



**AKIŞKAN YATAKLI GAZLAŞTIRMA İŞLEMİNİN
HESAPLAMALI OLARAK MODELLENMESİ VE
ARAŞTIRILMASI**

Ebubekir BEYAZOĞLU



T.C.
BURSA ULUDAĞ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**AKIŞKAN YATAKLI GAZLAŞTIRMA İŞLEMİNİN HESAPLAMALI OLARAK
MODELLENMESİ VE ARAŞTIRILMASI**

Ebubekir BEYAZOĞLU
0000-0002-7327-8471

Doç. Dr. Erhan PULAT
(Danışman)

DOKTORA TEZİ
MAKİNA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

BURSA – 2021
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

Doktora Tezi

AKIŞKAN YATAKLI GAZLAŞTIRMA İŞLEMİNİN HESAPLAMALI OLARAK MODELLENMESİ VE ARAŞTIRILMASI

Ebubekir BEYAZOĞLU

Bursa Uludağ Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Makina Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Erhan PULAT

Gazlaştırma işlemi ile karbon bazlı katı maddelerden enerji üretimi gittikçe artan bir araştırma konusu haline gelmiştir. Katı malzemelerden gaz üretimi fiziksel ve kimyasal olayların bir araya geldiği çok karmaşık bir olgudur. Ayrıca, gazlaştırma işlemi çok miktarda parametre içerdiği için deneysel bir çalışma ile her parametrenin ölçümünü yapmak oldukça zordur. Bu nedenle üretilen sentetik gazın verimliliğini en üst düzeye çıkarmak ve yeni bir gazlaştırıcı tasarlamak ve proses parametrelerini optimize etmek için gelişmiş bir modelleme yaklaşımına ihtiyaç bulunmaktadır. Öncelikle tez çalışmasından gazlaştırma hidrodinamiği incelenmiştir. Daha sonra, iki boyutlu (2-D) bir gazlaştırma sistemi ANSYS-FLUENT ticari kodu kullanılarak simüle edilmiştir. İşlemin piroliz ve sabit karbon yanma kimyasal reaksiyonlarının kimyasal kinetiklerini UDF kullanılarak modellenmiştir. Diğer bir adımda bu karmaşık problemi çözmek, araştırmak ve optimize etmek için üç boyutlu (3-D) basit, doğru, ve kapsamlı bir CFD modeli geliştirilmiştir. Sonraki aşamalarda, LES türbülans modeli, DDPM modelleri ve yeni alt modellerin gelişimi ile gazlaştırma problemine yeni bir çözüm modeli sunulmuştur. Geliştirilen bu modelleme çalışmaları için ağdan bağımsızlık çalışması ve model doğrulaması yapıldıktan sonra sistemin verimliliği hesaplanmıştır. RANS tabanlı türbülans modellerinden Standart k-ε modeli en uygun yaklaşım olarak seçilmiştir. Gazlaştırıcı tasarım parametreleri RSM kullanılarak optimize edilmiştir. LES türbülans modellerinden WALE modelinin incelenenler arasında en uygun model olduğu kabul edilmiştir. DDPM modelinin sonuçlarının da oldukça tutarlı olduğu görülmüştür. Gazlaştırıcının yatay ile 45° açı yapması durumunda çıkan ürün gazı bileşenlerinin daha fazla olduğu tespit edilmiştir. Katı parçacık gözenekliliğinin ise verimi azalttığı yönünde sonuca ulaşılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Gazlaştırma, yanma, çok fazlı akış, CFD, enerji, türbülans, parçacık kinetiği, kimyasal kinetik

2021, xi + 166 sayfa.

ABSTRACT

Ph.D. Thesis

COMPUTATIONAL MODELING AND INVESTIGATION OF FLUIDIZED BED GASIFICATION PROCESS

Ebubekir BEYAZOGLU

Bursa Uludağ University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Mechanical Engineering

Supervisor: Associate Professor Dr. Erhan PULAT

Energy production from carbon-based solid materials by gasification has become an essential research subject. Gas production from solid materials is a very complex phenomenon where physical and chemical events come together. Besides, since the gasification process involves many parameters, it is challenging to measure each parameter with an experimental study. Therefore, an advanced modeling approach is needed to maximize the produced synthetic gas's efficiency, design a new gasifier, and optimize process parameters. Firstly, the hydrodynamics of gasification has been studied. Next, a two-dimensional (2-D) gasification system was simulated using the commercial code ANSYS-FLUENT. The chemical kinetics of the devolatilization and char combustion chemical reactions of the process was modeled using the UDF. In another step, a simple, accurate, and comprehensive three-dimensional (3-D) CFD model has been developed to solve, research, and optimize this complex problem. In the following stages, the development of the LES turbulence model, DDPM models, and a new solution model to the gasification problem is presented. After the mesh independence study and model validation, the system's efficiency was calculated. The standard k- ϵ model among the RANS-based turbulence models was chosen as the most appropriate approach. Gasifier design parameters have been optimized using the RSM. The WALE model has been accepted as the most suitable model among those LES models examined. DDPM model's results are also quite consistent. When the gasifier makes an angle of 45° with the horizontal, the product gas components are increased. Solid particle porosity decreases the efficiency.

Keywords: Gasification, combustion, multiphase flow, CFD, energy, turbulence, particle kinetics, chemical kinetics

2021, xi + 166 pages.

TEŞEKKÜR

Doktora tezi danışman hocam **Doç. Dr. Erhan Pulat**'a oldukça zorlu olan bu doktora projesini takibi ve tamamlanması için bana verdiği, çalışmalarımda bana rehberlik ettiği, konuyu anlamam ve içinde olan problemleri çözmem için sağladığı çok önemli teknikler için, sağlamış olduğu olağanüstü motivasyon ve aynı zamanda bağımsız çalışma yetenekleri kazandırdığı için çok minnettarım. Ayrıca Makine Mühendisliği bölümü yönetime, başkan **Prof. Dr. Recep Yamankaradeniz**'e başkan yardımcısı **Prof Dr. Fatih Karpat**'a ve tüm bölüm hocaları adına doktora çalışmalarına ve doktora tezine katkıda bulunan **Prof.Dr. İrfan Karagöz, Prof.Dr. Muhsin Kılıç, ve Prof. Dr. Habib Umur**'a çok teşekkürlerimi iletiyorum. Tez komitesi üyeleri başkan **Prof. Dr. Ali Sürmen, Prof.Dr. Atakan Avcı, Prof Dr. İbrahim Atmaca, ve Dr. Kemal Furkan Sönmez** çalışmama katkılarından dolayı çok teşekkürlerimi iletiyorum. **Dr Onur Yemenci, Dr.Betül Gülçimen ve Dr. Stephan Akwaboa** doktora eğitimi boyunca vermiş oldukları destekleri ve aynı zamanda iyi bir bilim insanı ve mühendis olmama yardımcı oldukları için teşekkürlerimi iletiyorum. İşler biraz zorlaştığında yardımcı oldukları için meslektaşlarım aynı zamanda arkadaşlarım da çok müteşekkirim;**Burak, Ahmet, Erman, Erhan, Ercan, Çağlar, Kıvanç, Kumru, Meyrem, Ayşe Fidan ve Rumeysa. Figes Engineering & ANSYS, Inc.**'den iş arkadaşlarım **Arda**'yı ve **Ersen Arslan**'ın yüksek lisans ve doktora tezlerini kullandım. Bu tezler, reaktif akışların temel prensiplerini ve süreçlerini anlamada bir başlangıç noktası oluşturduğu için onlara da çok müteşekkirim. Aileme, amcam **Dr. Osman Kandara**'ya ve aile üyelerine doktora eğitimime sağlamış oldukları yardımları,müthiş teşvikleri ve hepsinden önemlisi, lisansüstü okula kabul edilmeme yardımcı oldukları, ABD ve yanı sıra TÜRKİYE'de eğitimim süresince bana destek oldukları için şükranlarımı sunuyorum. Araştırmamı teşvik eden ve motive eden **Dr. Ali Bayram** ve aile üyelerine de çok müteşekkirim. Son olarak, teknik geçmişimde güçlü bir temel oluşturmama yardım ettiği için içten takdirlerimi ilk öğretmenim **Mis. Margaret Jo Borland**'a iletiyorum. Bu araştırma çalışması **YÖK (100-2000), TÜBİTAK (2211 proje) ve BUU Makine Mühendisliği Bölümü** tarafından desteklenmektedir.

Ebubekir BEYAZOGLU,Ph.D. P.E.
Aralık 26,2020.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	v
ABSTRACT.....	vi
TEŞEKKÜR.....	ivi
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	v
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	x
1. GİRİŞ	1
1.1. Gazlaştırma İşlemi.	1
1.1. Mevcut Çalışmanın Amaçları.	9
1.2. Doktora Tezi Bölümleri	10
2. KURAMSAL TEMELLER ve KAYNAK ARAŞTIRMASI	13
2.1. Genel Bakış ve Literatür İncelemesi.....	13
2.2. Çok Fazlı Akış Çalışmaları.....	25
2.3. Gazlaştırma Çalışmalarında Kütle ve Isı Transferi	31
2.4. Türbülanslı Reaktif Akış Literatürü.....	32
3. MATERYAL ve YÖNTEM.....	44
3.1. Gazlaştırma Hidrodinamiği	44
3.2. İki Boyutlu (2-D) Reaktif Akış Modelleme.....	50
3.3. Üç Boyutlu (3-D) Gazlaştırma İşlemi Modellemesi ve Optimizasyonu.....	64
3.4. Büyük Girdap Simülasyonu (LES) ile Modelleme	86
3.5. DDPM, Makroskopik (MPM) ve PBM ile Modelleme	93
3.6. Yeni Alt Modelleme Teknikleri Kullanımı.....	96
4. BULGULAR ve TARTIŞMA	99
4.1. Gazlaştırma Hidrodinamiği	99
4.2. İki Boyutlu (2-D) Reaktif Akış Modelleme	108
4.3. Üç Boyutlu (3-D) Gazlaştırma İşlemi Modellemesi ve Optimizasyonu.....	117
4.4. Büyük Girdap Simülasyonu (LES) ile Modelleme	124
4.5. DDPM, Makroskopik (MPM) ve PBM ile Modelleme	135
4.6. Yeni Alt Modelleme Teknikleri Kullanımı.....	139
5. SONUÇ	143
KAYNAKLAR	147
EKLER.....	156
EK 1. Tek ve Çok Fazlı Akışlar İçin Sonlu Hacim Yöntemi.....	157
EK 2. Buharlaştırma veya Kurutma Temel Denklemleri	162
EK 3. FLUENT Algoritma Akış Şeması	163
EK 4. Kullanıcı Tanımlı Fonksiyonlar (UDF)	164
ÖZGEÇMİŞ	166

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler	Açıklama
A	Arrhenius sabiti
A_p	Parçacığın yüzey alanı [m^2]
A_k	Üstel öncesi faktör
C_D	Sürüklenme katsayısı
C_j	Türlerin molar konsantrasyonu
C_p	Isıl kapasite [$J/gr\ K$]
CO_2	Karbondioksit
CO	Karbonmonoksit
CH_4	Metan
Cl_2	Klörür
d_g	Gözenek çapı (cm)
d_p	Parçacık çapı (μm)
D_K	Difüzyon katsayısı
D_{pq}	Sürüklenme kuvveti
E_k	Aktivasyon enerjisi
f	Ağ aralığı faktör
F	Dış gövde kuvvetleri [N]
$F_{Sürüklenme}$	Parçacık sürüklenme kuvveti [N]
$F_{Kaldırma}$	Parçacığa etkiyen kaldırma kuvveti [N]
$F_{Diğer}$	Parçacığa etkiyen diğer kuvvetler [N]
F_s	Güvenlik faktörü
g	Yerçekimi kuvveti [m / s^2]
h	Isı taşınım aktsayısı [W/m^2K]
h_{pen}	Penetrasyon teorisi lokal ısı transferi katsayısı
h	Hücre veya eleman boyutu
H	Sıcak gaz ısı kapasitesi
H	Akışkan yatak yüksekliği
H_2	Hidrojen
H_g	Gaz ısıl değeri [kJ/m^3]
H_s	Katı yakıt ısıl değeri [kJ/kg]
H_2S	Hidrojen sülfür
I	Birim tensör
J_j	Difüzyon akısı [$m^{-2} s^{-1}$]
k	Türbülans kinetik enerji
k	k'inci tür reaksiyon hızı (tek bir reaksiyon için)
k_g^{eff}	Gaz için efektif ısı iletim katsayısı
k_s^{eff}	Parçacık için efektif ısı iletim katsayısı
k_s	Parçacık ısı iletim katsayısı
k_g	Gaz ısı iletim katsayısı
k_m	Penetrasyon teorisi ısı iletim katsayısı
K_k	Denge sabiti
K_{sl}	Gaz parçacık değişim katsayısı
L	Karakteristik uzunluk

m_p	Parçacık kütlesi [kg]
M	Moleküler viskozite [m^2/s]
M_s	Kütlesel debi [kg/s]
N	Denklem sayısı, hücre veya eleman sayısı, Azot
NH_3	Amonyak
Nu	Nusselt sayısı
O_2	Oksijen
p	Hesaplama yönteminin sırası
P	Statik basınç [Pa]
P_s	Parçacıkların yüzeyindeki su buharı basıncı [Pa]
P_a	Havadaki su buharı basıncı [Pa]
Q_g	Hacimsel debi [m^3/s]
R	Evrensel gaz sabiti
Pr	Prandtl sayısı, [$cp/\mu/k$]
r	Ağ iyileşme oranı
Re	Reynolds sayısı, [$\rho vL/\mu$]
R_K	Kimyasal kaynak terimi
r_k	Kimyasal reaksiyon hızı
$\bar{S}$	Şekil değiştirme oranı, Sülfür
S_h	Kimyasal reaksiyon ısısı [kJ/mol]
S_m	Katı parçacıkların gaz fazına kütle geçisi için kaynak terim
S_F	Parçacık momentum kaynak terimi
S_K	Reaksiyon ve ışınlam ile ısı transferin oluşturduğu ısıların kaynak terimi
T	Gaz sıcaklığı [K]
Tu	Türbülans şiddeti
u	x yönündeki hız bileşeni
Y_j	Türlerin kütle oranı
v_k''	Reaksiyona giren bileşiklerin stokiyometrik katsayıları
v_k'	Reaksiyon ürünlerinin stokiyometrik katsayıları
V_q	Akışkan hızı [m /s]
V_p	Parçacık hızı [m /s]
$v_{r,s}$	Parçacık limit hız katsayısı
v_f	Tür hacim oranı
v	y yönündeki hız bileşeni
w	z yönündeki hız bileşeni
α	Termal yayılma [m^2/s]
βk	k reaksiyonunun sıcaklık üssü
ΔP	Basınç düşüşü
ε	Türbülans yayılma oranı
ε_s	Parçacık hacim oranı
ε_g	Gaz hacim oranı
ε_g	Gözeneklilik
η_m	Verim
$\dot{\eta}_k$	j reaksiyondaki j ürünü için hız üssü
λ	Isı iletim katsayısı [$Wm^{-1}K^{-1}$]
μ	Dinamik Viskozite [$Pa \cdot s$]
ν	Kinematik viskozite [m^2 /s]
ρ	Yoğunluk

σ	Stefan Boltzmann sabiti
$\bar{\epsilon}$	Gerilme tensörü
μ_t	Türbülans viskozitesi

Kısaltmalar	Açıklama
AIAD	Cebirsel Arayüzey Alan Yoğunluğu (Algebraic Interfacial Area Density)
ANN	Yapay Sinir Ağı (Artificial Neural Network)
BVP	Sınır Değer Problemi (Boundary Value Problem)
CFD	Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (Computational Fluid Dynamics)
CAD	Bilgisayar Destekli Tasarım (Computer Aided Design)
CAE	Bilgisayar Destekli Mühendislik (Computer Aided Engineering)
1-D	Bir Boyutlu (One Dimensional)
2-D	İki Boyutlu (Two Dimensional)
3-D	Üç Boyutlu (Three Dimensional)
DDPM	Yoğun Ayırık Faz Modeli (Dense Discrete Phase Model)
DEM	Ayrık Eleman Yöntemi (Discrete Element Method)
DES	Ayrık Girdap Simulasyonu (Detached Eddy Simulation)
DNS	Doğrudan Sayısal Simulasyon (Direct Numerical Simulation)
DPM	Ayrık Faz Modeli (Discrete Phase Method)
ER	Karışım oranı (Equivalence Ratio)
FEA	Sonlu Elemanlar Analizi (Finite Element Analysis)
GCI	Ağ Yakınsama Endeksi (Grid Convergence Index)
HiTAC	Yüksek Sıcaklıkta Hava Yanması (High-Temperature Air Combustion)
KTGF	Tanecik Akışların Kinetik Teorisi (Kinetic Theory for Granular Flow)
LES	Büyük Girdap Simulasyonu (Large Eddy Simulation)
MISQP	Karışık Tamsayı Sıralı Kuadratik Programlama (Mixed-Integer Sequential Quadratic Programming)
MPM	Makroskobik Parçacık Modeli (Macroscopic Particle Model)
MOGA	Çok Amaçlı Genetik Algoritmalar (Multi Objective Genetic Algorithms)
NLPQL	Kuadratik Lagrangian ile Doğrusal Olmayan Programlama (Non-Linear Programming by Quadratic Lagrangian)
ODE	Adi Diferansiyel Denklem (Ordinary Differential Equation)
PDE	Kismi Diferansiyel Denklem (Partial Differential Equation)
RANS	Reynolds Ortalamalı Navier Stokes (Reynolds Averaged Navier Stokes)
RSM	Tepki Yüzeyi Metodolojisi (Response Surface Methodology)
RTE	Işınım Genel Denklemi (Radiation Transport Equation)
Screening	Screening Optimizasyon Yöntemi (Screening Optimization Method)
SIMPLE	Basınç Bağlantılı Denklemler için Yarı Kapalı Yöntem (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations)
UDF	Kullanıcı Tanımlı Fonksiyonlar (User Defined Functions)
WALE	Duvara Uyarlanan Lokal Girdap (Wall-Adapting Local Eddy)
WGS	Su- gaz değişimi (Water Gas Shift)
WLES	Duvar Modeli Büyük Girdap Simulasyonu (Wall Modeled Large Eddy Simulation)

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 1.1. Katı yakıtın bir gaz yakıtına termokimyasal dönüşümü olarak gazlaştırma	1
Şekil 1.2. Gazlaştırma işlemi için hammadde türleri.....	2
Şekil 1.3. Gazlaştırma işlemi	3
Şekil 1.4. Gazlaştırıcı çeşitleri	6
Şekil 2.1. Akışkan yatak gazlaştırmasının faydaları	14
Şekil 2.2. Akışkan yatak tipleri	16
Şekil 2.3. Akışkan yatak gazlaştırmanın deneysel kurulumu	25
Şekil 2.4. Tek fazlı akış	26
Şekil 2.5. Çok fazlı akış	26
Şekil 2.6. Zamansal ve boyutsal ortalamaların gösterimi.....	27
Şekil 2.7. Çok fazlı akış sistemleri.....	29
Şekil 2.8. Mutiphas akış ölçüm stratejisi.....	30
Şekil 2.9. Rocketdyne tarafından NASA için yapılmış bir uzay mekiği ana motoru	35
Şekil 2.10. Katı yakıt yanması ve gazlaştırma.....	38
Şekil 3.1. Akışkanlaşmanın farklı gözlemleri	44
Şekil 3.2. Akışkan yatak basınç düşüşü	45
Şekil 3.3. Gaz-katı (yogun) akış örnekleri	46
Şekil 3.4. Hidrodinamik alanda katı parçacıkların dağılımı ve kuvvet dengesi	46
Şekil 3.5. Limit hız açıklaması	46
Şekil 3.6. Isı transferi yöntemleri ve yeni sürüklenme modeli modifikasyonu	48
Şekil 3.7. Katı atık gazlaştırma ve enerji üretiminin şematik gösterimi	49
Şekil 3.8. Akışkan yataklı gazlaştırıcı ve sıcaklık değişimi	52
Şekil 3.9. Geliştirilen CFD modelinin akış şeması	53
Şekil 3.10. Geometri ve boyutlar	54
Şekil 3.11. CFD modelinin ağ yapısı	54
Şekil 3.12. Hücre sayısı ile maksimum gaz hız değişimi	55
Şekil 3.13. Akışkan partikül bağlantısı	57
Şekil 3.14. CFD modeli şeması, 2-D kararlı durum sonlu hacim modeli	57
Şekil 3.15. Malzeme karışımları, gaz karışım ve katı karışım	59
Şekil 3.16. Liu modelinin geometri boyutları, ağ yapısı ve sınır koşulları.....	62
Şekil 3.17. Bu çalışmanın katı hacim oranı dağılımı.....	62
Şekil 3.18. Gazlaştırma fiziksel ve kimyasal olaylar	64
Şekil 3.19. Gazlaştırma sisteminde meydana gelen kimyasal reaksiyonlar şematik	65
Şekil 3.20. Parçacık etkileşimi ve ısı kütle transferi olayı	69
Şekil 3.21. Sınır değer probleminin(BVP) geometri üretimi	71
Şekil 3.22. Ağ tipi ve yapısı	72
Şekil 3.23. Sınır koşulları ve hesaplama alanı	73
Şekil 3.24. Optimizasyon adımı için proje şeması	76
Şekil 3.25. Ölçüm alınan nokta.....	80
Şekil 3.26. Ağ iyileştirme çalışması.....	83
Şekil 3.27. Doğrulama test geometrisi ve sınır koşulları.....	84
Şekil 3.28. Şimdiki çalışma ile doğrulama sonuçları	85
Şekil 3.29. Lagrangian parçacık izleme ve ayırıştırma şeması	86
Şekil 3.30. Geometry-ağ-sınır koşulları	86
Şekil 3.31. LES türbülans modelleri	88
Şekil 3.32. Büyük ve küçük girdapların LES çözümlemesi.....	89

Şekil 3.33 Giriş hızı değerleri	89
Şekil 3.34 Orta z-r düzleminin ve çizgisinin görünümü	90
Şekil 3.35. Anlık, ortalama ve dalgalanan hız	90
Şekil 3.36. RANS tabanlı viskoz model paneli	91
Şekil 3.37. Lagrangian ayrık faz modeli (DPM)	93
Şekil 3.38. Euler-eulerian çok fazlı akış	94
Şekil 3.39. Euler-lagrangian çok fazlı akış	94
Şekil 3.40. Yoğun ayrık faz modeli parçacık hareketi ve çapları	95
Şekil 3.41. Arayüz sürüklenme kuvveti / momentum aktarımı.....	96
Şekil 3.42. Yeni alt modeller ile sürecin şematik gösterimi	97
Şekil 3.43. Geometrik konum.....	98
Şekil 4.1. Gaz karışım akım çizgileri.....	99
Şekil 4.2. Gaz karışım hız dağılımı.....	99
Şekil 4.3. Gaz karışım sıcaklık dağılımı	100
Şekil 4.4. Basınç dağılımı.....	100
Şekil 4.5. Gaz karışım (3-D) akım çizgileri	101
Şekil 4.6. Parçacık sıcaklık dağılımı.....	102
Şekil 4.7. Basınç dağılımı.....	102
Şekil 4.8. Orta düzlem gaz karışım hız dağılımı.....	103
Şekil 4.9. 3-D geometri merkez düzlem gaz karışım sıcaklık dağılımı.....	103
Şekil 4.10. 3-D geometri merkez düzlem gaz karışım sıcaklık dağılımı	104
Şekil 4.11. 3-D geometri merkez düzlem parçacık sıcaklık dağılımı.....	104
Şekil 4.12. 3-D geometri merkez düzlem gaz hız dağılımı.....	105
Şekil 4.13. Yeniden düzenlenmiş sürüklenme modeli (3-D) basınç dağılımı.....	105
Şekil 4.14. Deneysel ve sayısal modeller	106
Şekil 4.15. Katı hacim oranı sayısal sonuçlarının karşılaştırılması	106
Şekil 4.16. 0.38 m sabit gaz giriş hızı için basınç farkının karşılaştırılması.....	107
Şekil 4.17. CO molar konsantrasyonu	108
Şekil 4.18. Gaz hızı ve parçacık akış çizgileri	109
Şekil 4.19. Gaz karışım türbülans kinetik enerjisi ve hız dağılımı	110
Şekil 4.20. Deneysel ve sayısal sonuçlar ile mevcut sonuçların karşılaştırması.....	112
Şekil 4.21. CO kütle oranı ile gazlaştırıcı hacmi arasındaki ilişki.....	117
Şekil 4.22. Gazlaştırıcı çapı ve çıkış CO kütle oranı değişimi	117
Şekil 4.23. Gazlaştırıcı uzunluğu ve giriş gazı hızı ile CO kütle oranı değişimi	118
Şekil 4.24. Gazlaştırıcı uzunluğu ile CO kütle oranı değişimi	119
Şekil 4.25. Giriş gazı hızıyla CO kütle oranı değişimi	119
Şekil 4.26. Optimizasyondan önce çıkışta CO kütle oranı dağılımı	120
Şekil 4.27. Optimizasyondan sonra çıkışta CO kütle oranı dağılımı	121
Şekil 4.28. Hesaplamalı alanın akış çizgileri ve vektör dağılımı.....	121
Şekil 4.29. Sınır değer probleminin hız dağılımı.....	121
Şekil 4.30. Sınır değer probleminin sıcaklık dağılımı	122
Şekil 4.31. Sınır değer probleminin basınç dağılımı	122
Şekil 4.32. Hesaplama alanının CO kütle oranı dağılımı	123
Şekil 4.33. Smagorinsky Lilly modeli orta düzlem anlık hız	124
Şekil 4.34. Smagorinsky Lilly modeli ortalama hız.....	124
Şekil 4.35. WALE modeli orta düzlem anlık hız	125
Şekil 4.36. WALE modeli ortalama hız	125
Şekil 4.37. WALE modeli ortalama ve anlık hızın karşılaştırılması	126

Şekil 4.38. Smagorinsky Lilly ve WALE modellerinin karşılaştırılması	126
Şekil 4.39. WMLES modeli orta düzlem anlık kesit hızı dağılımı	127
Şekil 4.40. WMLES modeli ortalama hız	127
Şekil 4.41. Smagorinsky Lilly, WALE, ve WMLES modellerinin karşılaştırılması	128
Şekil 4.42. Kinetik enerji aktarımı modeli orta düzlem kesit hız dağılımı	129
Şekil 4.43. Kinetik enerji aktarım modeli ortalama hız	129
Şekil 4.44. WMLES S-Omega modeli anlık hız	130
Şekil 4.45. WMLES S-Omega modeli ortalama hız	130
Şekil 4.46. RANS tabanlı k-epsilon modeli ortalama hız	131
Şekil 4.47. Smagorinsky-Lilly, WALE, WMLES, ve k-ε modellerinin karşılaştırılması	132
Şekil 4.48. LES modellerinin RANS k-ε modeli ile karşılaştırılması	132
Şekil 4.49. Orta düzlem anlık statik sıcaklık dağılımı	133
Şekil 4.50. CO kütle oranı dağılımı	134
Şekil 4.51. DDPM-DEM ile CO kütle oranı dağılımı	136
Şekil 4.52. DDPM-KTGF ile CO kütle oranı dağılımı	137
Şekil 4.53. Populasyon dengesi ve makroskopik parçacık modeli ile sonuçlar	138
Şekil 4.54. Sentetik gaz kompozisyon sonuçları 45°	139
Şekil 4.55. Sentetik gaz kompozisyon sonuçları 0°	139
Şekil 4.56. Sentetik gaz kompozisyon sonuçları 90°	140
Şekil 4.57. Karışım ve gaz sıcaklığı	141
Şekil 4.58. Sentetik gaz kompozisyonuna gözenekli yapı etkisi	142

ÇİZELGELER DİZİNİ

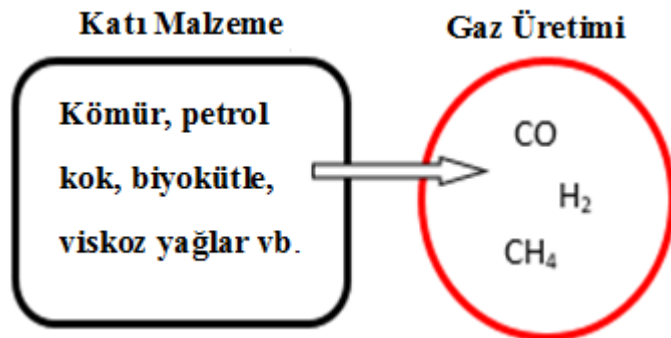
Sayfa

Çizelge 1.1. Gazlaştırma ve yanma özellikleri.....	3
Çizelge 2.1. Çok fazlı modelleme türleri	28
Çizelge 3.1. Heterogen kimyasal reaksiyonlar	67
Çizelge 3.2. Homojen kimyasal reaksiyonlar.....	68
Çizelge 3.3. Katı parçacık yaklaşık ve kesin analizi	75
Çizelge 3.4. Tasarım değişkenleri ve çıkış parametresi	76
Çizelge 3.5. Tasarım değişken kısıtları	77
Çizelge 3.6. Optimizasyon çalışması.....	78
Çizelge 3.7. Optimizasyon aday değerleri.....	78
Çizelge 3.8. Üç farklı ağ sayısı için ölçülen sıcaklık değerleri	81
Çizelge 3.9. Optimizasyon yöntemi doğrulaması.....	83
Çizelge 4.1. RSM türbülans modelinin duvar fonksiyonlarıyla karşılaştırılması.....	113
Çizelge 4.2. Çeşitli k- ω türbülans modellerinin karşılaştırması.....	114
Çizelge 4.3. Std. k- ϵ türbülans modelinin çeşitli duvar fonksiyonlarıyla kullanımı.....	115
Çizelge 4.4. RNG k- ϵ türbülans modelinin çeşitli duvar fonksiyonlarıyla kullanımı.....	116

1. GİRİŞ

1.1 Gazlaştırma İşlemi

1850'den beri, gazlaştırma prosesleri dünyanın büyük şehirleri için aydınlatma endüstriyel, ticari ve konut mülkleri için ise enerji tedariki sağlamıştır (Kegerreis ve ark. 1998, Anonim 2016). Son yıllarda ise gazlaştırma modellerinin kullanımında ve reaktörlerin tasarlanmasında önemli bir artış görülmektedir. Gazlaştırma özellikle tarım, petrol, metalurji endüstrisi, kimya sektörlerinde artarak kullanılmaya başlanmış, özellikle termal akışkan bilimlerinde (özellikle katı maddelerden enerji üretme ile ilgili) ve enerji ekonomisinde (finans) ise önemli araştırma konusu haline gelmiştir. Gazlaştırma birçok farklı alanların etkileşiminin olduğu çok fonksiyonlu bir çok denklemleri içinde barındıran karmaşık bir olay olup araştırmak için bu fonksiyonları, denklemleri ve içinde barındırdığı değişkenlerini en iyi şekilde tanımlamaya çalışmak gerekmektedir. Enerji dönüşümü, termo-elektrik enerjisi üretimi, ekonomi, reaktör fizibilitesi, kimyasal reaksiyonlar vb. bu araştırma çabasının temel amacı olan değişkenlerdir (Ahmad ve ark. 2016). Gazlaştırma, bir dizi kimyasal reaksiyonun meydana geldiği bir enerji dönüşüm sürecidir. Şekil 1.1 'de görüldüğü üzere işlem sırasında, içerdiği kömür, katı atık veya biyokütle vb. karbon elementlerin daha az oksijenle reaksiyona girerek yanma işlemine benzer bir proses ile sentetik gaz üretmesidir. Gazlaştırma sonucu üretilen gaz olarak isimlendirilen sentetik gaz, esas olarak hidrojen, karbon monoksit, metan ve bir miktar karbondioksitten oluşan bir gaz karışımı yakıttır.



Şekil 1.1. Katı yakıtın bir gaz yakıtına termokimyasal dönüşümü olarak gazlaştırma.

Gazlaştırma işlemi, katı yakıtın gazlı forma dönüştürülmesi işlemi kurutma, piroliz, yanma ve indirgeme gibi bazı işlemlerin gerçekleştirilmesi ile sağlanmaktadır. Şekil 1.2. de gösterildiği üzere gazlaştırma, kömür, biyokütle (bitkilerden veya hayvanlardan elde edilen organik materyal) veya petkok (petrol rafinerilerinden gelen bir atık ürün) gibi karbon içeren hammaddeleri sentetik gazına dönüştüren termo-kimyasal bir işlemdir. Hidrodinamik, kütle, ısı transferi ve kimyasal kinetik olaylarından oluşan çok ölçekli / çok farklı fiziksel olayların meydana geldiği bir süreçtir. Bunlar çok güçlü lineer olmayan birbirine bağlı birleşik transport olaylarıdır. Kazanlarda, motorlarda, türbinlerde, uçak-roket motorlarında, yakıt hücrelerinde, kimyasal reaktörlerde vb. sistemlerde kullanılabilecek bu sentez gazı üretme işlemi 800-1000°C'lik yüksek sıcaklıklı ,oksijensiz bir ortam ve indirgeme koşullarından (CO₂-H₂O içeren atmosfer)'dan oluşur.



Şekil 1.2. Gazlaştırma işlemi için hammadde türleri (ANSYS 2020).

Çizelge 1.1'de gösterildiği gibi bu process, bazı önemli özelliklerle yanma işlemi ile farklılıkları göstermektedir. Yanma, tam oksidasyon ortamında (yeterli oksijen) meydana gelirken gazlaşma işlemi ise , kısmi oksidasyon ortamında (yetersiz oksijen) meydana gelir.

Gazlaştırma: Katı parçacık + O₂ + Isı → Sentetik gaz + Kül

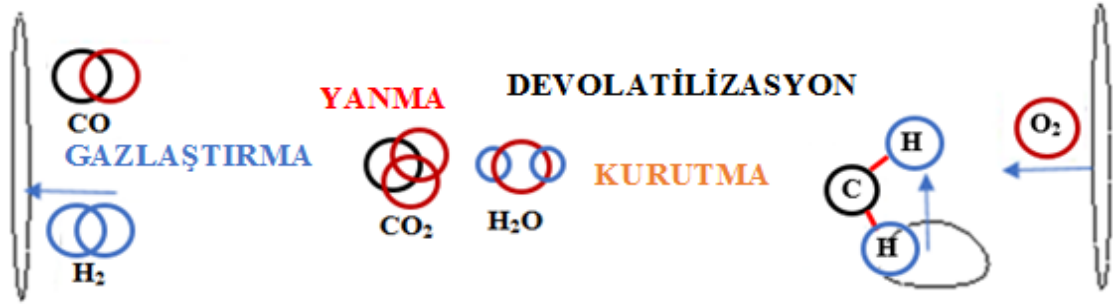
Yanma: Katı parçacık + O₂ → Isı + Atık Gaz+ Kül

Yanma, dünyada teknoloji için enerji üretmenin başlıca kaynağı olmaya devam etmektedir. Bununla birlikte, gazlaştırma işlemin de daha verimli olduğu görülmektedir. Daha düşük emisyonlara ve yanma ile kıyaslandığında rekabetçi sermaye maliyetine sahiptir ve ayrıca güvenilirlik düşünüldüğünde daha düşük bir riske sahiptir.

Çizelge 1.1. Gazlaştırma ve yanma özellikleri.

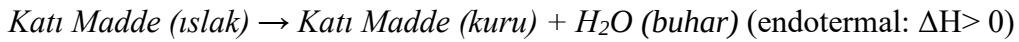
Özellikler	Gazlaştırma	Yanma
Oksijen kullanımı	Sınırlı miktarda kullanım	Fazla miktarda kullanım
Proses Türü	Endotermik	Egzotermik
Temel Kimyasal Denklemler	$C+H_2O=CO+H_2$ $C+CO_2=2CO$	$C+O_2=CO_2$
Ürünler	Yanıcı Gaz	Isı Enerjisi

Gazlaştırma işlemi, Şekil 1.3 'te görüldüğü gibi, temel olarak kurutma, piroliz, yanma ve indirgeme olmak üzere dört adımdan oluşmaktadır.

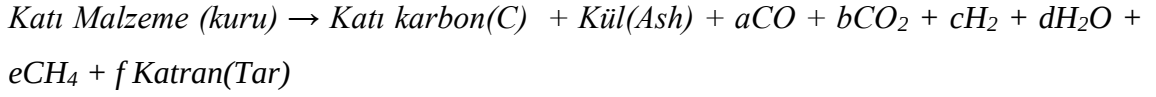


Şekil 1.3. Gazlaştırma işlemi.

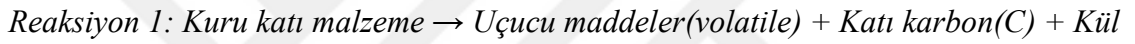
Kurutma: Kurutma işlemi, katı malzeme gazlaştırma reaktörünün ilk aşamasında sıcak kuru hava ile karşılaştığında gerçekleşir. Katı malzemenin nem içeriğinin tamamen çıkarıldığı ve 101 ° C'de buhara dönüştürüldüğü varsayılır.



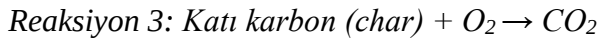
Devolatizasyon (piroliz): Piroliz, gazlaştırma veya yanmada kurutmadan sonraki ilk adımdır. Katı malzeme katı karbon (char), kül, katran ve CO, CO₂, H₂, H₂O ve CH₄ gibi küçük moleküllü gazlara dönüştürülür: bu aşamada



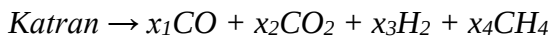
reaksiyonu meydana gelmektedir. Burada katı karbon(char) saf karbon içerdiği kabul edilir. Katı malzemedeki katı karbon(char) ve kül(ash) miktarını hesaplamak için yaklaşık analiz(proximate) kullanılır. CO, CO₂, H₂, H₂O ve CH₄'ün stokiyometrik katsayıları sırasıyla a, b, c, d ve e'dir. Bu yukarıdaki reaksiyon aşağıdaki gibi reaksiyon 1 ve reaksiyon 2 ile de ayrıca tekrar açıklanmıştır.



Yanma: Katı karbon(C), yanma ürünü CO₂'yi ve ayrıca reaktörün endotermik reaksiyonlarına ısı sağlamak için oksitlenir. Oksijenin tamamen yanma sürecinde tüketildiği varsayılmıştır.



Katran Çatlaması: Katran, yüzlerce farklı organik türden oluşan karmaşık bir karışımdır. Bileşiminin CO, CO₂, H₂ ve CH₄'ten oluştuğu varsayılır. Katran çatlaması sırasında



reaksiyonu meydana gelerek CO, CO₂, H₂ ve CH₄ olarak küçük moleküllü gazlara ayrışır. Stokiyometrik katsayılar, sırasıyla x₁, x₂, x₃ ve x₄ katran çatlama reaksiyonunun elemental dengesine göre literatürden alınan deneysel veriler yardımı ile hesaplanır.

Katran gazı reaksiyonları şunları içerir:

Reaksiyon 4: C_mH_n (katran) + $(m + n / 4) O_2 \rightarrow mCO_2 + n / 2H_2O$

Reaksiyon 5: C_mH_n (katran) + $mH_2O \leftrightarrow (m + n / 2) H_2 + mCO$ (Katran buharı reformasyonu reaksiyonu)

Reaksiyon 6: C_mH_n (katran) + $mH_2O \leftrightarrow (m + n / 2) H_2 + mCO$

Reaksiyon 7: C_mH_n (katran) + $mCO_2 \leftrightarrow n / 2H_2 + 2mCO$ (Katran kuru reformasyon reaksiyonu)

Gazlaştırma (indirgeme): Burada indirgeme reaksiyonları meydana gelmektedir. İndirgeme reaksiyonları gazlaştırma işleminin kalbidir ve son adımdır. Gazlaştırma işlemi aşamalarının sonunda yanıcı gazlar elde edilmektedir. Esas olarak üstün ve kusursuz yanma özelliklerine sahip olan H_2 , CO gazları üretilmektedir. İndirgeme reaksiyonları aşağıdaki gibidir:

Reaksiyon 8: $H_2 + 1 / 2O_2 \rightarrow H_2O$

Reaksiyon 9: $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$

Reaksiyon 10: $CO + 1/2 O_2 \rightarrow CO_2$

Reaksiyon 11: $C + CO_2 \leftrightarrow 2CO$ (CO_2 gazlaştırma)

Reaksiyon 12: $C + H_2O \leftrightarrow CO + H_2$ (H_2O gazlaştırma)

Reaksiyon 13: $C + 2H_2 \leftrightarrow CH_4$ (H_2 gazlaştırma)

Reaksiyon 14: $CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$

Reaksiyon 15: $CO + 3H_2 \leftrightarrow CH_4 + H_2O$ (Metanasyon)

Reaksiyon 16: $CH_4 + H_2O \leftrightarrow 3H_2 + CO$

Reaksiyon 17: $CaO + CO_2 \leftrightarrow CaCO_3$

Reaksiyon 18: $CO + 2H_2 \rightarrow (-CH_2-) n + H_2O$

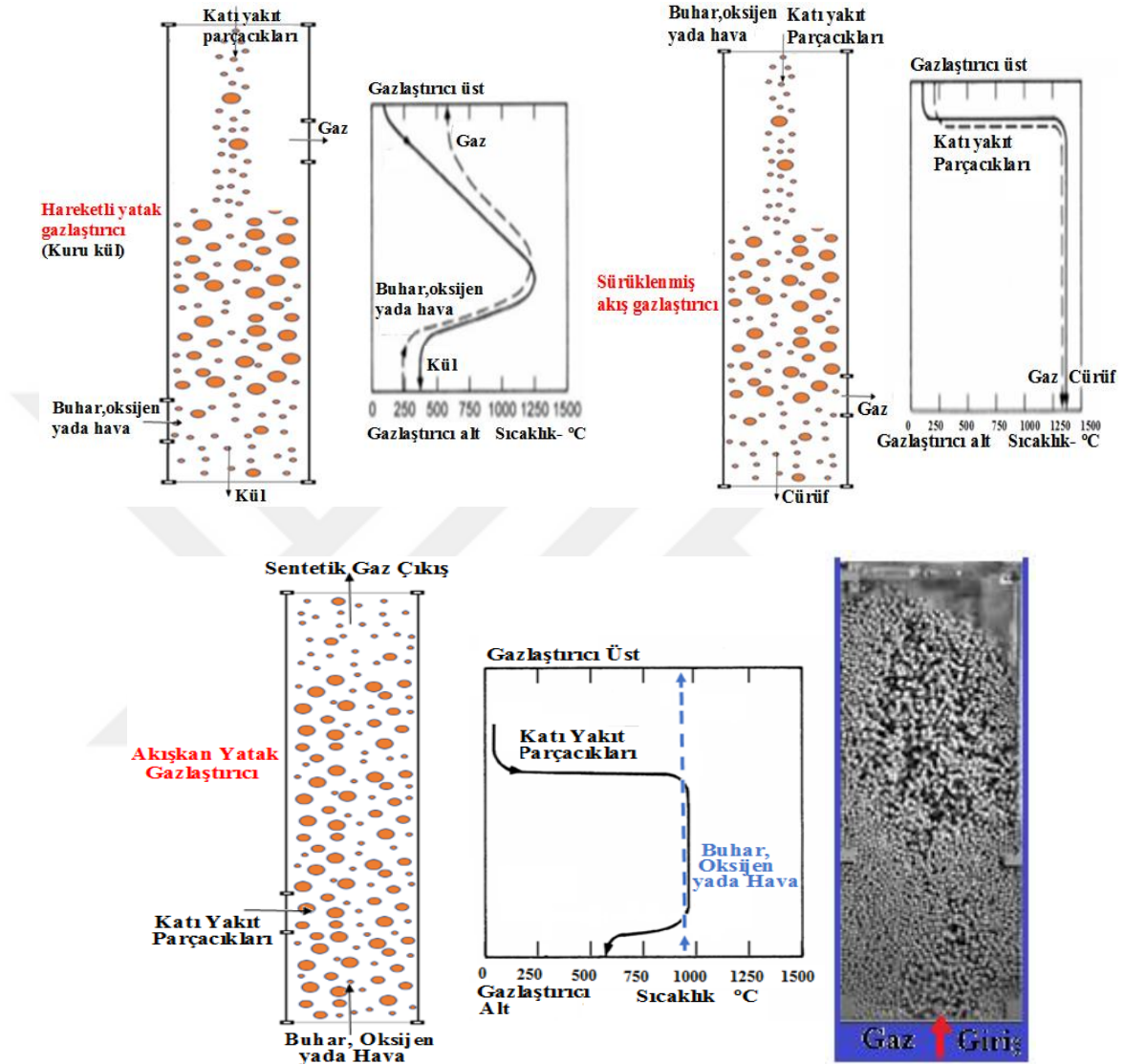
Reaksiyon 19: $CO + 2H_2 \rightarrow CH_3OH$

Reaksiyon 20: $CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OCH_3 + H_2O$

Reaksiyon 21: $2CH_3OH \rightarrow CH_3OCH_3 + H_2O$

Bu reaksiyonlar bir gazlaştırıcı reaktöründe meydana gelmektedir. Bunlar, Şekil 1.4'te görüldüğü gibi, yakıt türüne, reaktörün kapasitesine ve gazlaştırıcı kullanım amacına göre

esas olarak akışkan yataklar, sabit yataklar ve sürüklenmiş akışlı gazlaştırıcılar olarak değişmektedir (Alam ve ark. 2015).



Şekil 1.4. Gazlaştırıcı çeşitleri (ANSYS 2020).

Genel bir gazlaştırma sürecini tanıttıktan sonra, şimdi gazlaştırma araştırması ihtiyacından bahsetmek gerekir. Bunun nedenlerinden biri, tüm dünyada baskın bir kirlilik sorunu olarak hızla artan çevreye atılan katı atıktır. Bu katı atıklar çok ciddi ölçeklerde insanların kullanım alanlarına atılmakta ve bir çoğu ekoloji ve insan sağlığı için tehlikeli bir atık olarak kalmaya devam etmektedir. Örneğin, Uzak Doğu, Avrupa ve ABD tarafından yaklaşık her yıl 55 milyon ton tüketici sonrası katı atık üretilmektedir

(Levendis ve ark. 2001). Katı atık azaltma, enerji üretimi ve temiz yanan gaz ekde etmek, gazlaştırma sürecinin cazibesine hitap eden temel gerçeklerdir. Öte yandan, gazlaştırma işlemi görselleştirme açısından çok karmaşık bir yapıya sahiptir ve katı parçacıkların yanması işlemi gibi sistemin bilimsel kavramlarını açıklamak gerçek bir problemidir. Katı yakıtlar için tam oksidasyon oldukça zordur ve partiküllerin hareketleri önemli bir problemidir. Bu nedenle mühendislik ve bilimsel hesaplamalar için basit, güvenilir ve doğru bir model geliştirmek bir zorunluluktur. Son yıllarda, piroliz, yanma veya gazlaştırma gibi yüksek sıcaklıklı süreç olayları yenilenebilir enerjinin kullanımı ile ilgili olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu da , katı atıkların ve karbon bazlı katı maddelerin daha iyi kullanılması için daha fazla yeni model geliştirmeye olan ilgiyi artırmıştır (Monteiro ve Couto 2015). Bu çalışma bunlara ilave olarak insanların yaşam bölgelerini daha güvenli, daha temiz ve daha enerji verimli bir yer haline getirmeye yardımcı olacaktır. Şimdiye kadar geliştirilmiş gazlaştırma modeller arasında genel verimliliği ve tüm fiziksel ve kimyasal olayları detaylıca açıl原因 ve hesaplamalara dahil eden önemli bir model olarak da yerini alacaktır. Bu çalışma ayrıca gazlaştırma sürecinin öğrenilmesi, araştırılması ve geliştirilmesi verimli ve temiz bir enerji kullanılması açısından bir anahtar olduğunda gösterecektir.

Diğer yandan önemli bir konu olarak, sentez gazının üretimi gazlaştırıcı reaktörün sıcak bölüm bileşenleri arasında gerçekleşmektedir, diğer bir söylem ile araştırma, mühendislik ve geliştirme yüksek sıcaklıklarda çok zorlaşmaktadır. Çünkü, yüksek sıcaklıklarda, ölçümün zorluğu, oldukça reaktif ve çok hızlı zamanla değişen parametreler, hızlı dönüşüm yeteneği, kimya ve fizik arasındaki etkileşim, bu olayları anlama ve kontrol etme zorluğu gibi birkaç özel konuyu ortaya çıkarmaktadır. Kısaca yüksek sıcaklıklarda hem ölçüm hem de olayı doğru analiz edebilme işlemi oldukça zorlaşmaktadır. Gazlaştırma sürecinin zorlukları arasında diğer önemli konular ise, çıkan ürün gazının kullanılmadan önce temizliği, ürünler ile birlikte hidrojen sülfür(H_2S) ve Cürüf (kömürden mineraller-slagging) gibi zararlı son ürünler de üretilmektedir. Cürüfün aşındırıcı etkisi bulunmaktadır. İşlem sırasında 30 Bar gibi yüksek basınç ve 1500K gibi yüksek sıcaklıklarda olabilmektedir.

Bu nedenle, simülasyon, analiz, modelleme ve tasarım sağlamak için Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (Computational Fluid Dynamics-CFD) nin kullanılması bir başka önemli araştırma çabasıdır ve yüksek sıcaklık sistemlerinin modellenmesi, deneyleri bilgilendirmek için kullanılan modeller olan aşağıdaki nedenlerden dolayı zorunlu ve değerlidir. Olayın anlaşılması, teorik tartışma geliştirmek, tahmin araçları olarak ve süreç kontrolü için gereklidir.

Çok farklı kullanım alanlarına sahip olabilecek sentetik gaz üretimi sabit yataklı gazlaştırıcı, sürüklenmiş tip ve akışkan yataklı gazlaştırıcı gibi farklı gazlaştırıcı yataklı reaktörlerle ileri teknoloji ile üretilip miktarları ve verimliliği yeni araştırma olanakları sunmaktadır. 1200 °C'ye kadar hava ve katı yakıt yakma-gazlaştırma sürecinin termofiziksel parametreleri ölçülüp değerlendirilmektedir. Diğer bir deyişle, akışkan yatak gazlaştırma sürecindeki kimyasal reaksiyonlar, türbülans modelleri, ısı transfer modları, kütle transferi, çok fazlı akış modelleri bu tez çalışması ile birleşik olarak analiz edilmektedir. Birçok endüstriyel işlem için kullanılan sentetik gazın akışkan yataklı gazlaştırma işlemi ile elde edilmesi ve bu işlem sırasında meydana gelen yukarıda bahsedilen fiziksel ve kimyasal olaylar araştırılmıştır. Başlangıçta, bu işlem için iki boyutlu (Two Dimensional-2-D) ve daha sonra üç boyutlu (Three Dimensional-3-D) çok fazlı reaktif akış ve ısı transfer yöntemleri için bir termal-akışkan modeli geliştirilmiştir.

Gazlaştırma işleminin verimliliğini artırmak için örneğin yeterli katı malzeme, sıcak gaz giriş hızı, katı parçacık çapı seçmek gibi, uygun yatak çapı seçmek, gazlaştırma işleminin giriş sıcaklığını artırmak gibi parametreler optimum noktaya getirilmektedir. Bu nedenler ile bu sürecin araştırılmasının önemi yıllardır önemini korumaktadır. Teorik çalışmalar, deneysel çalışmalar, sayısal çalışmalar gibi yöntemler ile bu enerji dönüşümü konusunda araştırmalar halen devam etmektedir. Yukarıdaki şekillerde gösterildiği gibi, sistem davranışının doğru bir şekilde tahmin edilmesi için doğru ısı, kütle transferi, hidrodinamik ve kimyasal kinetik modellerin geliştirilmesi gereklidir.

1.2. Mevcut çalışmanın amaçları

Bu tezin temel amacı yukarıda da belirtilen gazlaştırma süreci içerisinde meydana gelen fiziksel olayların ve onları tanımlamak için kullanılan matematiksel karmaşık ve birleştirilmiş modellerin , örnek olarak gerek tek fazlı gerekse çift fazlı ısı akışlarında karmaşık ve /veya birleşik analizlerin yapılarak ele alınan gazlaştırma içerisinde bulunan piroliz ve yanma problemlerin araştırma geliştirme ve tasarım açısından değerlendirilmesidir. Bu amaçla mühendislik ve yenilenebilir enerji uygulamalarında sık karşılaşılan ve yukarıda bahsedilen karmaşıklıklardan biri olan gazlaştırma yöntemi ile enerji üretimi problemi seçilmiştir. İki fazlı akışlar için akışkan yataklı gazlaştırma işlemi bu problemlere örnek olarak verilebilir. Gazlaştırma sisteminin tasarımında gaz,katı - sıvı etkileşimleri de bu problemde bulunduğundan dolayı arayüz etkileşimleri , sınır şartının belirlenmesine ve çözüm üzerine etkileri de problem çözmede önemli bir noktaya sahiptir.

Bu çalışmanın amaçları aşağıdaki gibidir:

Gazlaştırma hidrodinamiği soğuk akış incelemesinin yapılması. Yeni sürüklenme (drag) modeli ile hidrodinamiğin incelenmesi

Kabarcıklı tipi akışkan yatak gazlaştırmanın akış, ısı, kütle ve kimyasal reaksiyon taşıma özelliklerini incelemek.

Katı parçacıkların mikro yapı değişiklikleri, katı parçacık gözeneklilik etkisi gibi gazlaştırmanın sentetik gazı üretimi üzerindeki etkilerini incelemek

Kimyasal reaksiyonların sayısını ve sentetik gazı üretimi üzerindeki etkilerini ve kimyasal reaksiyon türlerini incelemek.

Türbülans, türbülans parametreleri ve türbülans modellerinin (RANS ve LES türbülans modelleri) gazlaştırma özelliklerine etkisini anlamak.

Katı parçacığın mikro yapısı ile termal özellikleri ve sıcak gaz akışı özellikleri arasındaki ilişkiyi kurmak

Optimizasyon çalışmaları yapmak

Gazlaştırma işlemi için farklı radyasyon modellerini incelemek (P1- Discrete Ordinate)

Gazlaştırma işlemi için farklı çok fazlı modelleri incelemek

Tüm yukarıdaki incelenen noktaların birleştirilmesi ile birlikte gazlaştırma işlemini hesaplayan basit, kapsamlı ve sonuçları doğru veren 2-D ve 3-D modeller geliştirmek. Bu araştırma, çeşitli modelleme teknikleriyle yapılan gazlaştırma enerji dönüşümünün gaz, sıvı ve katı fazları arasındaki termal, kimyasal ve fiziksel özelliklerin daha iyi anlaşılmasını sağlar. Bu teknikler Ayırık Faz Modeli (Discrete Phase Model-DPM) ve yoğun ayırık faz modeli (Dense Discrete Phase Model-DDPM) gibi modeller kullanılmasıyla gerçekleştirilir. Ek olarak, bu çalışmanın temel amaçlarından biri, devolatilizasyon modeli, char yanma modeli, parçacıklar arası ısı iletim, buharlaşma, radyasyon ve sürüklenme modeli olan birçok alt modelin eklenmesi ile elde edilen yani gazlaştırma modeli ile, son ürün olan sentetik gazı özelliklerine etkisini araştırmaktır.

1.3. Doktora Tezinin Bölümleri

Bu tez, yapılan araştırma çalışmalarını, elde edilen sonuçları, tartışma ve önerileri kapsayacak şekilde beş (5) ana farklı bölümde düzenlenmiştir.

Bölüm 1 GİRİŞ: Gazlaştırma süreci ve yanma hakkında net bir arka plan sunulmaktadır. Ayrıca, bu çalışmanın kapsam ve tezin yapısı verilmiştir.

Bölüm 2 KURAMSAL TEMELLER ve KAYNAK ARAŞTIRMASI: Gazlaştırma ve yanma, bir literatür araştırması, teorik arka plan ve yıllar boyunca gazlaştırmanın gelişimi sunulmaktadır. Bölüm, gazlaştırma işleminin geniş bir kapsamını içeren altı (6) alt başlıkta düzenlenmiştir. Bunlar gazlaştırma işleminin yapısını, gazlaştırma kullanımının faydalarını, sentetik gaz yapmak için kullanılan farklı modelleme tekniklerini, gazlaştırma uygulamaları için yeni yöntemleri ve modellerin geliştirilmesini, hammadde ve sentetik gazı karakterizasyonunu ve gazlaştırma işleminin gelecekteki gelişimini içermektedir.

Bölüm 3 MATERYAL ve YÖNTEM:

Bölüm 3.1: Gazlaştırma reaktöründeki hidrodinamik olayların ayrıntılı bir açıklaması sunulmuştur, gazlaştırma akışının hidrodinamiği üzerindeki 3-D ve 2-D etkileri de yer

almaktadır. Hidrodinamik değerler, modeli doğrulamak için deneysel verilerle karşılaştırılmıştır.

Bölüm 3.2: Üretilen sentez gazı miktarını, gazlaştırıcı boyutunu, basıncı, sıcaklığı, ve gazlaştırıcının hız dağılımını hesaplamak için geliştirilen 2-D gazlaştırma modeli eulerian-eulerian yöntemi kullanılarak yapılmış olup bu bölümde ayrıntılı bir açıklaması sunulmaktadır. Ek olarak, farklı türbülans modelinin modelleme doğruluğu üzerindeki etkilerinin incelenmesine ilaveten, model geliştirme aparatı ANSYS FLUENT'in de anlatılması yer almaktadır. Modelde sadece üç tane kimyasal reaksiyon tanımlanmıştır.

Bölüm 3.3: Daha kapsamlı bir gazlaştırma modeli hazırlanmıştır. Bu sayısal model on dört farklı kimyasal reaksiyonun hesaba dahil edildiği üç boyutlu (3-D) bir modeldir. Katı parçacıkları modellemek için DPM modeli kullanılmıştır. Zamana bağlı olmayan kararlı durum çözümleri elde edilmiş ve son bölümde yanıt Yüzey Optimizasyonu Metodu ile (Response Surface Methodology-RSM) optimizasyon çalışmaları gerçekleştirilmiştir. Ağ Yakınsama Endeksi (Grid Convergence Index-GCI) ve ağdan bağımsızlık çalışmaları yapılmıştır. Deneysel değerler ve sayısal hesaplama arasında bir karşılaştırma da sunulmaktadır. Bu model euler-lagrangian yaklaşımı bir çalışmayı içermektedir. P-1 radyasyon modeli kullanılmıştır.

Bölüm 3.4: Bu bölümde Büyük Girdap Simülasyonu (Large Eddy Simulation-LES) türbülans model teknikleri kullanılmıştır: Bir önceki aşamada kullanılan tüm gazlaştırma model adımları burda da yapılmıştır. Modelin doğrulaması gerçekleştirilmiştir. Farklı LES türbülans modelleri ile sonuçlar sunulmuştur. Son bölümde LES türbülans modelleri ile Reynolds Ortalama Navier-Stokes (Reynolds Averaged Navier Stokes-RANS) türbülans modelleri sonuçları karşılaştırılmıştır. En uygun LES modeli ile sentetik gaz miktarı hesaplaması yapılmıştır. P-1 radyasyon modeli kullanılmıştır. Hesaplamalar zamana bağlı yapılmıştır.

Bölüm 3.5: Popülasyon denge modeli (Particle Balance Model-PBM), Makroskobik Parçacık Modeli (Macroscopic Particle Model-MPM) ve Yoğun Ayrık Faz Modelleri ile (Dense Discrete Phase Model- Discrete Element Method-DDPM-DEM ve Dense

Discrete Phase Model- Kinetic Theory of Granular Flow-DDPM-KTGF) çözümler sunulmuştur. Kısaca aralarındaki farklılıklarından avantaj ve dezavantajlarından bahsedilmiştir. Gerekli çözümler alınıp değerlendirilmiştir. Ayrık Ordinat(Discrete Ordinate-DO) radyasyon modeli kullanılmıştır. Hesaplamalar zamana bağlı yapılmıştır.

Bölüm 3.6: Farklı alt modellerin uygulanması ile gazlaştırma yöntemini CFD ile çözmede yeni bir model geliştirilmiştir. Mevcut modellerdeki hesaplamayı kısıtlayıcı özelliklerin bu geliştirilen farklı alt modellerin uygulanması ile ortadan kaldırarak daha doğru sentez gazı miktarı hesaplamaları yapılmıştır. Daha sonra sentetik gazı verimliliğine gazlaştırıcının konum etkileri farklı açılarda incelenmiştir. Ayrıca katı parçacıklardaki gözenekli yapıların gazlaştırma verimliliğine etkileri de araştırılmıştır.

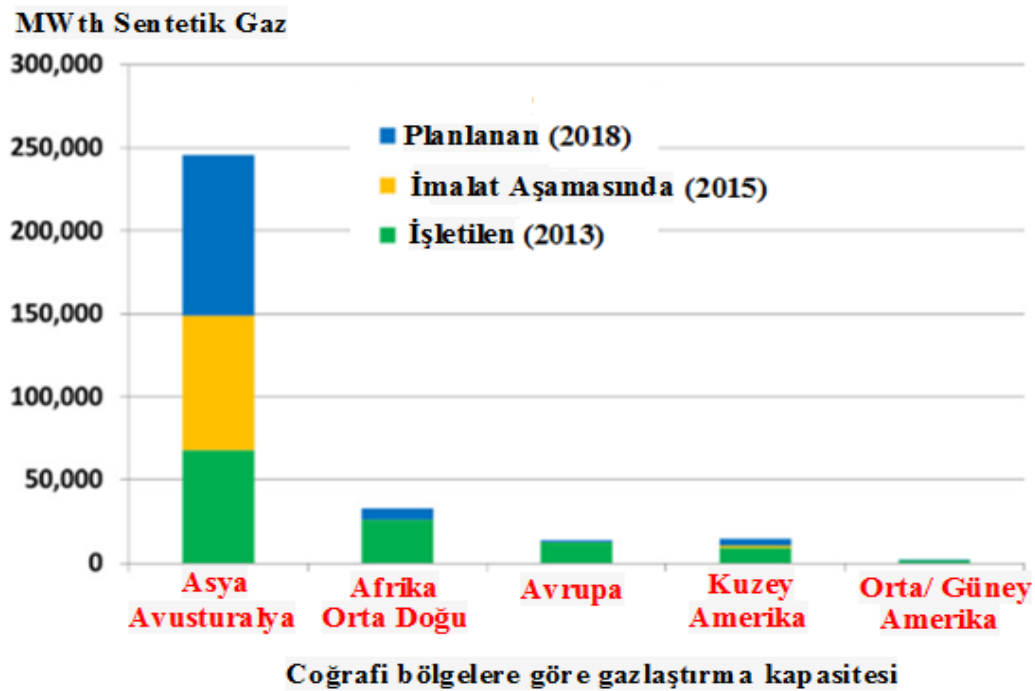
Bölüm 4 BULGULAR veTARTIŞMA: Bu bölümünde, bir önceki materyal ve yöntem bölümde kullanılan farklı alt bölümler içinde verilen yöntemler ile elde edilen sonuçların ayrıntılı bir özeti yine farklı alt bölümler şeklinde ayrılarak sunulmuştur. Tartışmalar yapılarak sonuç bölümü ile bağlanmıştır.

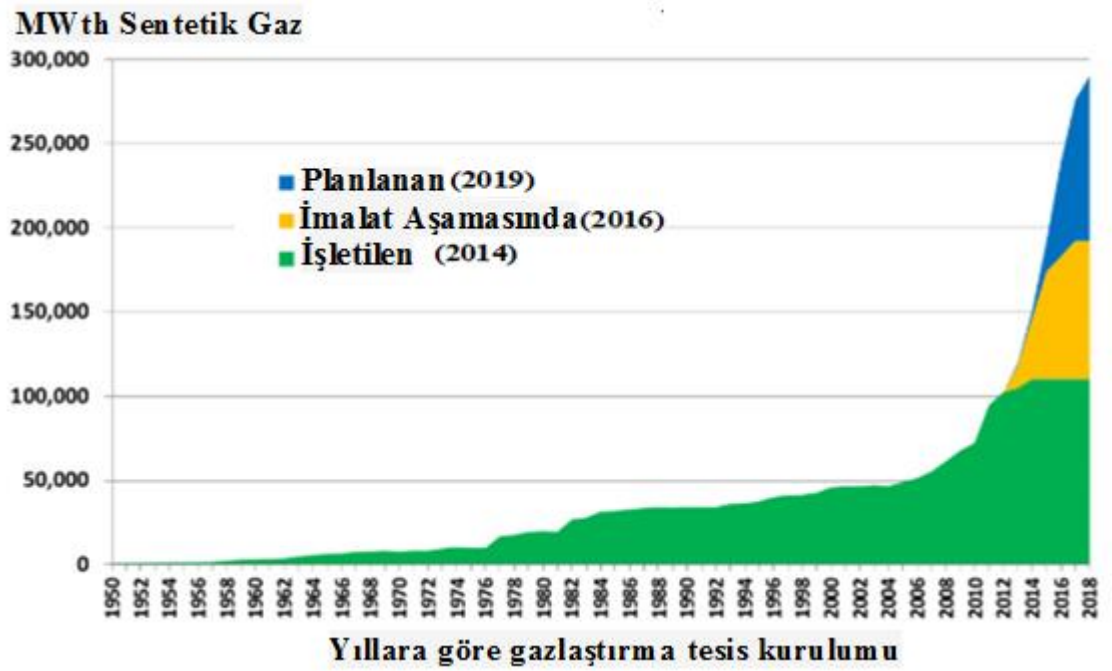
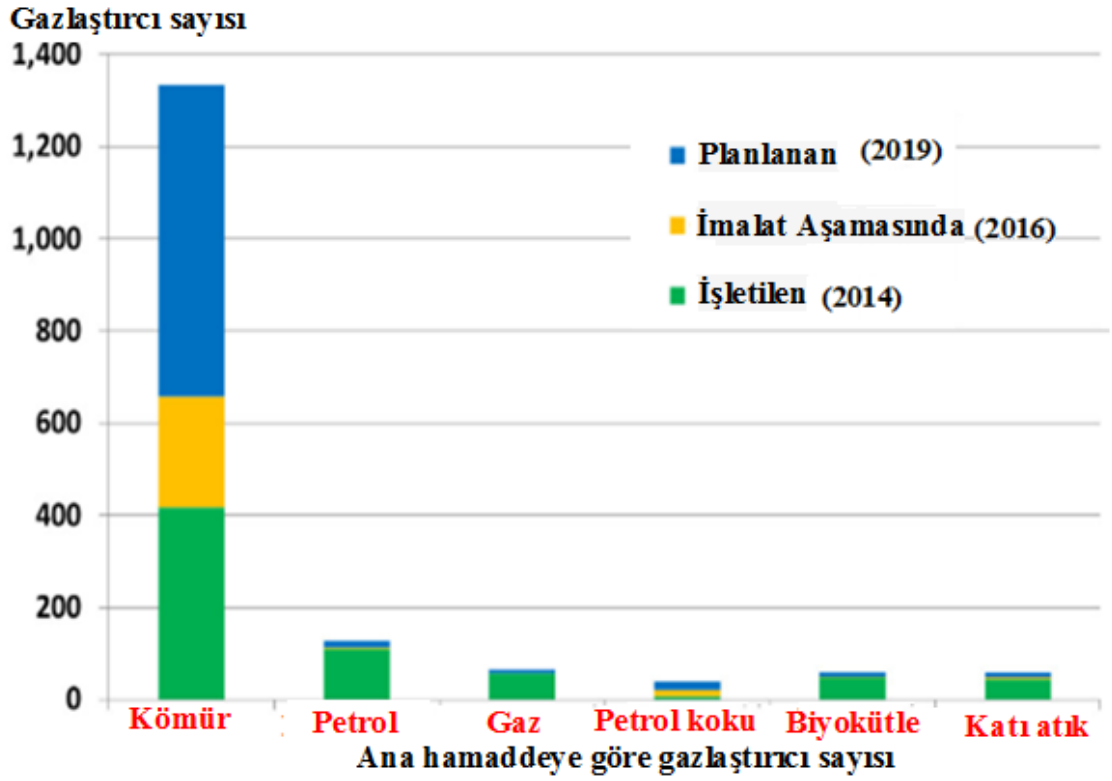
Bölüm 5 SONUÇ: Sonuç bölümünde, bu araştırma çalışmasıyla ulaşılan hedeflerin ve bu araştırma alana katkısının ayrıntılı bir özeti sunulmaktadır.

2. KURAMSAL TEMELLER ve KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Genel Bakış ve Literatür İncelemesi

Gazlaştırma yöntemi ile ileri enerji teknolojilerin geliştirmesi için halen yoğun araştırmalar yapılmakta ve taşımacılık sektörü ile diğer sanayi sektörlerinde kullanılmak üzere sıvı yakıt, elektrik ve çeşitli kimyasallar gibi verimli ve temiz enerji üretilmektedir. Dahası, gazlaştırma teknolojisi sıfır tehlikeli emisyon üretir ve bu nedenle bu teknolojinin önümüzdeki yıllarda daha yaygın olacağı tahmin edilmektedir. Gazlaştırma işleminin kurulum maliyeti, özellikleri nedeniyle yanma ile ilgili diğer sistemlere göre çok daha düşüktür; bu nedenle, dünyanın dört bir yanındaki araştırmacılar, mühendisler ve bilim adamları bu teknolojiye çok ilgi göstermektedir. Günümüzde, gazlaştırma tesisleri, uygulamalarının farklı kullanımı için çok daha fazla inşa edilmektedir ve sayısı gittikçe artmaktadır. Halihazırda işletilmekte olan çok sayıda gazlaştırma tesisi de bulunmaktadır. Bununla birlikte bir çok gazlaştırma tesisi de imal edilmektedir, ve aynı zamanda bir çoğu da projelendirme sürecindedir. Şekil 2.1'de gösterildiği gibi, başlıca büyümenin Asya'da (özellikle Çin, Hindistan, Güney Kore ve Moğolistan) gerçekleşmesiyle, dünyadaki gazlaştırma kapasitesinin 2023 yılına kadar önemli ölçüde artması beklenmektedir.





Şekil 2.1. Akışkan yatak gazlaştırmasının faydaları (Miloni 2015)

Tüm dünyada bu konuya ilgi büyüktür ve işletimde veya inşa halinde olmak üzere farklı uygulamalara yönelik gazlaştırma tesislerinin sayıları giderek artmaktadır. Dünyada 686

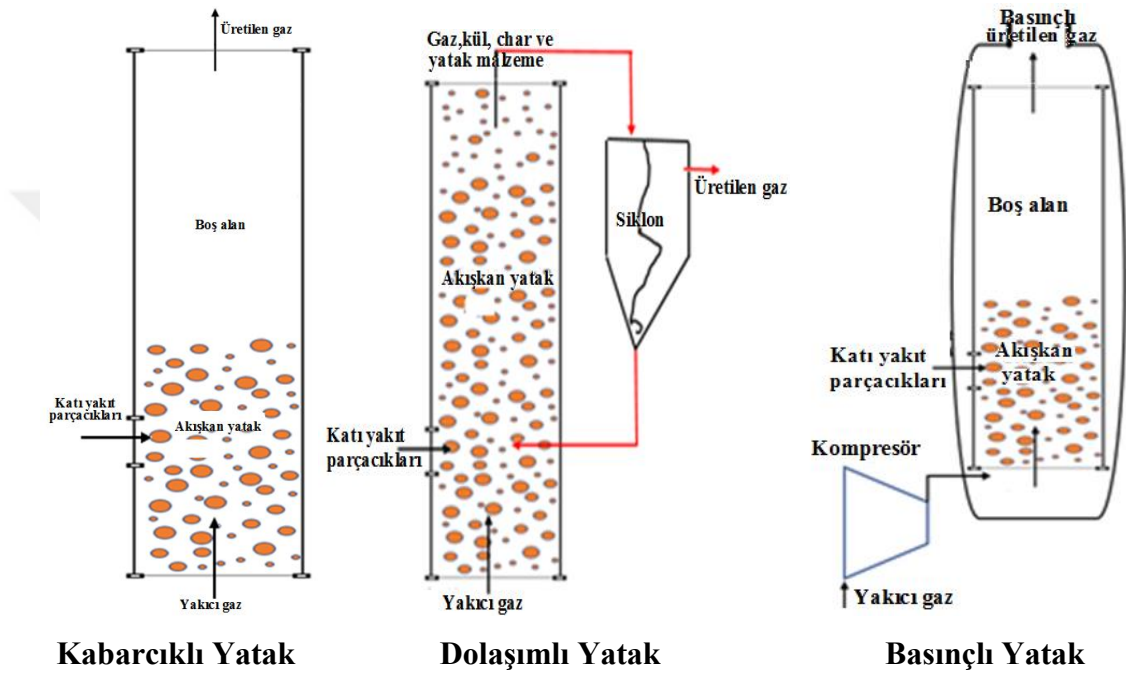
gazlaştırıcı reaktör ile birlikte yaklaşık 272 çalışan gazlaştırma tesisi bulunmaktadır. Türkiye'de spesifik bir gazlaştırıcı üretici firma çok az sayıda bulunmaktadır. Ancak Türkiye dışında çok sayıda gazlaştırma reaktör üreticisi bulunmaktadır (Anonim, 2020). Yenilenebilir enerji sistemlerini üreten bu şirketler, yeşil enerji ve diğer alt ürünleri araştırma, geliştirme ve üretme, satma konusunda uzmanlaşmaktadır. Ürün reklamlarında da belirtildiği gibi, her birinin küçük ve düşük kaliteli sistemlerden daha akıllı ve karmaşık sistemlere kadar değişen özgün tasarımları ve çözümleri bulunmaktadır.

Gazlaştırma teknolojisi neredeyse iki yüzyıl önce geliştirilmiştir; bu teknoloji çoğunlukla 2. Dünya Savaşı sırasında kullanılmıştır. Teknoloji bu savaştan kısa süre sonra ortadan kaybolmuştur. Ancak son zamanlarda artan akaryakıt ve petrol fiyatları ile çevre kaygıları nedeniyle yeniden ilgi kazanmaktadır. Gazlaştırmada kullanılan teknolojinin birçok farklı türü vardır, ancak gazlaştırma teknolojisinin aşağıdaki temelde dört mühendislik noktası vardır;

1-Reaktör tasarımı, 2-Çalışma sıcaklığı, 3-Dahili ve harici ısıtma, 4-Oksijen seviyesi veya Hava içeriği. Gazlaştırma sistemlerinde kullanılan tipik olarak metaller, plastikler ve kompozitler olmak üzere üç farklı malzeme vardır. Metaller: Yüksek mukavemet ve sıcaklık toleransları nedeniyle her türlü gazlaştırma sistemlerinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Aşındırıcı veya aşındırıcı olmayan türleri seçme seçeneği olabilir. Başlıca dezavantajlar; sistemi çok ağır hale getirirler ve oldukça maliyetlidirler. Plastikler: Düşük mukavemet ve sıcaklık toleransları nedeniyle sadece ıslak gazlaştırma sistemlerinde kullanılırlar. Bu tür sistemler çok hafiftir ve aşındırıcı değildir. Ayrıca, çok ucuzdurlar (uygun maliyetli). Kompozitler: Sadece akışkan yataklı gazlaştırma sistemlerinde kullanılırlar. Elyaf takviyeli polimer veya karbon elyaf takviyeli polimer ile üretilbilirler. Plastiklerin aksine, geniş bir mukavemet ve sıcaklık toleranslarına sahiptirler. Ayrıca, bu sistemler çok hafiftir, aşınmaz ve oldukça ucuzdur.

Gazlaştırıcı reaktör yapılandırmaları ve uygulama durumları; gazlaştırma reaktörleri tipik olarak sürüklenmiş akış, akışkan yatak ve hareketli veya sabit yataklı sistemler olarak sınıflandırılır. Gazlaştırma sistemlerinin konfigürasyonu ve bileşenleri birkaç faktöre bağlıdır. Bunlardan bazıları reaktör konumu (yatay veya dikey yönde), akışkanlaşma hızı,

yatak yüksekliği, reaktör yüksekliği ve Eşdeğerlik Oranı (Equivalence Ratio-ER) olup, bu faktörlere göre gazlaştırma türleri ve bileşenleri kullanılacaktır. Bu çalışmada genelde akışkan yatak üzerinde durulacağından aşağıda akışkan yataklar sınıflandırılmıştır. Akışkan yataklı gazlaştırıcılar, akışkan dinamiklerine ve ısı transferi modellerine göre kategorize edilir. Yaygın akışkan yatak gazlaştırıcılar, Şekil 2.2 de gösterildiği gibi, kabarcıklı akışkan yatak, dolaşımdaki akışkan yatak ve basınçlı yataktır.



Şekil 2.2. Akışkan yatak tipleri

Temiz kömür teknolojileri kapsamında kömür kaynaklarından akışkan yataklı ileri dönüşüm teknolojileri kullanarak elektrik, sıvı yakıt ve çeşitli kimyasallar elde etmek ve bunların temiz ve verimli bir şekilde enerji üretimi, ulaşım ve diğer sektörlerde kullanımına yönelik yoğun Ar-Ge ve teknoloji uygulama çalışmaları devam etmektedir. TUBITAK MAM Enerji enstitüsü ve Türkiye Kömür İşletmeleri (TKİ) bu gazlaştırma teknolojilerini araştırmaya, geliştirmeye ve uygulamaya devam etmektedir.

Diğer taraftan gazlaştırma teknolojisi, özellikle sıfır emisyonlu santral teknolojilerinden biri olduğu için önümüzdeki yıllarda bu teknolojinin artarak yaygınlaşacağı öngörülmektedir. Çünkü bu sistemlerde CO₂ tutma söz konusu olduğunda gerekli ilave maliyet, yakma sistemlerine oranla çok daha düşük seviyelerde olmaktadır.

Ülkemizin geliştireceği özellikle kül ve nemi yüksek, ısı değeri düşük kömürlerin ve biyokütle kaynaklarının (atık ve kanalizasyon çamurları dahil) gazlaştırılması/pirolizi teknolojileri ile mevcut kaynaklardan daha verimli enerji üretir konuma gelerek enerji alanında yurtdışı bağımlılığının azaltılması ve gazlaştırma/piroliz teknolojileri konusunda dünyada yer alınabilmesi açısından önemli bir teknolojidir.

Türkiye zengin kömür kaynaklarına, biyokütle kaynak atıklarına sahiptir. Özellikle kömür kaynakları yüksek nem içeriğine ve düşük kalori değerine sahiptir. Bu nedenle gazlaştırma işlemi ile bu kömür ve biyokütlenin doğrudan yakıt olarak kullanılması yerine, gazlaştırma yakıt dönüştürme teknolojilerini kullanarak daha verimli ve temiz gaz kullanılması önemli olacaktır. Günümüzde enerji üretiminin yanında temiz olarak üretmek de hayati önem taşımaktadır. Gazlaştırmanın önemi sadece daha verimli bir enerji üretimi değil, aynı zamanda süreç çok düşük seviyede zararlı emisyonlar da üretmesidir. Dolayısıyla bu gazlaştırma teknolojisi, doğasının ve öneminin ayrıntılı olarak farkında olup, ülkemize enerji ihraç etmeden enerji potansiyelini artıracak ve katkı sağlayacaktır.

Verimli, istenilen düzeyde ve optimize edilmiş analiz, tasarım, üretim ve bunu enerji üretimi endüstrisine uygulamak, başlangıçta gazlaştırma sürecinin daha iyi anlaşılmasına bağlıdır. Gazlaştırma sürecini çok iyi bir şekilde anlamak için deneysel, teorik veya hesaplamalı modeller geliştirilmelidir. Bu süreci araştırmak için çok zor ve pahalı deneysel kurulumlar nedeniyle hesaplamalı modeller seçilmiştir. Hesaplamalı modellerin de deneysel çalışmalara kıyasla çeşitli avantajları vardır. Deneysel çalışmalar yalnızca CFD modellerinin doğrulanması için kullanılmıştır. Günümüzde, CFD araçları artık akademi veya endüstride moda olmuştur ve bilimsel, endüstriyel veya mühendislik problemleri CFD yöntemleri kullanılarak çözülmektedir. Bilgisayar destekli mühendislik, deneysel çalışma ve tasarım süresinin önemli ölçüde azalması nedeniyle, tasarım ve prototip üretim maliyetlerini azaltma konusunda da önemli bilgiler sağlar. Bunun yanı sıra yeni bir ürün, bugünün çok rekabetçi bir pazarına CFD yardımı ile çok kısa sürede pazarlanmaktadır ve bu da üretici firmaya rakiplerine kıyasla önemli ölçüde fayda sağlayabilmektedir. Bu çalışmada gazlaştırma sürecinin çok pahalı ve karmaşık olması

nedeniyle, deneysel çalışma yapmak yerine, sayısal modeller çoğunlukla gazlaştırma problemlerini çözmek için avantajlar sağlayacaktır.

CFD bu çalışmada karmaşık ve birleşik reaktif ve çok fazlı akışları analiz etmek için kullanılacaktır (Belhadj ve ark. 2016). CFD, termodinamik, ısı transferi, enerji ve akışkanlar mekaniği olaylarını araştırmak için en hayati araçlardan biridir. CFD sayısal bir çalışma aracıdır ve fonksiyonları sürekli olarak artırılmaktadır. Endüstriyel ürün ve süreçlerin tasarımı için hayati bir bileşendir (Anderson 1996, Peniguel 1998, Patankar 2002, Versteeg ve Malelesekera 2007, YaoSong ve Xiao Wen 2007, Gant 2010).

Şu anda, basit ve tek fazlı laminar veya türbülanslı akışlar, CFD tarafından çok doğru ve güvenilir bir şekilde simüle edilmektedir. Öte yandan, enerji denklemleriyle tek fazlı akışlar ve ısı transferi birleşik çözümler momentum denklemleri ek karmaşıklık getirmektedir. Öncelikle türbülanslı ısı transferini, akış sıkıştırılabilirliğini, yerçekimini ve kaldırma kuvvetlerini etkilemektedir. Isıl iletkenlik, ısı yayılma veya sıcaklık, yoğunluk veya viskoziteye bağlı olarak belirli ısı değişimi gibi ana parametrelerle bazı akış özellikleri değişiklikleri, sıcaklık veya basınç parametrelerine bağlı olarak değişmesi analiz yöntemlerini daha karmaşık hale getirmektedir (Shaw 1992, Farmer ve ark. 2005).

Ek olarak, endüstride, çoğu mühendislik problemi, birleşik analizler olarak bilinen iletim, taşınım ve radyasyon ile ısı transferinden oluşmaktadır. Parçacık dağılım modellemesi, türlerin(species) taşınması ve kimyasal reaksiyonlar da eşlenik analizleri gerektirir ve bu eşlenik ve çift analizleri gazlaştırma sorunlarını çok daha karmaşık hale getirmektedir. Bu problemlerin ampirik ve yarı ampirik modellere dayalı geleneksel modelleme teknikleriyle modellenmesi günümüz rekabet ortamında daha fazla zaman gerektirdiği gibi tasarım, üretim ve test sürecine hızlı bir şekilde uygulanması da güvenilir değildir. Çünkü, geçerli modeldeki yeni tasarım denklemleri ve bilinmeyen parametreler, onaylanmış deneysel veritabanlarına dayalı olarak ekipman veya süreç revize edilirken de değiştirilmelidir. Yeni ekipman ve işlemlerin geliştirilmesi, bir laboratuvar ölçeğinden gerçek bir ölçeğe geçiş gibi deneyimli uzmanlar için önemli ölçüde zaman gerektiren zorlu adımlara bağlıdır (Andersson ve ark. 2011). Bu gibi durumlarda bazı parametre

değişiklikleri ve bu değişikliklerin yeni tasarımı nasıl etkileyebileceği CFD analizleri ile kolaylıkla yapılabilir. Deney sayısı önemli ölçüde azaltılabilir.

Nümerik yöntem, ön işleme, çözüm ve son işlemden oluşur. Ön işleme, geometrik modellemeyi, ağ oluşturma ve sınır koşullarını, ayrıklaştırma denklemlerini ve nihai işlem sonuçlarının görselleştirilmesini içerir. Bu karmaşık ve bağlantılı analizlerde, kullanıcı tanımlı fonksiyonların kullanılması ve farklı analiz türlerinin birleştirilmesi de bu çalışmanın belirli bölümlerinde uygulanmaktadır. Dahası, süreçteki radyasyon ısı transferi de araştırılacak ve sorunu daha karmaşık hale getirecektir. RANS denklemlerine ek olarak, Ayrılmış Girdap Simülasyonu (Detached Eddy Simulation- DES) ve LES gibi nispeten gelişmiş türbülans modellerinin kullanımı da hedeflenmiştir. Ayrıca yakın duvar modellemesinde yeni geliştirilen Menter-Lechner duvar fonksiyonu, gerektiğinde ilgili türbülans modellerinde kullanılmıştır. Bu şekilde, yukarıda bahsedilen yeni konular, gazlaştırma işlemi olarak bilinen karmaşık ve birleşik bir reaktif akış sürecinin performansını değerlendirmek için uygulanmıştır.

Genel gazlaştırma ile ilgili kavramsal temeller, kısaca tarihçesi ve CFD'nin gazlaştırma problemi için uygulamaları literatür taramasından sonra, şimdi gazlaştırma süreci ile ilgili daha ayrıntılı literatür taraması ile ilgili bilgi verilmektedir. En önemli genel bakış çalışmalarına bakıldığında, Baruah ve Baruah (2014) biyokütle yada katı yakıt gazlaştırma sürecini gözden geçiren bir çalışma hazırlamışlardır. Biyokütle gazlaştırmanın dünya çapında ciddi bir enerji kaynağı olduğunu ve bugüne kadar çok sayıda hesaplamalı ve deneysel çalışmanın yapıldığını çalışmalarında belirtmektedirler. Makalelerinde, son hesaplama çalışmalarını belirli kriterlere ve parametrelere göre kategorize etmişlerdir. Yazdıkları bu inceleme makalelerinin araştırmacılar, gazlaştırma sonu ürünlerini kullanan teknik elemanlar ve reaktör tasarımcıları için yararlı olması gerektiği sonucuna varmaktadırlar. Son olarak CFD yönteminde bulunan farklı modellerin avantajlarını entegre ederek gazlaştırıcı tasarımın vazgeçilmez bir parçası olduğu sonucuna varılmaktadır. Hassas sayısal yöntemlerle birleştirilen gazlaştırma işleminin ayrıntılı ve doğru kimyasal olaylarının, kapsamlı bir CFD simülasyonu geliştirerek hesaplamanın gerekli olduğu da vurgulanmıştır.

Öte yandan, Sinir Ağı Modellemesi (Artificial Neural Network-ANN), bazı araştırmacılar tarafından biyokütle gazlaşmasının incelenmesinde yeni bir yaklaşım olarak da kullanılmaktadır. ANN karmaşık gazlaştırma sürecine alternatif bir yöntem sağlamaktadır.

Sikarwar ve ark. (2016) yakın zamanda biyokütle gazlaştırmadaki ilerlemelere genel bakış adlı bir inceleme makalesi yayınlamıştır. Bu çalışmada biyokütle gazlaştırma için geleneksel ve ileri teknolojiler gözden geçirilmektedir. Ayrıca bu makaleleri içerisinde, termodinamik modelleme, kinetik modelleme, CFD, ANN gibi çeşitli matematiksel modelleme tekniklerini ve geliştirilmiş tar modelleri ile birlikte bu yöntemlerin avantaj ve dezavantajlarını da açıklamışlardır. Bu akademik çalışmada sosyal ve çevresel etkiler de tartışılmaktadır. Kullanılan hammadelerin direk enerji dönüşümü için kullanmak yerine, biyokütle dönüştürme işlemi ile kullanılması daha yüksek verimlilik ve daha düşük maliyet meydana getireceğini vurgulamaktadırlar. CFD modelinin ise gazlaştırma işlemini incelemek için daha önce bahsedilen yöntemler arasında en kapsamlı model olduğunu da söylemektedirler. CFD ile bir optimizasyon aracının kullanılmasının da , biyokütle araştırması ve reaktör tasarımı için oldukça verimli olacağını vurgulamaktadırlar. ANN karmaşık sistemlerin modellenmesi için nispeten yeni bir yaklaşım olduğunu belirttikleri gibi ve çok az sayıda araştırmacının bu modeli biyokütle gazlaştırmayı tartışmak için kullandıklarını bahsetmektedirler. Çalışmalarında araştırma için önemli olan düşük maliyetli hammaddelerin kullanılması, proses verimliliğinin artırılması, kurulum ve işletim maliyetlerinin düşürülmesi ve sosyo-çevresel etkiler gibi alanları özetlemektedirler. Çalışmaları, günümüzdeki yapılan araştırmalar ve gelecekteki yapılacak araştırma, geliştirme ve incelemenin tam olarak bütünsel bir görünümünü vermektedir. Çalışmaları aynı zamanda biyokütle gazlaştırma teknolojilerinin ekonomik ve sosyal olarak da nasıl ilerleyeceğini göstermektedir. Biyokütle gazlaştırma, enerji ürünleri elde etmek için termokimyasal süreçlerde yaygın olarak kullanılmakta olduğunu ve diğer yenilenebilir enerji dönüşüm süreçlerinden daha iyi bir yöntem olduğunu çalışmalarında önemle vurgulamaktadırlar.

Schulze ve ark. (2016) yeni bir alt model geliştirerek sürüklenmiş akışlı bir gazlaştırıcı üzerinde çalışmaktadır. Hem deneysel hem de hesaplamalı çalışmalara makalelerinde yer

vermektedirler. Deneysel verilerle de doğrulanmış oldukları endotermik gazlaştırma birimi için CFD tabanlı simülasyonların kullanarak bir kinetik alt model geliştirmektedirler.

Adeyemi ve ark. (2015) ise sürüklenmiş akışlı gazlaştırma için sayısal bir model oluşturmaktadır. Sayısal model Lagrangian-Eulerian yaklaşımına dayanır ve deneysel sonuçlarla makul şekilde doğrulanmaktadır. Kentucky kömürü ile bir ağaç odununun sentetik gaz verimlilikleri karşılaştırılmaktadır.

Vascellaria ve ark. (2015) sürüklenmiş akışlı kömür gazlaştırma üzerine araştırma yapmaktadır. Sürüklenen akışlı gazlaştırıcı içindeki sentez gazına kömür dönüştürme sürecini sayısal olarak araştırmak için ANSYS FLUENT ticari yazılımını kullanmaktadırlar. Türbülans, realizable k- ϵ yaklaşımı kullanılarak modellenmektedir. Radyasyon ise P-1 modeli ile modellenmektedir. Euler-Lagrangian yaklaşımını kullanmaktadırlar. Divolatilizasyon ve katı karbon dönüştürme işlemleri için geliştirmekte oldukları ileri düzey modeli bu ticari kode ile birleştirmektedirler.

Jeong ve ark. (2014) iki aşamalı sürüklenmiş akışlı gazlaştırıcı için kömür gazlaştırma sürecini iyileştirmiştir. Eulerian-Lagrangian yaklaşımı ile ANSYS FLUENT ticari kodunu kullanmışlardır. Geliştirilen difüzyon etkili rastgele gözenek modeli, Kullanıcı Tanımlı Fonksiyon (User Defined Function-UDF) ile ticari kod ile birleştirilmektedirler. Çalışmalarını kömür boyutunun gazlaştırma verimliliği üzerindeki etkilerini inceleyerek tamamlamışlardır. Yong ve Ghoniem (2012) cüruf akışı ve partikül yakalama ve tüketim alt modelleri geliştirmektedir. Çalışmalarını zamandan bağımsız durumlar için hesaplamaktadırlar. Geliştirilen alt modeller ise CFD ile iki yönlü olarak birleştirilmektedir.

Singh ve ark. (2013) akışkan yatak yanması ve gazlaştırmanın CFD modellemesi ile ilgili bir makale yayınlamaktadır. Çalışmalarında şimdiye kadar CFD metodlarının gazlaştırma ve yanma işlemlerinin akışkan yatak uygulamaları özetlenmektedir. Yazmış oldukları bu inceleme makalesi son yirmi yılın akışkan yatak yakma ve gazlaştırma süreçlerinin CFD modellemesine genel bir bakış getirmektedir. Sayısal yöntemlerin, akışkan yatak

gazlaştırma için kritik parametreleri tahmin etmek için en uygun yaklaşımlardan biri olduğunu belirtmektedirler. Bu alandaki bazı yeni zorluklara işaret ederler. Ayrıca, reaktif türbülanslı akışta kararsız veya geçici etkiler gerekli olduğunda büyük girdap benzeşimi yöntemlerinin gerekli olduğunu ileri sürmektedirler. Bununla birlikte, LES yöntemleri hesaplama açısından maliyetlidir ve yeterince ince ağ yapısı ve uygun kısa zaman adımı gerekmektedir. LES yönteminin akışkan yatak yakma ve gazlaştırma işlemine uygulanması, hesaplama pahalılığı nedeniyle literatürde çok az bulunmaktadır. Bu süreçlerin sayısal hesaplamaları hakkında birçok yayını inceledikten sonra, hesaplamaların çok sayıda geliştirilen yaklaşık modeller ile yapıldığını ve bazılarının ise aşırı basitleştirmelere sahip olduğu vurgulamaktadırlar. Teorik ve deneysel çalışmalar yerine hesaplamalı akışkanlar dinamiği işlemlerinin daha önemli olduğunu ve daha fazla sayıda gazlaştırma işlemlerine uygulanması gerektiğini söylemektedirler. Son olarak yanma ve gazlaştırma süreçlerindeki sayısal hesaplama uygulamaları gelecekte daha geniş bir alana yayılacağını belirtmektedirler.

Dernbecher ve ark. (2019) CFD ve biyokütle yanma sistemi ile ilgili bir inceleme makalesi yayınlamaktadır. Makale çok ayrıntılıdır ve biyokütle dönüşüm sistemlerine modelleme yaklaşımı hakkında en güncel literatürü kapsamlı bir şekilde sunmaktadır. CFD tabanlı bir modelin yapısı, yakıt yatağı modellemesi, yakıt özellikleri, ısı transferi, kurutma, piroliz, kömürün yanması ve gazlaştırılması, yakıt yatağı içindeki homojen ve heterojen reaksiyonlar, gözenekli ortam, yanma modelleri ve türbülans modelleri gibi gazlaştırma dönüşüm sisteminin adımlarını çok derinlemesine anlatmaktadır. CFD biyokütle modellemesi ile ilgili bazı değerli bilgiler ile çalışmalarını sonuçlandırmaktadırlar. Bunlar, LES türbülans modeli, RANS'tan daha iyi bir tahmin yöntemi olmaktadır. Öte yandan, mühendislik uygulamaları için, RANS yeterli doğruluk sağladığını ve genellikle k- ϵ ailesi biyokütle yanmasında kullanılmakta olduğunu bahsetmişlerdir. Son olarak, biyokütle gazlaştırma simülasyonu için hangi modelin uygun olduğu konusunda genel bir sonuca varmanın zor olduğunu da eklemektedirler.

Fletcher ve ark. (1998) ANSYS CFX ticari yazılımını kullanarak sürüklenmiş akış biyokütle gazlaştırıcısının akışını incelemek için matematiksel bir model geliştirmektedir. Kullandıkları türbülans modelleri, k- ϵ modelleri ve bir diferansiyel

Reynolds gerilim modelidir. Simülasyonları yalnızca reaktif olmayan soğuk akışlar için geçerlidir.

Billaud ve ark. (2016) sürüklenmiş akışlı bir gazlaştırıcı için bir boyutlu (One Dimensional, 1-D) model oluşturmuşlardır. GASPARD modeli olarak adlandırılan bu model ile biyokütle gazlaştırma performansı üzerindeki CO₂, H₂O ve O₂ artışının etkisini incelemektedirler. Sürüklenmiş akışlı gazlaştırıcıların iyi bilinen teknoloji olduğunu, ancak yine de verimli miktarda sentez gazı üretmek için iyileştirmeye ihtiyaç duydukları tavsiye etmektedirler.

Kumar ve Shukla (2016) çalışmalarında öncelikli olarak siklon performans parametrelerini değerlendirmiştir. Aşağı çekiş tipi gazlaştırıcı kullanmışlardır. Deneysel olarak araştırmışlardır, ve aynı zamanda ANSYS FLUENT ticari kodunu kullanarak gazlaştırma sürecini simüle etmek için 3-D bir model geliştirmişlerdir.

Cavazzuti ve ark. (2013) bir seramik endüstriyel silindir fırın için sentez gazı ateşlemeli brülörün CFD analizini yapmıştır. Üç boyutlu sayısal bir model kullanımının yardımı ile sentetik gazın kullanımı için ateşlemeli bir brülör öngörmüşlerdir.

Wecel (2006) radyasyon ve konveksiyon çifti problemleri üzerine bazı değerli çalışmalar yapmıştır. Bu nedenle, gazlaştırma işlemi için konveksiyonla ısı transferi ile birleştirilmiş radyasyon ısı transferinin hesaba katılması önemlidir.

Wang ve ark. (2017), bir gaz-katı akışkan yataktaki hidrodinamik özelliklerin sayısal simülasyonunu incelemişlerdir. 3-D bir model geliştirmişlerdir. Gaz-katı akışının iki fazlı akış mekanizmasını incelemişlerdir. Özellikle farklı sürüklenme modeli kullanmanın etkilerini incelemişlerdir.

Halama ve Spliethoff (2016) basınçlı sürüklenmiş akışlı kömür gazlaştırmanın reaksiyon kinetiğini incelemek için bir CFD modeli geliştirmişlerdir. Hesaplama alanı üç boyutlu olduğundan CFD algoritmasını çözmek için ticari yazılım kullanmışlardır. Simülasyonları zamandan bağımsız olup basınç tabanlı SIMPLE algoritmasıyla birlikte

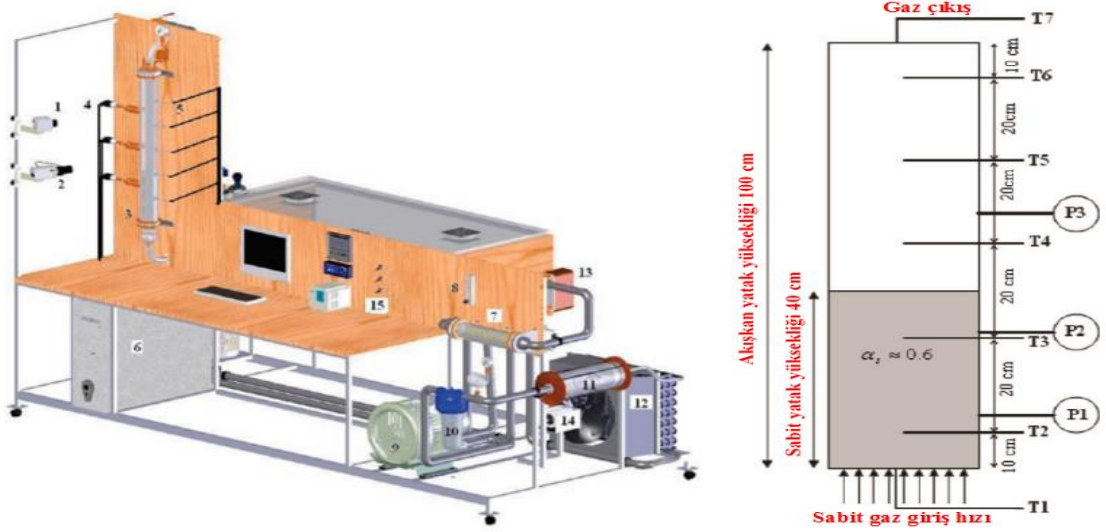
RANS tabanlı türbülans modeli kullanmışlardır. Eulerian-Lagrangian yaklaşımı ile iki fazlı gaz ve katı parçacık karışımını hesaplamaktadırlar. DO ışınım modeli kullanılmıştır ve ayrıca parçacık radyasyon etkileşimi hesaplamalarına dahil edilmiştir.

Alam ve ark. (2015) CO₂ açısından zengin gaz karışımları ile kömür gazlaştırmasından sentetik gazı üretimini incelemiştir. Kimya ve türbülans arasındaki etkileşim, girdap dağılım modeli(eddy dissipation) kullanılarak modellemiştir. Radyasyonla ısı transferi P-1 modeli ile hesaplanırken türbülans akışı standart k – ϵ modeli kullanılarak hesaplanmıştır. Birinci dereceden yukarı geçiş (upwind) yönetimi ile deneklemler ayrıştırılmış ve birleştirilmiş basınç – hız SIMPLE algoritması kullanılmıştır.

Begum ve ark. (2013) ASPEN Plus yazılımı ile sayısal olarak belediye katı atık gazlaştırmayı araştırmak için bir çalışma yapmaktadır. ASPEN Plus (Advanced System for Process Engineering Plus) yazılımını kullanarak sabit yataklı bir gazlaştırıcının simulasoyununu yapmışlardır.

Jurascik ve ark.(2010) gazlaştırma sürecini iyileştirmek ve analiz etmek için bir ekserji çalışması yapmıştır. Çalışmaları öncelikle iki kritik parametre basınç ve metanasyon bölümünün sıcaklığı ve bunların tüm proses performansı üzerindeki etkisine yoğunlaşmaktadır.

Hamzehei ve ark. (2010) çalışmalarında hem deneysel hem de sayısal yaklaşımları kullanmaktadır. Çalışma başlığı 2-D Gaz-katı akışkan yataklı bir reaktörde ısı transfer hidrodinamiğinin hesaplamalı ve deneysel çalışmasıdır. Şekil 2.3' te yapmış oldukları deneysel çalışmasının bir görünümü gösterilmiştir.



Şekil 2.3. Akışkan yatak gazlaştırmanın deneysel kurulumu (Hamzehei ve ark. 2010)

Lui ve ark. (2014), biyokütle gazlaştırma için üç boyutlu bir CFD kararlı durum modeli geliştirmişlerdir. Dolaşımli Akışkan Yataklı (Circulating Fluidized Bed-CFB) bir reaktör kullanmışlardır. Standart $k - \epsilon$ türbülans modeli seçilmiş ve gazlaştırıcının hidrodinamiği türbülanslı reaktif akış ile granüler akışın kinetik teorisi birleştirilerek hesaplamışlardır. Homojen ve heterojen kimyasal reaksiyonların kinetiği hesaplanarak gazlaştırma sırasında meydana gelen bileşiklerin(species) dağılımlarını, hızını ve sıcaklığını hesaplamak için süreklilik, momentum ve enerji denklemleriyle entegre edilmiştir. Çalışmalarının son aşamasında türbülans modellerinin, radyasyon modelinin, Su-Gaz Değişim (Water Gas Shift-WGS) reaksiyonunun ve Eşdeğerlik Oranının (Equivalence Ratio-ER) etkilerini araştırmışlardır.

2.2. Çok Fazlı Akış Çalışmaları

Gazlaştırma yöntemi aslında bir reaktif akıştır. Bu reaktif akış içerisinde parçacık yayılma hidrodinamiği, yanma, türbülanslı akışlar, akışlar ve katı cisimler arasındaki etkileşimle çok fazlı akış meydana gelmektedir ve en son güncel literatür, çok fazlı reaktif akış problemleriyle ilgilenir. 50 yılı aşkın süredir, çok fazlı akış birçok endüstriyel uygulamada hala önemli bir yere sahiptir. Çok fazlı akış, diğer tüm proses sistemlerinde, özellikle kimya endüstrisi, nükleer endüstri, hidrokarbon ve gıda endüstrisinde kullanılmaktadır. Endüstrinin temel uygulamalarından biri olan gazlaştırma sistemleri de

çok fazlı akışın önemli bir örneğidir. Bu gazlaştırma sistemlerinde oluşan sıvı-gaz-katı karışımı ve su sıvısının buharlaşması çok fazlı akışın bir başka şeklidir. Bu sistemin akış yapısı ile enerji dönüşüm performansı hala detaylı olarak araştırılmaya devam edilen önemli konulardan biridir. Şimdiye kadar yapılan akademik çalışmalara baktığımızda pek çok konuda kesinlik olmadığı ve çalışmaların devam ettiği görülmektedir. Literatüre ilk bakışta çok sayıda deneysel ve sayısal çalışmaların olduğu görülmektedir. Bilgisayar destekli çalışmaların da son yarım yüzyılda çok önemli olduğu görülmektedir.

Çok fazlı akış, karışım içinde aynı anda akan iki veya daha fazla fazdan oluşan veya moleküler seviyenin üzerinde bir ölçekte bir düzeyde faz ayrılmasına sahip olan bir akış forumudur. Malzemelerin farklı halleri veya fazlarından (örneğin, gaz, sıvı, katı) veya aynı durumda ve fazda farklı kimyasal özelliklere sahip malzemelerden oluşur. Ana faz ve ikincil faz olarak tanımlanmaktadır. Şekil 2.4 ve şekil 2.5'te gösterildiği gibi gaz-sıvı karışımı, gaz-katı karışımı, sıvı-katı karışımı ve birbiri ile karışmayan-sıvılar karışımı olarak açıklanabilir.



Şekil 2.4. Tek fazlı akış (ANSYS 2020)

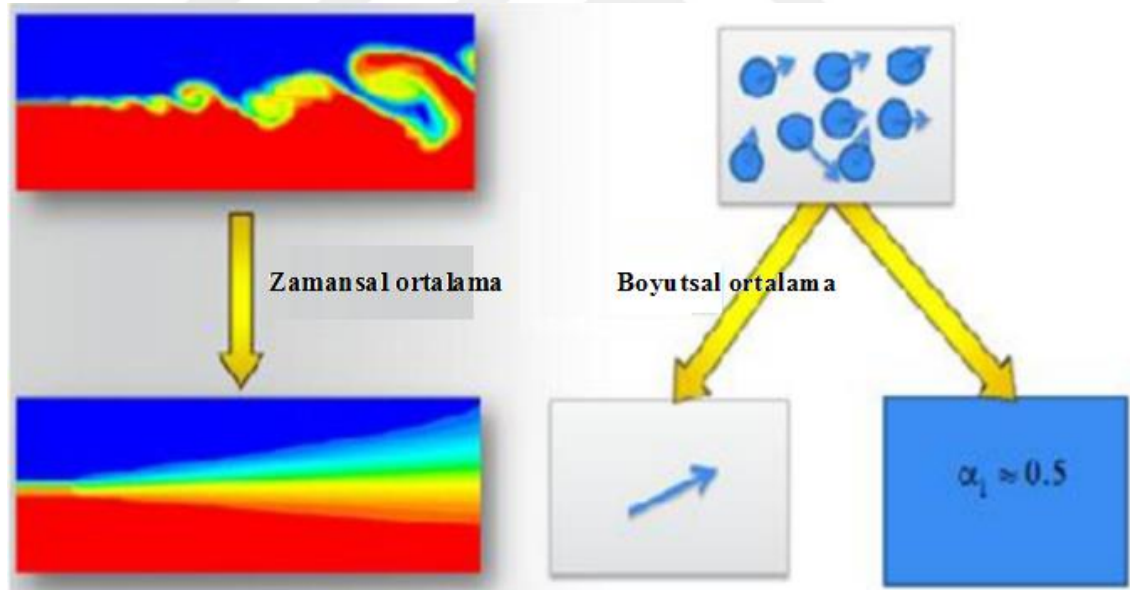


Şekil 2.5. Çok fazlı akış (ANSYS 2020)

Çok fazlı akıştaki fiziksel olayların karmaşıklığı, sayısal, deneysel veya analitik modellemeyi son derece zorlaştırmaktadır. Bu zorluğa rağmen, bazı yeni yaklaşımların yardımıyla, günümüzün bilgisayarlı hesaplama teknolojisi ve gelişen ileri bilimsel teknikleri ile, doğru zamana ve konuma bağlı modelleme önemli ölçüde geliştirilmiştir. Günümüzün CFD teknolojisi, çok fazlı akış denklemlerinin çözümlerine de önemli katkılar sağlamıştır. Aşağıda ifade edildiği gibi çok fazlı momentum denklemi

$$\frac{\partial(\alpha_q \rho_q v_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q v_q) = \alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \vec{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (K_{pq}(\vec{v}_p + \vec{v}_q) + \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp}) + (F_{lift,q} + F_{vm,q} + F_{wl,q} + F_{td,q} + F_q) \quad (2.1)$$

çözülerek denklemdeki bağımlı değişkenlerin bağımsız değişkenlere (t, x, y, z) göre değişim oranı zamana bağlı veya zamandan bağımsız olarak hesaplanır. Bu sektördeki akademik çalışmalarda ve mühendislik hesaplamaları ve analizlerinde Ar-Ge süreçlerinin vazgeçilmez bir parçası haline gelmektedir. FLUENT'te gazlaştırma ve yanma sistemleri için çok fazlı akışı modellemenin farklı yolları bulunmaktadır. Hesaplamalı gazlaştırma için sıcak gaz içerisindeki katı parçacıkların hareketi, çok fazlı akışa bir örnektir. Şekil 2.6' da gösterildiği gibi mikro, mezo ve makro ölçekte (zamansal veya boyutsal ortalama, parçacıklar için yanıt süresi vb.) bazı varsayımlar ile FLUENT'te günümüzün CFD teknikleriyle araştırmak ve çözmek mümkündür. FLUENT'te geliştirilen başlıca beş farklı çok fazlı model yaklaşımları kullanılabilir ve bunlar çizelge 2.1'de verilmektedir.

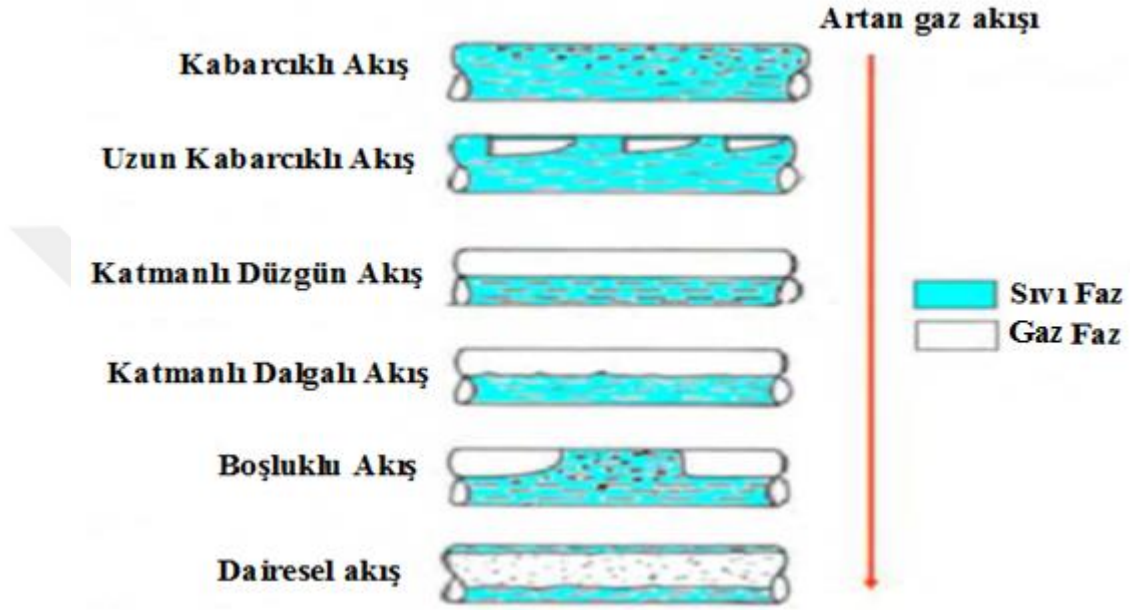


Şekil 2.6. Zamansal ve boyutsal ortalamanın gösterimi (ANSYS 2020)

Çizelge 2.1. Çok fazlı modelleme türleri (ANSYS 2020).

Model İsmi	Sayısal Yaklaşım	Parçacık Akışkan Etkileşimi	Parçacık Parçacık Etkileşimi	Parçacık Boyut Dağılımı (PSD)
DPM	Akışkan-Eulerian Parçacıklar-Lagrangian	Ampirik Modeller	Dahil edilmedi	Dahil etmesi kolay
DDPM-KTGF	Akışkan-Eulerian Parçacıklar-Lagrangian	Ampirik Modeller	Granüler modellerle belirlenen yaklaşık P-P etkileşimleri.	Dahil etmesi kolay
DDPM-DEM	Akışkan-Eulerian Parçacıklar-Lagrangian	Ampirik Modeller	P-P etkileşiminin doğru belirlenmesi	Dahil etmesi kolay
Macroscopic Particle Model	Akışkan-Eulerian Parçacıklar-Lagrangian	Etkileşimlerin çözümün bir parçası olarak belirlenmesi	P-P etkileşiminin doğru belirlenmesi	Dahil etmesi kolay
Euler-Granular Model	Akışkan-Eulerian Parçacıklar-Eulerian	Ampirik Modeller	Akışkan özelliklerine göre modellenen P-P etkileşimleri	PSD'yi hesaba katmak için farklı aşamalar

Yukarıda vurgulandığı gibi, çok fazlı akışla birlikte ısı transferi, akustik ,titreşim, yanma veya gazlaştırma ile ilgili fiziksel problemleri çözmek için çok önemli araştırmalar devam etmektedir. Tek fazlı akışlarla karşılaştırıldığında, çok fazlı akış davranışları çok daha karmaşıktır ve modellemeyi zorlaştırdığı aşağıdaki şekil 2.7'de gösterilen çok fazlı akış sistemlerinden de anlaşılmaktadır.



Şekil 2.7. Çok fazlı akış sistemleri (Lababidi ve ark. 2015).

Şekil 2.7'deki akış türleri aşağıda açıklanmıştır:

Kabarcıklı akış: Sürekli bir sıvı içinde ayrı ayrı gaz kabarcıklarıdır.

Uzun kabarcıklı akış: Sürekli bir gazda ayrı akışlı parçacıklar.

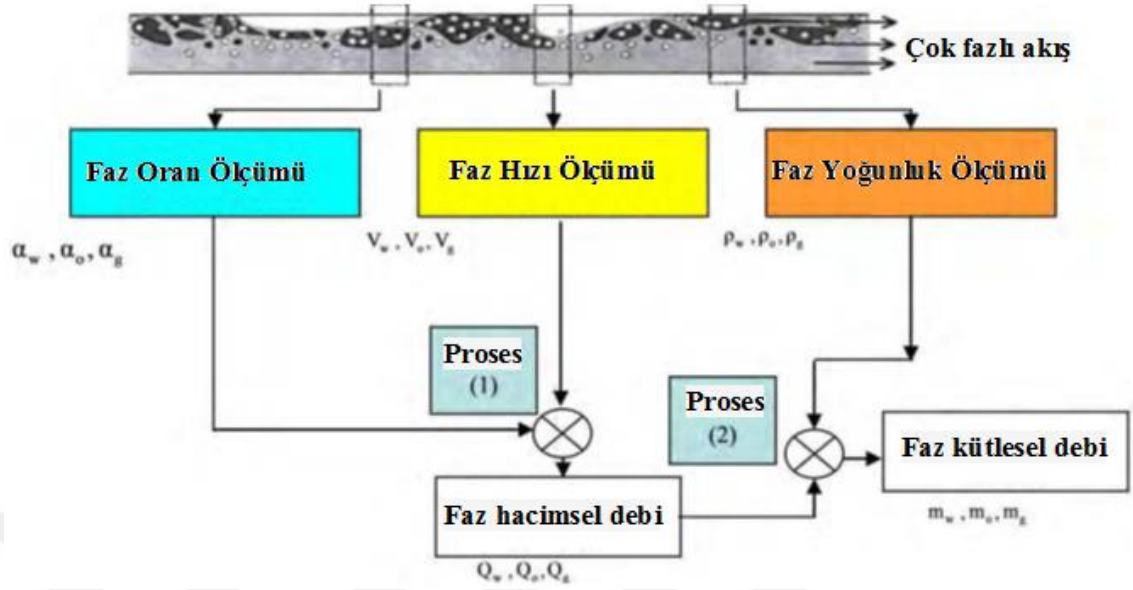
Katmanlı düzgün akış: Sürekli bir akışkan içinde ayrı katı parçacıklar.

Katmanlı dalgalı akış: Birbiriyle karışmayan, tanımlanmış arayüzlere sahip akışkanlar.

Boşluklu akış: Sürekli bir sıvı içinde büyük kabarcıklar.

Dairesel akış : Duvarlar boyunca sürekli sıvı, fakat ana akışkan gaz.

Al-Lababidi ve ark. (2015), test ve sayısal ölçümleri karşılaştırmış ve Şekil 2.8'de gösterildiği gibi çok fazlı akış ölçümleri çok fazlı akış sistemleri hakkında bilgi sağlamıştır.



Şekil 2.8. Mutiphas akış ölçüm stratejisi (Lababidi ve ark. 2015).

Verdin ve ark. (2014) 38 borudaki su parçacıklarının hareketlerini inceleyerek önceki çalışmalarını geliştirmişlerdir. Su damlacıklarının transferinde yüzey geriliminin önemli bir parametre olduğunu göstermişlerdir. Yaptığı bu çalışmaları, deneysel çalışmalarla göre, CFD çalışmaları ile bazı sonuçların daha kolayca elde edilebilecek olduğunu göstermiştir.

Höhne ve Mehlhoop (2014) hava-su karışımı boşluklu akışını (slug flow) incelemişlerdir. Bu akışı yatay bir kanal için incelemişler ve iki farklı deneysel sonuçla karşılaştırmışlardır. Yüzey sürekleme katsayısı ve türbülans Cebirsel Arayüzey Alan Yoğunluğu (AIAD) modeli kullanmışlardır. Plug formu ve frekans değerleri dikey sonuçlarla karşılaştırıldığında sonuçların tutarlı olduğu görülmektedir. Bu çalışma ile hız ve türbülans değerlerinin AIAD modeli ile standart k- ω , k- ϵ ve SST sonuçlarına göre daha doğru olduğu tespit edilmiştir.

Başka bir çalışmaya baktığımızda, Wang ve ark. (2014), LES modeli ile bir çalışma yapmışlardır. Türbülans modeli olarak LES kullanılmışlardır ve çok fazlı akışı yeni bir sayısal şema ile çözmüşlerdir. Çalışmalarında faz ayrımı, ilk bulut şekli etkileri, başlangıç en boy oranı ve çoklu dağılım dinamikleri üzerinde yoğunlaşmışlardır.

2.3. Gazlaştırma Çalışmalarında Kütle ve Isı Transferi

Gazlaştırma sistemlerinde buharlaşma veya kurutma çok fazlı akışın başka bir şeklidir. Buharlaşma, enerji ilavesinden kaynaklanan bir maddenin sıvıdan buhara dönüşmesidir. Yoğuşma ise bir maddenin buhar fazından enerji uzaklaştırılması sonucu buhardan sıvıya dönüşmesidir. FLUENT'teki buharlaşma (veya kurutma) hesabında LEE Modeli, termal faz değişim modeli veya iki direnç modeli olmak üzere üç farklı model ile hesaplanabilmektedir. Literatürde, gazlaştırma işleminde nem kaybı, nemin parçacığın ince kabuğundan taşınmasını, bu nemin parçacık yüzeyinden buharlaşmasını ve nemin çevreye konvektif kütle taşınmasını içermektedir. İtici güç, parçacığın yüzeyi ile çevreleyen sıcak gazlar arasındaki su buharı basıncı farkıdır. Dolayısıyla tek bir faz kaynaklı nem kaybı aşağıdaki gibi modellenmiştir.

$$\dot{m} = k_t(P_s - P_a) \quad (2.2)$$

k_t 'nin bir kütle transfer katsayısı olduğu durumda, P_s , parçacıkların yüzeyindeki su buharı basıncıdır. P_a , havadaki su buharı basıncıdır. Isı transferi hesaplamaları için, ısı transferinin modellemesini kolayca yönetilebilir kılmak için, parçacık ve ortamının tekdüze dahili ısı üretimi ile bir küre şeklinde olduğu varsayılmıştır. Ayrıca, bir parçacık içindeki sıcaklığın yalnızca radyal yönde değiştiği varsayılmıştır. Geçici ısı denklemi bu varsayımlarla aşağıdaki gibi yazılmaktadır (Becket ve Fricke 1997).

$$\frac{k}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \rho W = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$h_{eff} = h_{convection} + h_{radiation} \quad (2.4)$$

Radyasyon ısı transfer katsayısı aşağıdaki formülle verilmektedir.

$$h_{radiation} = \sigma(T_s + T_a)(T_s^2 + T_a^2) \quad (2.5)$$

Konveksiyonla ısı transfer katsayısı Nusselt numarası Nu 'dan aşağıdaki gibi elde edilir.

$$Nu = \frac{h_{convection} d}{k_{hot\ gas}} \quad (2.6)$$

2.3. Reaktif Akışta Türbülans Çalışmaları

Türbülanslı reaktif akış, akış parametrelerinin analizi, ölçümü, tahmini ve kontrolü için oldukça karmaşık bir akıştır. Türbülanslı akışlarda genel olarak, reynolds sayısı akışı karakterize etmek için yeterli değildir. Türbülanslı akış için türbülans şiddeti (Tu) ve türbülans uzunluk ölçeği (LS) ni de tanımlamak gerekmektedir. Sadece Reynolds sayısı değil, türbülans şiddeti, türbülans uzunluk ölçeği de Reynolds sayısı ile birlikte düşünülmelidir. Türbülans şiddeti, hız dalgalanmalarının ortalama karekökün ortalama hızına oranı olarak tanımlanır. Genellikle yüzde olarak verilir. Başka bir deyişle, türbülansın şiddeti akış boyunca meydana gelen rastgele dalgalanmaların yoğunluğunun bir ifadesidir. Aşağıdaki şekilde matematiksel olarak ifade edilmiştir.

$$Tu = \frac{u'}{U} \times 100\% \quad (2.7)$$

Türbülans şiddeti, hızdaki dalgalanmaların ortalama karekökün ortalama hızına oranı olarak ifade edilir. Türbülans şiddeti, türbülans seviyesini tanımladığı için türbülanslı akışlarla çalışan araştırmacılar ve tasarımcılar için hayati önem taşımaktadır. Türbülans seviyesi arttığında genellikle basınç düşüşü ve ısı transferi artmaktadır. Bununla birlikte, bazı durumlarda, girdi türbülans değeri, özellikle ayrılmış akışlarda veya reaktif karmaşık akışlarda akış biçimini tamamen değiştirebilmektedir. Akış şeklinin değişmesi, basınç düşüşünde ve ısı transferinde değişikliklere neden olmaktadır. Tasarımcılar bazen basınç kayıplarını en aza indirmek isterken, bazen ısı transferini artırmak isterler. Türbülans hem istenmeyen bir durum hem de bilinçli olarak istenen bir durum olabilir.

Bir CFD simülasyonunda sınır koşullarına girerken türbülans seviyesini belirlemek ve giriş sınır şartı olarak bunu tanımlamak gereklidir. Türbülans şiddeti uygun girilmesi ve türbülans oluşumunun uygun hesaplanması için önceki deneyimler veya deneysel ölçümler kullanılabilir. Önceki deneyimlerden bazı bilgiler aşağıda bulunabilir:

Yüksek türbülans durumu: Karmaşık geometrilerde yüksek türbülanslı akışlar, ör. Isı eşanjörlerinde, türbomakinelerde türbülans şiddeti genellikle% 5 ile% 20 arasında değişir. Bu bölgeye yüksek türbülans bölgesi denir.

Orta türbülans durumu: Büyük borular, havalandırma kanalları gibi akışın çok karmaşık olmadığı yerlerde türbülans yoğunluğu% 1 ila% 5 arasında değişir.

Düşük türbülans durumu: Dış akış, örneğin bir araç üzerinden akış, düşük türbülans yoğunluğu ortaya çıkar ve türbülans yoğunluğu genellikle% 1'in altındadır.

Çeşitli alanlar için türbülans seviyesi gerekli olabilir. Havacılık ve uzay endüstrisinde türbülans seviyesi bir kanat profilinden akan sürüklenme kuvvetini ve katsayıları doğrudan etkiler. Dolayısıyla, bunlar uçağın yakıt tüketimini ve uçak akış stabilitesini etkiler. Reaktif akışların karşılaşıldığı endüstrilerde ise türbülanslı akış, parçacıkların hidrodinamiğinde esastır. Düşük türbülans miktarı her zaman mümkün değildir, ancak bazı durumlarda yüksek türbülans içeren uygulamalarla da karşılaşılabılır. Kimyasal reaksiyonlar ile uğraşırken, bazı durumlarda yüksek türbülans miktarı istenir. Örneğin karışım miktarının artırılması istendiğinde yüksek türbülanslı akış istenmektedir. Bununla birlikte, bazı durumlarda, yavaş reaksiyonların gerekli olduğu durumlarda türbülans oluşumu beklenmez.

Akışkanlar mekaniğiyle ilgilenen araştırmacılar ve tasarımcılar, CFD'nin avantajlarından büyük ölçüde yararlanmaktadır. Türbülans şiddeti ve geometrik modelleme, hesaplamalı akışkanlar dinamiğinde giriş sınır koşulu olarak ortaya çıkmaktadır. Bununla birlikte, türbülanslı akışları hesaplayabilmek için farklı modeller geliştirilmiştir. Bunlar başlıca RANS, LES ve Doğrudan Sayısal Simulasyon (Direct Numerical Simulation-DNS) olmak üzere üç ana başlık altında ayrılabilir. RANS modelleri ortalama hız sapmaları ve ortalama hız olarak tanımlanmaktadır (Reynolds ortalaması). Türbülans uzunluk ölçeği, akıştaki girdapların büyüklüğü ile ilgilidir (Tennekes ve Lumley 1999).

Çok fazlı türbülanslı akışları modellemek için ise, genellikle RANS modellerinden olan k-ε modelleri kullanıldığında, türbülans modellemeye yönelik üç yöntem bilinmektedir. Bunlar karışım türbülans modeli, dağınık türbülans modeli ve faz başına türbülans modelidir (mixture turbulence model, dispersed turbulence model, and per phase turbulence). Her iki kategori için de model seçimi, uygulamanızdaki ikincil faz türbülansının önemine bağlıdır. Karışım türbülans modeli, tabakalı çok fazlı akışlarda olduğu gibi fazlar ayrıldığında ve fazlar arasındaki yoğunluk oranı bire yakın olduğunda

uygulanabilir. Bu durumlarda, karışım özelliklerinin ve karışım hızlarının kullanılması, önemli türbülanslı akış özelliklerini yakalamak için yeterlidir. İkincil fazların konsantrasyonları seyreltildiğinden, dağınık türbülans modeli uygun modeldir. Bu durumda, ikincil fazların rastgele hareketi, birincil faz türbülansından etkilenir. Fazlar arasında türbülans transferi baskın bir rol oynadığında ise faz başına türbülans modeli uygun seçimdir.

Gazlaştırma verimi ile türbülans seviyesi arasında önemli bir ilişki olduğu bilinmektedir. Türbülans seviyesi arttıkça ısı transferinin arttığı araştırmacılar tarafından yaygın olarak bilinmektedir (Kondjoyan ve Daudin 1993, Kondjoyan ve Daudin 1995, Kondjoyan ve Boisson, 1997).

Peneau ve ark. (2004) giriş türbülansı şiddeti düzlem plakası üzerinde gelişen sınır tabakası üzerindeki etkilerini LES türbülans modelini kullanarak araştırmıştır. Farklı giriş türbülansı şiddeti sonuçlar elde etmişler ve deneysel sonuçlarla karşılaştırmışlardır. LES türbülans modelinin giriş türbülans şiddetine etkisini incelemek için uygun olduğunu belirtmişlerdir. Davidson ve Nielsen (1996), LES türbülans modellerinin oda içi havalandırma sistemlerinin kullanımını göstermek için EK 20 odasındaki hava dağılımını Smagorinsky ve Dynamic LES türbülans modelleri ile sayısal olarak analiz etmişlerdir. Dinamik LES türbülans modelinin deneysel sonuçlarla daha uyumlu olduğunu belirtmişlerdir.

Türbülans ile ilgili literatür bilgilerinden sonra, bu çalışma ile gazlaştırma sisteminin performansı üzerindeki etkilerinin araştırılacağı varsayılır ise, bu durumda, gazlaştırma kitaplarına ek olarak, öncelikli olarak çok sayıda literatür bulunan gazlaştırma çalışmaları ile mevcut çalışma ile geliştirilen sistemin arasındaki farklılıkları ve benzerlikleri ortaya konulmalıdır.

Bu yaklaşım ile daha önce yapılan çalışmalar incelendiğinde, gazlaştırıcılar aynı zamanda yüksek ile düşük miktarlarda katranı bastırmak için kullanılır. Bununla birlikte, pratik uygulama söz konusu olduğunda, gazlaştırma fiziği ters yönde çalışır. Diğer bir deyişle, yetersiz seviyelerde hem katranı hem de külü ortadan kaldıran bir gazlaştırıcı tasarlamak

her zaman mümkün değildir. Bu yüzden hammadde kaynağını ve bileşenlerini çok iyi bilmek hayati önem taşımaktadır. Gazlaştırıcı, optimum verimli parametrelerine göre tasarlanmalıdır.

Bir gazlaştırıcı tasarlarken, literatürde analitik, deneysel ve sayısal tabanlı olarak kullanılmış birçok yöntem mevcuttur. Analitik, sayısal yada deneysel yöntemler, tasarımın türüne ve boyutuna, performans sınırlarına ve fiziksel varsayımlara göre seçilmektedir. Genel olarak, gazlaştırıcı analizi ve tasarımı için ilgi konusu frekans aralığında, gaz basınç dalgaları tipik olarak bir gazlaştırıcıda düz dalgalar halinde ilerlemektedir. Bir örnek vermek gerekir ise, roket motoru yenilikleri NASA'daki gelişmiş temiz enerji, şekil 2.9'da gösterildiği gibi enerji üretimi ve dönüşümü, tasarım ve araştırma amaçları için gazlaştırma tekniğini kullanmaktadır.



Şekil 2.9. Rocketdyne tarafından yapılan bir uzay mekiği ana motoru (NASA Technical Anonymous, 2011)

Gazlaştırma, yanma olmaksızın malzemelere kontrollü miktarda oksijen ve/veya buharla reaksiyona girmek için yüksek sıcaklıklarda (600°C ile 800°C) çalıştırılan bir gaz üretim süreci olduğu daha önce de açıklanmıştı. İşlem, organik veya fosil yakıt bazlı karbonize malzemeleri, sırayla meydana gelen kimyasal reaksiyonları kullanarak karbon monoksit, hidrojen veya karbondioksit dönüştürmektedir. Bu elde edilen karışım gazları genellikle

sentetik gaz veya sentetik doğal gaz olarak adlandırılır (Mellin ve ark. 2014). Sentetik gaz üretildikten sonra, piyasa talebi için farklı bir enerji türü olarak mekanik iş, ısı veya elektriğe dönüştürülmektedir. Yanma termo-kimyasal bir süreçtir ancak herhangi bir sentetik gaz üretimi olmaksızın termal enerji üretmektedir. Piroliz de gazlaştırma ve yanmaya benzer bir süreçtir; başlangıçta biyo-yaglar üretilir ve bunlar sonunda hidrojen gibi kimyasal yakıtlara dönüştürülür.

Gunarathne ve ark.(2014) biyokütlenin gazlaştırma öncesi ön işlemlerini incelemişlerdir ve bu yöntem, yüksek talep ve düşük enerji yoğunluğunu muhafaza etmesi nedeniyle kullanımı sürekli olarak artmaktadır. Hava akışı yakıt akışına ters olan (updraft) bir yüksek sıcaklık gazlaştırma ünitesinde hava ve buharla gazlaştırmak için buharla üflenmiş siyah peletler ve ön işleminden geçirilmemiş gri peletler kullanmışlardır.

Horton ve ark. (2016) FLUENT ticari kodunu kullanarak bir katı atık gazlaştırma sürecini simüle etmek için bir CFD modeli geliştirmişlerdir. Bu çalışma için Kinetik Modelleme Düzenleyicisi (KME), ekipman düzeyinde bilgilerin tasarıma girmesine izin vermek için bir (CFD) çözücüsüne bağlanmıştır.

Yüksek Sıcaklıkta Hava Yanması (HiTAC), Saffari and Weihong (2014) tarafından sayısal olarak analiz edilmiştir. HiTAC, ısının geri kazanılması, enerji tasarrufu ve alevin kararlılığının artırılması için ümit verici bir ileri teknoloji olacaktır. (HiTAC) modellemeyi gerçekleştirmek için uygulamalı bir araç olarak bilinen bir CFD modeli geliştirirler .

Zhou ve ark. (2014) bir CaO katkısı kullanarak evsel katı atıkların buharla gazlaştırılması üzerinde çalışmışlardır. CaO ilavesinin ısı transfer özellikleri üzerindeki etkilerini araştırmak için kesikli tip sabit yataklı bir reaktör kullanmışlardır.

Li ve. ark. (2014) biyokütlenin piroliz işlemini yüksek sıcaklıklarda ve yüksek ısıtma oranlarında yapmışlardır. Biyokütle reaktivitesi düşürülmüştür ve parçacıkların daha fazla kavurulmasına izin verilmiştir. Kavurulmuş biyokütlenin kinetik parametreleri de

hesaplanmıştır. CO ve H₂, kavurulmuş biyokütlenin piroliz işlemi sırasında buharlaşan ilk ve önemli uçuucu maddeleri olmuşlardır.

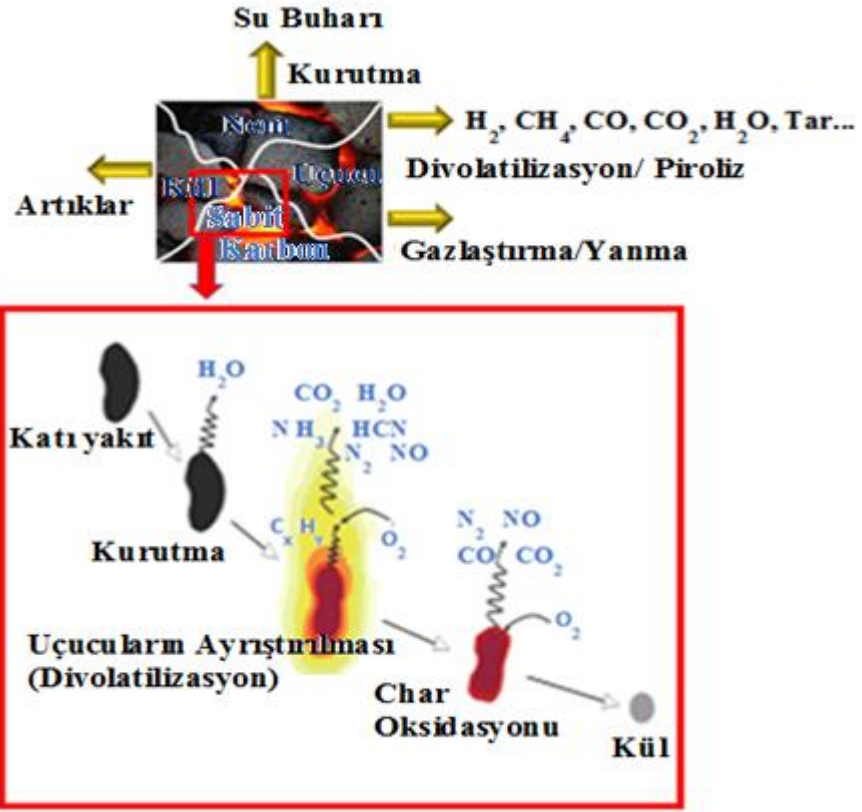
Buhar pirolizi sırasında oluşan biyokütlenin ürün verimi ve bileşiminin etkileri, metal modifiye HZSM 5 / zeolit / bağlayıcı oranı (Z / B) üzerinde araştırılmıştır. Biyokütlenin katalitik buhar pirolizi, 450°C'de köpüren akışkan yataklı bir reaktörde araştırılmıştır. Silis destekli geçiş metallerinin (Ni ve V) ürün verimleri ve bileşimler üzerindeki etkileri Kantarelis ve ark. (2014) tarafından incelenmiştir.

Mellin ve ark. (2014) 'da biyokütle pirolizine yeni bir çözüm getirmiştir. Bu çalışmada CFD ile birlikte biyokütle pirolizi için gelişmiş bir 3-D kinetik model geliştirilmiştir. Simülasyonları çok zaman almaktadır, ancak ikincil reaksiyonları araştırmayı mümkün kılmıştır.

Gunarathne ve ark. (2014) sıkıştırma etkisi ile basınç düşüşü sapmaları için bir denklem geliştirmişlerdir ve korelasyon sabitlerinin grafiksel temsillerini sunmuşlardır. Ayrıca pelet boyutunu belirlemek ve bir ızgara tasarlamak için bir yeni bir yaklaşım sağlamışlardır.

Schulze ve ark. (2016) verimli gazlaştırıcının karbon dönüşüm oranını belirlemek için hesaplamaları çok iyi olan ve yeni bir sabit karbon parçacık gazlaştırma çalışması yapmışlardır. Araştırmaları, yeni bir gazlaştırıcı tasarımında gazlaştırma işleminin verimliliğini en üst düzeye çıkarmak için alternatif ileri düzey bir model geliştirmeye odaklanmaktadır. Tasarım değişkenlerinin hesaplanması, optimize edilmesi, kararlı atık özellikleri ve işleme koşullarının belirlenmesi, bu çalışmanın ikinci en önemli hesaplamalarıdır.

Yukarıdaki literatür incelemesi, gazlaştırma sürecinin temel özelliklerini gösterdiğinden, bu araştırma temel olarak bir dizi fiziksel dönüşüm ve kimyasal reaksiyonla ilgilidir. Şekil 2.10'de gösterildiği gibi nem salımı, buharlaşma, katran parçalama ve sabit karbon yakma işlemlerinden oluşmaktadır.



Şekil 2.10. Katı yakıt yanması ve gazlaştırma (ANSYS 2020).

Şimdiye kadar yapılan bu konu ile ilgili benzer çalışmalar incelendiğinde, farklı gazlaştırıcı türlerinin ve bunların endüstrideki uygulamalarının analizi, mühendisler için bir sonraki zorlu görevin akışkan yatakların verimliliğini artırmak olduğunu göstermektedir. Bu, akışkanlaştırılmış yataklarda meydana gelen işlemlerin CFD modellemesi kullanılarak yapılabileceğini de söylemektedir. Mühendislik alanında yeni teknolojilerin tasarımı ve optimizasyonunda son zamanlarda bilgisayar modellemenin en temel unsurlardan biri haline geldiği vurgulanmalıdır. Bilgisayar ile modellemenin avantajlarından biri, akışkan yataklı reaktörün davranışının ve özelliklerinin bir prototip üretmeden araştırılabilmesidir. Böylece, ürün geliştirmenin toplam maliyetleri önemli ölçüde azaltılabilmektedir (Dolu ve Kuddusı 2017).

Bu nedenle, gazlaştırma işlemlerinin genel verimliliğini artırmak için daha fazla araştırmaya ihtiyaç vardır ve reaktör tasarımı da hesaplama teknolojisi kullanılarak optimize edilmelidir. Tersine, akışkanlaştırılmış yataklardaki çok fazlı akışların sayısal simülasyonları, CFD yazılımına uygulanan gelişmiş matematiksel modeller kullanılarak

modellenmelidir. Bu arada, son zamanlarda ticari CFD yazılımında etkileyici gelişmeler meydana gelmiştir; örneğin ANSYS FLUENT, CFX kullanımı (Lee ve ark. 2010).

Literatürde, Beyazoglu ve Pulat (2019), özellikle türbülans modelleme konusunda bazı araştırma problemlerini çözmek için akışkan yatak gazlaştırma için iki boyutlu bir Euler-granüler model geliştirmişlerdir. RANS tabanlı türbülans modellerini karşılaştırmışlardır. Ayrıca, daha doğru bir şekilde divolatilizasyon ve sabit karbon(char) kimyasal reaksiyonlarını hesaplamak için bir alt model geliştirerek kullanmışlardır.

Nakod ve Shelke (2014) daha sonra geniş kömür gazlaştırma CFD simülasyonlarını şimdiye kadar geliştirilen tüm alt modellerle yeniden gözden geçirmiştir. Gazlaştırma süreci konusunda araştırma yapılması gerekli konuların olduğunu belirtmişlerdir.

Ma ve Zitney (2012) ANSYS FLUENT kodunu kullanarak kömür gazlaştırma sürecini araştırmış ve optimize etmişlerdir. Sürüklenmiş akışlı bir gazlaştırıcı için ayrı faz modelini kullandılar. Geliştirdikleri kimyasal ve fiziksel alt modellerle sürece çözüm yaklaşımlarını geliştirdiler.

Beyazoglu ve Pulat (2020) ayrıca iki boyutlu modellerini geliştirerek modeli 3-D duruma getirmişlerdir. Daha detaylı kimyasal reaksiyonlar ile birlikte geliştirdikleri bu modeli bir optimizasyon yöntemi kullanarak gazlaştırıcı tasarım parametrelerini ve çıkıştaki ürün gazlarını optimize etmeye çalışmışlardır. Gazlaştırma içerisindeki kimyasal olaylar ile birlikte, çalışmaları çoğunlukla akışkanlar dinamiği ,ısı transferi performansı ve reaktördeki türbülans hesaplamaları üzerinde odaklanmıştır.

Liu ve ark. (2013) akışkan yatak gazlaştırma sirkülasyonu için 3-D, kararlı hal, Euler-Euleran modeli geliştirmişlerdir. Geliştirdikleri bu model ile, türbülans modellerinin, radyasyon modelinin, su-gaz değişim (WGS) reaksiyonunun ve eşdeğerlik oranının (ER) etkilerini araştırmışlardır.

Hwang ve ark. (2016) ise sürüklenmiş kömür gazlaştırma için tek boyutlu bir model incelemişlerdir. Gazlaştırıcı reaktörün performansını çeşitli çalışma parametreleri ile simüle etmişlerdir. En uygun koşullarla sonuçlandırırılar.

Yukarıdaki özeti verilen araştırmacıların çalışmaları gibi, önemli sayıda CFD çalışması yapılmış ve literatürde kabul görmüştür (Kumar ve Ghoniem 2012), (Silaen ve Wang, 2012), (Gerber ve ark. 2010), (Syamlal ve Bissett 1992), (Wen ve Chaung 1979), (Phillips 2020), and (Dowd,2000). Çalışmalarında hareketli yatak gazlaştırıcıları, sürüklenmiş akış gazlaştırıcıları, ve akışkan yataklı gazlaştırıcıları kullanmaktadırlar. Genellikle optimum çalışma parametreleri, türbülanslı karışımın etkisi, reaksiyon kinetik parametreleri vb. noktalar üzerinde çalışmışlarını yapmışlardır. Ayrıca yapmış oldukları sayısal çalışmalarını deneysel verilerle karşılaştırmışlardır.

Öte yandan literatürde genel olarak k-epsilon türbülans modelleri kullanılmıştır. Türbülanslı gazlaştırmada türbülans modelleme, akış, karıştırma ve gazlaştırma süreçlerini oluşturmada rolü nedeniyle en kritik süreçlerden biridir (Chen ve Ghoniem 2012). Bu nedenle, gazlaştırma sürecini doğru bir şekilde simüle etmek için en verimli türbülans modelini kullanmak son derece gereklidir ve türbülans diğer herhangi bir fiziksel olaydan daha ayrıntılı olarak incelenmelidir.

Yukarıdaki literatür taramasına göre, çoğu gazlaştırma analizi bir çok basitleştirmeye dayanmaktadır. Sorunun karmaşıklığı ve hesaplamaya dayalı zaman alıcı olması nedeniyle bu kabullerin gerekli olduğu düşünülebilir. Bununla birlikte, gazlaştırma problemini de gereğinden fazla basitleştirmiş olabilirler. Bu sınır değer probleminin doğrusal olmayan kısmi diferansiyel denklemleri doğru sonuçlar vermeyebilir. 3-D akışkanlaştırılmış yatakları aşırı basitleştirme olmadan simüle etmek için yeni çok fazlı akış modelleri kullanılmalıdır. Buna ek olarak, araştırmacılar çoğunlukla sürecin kimyasal kısmını geliştirmeye çalıştılar, ancak ısı, kütle, momentum transfer parametrelerini iyileştirmeye fazla zaman ayırmadıkları görülmektedir. Literatür taramasından çıkan bir başka sonuç, gazlaştırma sürecinin CFD modeli ile tüm termokimyasal olayları doğru bir şekilde simüle etmenin zorluğudur. Bu nedenle, araştırmacılar halen gazlaştırma reaktörlerinin ürünlerini hesaplamak ve artırmak için

farklı yaklaşımlarla ilgilenmektedir. Çok fazlı reaktif gazlaştırıcı içindeki doğru bileşikler (species) dağılımını tahmin etmek için katı ve gaz parçacıkları arasında doğru bir ısı ve kütle difüzyon modeline halen ihtiyaç bulunmaktadır.

Lettieri ve Mazzei (2009) ayrıca akışkan yatak gazlaştırmanın hesaplamalarının halen zor olduğundan bahsetmişlerdir. Akışkan yataklı gazlaştırmanın CFD ile çözümün zorlukları ile ilgili makale yayınlamışlardır. Akışkanlaştırma teknolojisini gözden geçirdiler ve birçok endüstriyel süreçte kullanılan akışkan yatak teknolojisinin ve akışkan yatak sürecinin doğru modellemesinin hem akademi hem de endüstri için hala gerekli olduğu sonucuna varmışlardır.

Bogdanova ve ark. (2017) daha sonra, gazlaştırıcı tasarımına ve sistem optimizasyonuna rehberlik etmek için CFD gazlaştırıcı modellerinin, ilgili tüm alanlarda gelişmiş alt modellerle ayrıntılı fizik ve kimyayı dahil etmek için geliştirilmesi gerektiğinden bahsetmektedir.Önemli ilave etkileri hesaba katan modeller sürekli olarak geliştirilmiş ve birçok ticari yazılım koduna dahil edilmiş olsa da, bu alandaki araştırmalar hala tamamlanmamıştır (Fox 2003).

Üretilen sentetik gaz, kimya endüstrisinde, havacılık endüstrisinde, uzay uçuşlarında, denizcilik endüstrisinde, servis araçları, gemi ile birlikte, farklı tip motorlar, ve enerji dönüşüm sistemlerinde kullanılabilmektedir. Çok farklı kullanım alanına sahip olması gazlaştırma araştırmasının ne kadar önemli olduğunu da vurgulamaktadır.

Kaynak araştırmasının özeti; Enerji endüstrisinde, gazlaştırma işlemi tipik olarak, gazlaştırıcı reaktörün sentetik gazını oluştururken gösterdikleri fiziksel davranışa göre öncelikli olarak hareketli,sürüklenmiş, akışkan yatak gazlaştırıcı olarak sınıflandırılmakta olduğu giriş bölümünde de bahsedilmişti. Literatürde görüldüğü üzere,yüzden fazla makale, bu üç tür gazlaştırma sürecine odaklanmaktadır. Akışkan yatak gazlaştırıcıların diğer tip gazlaştırıcılara göre daha az miktarda araştırma yapıldığı gözlemlenmiştir. Tüm endüstri alanlarına bakıldığında daha az uygulamaya sahip oldukları da görülmektedir. Özellikle " kabarcıklı akışkan yataklı (tip) gazlaştırma sistemleri" adı verilen farklı bir akışkan yatak gazlaştırma çeşidi de bulunmaktadır. Bu sistemin diğerlerinden temel

farkı, gazlaştırıcı içerisinde kabarcıkların meydana gelmesidir. Reaktör içerisinde oluşan kabarcıkların gazlaştırma verimini artırması beklenmektedir. Literatürde çok az sayıda kabarcıklı akışkan yatak çalışmasına rastlanmıştır. Aynı zamanda katı yakıtın tanecik şeklinde direkt olarak püskürtüldüğü uygulamalar da çok azdır. Katı yakıt ile birlikte yakıtın içerisinde bulunan nem de püskürtülmektedir. Ayrıca, Literatürde kabarcıklı akışkan yataklı gazlaştırmada parçacıklar arası ısı iletimi, buharlaşma ve partikül sürüklenme modeline doğrudan odaklanan neredeyse hiç bir akademik çalışma yoktur. Diğer taraftan divolatilizasyon, sabit karbon yanma işlemi, parçacıklar arası ısı iletimi ve parçacık sürüklenme ve ışınlam ile ısı transferi alt modelleri herhangi bir literatürde birlikte kullanılmamıştır. Bunlara ilave olarak ,yukarıdaki literatür özetinin tümü göz önüne alındığında, akışkan yataklı gazlaştırıcının akışkan mekaniğinin tüm yönlerini kapsamlı bir şekilde araştıran çok az sayıda CFD modeli olduğu sonucuna ulaşılmıştır.

Akışkan yataklı gazlaştırma sistemleri ile ilgili şu ana kadar geliştirilmiş olan literatürün eksikliği, çeşitli nedenlerden kaynaklanıyor olabilir: Bu nedenlerden birisi sentetik gaz üretimi gerçekleştiren bu sistemin birleşik ve karmaşık fiziği (akışkan dinamiği, termodinamik, ısı ve kütle transferli yanma / gazlaştırma) analitik, deneysel veya sayısal olarak oldukça zor bir çalışmadır. Bu da sistem üreticilerini çoğunlukla ilke olarak tasarım-test prosedürünü benimsemelerine yol açmıştır. Fakat bilgisayar ortamında test ve analizlerin gereksinimi gittikçe önem kazanmaktadır.

Gazlaştırma sisteminin daha karmaşık geometrileri, sınırları ve fiziği söz konusu olduğunda, analitik yöntemler yeterince iyi değildir. Üç boyutlu uzay-zamanda yaşadığımız için, diğer herhangi bir fizik olayı gibi, gazlaştırma, türbülanslı yanma da problemin karmaşıklığına bağlı olarak frekans veya zaman alanında üç boyutlu olarak incelenmelidir. Donanım teknolojilerindeki gelişmelere paralel olarak sayısal yöntemler giderek daha popüler ve verimli bir çözüm haline gelmiştir. Literatürde çok az sayıda 3-D çözümler bulunmaktadır. Gelişen yazılım ve donanım teknolojisi ile birlikte 3-D gazlaştırma çözümleride artmaktadır.

Bu nedenle, bu çalışmanın temel amacı, doğru bir CFD modeli geliştirmek ve gazlaştırma sürecinin tüm yönlerini araştırabilmek; bu çalışma, akışkan yatak gazlaştırmanın pratikte

nasıl çalıştığını ve performansını değerlendirmek için ANSYS FLUENT kullanarak daha gerçekçi bir CFD yaklaşımı geliştirmektedir.

Kısaca bu tez, yukarıda bahsedilen gazlaştırma sürecinde meydana gelen fiziksel ve kimyasal olayların matematiksel bir modelinin, örneğin hem tek fazlı hem de çift fazlı termal akışlarda karmaşık ve birleşik analizler yapılarak ve değerlendirilerek oluşturulmasıdır. Tasarım açısından gazlaştırmada piroliz ve yanma sorunları giderebilmektir. Bu amaçla mühendislik ve yenilenebilir enerji uygulamalarında sıkça karşılaşılan ve yukarıda bahsedilen karmaşıklıklardan biri olan gazlaştırma yöntemiyle enerji üretimi araştırılmıştır.

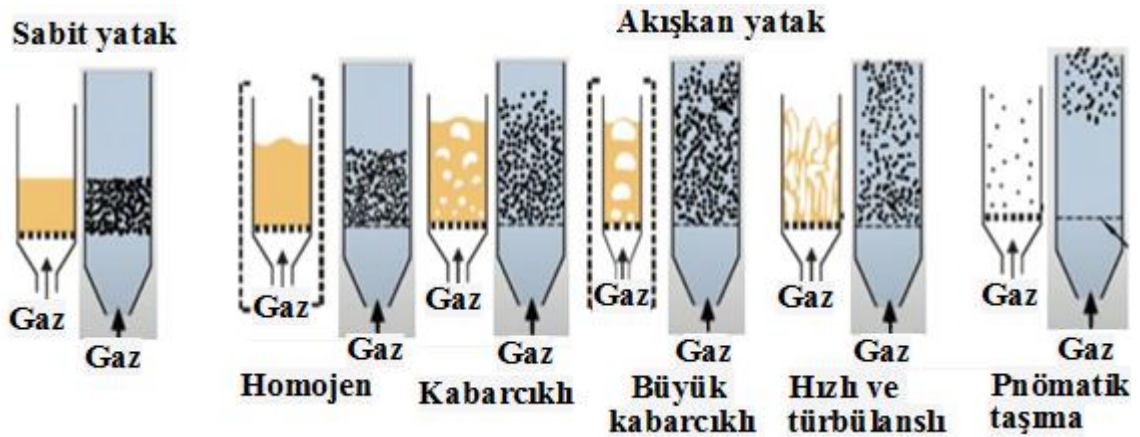


3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1. Gazlaştırma Hidrodinamiği

Bu bölüm, bir CFD modeli geliştirerek akışkan yatak gazlaştırmanın iç hidrodinamik davranışını anlamaya yöneliktir. Gaz ve katı parçacıkların aralarındaki teması incelenmiştir. Hidrodinamik bir model katı-gaz karışımlarının gazlaştırılması için geliştirilmiştir ve aynı zamanda soğuk akış modeli adıyla da bilinir (Herzog ve ark. 2012).

Gazlaştırma konusundaki bu artan ilginin birçok nedeni olsa da, temel neden enerji maliyetleri ve gazlaştırma teknolojisinin çevresel avantajları konusundaki farkındalıktır. Bu nedenle gözlemlemek, sezmek, yargılamak, gazlaştırma sürecini araştırmak ve incelemek için başlangıçta deneyle oluşturulan gazlaştırma teorisi gözlemlenmiştir. Fakat gazlaştırma doğasının olayı deneylerle oldukça zor incelenmektedir. Şekil 3.1'de görüldüğü gibi, bu çalışmanın farklı yönlerini inceleyebilmek için çoğunlukla hesaplamalı veya hesaplamalı olarak gerçekleştirilen modeller modelleri geliştiren bilim adamının çalıştığı olay ile ilgili düşüncelerinin bir yansıması olup düşüncel (intellectual experiment) veya sanal deneyler olarak ta adlandırılan bu yöntemler kullanılmıştır (Perez ve ark. 2010).



Şekil 3.1. Akışkanlaşmanın farklı gözlemleri (Van Ommen 2015, Verganelakis 2014)

Şekil 3.2'den görülebileceği gibi, işlemde akışkan yatak kullanıldığında basınç düşüşü sabit kalır. Denklem 3.1'de olduğu gibi akışkan yatağın basınç düşüşü, katı partiküller ve

gaz yoğunluğu farkı ile hacim fraksiyonu, yerçekimi ve yatak yüksekliğinin çarpılmasına eşittir.

$$\Delta P = H(1 - \varepsilon)(\rho_p - \rho_f)g \quad (3.1)$$

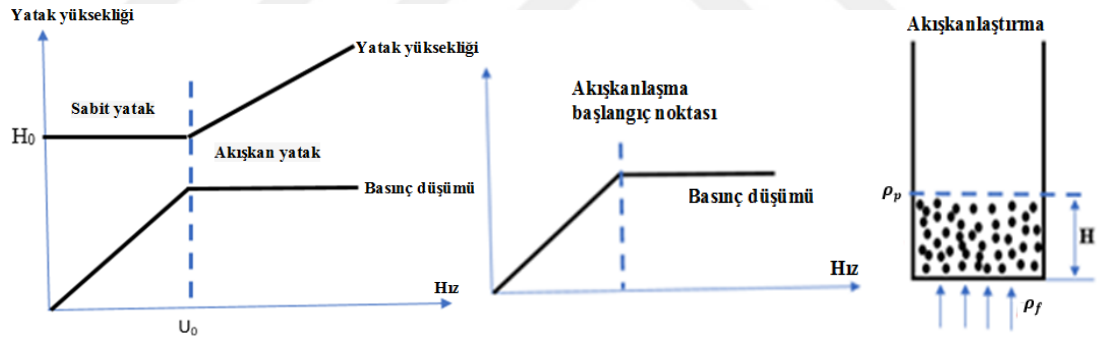
Parçacıklar için süreklilik denklemi,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s) = \dot{m}_{fs} \quad (3.2)$$

Parçacıklar için momentum denklemi

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \vec{u}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) = -\alpha_s \nabla p_f + \nabla \cdot \bar{\tau}_s + \sum_{s=1}^n (\vec{R}_{fs} + \dot{m}_{fs} \vec{u}_{fs}) + \vec{F}_s \quad (3.3)$$

∇p_f gaz basıncıdır, $\bar{\tau}_s$ Parçacık gerilme tensörü, $\vec{R}_{fs}$ fazlar (parçacık- gaz) arası etkileşim terimidir.



Şekil 3.2. Akışkan yatak basınç düşüşü

Şekil 3.3'te gösterildiği üzere gaz-katı (yoğun) granüler akışlar (KTGF) çarpışmanın hakim olduğu parçacık dinamiği olarak bilinmektedir. Denklem 3.4'te verilen katı parçacıkların kayma gerilmesi, granüler kinetik teoriden türetilen katı parçacıkların birbirleri arasındaki etkileşimi ifade etmektedir.

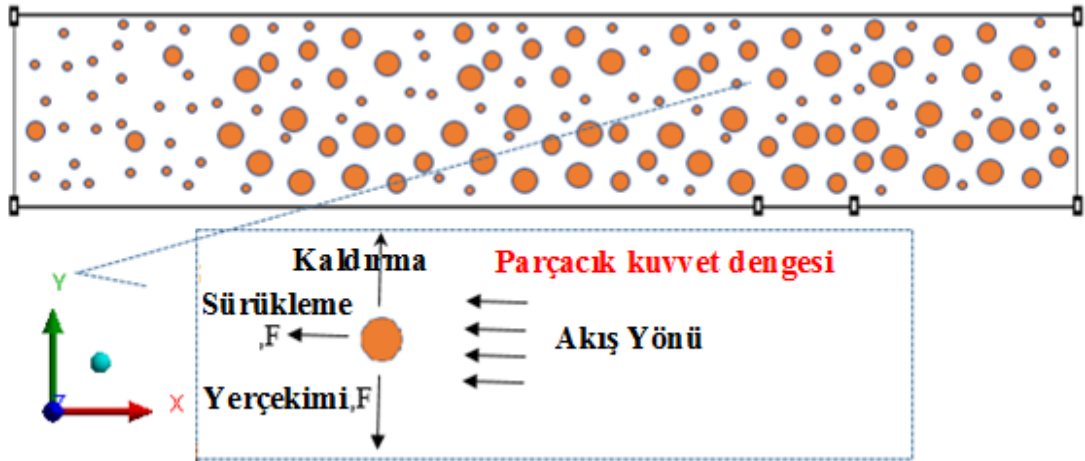
$$\bar{\tau}_s = -P_s \bar{I} + 2\alpha_s \mu_s \bar{S} + \alpha_s \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot \vec{u}_s \bar{I} \quad (3.4)$$

burada, $\bar{S} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u}_s + (\nabla \vec{u}_s)^T)$ şekil değiştirme oranıdır.



Şekil 3.3. Gaz-katı(yogun) akış örnekleri (ANSYS 2020)

Özellikle enerji üreticisi işletmelerde kullanılan homojen akışkanlaştırılmış yataktaki basınç düşüşünün tahmin edilmesi mühendisler için hesaplanması gereken zorlu bir işlem olarak kalmaya devam etmektedir. CFD kodları için geliştirilen Eulerian modeli, karmaşık fazlar arası momentum transferini içeren yoğun faz partikül akışını incelemek için çok önemli bir modelleme imkanı sağlar. Sürüklenme (drag) yasaları ile ilgili fiziğin oldukça fazla matematiksel modellemesine rağmen şimdiye kadar yarı deneysel kalmıştır. Bu nedenle, Şekil 3.4'te gösterildiği gibi, katı parçacıklar yatağının yüzeysel sürüklenme ve parçacık üzerine etkiyen kuvvetleri arasındaki denge nedeniyle esasen bir süspansiyon durumunda kalmaktadır. Bu nedenle başlangıç aşamasındaki veya minimum akışkanlaşma koşullarını doğru bir şekilde hesaplayan bir sürüklenme (drag) yasasının kullanılması çok önemlidir.

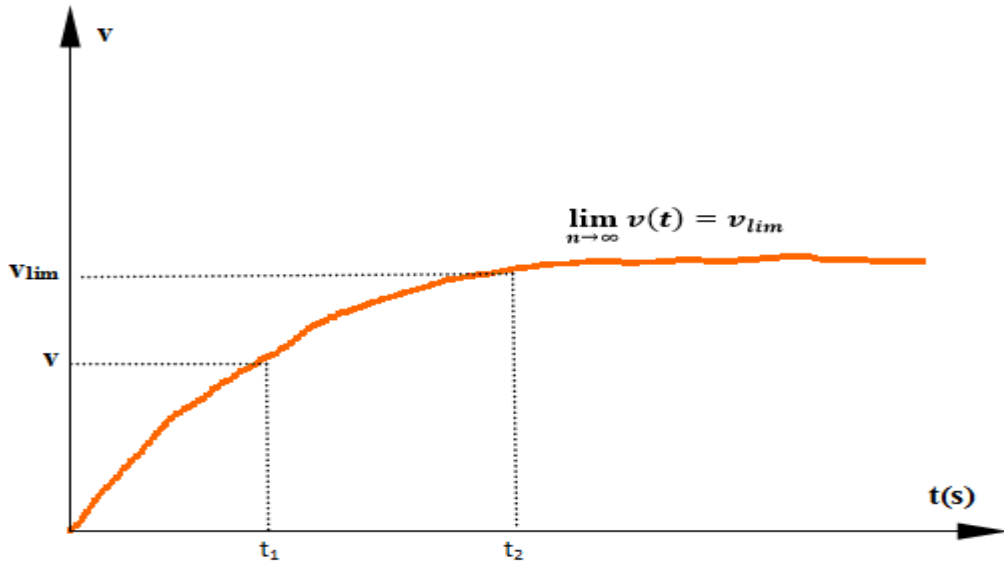


Şekil 3.4. Hidrodinamik alanda katı parçacıkların dağılımı ve kuvvet dengesi

Bu bölümde akışkan bir yatağın hidrodinamiği ve kabarcık oluşumunu tanıtılmaktadır. Bununla birlikte granüler gaz-katı akışı için bir sürükleme yasasının nasıl modelleneceğini de gösterilmektedir. Syamlal-O'Brien sürükleme yasası bu CFD koduna uygulanmıştır (Syamlal ve O'Brien 1987). Bununla birlikte, bu yasa, çeşitli problemler için verimli bir şekilde çalışmasına rağmen, akışkanlaşma koşullarını doğru bir şekilde tahmin etmek için uygun şekilde kullanılmalıdır. Syamlal-O'Brien sürükleme yasasının formülizasyonu aşağıdaki gibidir:

$$v_{r,s} = 0.5(A - 0.06Re_s + \sqrt{(0.06Re_s)^2 + 0.12Re_s(2B - A) + A^2}) \quad (3.5)$$

$v_{r,s}$ parçacıkların limit hız katsayısıdır. Limit hız parçacığa gelen kuvvetlerin dengesi oluştuğunda parçacığın hareketini sağlayan sabit bir hız olup aşağıdaki şekil 3.5 gösteriliği gibi tanımlanır.



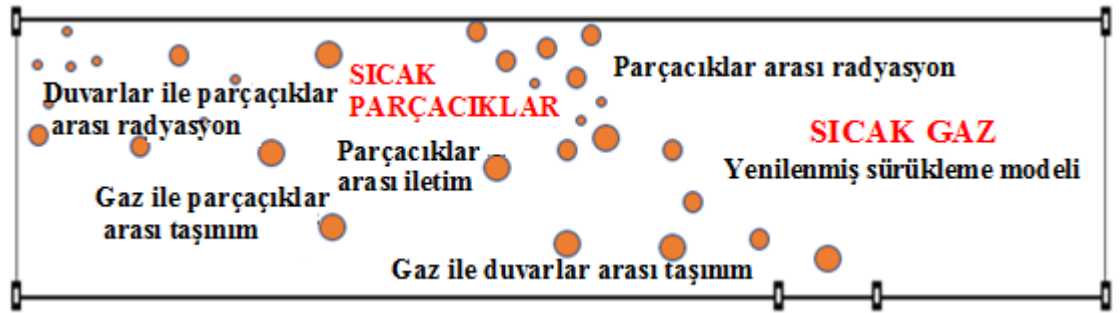
Şekil 3.5. Limit hız açıklaması

Gaz-katı değişim katsayısı ise

$$K_{sl} = \frac{3\alpha_s \alpha_l \rho_l}{4v_{r,s}^2 d_s} C_D \left(\frac{Re_s}{v_{r,s}} \right) |\vec{v}_s - \vec{v}_l| \quad (3.6)$$

$\alpha_t \leq 0.85$ için $A = \alpha_t^{4.14}$ ve $B = 0.8\alpha_t^{1.28}$ ve $\alpha_t \geq 0.85$ için $B = \alpha_t^{2.65}$ bu parametreler ile hesaplama alanı, Şekil 3.4'te gösterildiği gibi, 1.2 m x 0.10 m akışkan yatak olarak kabul edilmiştir. Giriş gazı hızı 3 m/s olarak alınmış ve çıkış basınç çıkışı (pressure outlet) düşünülerek olarak modellenmiştir. Yukarıdaki bahsedilen doğrusal olmayan kısmi diferansiyel denklemler sonlu hacim yöntemi uygulanarak çözülmüştür. Sayısal problemin çözümleri ilk olarak sürüklenme modeli değiştirilmeden iki boyutlu ve üç boyutlu olarak elde edilmiştir.

Bu hesaplardan sonra tanecikli gaz-katı akışı için sürüklenme model formülasyonu değiştirilmiştir ve Eulerian-euleran modeli için homojen bir akışkan yataktaki basınç düşüşünü tahmin etmek için kullanılmıştır. Sürüklenme hesaplaması için yeni bir alt model geliştirdikten sonra, başka bir kavramsal analiz gerçekleştirilmiştir. Temel olarak analiz, şekil 3.6'te gösterildiği gibi, fikrin daha iyi anlaşılması için kavramları bileşenlerine ayırmaktan oluşur.



Şekil 3.6. Isı transferi mekanizmaları ve yeni sürüklenme (drag) modeli modifikasyonu

Zimmermann ve Taghipour (2005) yayınlarında Syamlal-O'Brien sürüklenme modelinin parçacıklar için sürüklenme kuvvetini doğru değerinden fazla hesapladığını belirtmişlerdir. Değiştirilmiş sürüklenme modeli kullanıldıktan sonra, akışkanlaştırma ve kabarcıklaşma davranışlarını doğru bir şekilde tahmin etmişlerdir. Ayrıca, sürüklenme ve yerçekimi kuvvetlerinin daha baskın kuvvetler olduğunu, hareket eden parçacıkların çarpışmalarıyla oluşan kinetik enerjinin yayılmasının ise daha düşük bir etkiye sahip olduğunu belirtmişlerdir. Dahası, gazlaştırıcı kinetiğinin doğru tahmini, büyük ölçüde hidrodinamik modellemesine bağlı olduğunu belirtmişlerdir.

Şekil 3.6'da gösterildiği üzere, akışkan yataklı gazlaştırıcıların hidrodinamiği ve ısı transferi, verimli bir tasarım ve işletilmesi için ayrıntılı ve iyi anlaşılmalıdır. Reaktörde gaz-katı karışımı çok fazlı akışı meydana getirmektedir. Bu çok fazlı akış, reaktif gaz akışının ve parçacık hareketinin birleşmesi nedeniyle oldukça karmaşıktır. Bu karmaşıklıklar, tasarım ve işletme parametrelerini optimize etmede önemli zorluklara yol açmaktadır (Hamzedei ve ark. 2010). Bu nedenle, Syamlal-O'Brien sürüklenme yasasının varsayılan değerleri, ara yüzey sürüklemeyi parçacık ağırlığıyla yatak akışkanlaştırma hızında dengelemek için değiştirilmelidir. Bu yapılmadıysa, kabarcıklı akışkan yataktaki gaz ve partikül karışımı dağılımı doğru tahmin edilemez ve yanlış basınç düşüşü hesaplanmasına yol açar. Basınç farkının doğru hesaplanması akışkan yatak simülasyonlarının en önemli noktalarından biridir (Wang ve ark. 2017).

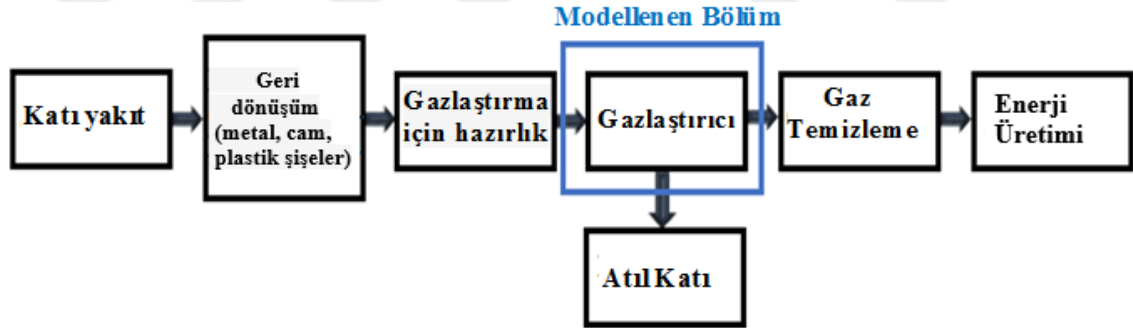
Sürtünme yasasının varsayılan sabit değerleri, minimum akışkanlaşma hızını 21 cm/s olarak öngörür. Bu durumda, akışkanlaşma hızı 3 m/s'dir. Bu nedenle, akışkanlaşma hızı için sabit değerlerin 3 m/s civarında düzenlenmesi gerekir. Bazı matematiksel hesaplamalardan sonra, bu sabitler sırasıyla $A = 0,10$ ve $B = 11,54$ olarak çıkmıştır. Bu nedenle, bu sabit değerlerin, kullanıcı tanımlı kodlar ile tanımlaması ve hesaplamalara adapte edilmesi neticesinde yataktaki doğru gaz-parçacık karışımı davranışını hesaplamak için kullanılması gerekir.

3.2. İki Boyutlu (2-D) Reaktif Akış Modelleme

3.2.1 Problem Tanımı ve Sayısal Modele Giriş

Bu bölümdeki çalışmada yapılan kabulleri bahsetmek gerektiğinde, gazlar sıkıştırılmaz ideal gazlardır ve hava % 21 O₂ ve % 78 N₂'den oluşmaktadır. Tüm biyokütle granülleri küreler olarak kabul edilmiştir. Biyokütle neminin buharlaşması ihmal edilmektedir. Pratikte meydana gelen cüruf oluşumu ise hesaplamalara dahil edilmemiştir. Sentetik gaz hesaplamalarda CO₂, CO, CH₄, H₂, H₂O, O₂ ve N₂'den oluştuğu kabul edilmektedir.

Gazlaştırıcının yani bu çalışmada modellenen bölümün katı atık gazlaştırma ve enerji üretim aşamalarının tamamı içindeki yeri Şekil 3.7'de gösterilmiştir. Gazlaştırma işlemleri için kullanılan siklon gazlaştırıcı, aşağı akımlı biyokütle gazlaştırıcı, sürüklenmiş akış gazlaştırıcı, ve akışkan yataklı gazlaştırıcı olmak üzere farklı çeşitleri bulunmaktadır ve ilave olarak biyokütle gazlaştırma modellemesinin kısa bir incelemesi Baruah ve Baruah (2014) 'tarafından yapılan çalışmada verilmektedir.

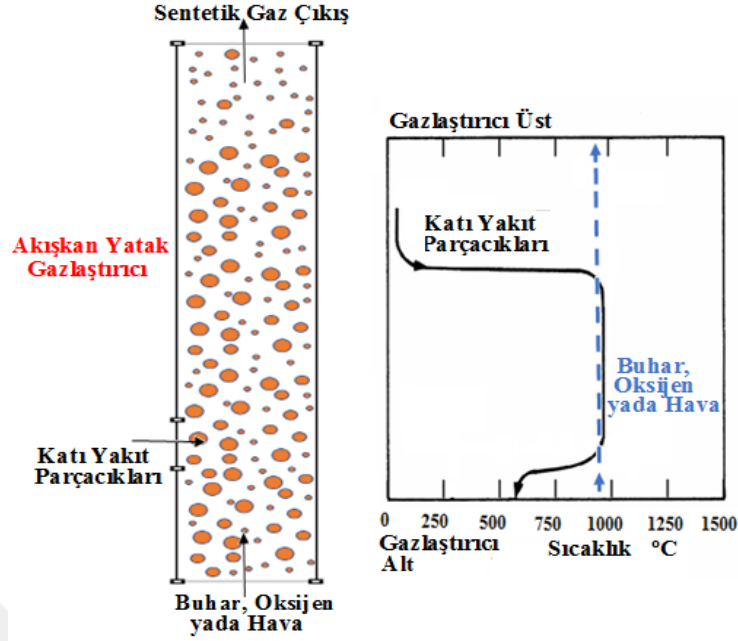


Şekil 3.7. Katı atık gazlaştırma ve enerji üretiminin şematik gösterimi.

Gazlaştırma işleminin ana ürünü, karbon monoksit, hidrojen ve metan içeren sentetik gaz, olabildiğince çevre dostu ve enerji verimli bir gazdır. Diğer bir ürün ise gazlaştırma sonucunda meydana gelen yanmayan malzemelerden (kül) oluşan ve nispeten düşük seviyede karbon içeren katı atıktır. Sentetik gazı farklı şekillerde kullanılabilir; örneğin sentetik gaz elektrik üretimi veya endüstriyel ısıtma için kullanılabilen buhar üretmek için bir brülörde yakılabilir. Özel bir gaz motorunda yakıt olarak da kullanılabilir.

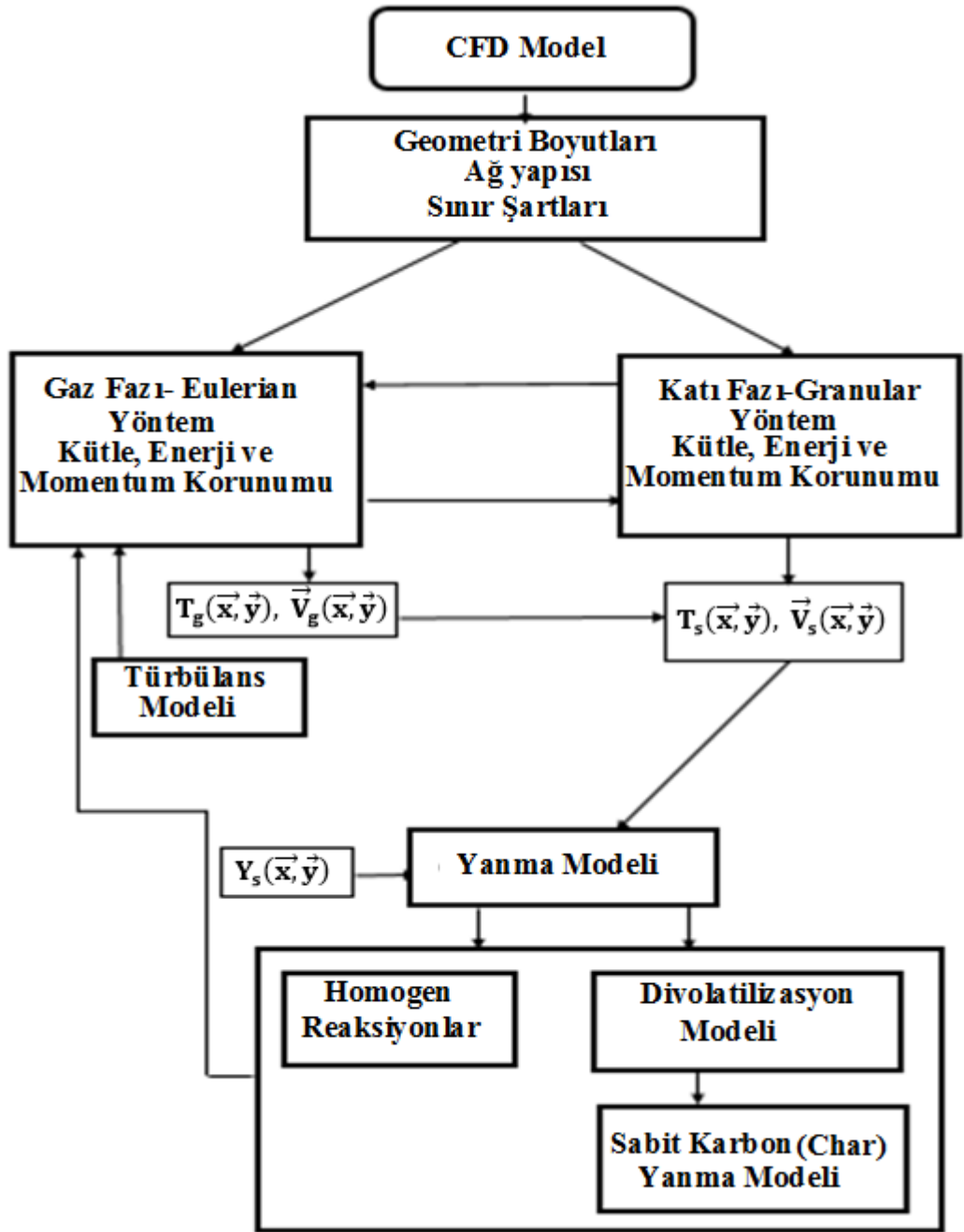
Akışkan yataklı reaktörler, yüksek derecede gaz-katı teması, hızlı katı-katı karıştırma ve katı parçacıkların neden olduğu akış yapısı ve yatak bölgesi içinde hızlı gaz karışımı sağlama yeteneklerinden dolayı katıdan gaza dönüşüm işlemlerinde özellikle tercih edilmektedir. Ayrıca akışkan yatak katı parçacıkların gazlaştırılması açısından sürüklenmiş akışlı gazlaştırma ile karşılaştırıldığında daha önde olan bir teknolojidir. Sürüklenmiş akışlı gazlaştırıcılar yüksek öğütme maliyeti ve düşük enerji yoğunluğu gibi özelliklerden dolayı ekonomik olarak pratik olmamaktadır. (Addison ve ark. 2015).

Gazlaştırma işleminin modellenmesi, gaz fazında meydana gelen uçucu gazlaştırma homojen kimyasının ve katı fazda meydana gelen karbon içerikli parçacığın yanmasının heterojen reaksiyonlar olarak ilerlemesiyle ilgilidir. Termodinamik denge (i), kinetik (ii) ve yapay sinir ağı yolları (iii) gazlaştırma sürecinin matematiksel modellenmesi için temel yaklaşımlardır (Baruah ve Baruah 2014). Denge veya kinetik modellerin veya her ikisinin kombinasyonunun avantajları ve dezavantajları bulunmaktadır. Denge modelleri formülasyonda daha basittir ancak karmaşık reaktör tasarımları için tatmin edici sonuçlar vermezken, kinetik modellerin formülasyonları ise karmaşıktır. Yine de tahminleri, karmaşık reaktör tasarımları için denge modellerine kıyasla daha doğru vermektedir. Başka bir yöntem, CFD, her iki modelin avantajlarını birleştirerek belirli bir gazlaştırıcı tasarımının davranışını incelemek için bir araç olarak kullanılmaktadır (Baruah ve Baruah 2014). Bu nedenle, bu çalışmada akışkan yataklı gazlaştırıcı içindeki gazlaştırma süreci CFD ile modellenmiştir. Akışkan yataklı gazlaştırıcı içindeki gazlaştırma işlemlerinin sistematik bir açıklaması ve hem katı yakıtın hem de havanın sıcaklık artışları aşağıdaki şekil 3.8'te verilmiştir.



Şekil 3.8. Akışkan yataklı gazlaştırıcı ve sıcaklık değişimi (ANSYS 2016).

Şekil 3.8'de gösterilen 2-D geometrinin katı atık parçacıklarının gazlaşmasını simüle ettiği ve heterojen ve homojen reaksiyonlarla Euler-granüler akış modelinin kurulumunu gösterdiği kabul edilmiştir. Gaz ve katı atık parçacıkları, geometrinin farklı giriş taraflarından aynı anda gazlaştırıcı alanına girmektedir. Bu çalışmada hem birincil hem de ikincil fazlar bir karışım olarak düşünülerek modellenir. Birincil faz, O_2 , N_2 , CO , CO_2 , ve H_2O 'dan oluşan gazlardan ve katran olarak ise sıvıdan meydana gelen bir gaz sıvı karışımıdır. Diğer yandan, ikincil faz sabit karbon (char), uçucu maddeler, H_2O (sıvı) ve külden oluşan katı- sıvı karışımıdır. Başlangıçta katı yakıtın % 2 sabit karbon ve % 2 uçucu madde içerdiği kabul edilmektedir. Bu simülasyonda, sadece iki heterojen ve bir homojen reaksiyonu dikkate alınmıştır. Heterojen reaksiyonlar divolatilizasyon ve sabit karbon (char) yakma reaksiyonları içindir, homojen reaksiyon ise oksijen ile reaksiyona giren karbon monoksitin karbondiokside dönüşmesinden meydana gelmektedir. (ANSYS 2016). Geliştirilen CFD modelinin akış şeması şekil 3.9'da gösterilmektedir.

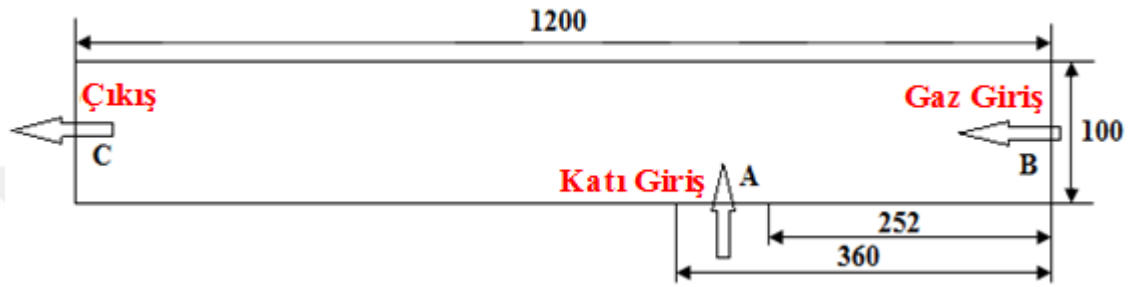


Şekil 3.9. Geliştirilen CFD modelinin akış şeması.

3.2.2. Hesaplama Bölgesi ve Sınır Koşulları

Yukarıda Şekil 3.8'te bahsedilen gazlaştırma işlemi, Şekil 3.10'da gösterildiği gibi iki boyutlu bir CFD modeli geliştirilerek incelenmiştir. Giriş sınır koşulları hız değerleri alınarak seçilmiştir (A: Giriş katı parçacıklar $V = 0,2 \text{ m/s}$, $T = 300 \text{ K}$ ve B: Giriş gazı V

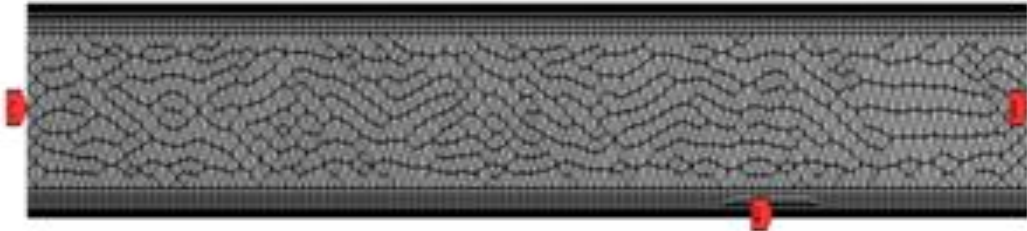
= 3 m /s ve $T = 1200$ K). Basınç çıkışı, Şekil 3.10'da gösterildiği gibi Çıkış sınırı (C: Çıkış basıncı = 0 Pa) olarak seçilir. Diğer tüm duvarlar kaymaz sınır koşulları olarak kabul edilir. Gazlaştırmacının duvarları yalıtımlı bir duvar olarak modellenmiştir. Gazlaştırmacı duvarlardaki ısı iletimi dikkate alınmamıştır. Gazlaştırmacı duvarlarından çevreye olan taşınım ve ışıınım ile ısı transferi de ihmal edilmiştir. Katı partikülün başlangıç çapı 0,0005m, partikül yoğunluk değeri 1400 kg / m^3 , partikülün özgül ısı değeri 2092 J / kgK ve partikülün ısıl iletkenliği değeri $1,5 \text{ W / mK}$.



Şekil 3.10. Geometri ve boyutlar (Boyutlar mm cinsindendir).

3.2.3. Ağdan Bağımsızlık Çalışması ve Ağ Yapısı

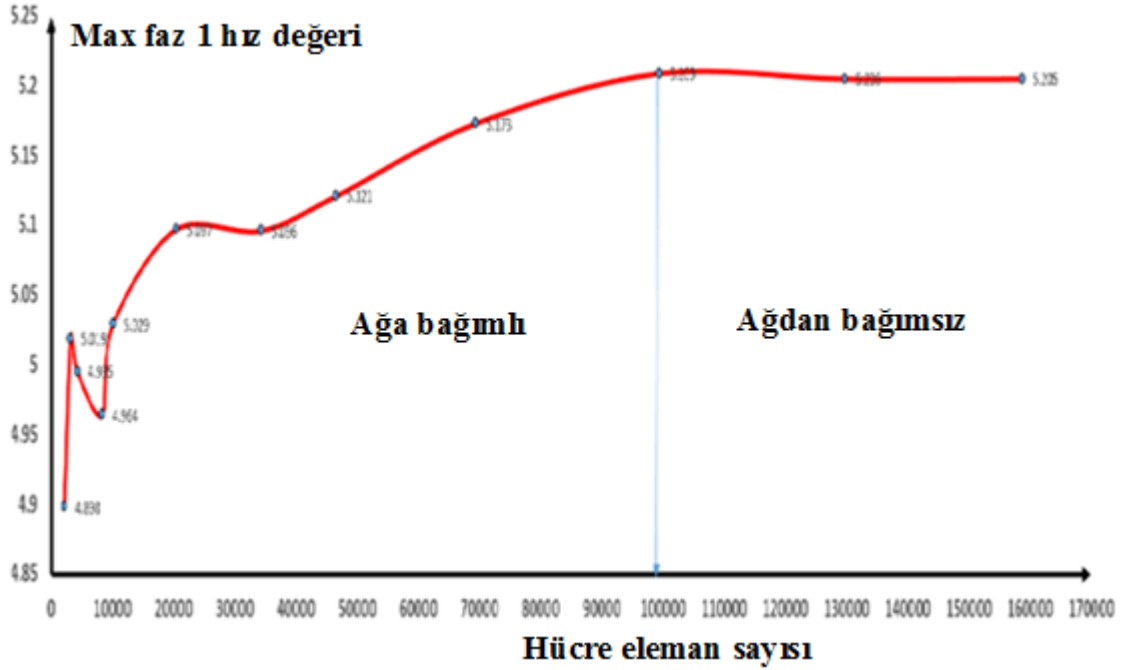
Tüm CFD analizlerinde doğru sonuçlar elde etmek için ağdan bağımsızlık çalışması yapılması gereklidir. Şekil 3.11'de görüldüğü gibi ağ düzgün ağ aralığına sahip üçgen ve prizma hücreler kullanılarak inşa edilmiştir. Akışkan yataklı reaktörlerin hidrodinamiğini etkili bir şekilde hesaplamak için duvarların çevresindeki sınır tabakası ağları için ince ve düzgün ağlar kullanılmıştır.



Şekil 3.11. CFD modelinin ağ yapısı.

Aşağıdaki Şekil 3.12'de görüldüğü gibi ağdan bağımsızlık çalışması başlangıçta çeşitli hücre sayılarının maksimum faz 1 hız değişikliklerinin karşılaştırılmasıyla yapılmıştır.

Ağdan bağımsızlık çalışmasının tamamlanmasının ardından, 99424 hücre sayısının meydana getireceği çözünürlüğün doğru hesaplama ve similasyon çözdürme zamanı açısından uygun olduğuna karar verilmiştir.



Şekil 3.12. Hücre sayısı ile faz 1'in maksimum hız değeri değişimi.

3.2.4. Türbülans Modeli

Bugün türbülans modelleme yöntemleri aşağıdaki gibi üç kategoriye ayrılabilir: RANS denklemleri ile, LES ve DNS (Versteeg ve Malalasekera 2007). LES ve DNS modelleri, RANS modellerinden daha doğru modeller olmasına rağmen, endüstriyel akış uygulamaları için yüksek maliyetli hesaplama kaynakları nedeniyle yaygın olarak kullanılmamaktadır. RANS tabanlı standart k-ε türbülans modeli genellikle akışkan yataklarda yanma ve gazlaştırma işlemleri için türbülanslı akışın modellenmesinde kullanılmaktadır (Bakul ve ark. 2001). Bu çalışmada, bağımlı değişken dağılımının güvenilir hesaplamalarını elde etmek ve uygun türbülans modellemesini belirlemek için çeşitli RANS tabanlı türbülans modelleri araştırılmıştır. Çok fazlı türbülans modeli için dağılık seçenek (dispersed option) seçilmiştir ve hesaplamalar için ANSYS-FLUENT yazılımı kullanılarak sonlu hacimler yöntemi ile çözümler yapılmıştır.

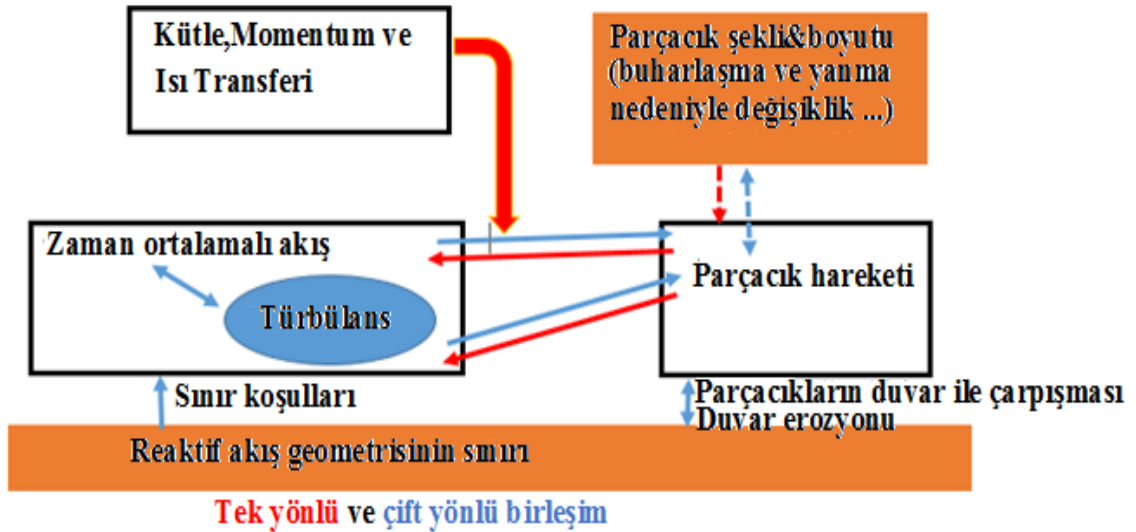
3.2.4. Çok Fazlı Reaktif Akış Modellemesi

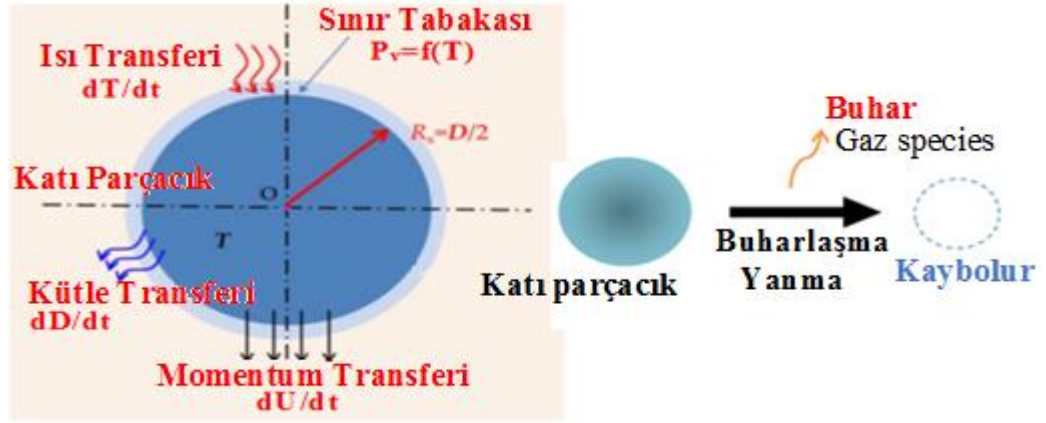
Şekil 3.13 Akışkan parçacık birleşimini ve modellemesini şematize etmektedir. Çok fazlı akışın parametrelerini ve birbiri ile ilgili ilişkilerini ifade etmektedir. Çok fazlı akış için Reynolds sayısı hesaplaması; $D = 0,1$ m çapında ve $L = 12D = 1,2$ m uzunluğunda silindirik bir borudan akan sıvıyı düşünün. Boru girişindeki yığın hızı $U_{yığın} = 11$ m / s'dir. Karışımın yoğunluğunun sabit olduğu durum kabul edilir. Yoğunluk, $\rho = 1,331$ kg / m³ ve viskozite katsayısı $\mu = 2,34 \times 10^{-5}$ kg / ms alınmaktadır. Boru çapına ve yığın hızına dayalı Reynolds sayısı (Re) aşağıdaki gibi hesaplanmaktadır.

$$Re = \frac{\rho_{mixture} U_{bulk} D}{\mu_{mixture}} \cong 62568 \quad (3.7)$$

$$Re_s = \frac{\rho_g d_s \epsilon_g |\vartheta_g - \vartheta_s|}{\mu_g} \cong 67,089 \quad (3.8)$$

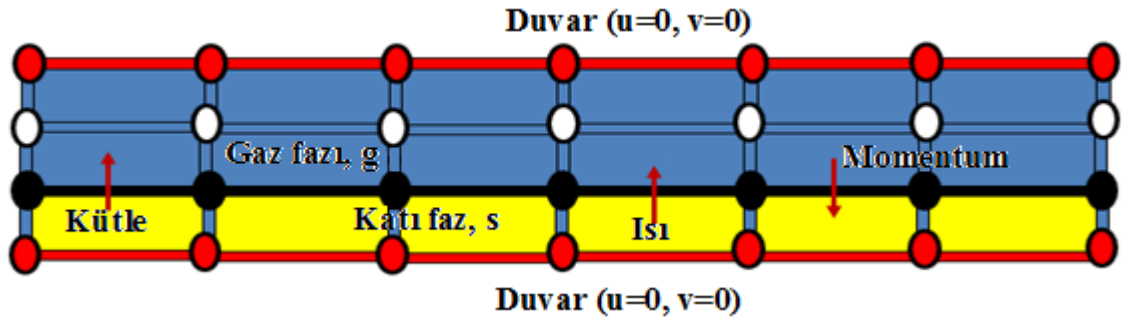
$$Pr = \frac{\mu_g C_{p,g}}{k_g} \cong 0,744 \quad (3.9)$$





Şekil 3.13. Akışkan-partikül birleşimi (ANSYS 2020).

Eulerian-Granular modelleme yaklaşımı, çok fazlı reaktif akışı modellemede kullanılır. Bu model, ANSYS FLUENT'te çok fazlı akışları analiz etmek için en karmaşık, doğru ve son teknoloji hesaplama tekniğidir (ANSYS 2020). Bu model, kütle türleri için denklemler 3.10) ve 3.13 momentum aktarımı için denklemler 3.11 ve 3.14 için ve enerji taşınımı için denklemler 3.12 ve 3.15 olarak bir dizi korunum denklemini çözmektedir. Aşağıdaki şekil 3.14 sınır yüzeyindeki düğümleri, arayüzeydeki düğümleri ve başlangıç düğümlerini gösteren çok fazlı akış için bir nümerik model geliştirildiğini ifade etmektedir. Bu yukarıdaki bahsedilen denklemler şekil 3.14'de görüldüğü gibi bu 2-D CFD modelini geliştirerek granüler sıcaklık denklemi ile birlikte her bir birincil ve ikincil fazlar için çözülmüştür. Fazlar, basınç değerleri ve fazlar arası değişim katsayıları ile birleştirilmiştir. Granüler akışın özellikleri ise kinetik teorisinin uygulanmasından elde edilmektedir.



Şekil 3.14. CFD modeli şeması, 2-D kararlı durum sonlu hacim modeli.

Gaz fazı karışımı ;

Gaz fazının tür (species) kütle denklemi;

$$\nabla \cdot (\alpha_g \rho_g Y_i \vec{v}_g) = \dot{m}_i + S_i \quad (3.10)$$

Gaz fazın momentum denklemi;

$$\nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_g + \alpha_g \rho_g \vec{g} + K_{sg} (\vec{v}_s - \vec{v}_g) + \dot{m}_{sg} \vec{v}_{sg} \quad (3.11)$$

Gaz fazı enerji denklemi;

$$\nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = \bar{\tau}_g : \nabla \vec{v}_g + \nabla \cdot \vec{q}_g + S_g + Q_{sg} + \dot{m}_{sg} H_{sg} \quad (3.12)$$

Katı faz karışımı;

Katı fazın tür (species) kütle denklemi;

$$\nabla \cdot (\alpha_s \rho_s Y_i \vec{v}_s) = \dot{m}_i + S_i \quad (3.13)$$

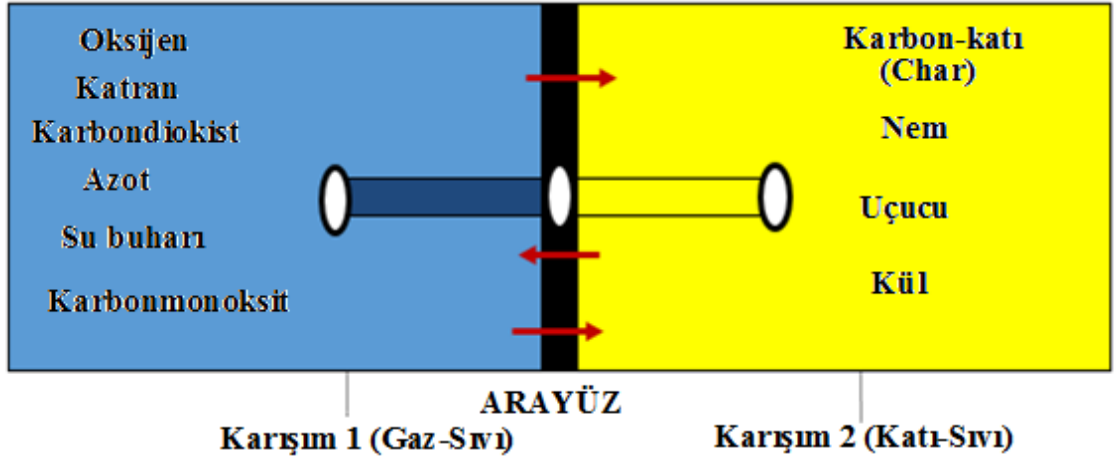
Katı fazın momentum denklemi;

$$\nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = -\nabla p_s + \nabla \cdot \bar{\tau}_s + \alpha_s \rho_s \vec{g} + \dot{m}_{sg} \vec{v}_{sg} \quad (3.14)$$

Katı fazın enerji denklemi;

$$\nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s H_s) = \bar{\tau}_s : \nabla \vec{v}_g + \nabla \cdot \vec{q}_s + S_s + Q_{sg} + \dot{m}_{sg} H_{sg} \quad (3.15)$$

Kütle, momentum ve enerji bu fazlar arası değişim, şekil 3.15'te gösterildiği gibi modellenen karışımın tipine, ara yüzeydeki kütle, momentum ve ısı aktarımına bağlıdır. Ara yüzey transport denklemleri 3.16, 3.17, ve 3.18 de bu geliştirilen model ile birlikte çözülmektedir.



Şekil 3.15. Malzeme karışımları, karışım sıvı- gaz (Faz 1) ve karışım sıvı- katı (Faz 2).

$$m_p C_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \frac{dm_p}{dt} h_{sg} + S_x \quad (3.16)$$

$$-Q_{sg} = Q_{sg} = \frac{6K_g \alpha_s \alpha_g Nu_s}{L_s^2} (T_s - T_g) \quad (3.17)$$

Gunn (1978) tarafından geliştirilen Nusselt sayısı

$$Nu = (7 - 10\alpha_g + 10\alpha_g^2)(1 + 0.7Re_s^{0.2}Pr_g^{0.33}) + (1.33 - 2.4\alpha_g + 1.2\alpha_g^2)Re_s^{0.7}Pr_g^{0.33} \quad (3.18)$$

$$\frac{Nu k_g^{eff}}{d_s} = h \quad (3.19)$$

$k_g^{eff} = (1 - \sqrt{\frac{\epsilon_s}{\epsilon_g}})k_g$ ve katı faz için, efektif (etkin) iletim katsayısı aşağıdaki bağıntı ile verilir.

$$k_s^{eff} = \frac{(\beta A + (1-\beta)\gamma)k_g}{\sqrt{\epsilon_s}} \quad (3.20)$$

ve denklemdaki diğer parametreler

$$\gamma = \frac{2}{1-\frac{B}{A}} \left[\frac{\frac{A-1}{(1-\frac{B}{A})^2} \frac{B}{A} \ln \frac{A}{B} - \frac{B-1}{1-\frac{B}{A}} - 0.5(B+1) \right] \quad (3.21)$$

Örneğin küresel parçacıklar için,

$$A = \frac{k_s}{k_g} \quad (3.22)$$

$$B = 1.25(1 - \frac{\epsilon_s}{\epsilon_g})^{\frac{10}{9}} \quad (3.23)$$

$$\beta = 7.26 \times 10^{-3} \quad (3.24)$$

$$h_{pen} = \frac{k_m(\rho C_p)_m}{\pi t} \quad (3.25)$$

$$\text{with } k_m = \varepsilon_g k_g + (1 - \varepsilon_g) k_s \quad \text{and } (\rho C_p)_m = \varepsilon_g \rho_g C_{pg} + (1 - \varepsilon_g) \rho_s C_{ps} \quad (3.26)$$

3.2.5. Kimyasal Reaksiyonların ve Türlerin(Species) Modellemesi

Kimyasal reaksiyonlar tür (species) transport denklemi ile bir hacimsel reaksiyon düşünülerek modellenirken, türbülans ve kimya etkileşimi için sonlu-oran / girdap dağılımı modeli kullanılmaktadır. Tür (species) transport denklemi 3.27 çözülmektedir. Her tür için Y_j 'nin kütle oranını hesaplamak için konveksiyon-difüzyon denklemi hesaplanmaktadır.

$$\frac{\partial(\rho Y_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_j V) = -\nabla \cdot J_j + R_j + S_j \quad (3.27)$$

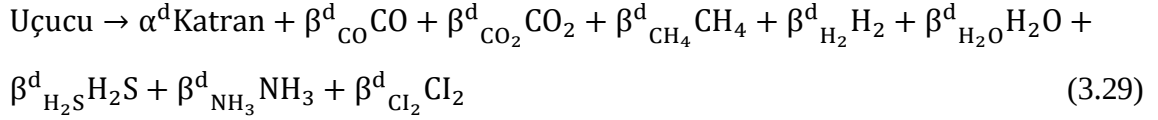
Daha gerçekçi katı yakıt yakma veya gazlaştırma süreci için, daha fazla heterojen ve homojen reaksiyonları dikkate almak gerekir. Biri sabit karbon yakma ve diğeri devolatilizasyon için olmak üzere bu çalışma için iki heterojen reaksiyon düşünülmüştür. Üçüncü reaksiyon ise homojen reaksiyon olup aşağıdaki kimyasal denklemi 3.30 da verilmektedir.

Gazlaştırma işleminin kimyasal reaksiyonları aşağıdaki gibidir;

a-) Kimyasal denklem 3.28 'de formüle edildiği gibi sabit karbon yanması, heterojen reaksiyon.



b-) Kimyasal denklem (3.29)'da verildiği üzere,devolatilizasyon, heterojen reaksiyon



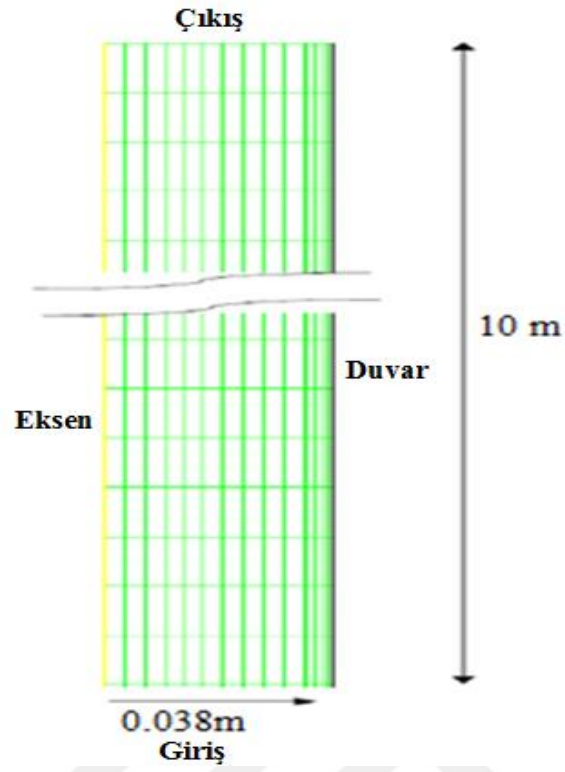
c-) CO yanma, homojen reaksiyon



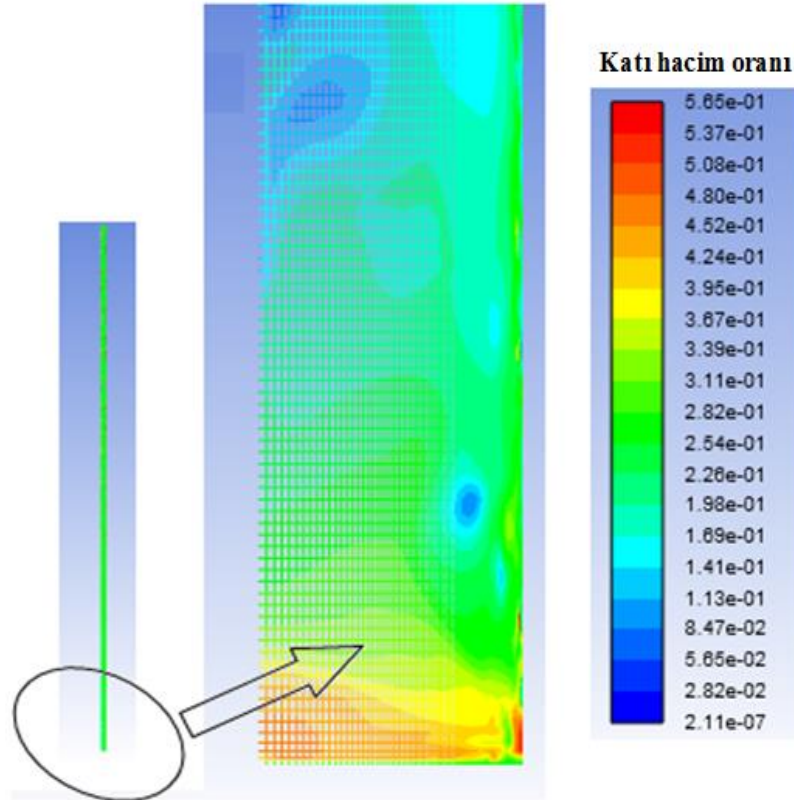
3.2.6. Model doğrulama

Şekil 3.16 doğrulama çalışması yapılan parçacık ve gaz akış sisteminin akış özellikleri, geoemtri, ağ yapısı ve simülasyon parametrelerini göstermektedir. Ortalama parçacık çapı 67 µm, yoğunluk 1500 kg/m³, katı kütle akışı 300 kg/m²s, gaz hızı 5.5 m/s dir. Giriş durumu için sınır koşulları (gaz, partikül): Hız giriş değerleri kullanılmıştır ve partikül fazının hacim oranı ise 0.25 tir. Çıkış durmu (gaz, partikül): Atmosferik basınç, duvar durumu (partikül ve gaz için): Kaymaz sınır şartı kullanılmıştır. Hesaplama alan boyutları gazlaştırıcının iç çapı 76 mm, gazlaştırıcının yüksekliği 10 m dir. Gazlaştırıcı merkezinden hattından radyal mesafe ise 38 mm dir. Aynı zamanda eksen de simetri sınır şartı kullanılmıştır.

Bu CFD modeli, Şekil 3.16'da görüldüğü gibi Liu (2014)'nin çalışması tarafından doğrulanmıştır ve Şekil 3.16 ve 3.17'de gösterildiği üzere katı hacim oranları karşılaştırılmıştır. Mevcut sayısal sonuçlar ile Lui'nin sonuçları oldukça benzerdir. Model doğrulaması için, her iki modelin sonuçlarını karşılaştırmak için benzer sınır koşullarına sahip aynı 2-D boyutları dahil olmak üzere Lui'nin çalışmasında olduğu gibi başka bir asimetrik model hazırlanmıştır. Zaman ortalamalı katı hacim fraksiyonu olan Lui'nin bulguları, bu çalışmanın katı hacim fraksiyonu dağılımı ile karşılaştırılmıştır. Şekil 3.17'de gösterildiği gibi, bir noktadan alınan değerlerin karşılaştırması gerçekleştirilmiştir. Maksimum katı hacim oranı 0,565 olarak okunurken diğer yandan Lui'nin maksimum katı hacim oranı değeri 0,559'dur. Her iki model karşılaştırıldığında hata yüzdesi de alınan ölçüm hatalarını da göz önünde bulundurduğunda % 3 gibi çok düşük bir değer elde edilmektedir.



Şekil 3.16. Liu modelinin geometri boyutları, ağ yapısı ve sınır koşulları (Liu 2014).



Şekil 3.17. Bu çalışmanın katı hacim oranı dağılımı.

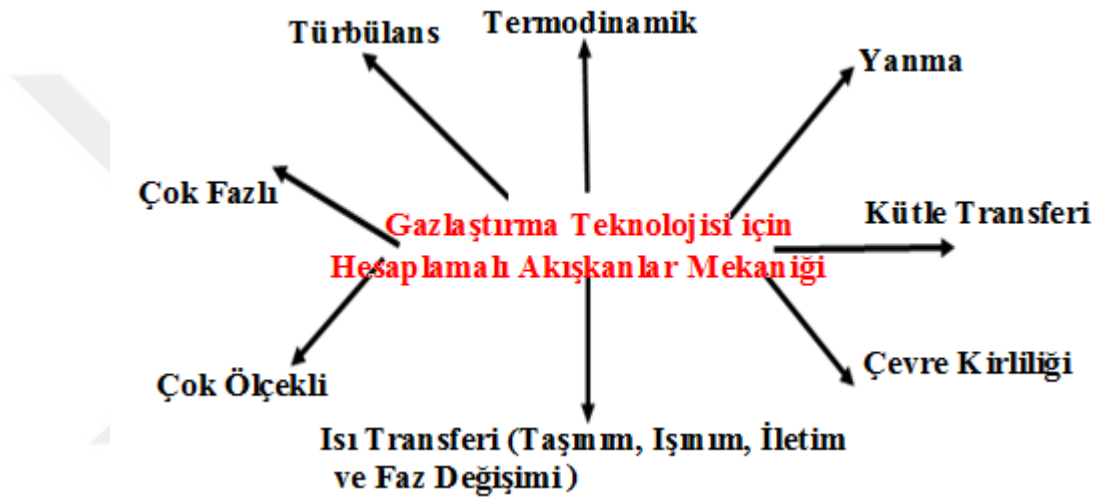
3.2.7. Sayısal Yöntem

Gazlaştırma işlemi, sonlu hacimli yöntem tabanlı olan ticari ANSYS-FLUENT yazılımı kullanılarak analiz edilmiştir. Basınç tabanlı çözücü, yani enerji denkleminde toplam enerji yerine entalpi terimi kullanılarak, çözümler yapılmıştır. Yerçekimi kuvveti boussinesq yaklaşımı ile hesaba katılmıştır. Ayrıca, bu hesaplamada viskoz sürtünmeden dolayı üretilen ısı ihmal edilmiştir. Denklemleri çözmek için SIMPLE algoritması kullanılmıştır. Hesaplamalar hücre merkezi baz alınarak yapılmıştır. Hesaplama için gerekli olan ağ, düzgün ağ aralığına sahip üçgen hücreler kullanılarak oluşturulmuştur. İkinci dereceden akış yönü (upwind) düzeni, momentum, kütle ve enerji denklemlerindeki taşınım terimleri nümerik çözüm için hücrelere bölmede kullanılmıştır. Gaz, katı ve sıvı fazlardan oluşan çok fazlı akış, kararlı (Stable) bir çözüm bulmak için öncelikle enerji denklemleri ve kimyasal reaksiyonlar hesaplara dahil edilmeden çözülmeye başlanmıştır. Uygun bir çözüm akışı elde edildikten sonra, kimyasal reaksiyonlar ve ısı transfer modları da dahil edilerek problemin çözümü gerçekleştirilmiştir. Yakınsama kriteri, süreklilik ve momentum denklemleri için 10^{-6} ve enerji denklemleri için 10^{-10} kullanılarak çözümler elde edilmiştir. Hesaplamalarda Standart k- ϵ türbülans modeli ve standart duvar fonksiyonu kullanılmıştır.

3.3. Üç Boyutlu (3-D) Gazlaştırma İşlem Modellemesi ve Optimizasyonu

3.1.1 Problem Tanımı ve Sayısal Model Giriş

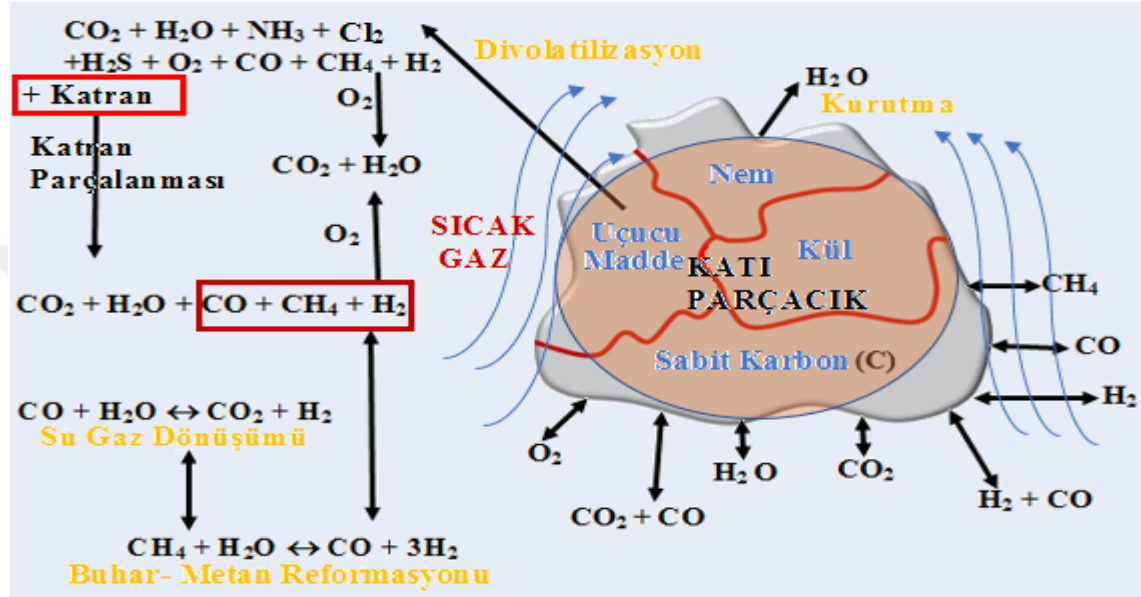
Şekil 3.18’ de gösterildiği üzere gazlaştırma işleminin yanma ile kimyasal reaksiyon, kinetik modelleme, sıvı akışı, türbülans, iletim, taşınım, radyasyon ile ısı transferi, gibi birçok benzerliği vardır. Gazlaştırma işlemi için önemli fark, yanma işlemi yerine yüksek CO içeriği ve düşük CO₂ içeriğidir. Yanma, doğrudan karıştırmaya ve kimyaya bağlıdır. Kimyasal tepkimenin karıştırmaya olan göreceli hızı çok önemlidir.



Şekil 3.18. Gazlaşma fiziksel ve kimyasal olayları.

Yukarıdaki şekilde bahsedildiği gibi gazlaştırma içerisinde meydana gelen bu tüm fiziksel ve kimyasal olayları doğru bir şekilde hesaplayabilmek için doğru olan denklemleri ve modelleri kullanıp bu denklemleri doğru bir şekilde çözmek gerekmektedir. Bu bölümdeki çalışmada üç boyutlu geometri (3-D), RANS tabanlı standart k-ε modeli ve LES tabanlı türbülans modelleri kullanılmıştır. Gaz fazı Eulerian yaklaşımı ile modellenmiştir. Particulerin modelleme yaklaşımı Lagrangian'dır. Katı parçacıkların içinde bulunan nemin buharlaşması hesaplamaları ise konveksiyon / difüzyon kontrollü model kullanılarak yapılmıştır (convection/diffusion controlled model). Çok fazlı modelleme için ayrık faz modeli (DPM) yaklaşımı kullanılmıştır. Katı parçacıkların divolatilizasyonu için ise iki rakipli hız modeli kullanılarak yapılmaktadır (two-competing rates model). P1 modeli ışınlam ile ısı transferi hesaplamaları yapmak için

kullanılmıştır. Şekil 3.18’ de şematik şekilde gösterildiği üzere, gazlaştırma işleminin kimyasal reaksiyonları, on gaz fazı reaksiyonu ve dört partikül yüzey reaksiyonu olarak modellenip akışın hidrodinamiği ile birleştirilip hesaplamalar yapılmıştır. Kimyasal reaksiyon hesaplamalarında girdap yitimi / sonlu oran modeli (eddy dissipation/finite rate model) kullanılmıştır.



Şekil 3.19. Gazlaştırma sisteminde meydana gelen kimyasal reaksiyonların şematik gösterimi (ANSYS 2020).

Bu bölümde bir önceki aşamada geliştirilen daha basit 2-D modeli bu 3-D çalışma ile modelleme açısından daha doğru, kapsamlı ve verimli hale getirilmiştir. Modelde ilk olarak çözülen süreklilik denkleminde bahsetmek gerekir ise, denklem aşağıdaki 3.31 numaralı denklem ile gösterilmiştir.

$$\nabla \cdot (\rho \bar{u}) = S_m \quad (3.31)$$

ρ gaz fazının yoğunluğu, $\bar{u}$ gaz fazının ortalama hızı S_m ise kaynak terimi, katı parçacıklardan piroliz(devolatilizasyon) aşamasında gaz fazına dönüşen kütle miktarını ifade etmektedir. Momentumun korunumu için denklem şu şekildedir.

$$\nabla \cdot (\rho \bar{u} \bar{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau} + S_F \quad (3.32)$$

P , statik basınçtır $\bar{\epsilon}$ Gerilme tensörü S_F katı parçacıklardan kaynaklanan kaynak terimidir. Enerjinin korunumu denklemi ise aşağıdaki gibidir.

$$\nabla \cdot (\rho \bar{u} h) = \nabla (\lambda \nabla T) + S_k \quad (3.33)$$

S_k ısınım ısısı ve reaksiyon ısısı nedeniyle kaynak terimidir. h özgül entalpidir. T Sıcaklık ve λ ise ısı iletim katsayısıdır. Yanma ve gazlaştırmanın sayısal modellenmesi için kimyasal kinetik ve reaksiyon kaynak terimi ise aşağıdaki bağıntılar ile ifade edilmektedir. Yakıt, yakıcı madde ve yanma işleminin ürünleri, çok bileşenli akışkanın kütle oranlarını düzenleyen skaler değişkenlerdir. Her kütle oranı, türlerin tüketimini veya üretimini hesaba katmak için kaynak terimleriyle birlikte genel bir tür kütle oranı transport denklemi ile hesaplanmaktadır.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + R_k \quad (3.34)$$

R_k yakıcı madde veya ürünün üretimini veya tüketimini temsil eden kaynak terimidir. Kaynak terimi hesaplamalarda kullanılmak üzere modellenmiştir ve reaksiyona bağlıdır. Türbülans modeli ile kullanıldığında yukarıda bahsedilen denklem Reynolds (zaman) ortalamalı tür denklemi olarak aşağıdaki gibi ifade edilmektedir.

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{Y}_k \bar{u}_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial (\bar{\rho} \overline{Y_k'' u_i''})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \bar{D}_k \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_i} \right) + \bar{R}_k \quad (3.35)$$

1ci terim zamana bağlı (kararsız durumu) ifade etmektedir. Kararlı akışlarda bu terim sıfır olmaktadır. 2ci terim ortalama hızın oluşturduğu konveksiyondur. 3 üncü terim türbülanslı hız dalgalanmalarının oluşturduğu konveksiyondur. Eşitliğin sağ tarafındaki ilk terim moleküler difüzyon ve diğeri ise ortalama kimyasal kaynak terimidir. Denklemdaki parametreler ise Y_k , D_k , R_k sırasıyla tür kütle oranı, difüzyon katsayısı ve kimyasal kaynak terimidir. Ortalama gradyan difüzyonu ile modellenen türbülanslı akı terimi ise

$$\bar{\rho} \bar{Y}_k'' \bar{u}_t'' = \frac{\mu_t}{Sc_t} \cdot \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_i} \quad (3.36)$$

Kimyasal kinetik hesaplamalarına gelince, hesaplanan reaksiyon hızı aşağıdaki formülasyon ile bulunmaktadır.

$$R_k = M_k (v_k'' - v_k') \left(A_k T^{\beta_k} e^{\frac{-E_k}{RT}} \right) \prod_{j=1}^N C_j^{\eta_{kj}} \quad (3.37)$$

k'inci tür reaksiyon hızı (tek bir reaksiyon için). v_k'' , v_k' ise reaktant ve ürün stokiyometrik katsayısıdır. η_{kj} j reaksiyondaki j ürünü için hız üssüdür. β_k ise k reaksiyonunun sıcaklık üssüdür. E_k Aktivasyon enerjisidir. R evrensel gaz sabitidir. A_k üstel öncesi faktördür. C_j Türlerin molar konsantrasyonudur. K_k denge sabitidir. R_k "k" reaksiyonundaki "j" türlerinin üretim veya tüketim oranıdır.

Aşağıdaki çizelge 3.1 ve 3.2'de görülebileceği gibi, tüm gazlaştırma kimyasal reaksiyonları, yukarıdaki bahsedilen denklemler ile modellenmekte ve akışla yani Navier-Stokes denklemleri ile birleştirilmektedir. Bir önceki bölümdeki kimyasal reaksiyon sayıları bu bölümde artırılarak daha gerçekçi bir model elde edilmeye çalışılmıştır.

Çizelge 3.1. Heterojen kimyasal reaksiyonlar.

Reyaksiyon isimleri	Kimyasal reyaksiyon denklemleri
R 11: Sabit karbon(Char) yanması:	$C_{<S>} + 0.5 O_2 \rightarrow CO$
R 12: CO ₂ gazlaştırma	$C_{<S>} + CO_2 \rightarrow 2 CO$
R 13: H ₂ O gazlaştırma	$C_{<S>} + H_2O \rightarrow CO + H_2$
R 14: H ₂ gazlaştırma	$C_{<S>} + 2 H_2 \rightarrow CH_4$

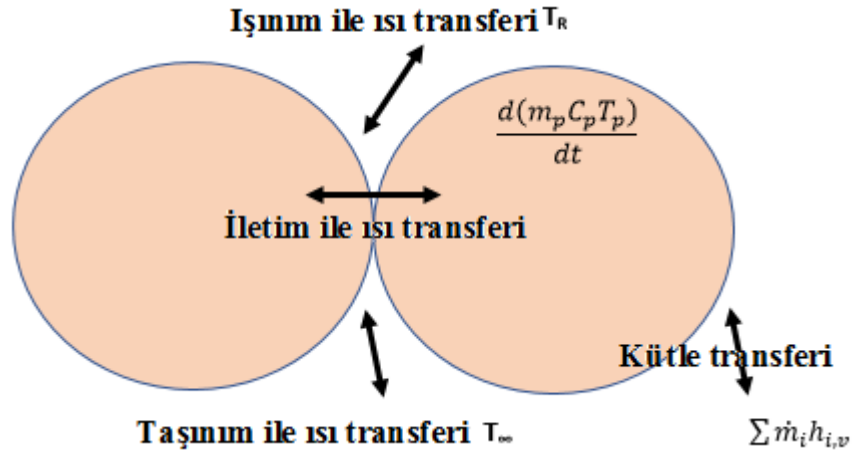
R: Reaksiyon, <S>: Katı (Solid)

Çizelge 3.2. Homojen kimyasal reaksiyonlar.

Reaksiyon isimleri	Kimyasal reaksiyon denklemleri
R1: Divolatilizasyon	$\text{Ucucu madde} \rightarrow \text{CO} + \text{CO}_2 + \text{CH}_4 + \text{H}_2$ $+ \text{H}_2\text{O} + \text{NH}_3 + \text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{S}$ $+ \text{N}_2 + \text{O}_2 + \text{Katran}(\text{Tar})$
R2: CO oksidasyon reaksiyonu	$\text{CO} + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$
R3: İleri su-gaz dönüşümü reaksiyonu	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$
R4: Geri su-gaz dönüşümü reaksiyonu	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
R5: Hidrojen oksidasyonu	$\text{H}_2 + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$
R6: Ters hidrojen oksidasyonu	$\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + 0.5 \text{O}_2$
R7: Metan oksidasyonu	$\text{CH}_4 + 1.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
R8: Buhar metan reformasyonu	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3 \text{H}_2$
R9: Katran oksidasyonu	$\text{Katran} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
R10: Katran parçalanması	$\text{Katran} \rightarrow \text{C}_{<\text{S}>} + \text{CO} + \text{CH}_4$

Gazlaştırmanın akış denklemleri kimyasal reaksiyonlarını bahsettikten sonra, Şekil 3. 20' de görüleceği üzere ısı ve kütle transferinin temel kavramlarından ve denklemlerinden bahsetmek gerekmektedir. Işınım, taşınım, iletim ile ısı transferi ve kütle transferinin birlikte bulunduğu ana denklem aşağıdaki gibidir.

$$\frac{\partial(m_p c_p T_p)}{\partial t} = \pi d_p^2 h (T_\infty - T_p) + \sum \dot{m}_i h_{i,v} + \pi d_p^2 \varepsilon_p \sigma (T_R^4 - T_P^4) \quad (3.38)$$



Şekil 3.20. Parçacık etkileşimi ve ısı kütle transferi olayı.

Gazlaştırma sırasında kütle ve ısı transferinin modellenmesi sırasında kullanılabilecek denklemler aşağıdaki gibidir. Kütle transferi için denklem 3.41 ile ifade edilmiştir.

$$u_j \frac{\partial c_j}{\partial z} = D_j \frac{\partial^2 c_j}{\partial z^2} + R_{c,j} \quad (3.39)$$

Yukarıdaki denklem reaktördeki tür j konsantrasyonu, parçacığın hızı, ortamdaki türün difüzyon katsayısı, ve kimyasal reaksiyonlardan türlerin üretim veya tüketim hızı parametrelerinden oluşmaktadır. Isı transferi için denklemler 3.40 ve 3.41 ile verilmektedir.

$$\rho_g c_g u_g \frac{\partial T_g}{\partial y} = R_{Rxn,g} + R_{c,g} + R_{R,g} \quad (3.40)$$

$$\rho_s c_s u_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = R_{Rxn,s} + R_{c,s} + R_{R,s} \quad (3.41)$$

Taşınım ile ısı transferi, kimyasal reaksiyona bağlı enerji kaynağı, radyasyonla ısı transferi kaynak terimlerini ifade etmektedir.

$$N_u \lambda \pi d_p (T_g - T_p) = R_c \quad (3.42)$$

$$\sigma \epsilon \pi d_p^2 (T_g^4 - T_p^4) = R_R \quad (3.43)$$

Yakıt için bilinen girdiler, yaklaşık (proximate) ve kesin (ultimate) analiz sonuçları ile elde edilen değerleridir. Bu bilgiler ışığında, uçucu madde ayrışması işlemi gerçekleştirilmektedir. Uçucu madde C, H, O, N, S elementleri ile temsil edilmektedir. Elementlerin, uçucu maddenin ayrışması işlemi ile türlere dönüştürülmesi gereklidir. Kütle dengesi denklemleri de aşağıda verilmektedir. Bileşiklerin katsayıların, her bir elementin kütlesi korunacak şekilde hesaplanması gerekir.

$$C = C_{CO} + C_{CH_4}$$

$$H = H_{H_2S} + H_{CH_4} + H_{H_2O} + H_{H_2}$$

$$O = O_{CO} + O_{H_2O} + O_{O_2}$$

$$N = N_{N_2}$$

$$S = S_{H_2S}$$

Bilinenler $\rightarrow 5$ (C, H, O, N, S)

Bilinmeyenler $\rightarrow 7$ (CO, CH₄, H₂S, H₂O, H₂, O₂, N₂)

Uçucu Madde $\rightarrow a$ CO + b CH₄ + c H₂S + d H₂ + e N₂ + f H₂O + g O₂ + h Katran(Tar)

($u, v, w, P, \rho, T, k, \varepsilon, \nu f$) 1, ($u, v, w, P, \rho, T, k, \varepsilon, \nu f$) 2,.....($u, v, w, P, \rho, T, k, \varepsilon, \nu f$) N

9 + 9 + ... bilinmeyenler ($u, v, w, P, \rho, T, k, \varepsilon, \nu f$)

7 + 7 + 7...denklemler (Süreklilik, momentum-x,y,z, enerji, ve türbülans denklemleri)

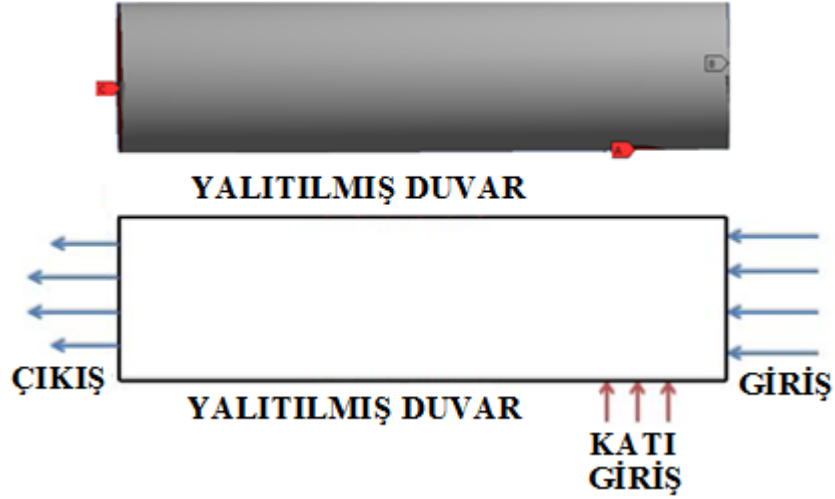
$\nu f_1 + \nu f_2 + \dots = I$ (Tür(species) hacim oranı denklemi)

$PV = mRT$ 1 (İdeal gaz denklemi)

$P_1 = P_2 = P_N$

9 bilinmeyen ve 8 diferansiyel 1 cebirsel denklem olmak üzere 9 denklem çözümünden oluşmaktadır. Tür sayısının artışına göre de denklem sayısı artış göstermektedir. Süreklilik, momentum, enerji ve genel skaler korunum denklemleri çözülmüştür. Çözülen denklemler N takım birleşik kısmi diferansiyel ve cebirsel denklemler den oluşmaktadır. Bu yukarıdaki denklemler ve bahsedilen modellerin birleşimi ile çözümleri gerçekleştirilmiş olup akış alanı , karışım karakteristikleri, sıcaklık alanı, tür (species) konsantrasyonları, partiküller ve çevreye zarar verebilecek atık ürünler ile ilgili

hesaplamalar yapılmıştır. Bu bölümdeki çalışmanın geometrik çizimi aşağıdaki şekil 3.21’de verilmektedir.



Şekil 3.21. Sınır değer probleminin (BVP) geometri üretimi.

Şekil 3.21'deki diyagram, duvar bölgelerine sıfır ısı akısı sınır şartının verildiği, katı partikül girişi ve gaz giriş bölümlerin gösterildiği dairesel kesit uzunluğu 0.25 m ve aksel uzunluğu 2 m olan bir gazlaştırıcıyı göstermektedir. Isıtılmış hava gazlaştırıcısının sol girişten sağa doğru gazlaştırıcı çıkışına akmaktadır. ANSYS FLUENT kodu bu Sınır Değeri Problemini (Boundary Value Problem-BVP) çözmek ve gazlaştırıcıdaki hız, sıcaklık, basınç ve gazlaştırma sonu elde edilen gaz bileşenlerinin dağılımını elde etmek için kullanılmıştır. Gazlaştırıcı için gaz giriş hızı ve katı partiküllerin giriş hızları ve yalıtımlı duvar gibi simülasyon için gerekli girdiler, belirli deneysel çalışmalardan elde edilmiştir (Couto ve ark. 2015). Aynı zamanda bu çalışma bir akışkan yatak gazlaştırıcı olarak düşünülüp modellenmiştir fakat herhangi bir akışkan yatak gazlaştırıcısının doğru deneysel verilerine ulaşamadığından dolayı simülasyon sonuçları doğrulama amaçlı olarak sürüklemeli tip gazlaştırıcı dan alınan deneysel veriler ile karşılaştırılmıştır.

Sınır değeri problemini çözmek için hesaplama alanını, sınır koşullarını ve malzeme özelliklerini belirlemek için aşağıdaki girişler gereklidir.

Gaz Girişi: $V_z = 15 \text{ m/s}$, $V_r = 0$, $V_\theta = 0$, $T = 1200\text{K}$

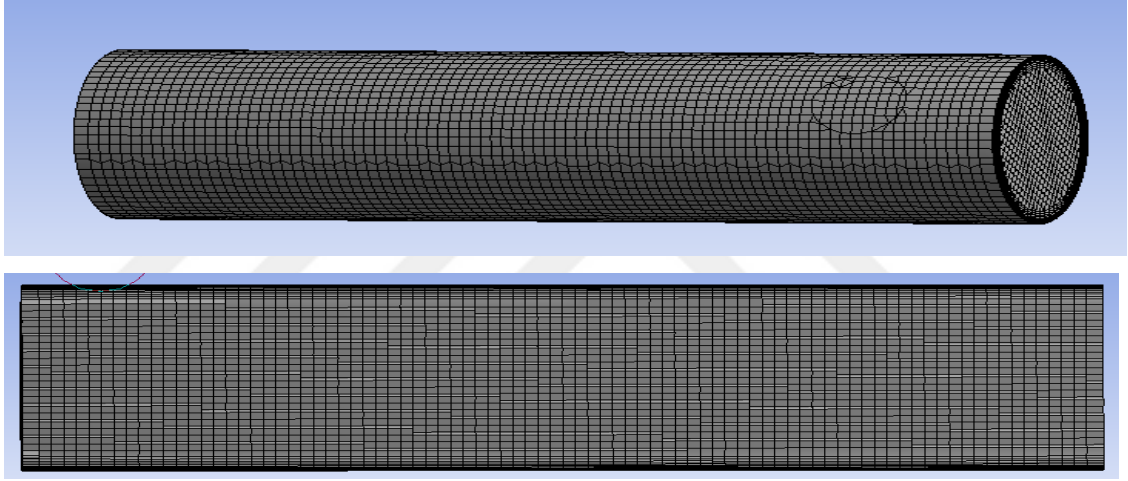
Katı Girişi: $V_r = 15 \text{ m/sn}$, $m = 0.1 \text{ kg/sn}$, $T = 300\text{K}$

Çıkış: Gösterge Basıncı = 0 Pa

Duvar: Duvar yalıtımlıdır, ısı akısı sıfıra eşittir. Duvar pürüzlülüğü sıfıra eşittir (ihmal edilmektedir). Duvar kalınlığı sıfıra eşittir (ihmal edilmektedir).

Çevre koşulları: Ortam Basıncı 101325 Pa

Ağ Üretimi: Şekil 3.22’ de görüldüğü üzere gazlaştırıcı hesaplama alanı için geliştirilen ağ yapısı sınır bölgesi ağları da dahil olmak üzere dörtgen prizma elemanlardan oluşmaktadır. Ağ yapısının eleman sayısı 64362 ve düğüm sayısı 66755 tir. Ağ yapısındaki maksimum çarpıklık sayısı (Skewness number) 0,87 dir. Genişlik yükseklik oranının (Aspect ratio) minimum değeri 1,1996 dır.



Şekil 3.22. Ağ tipi ve yapısı.

Sınır değer probleminin fiziksel tanımı: Sınır değeri problemini hesaplamak için çift hassasiyetli, 16 CPU paralel işlemli ve 8 GB RAM kapasiteye sahip bir kişisel bilgisayar kullanılmıştır. Şekil 3.23'te görüldüğü gibi, aşağıdaki bağımlı değişkenleri çözmek için silindirik koordinatlar (r, θ , z) kullanılmıştır.

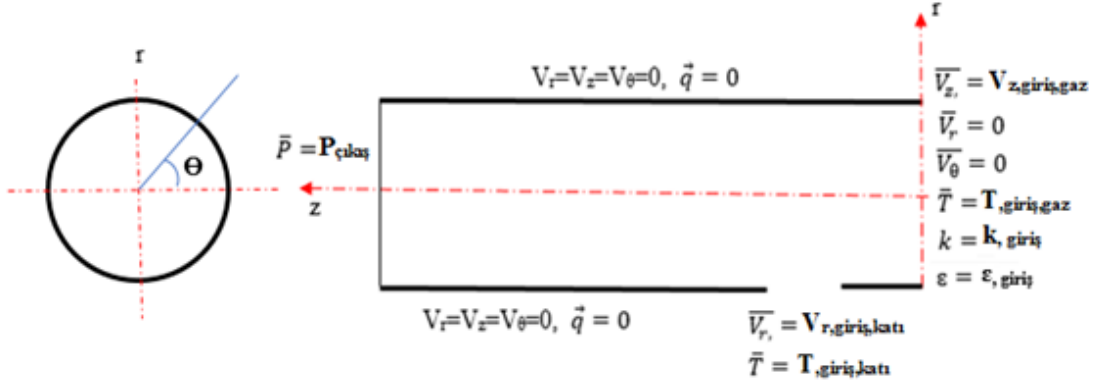
$$\begin{aligned} P &= P(r, \theta, z), & T &= T(r, \theta, z), & \vec{V} &= V_r \hat{e}_r + V_z \hat{e}_z + V_\theta \hat{e}_\theta \\ V_r &= v_r(r, \theta, z), & V_z &= v_z(r, \theta, z), & V_\theta &= v_\theta(r, \theta, z) \\ \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{V}) &= S_m \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$\bar{\rho} (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\nabla \bar{P} + \mu \nabla \cdot (\nabla \vec{V} + \nabla \vec{V}^T) - \frac{2}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot \vec{V}) + S_f + \text{Türbülans terimleri} \quad (3.45)$$

$$\bar{\rho}(\vec{V} \cdot \nabla) C_v \bar{T} = k \nabla^2 \bar{T} - \bar{P} (\nabla \cdot \vec{V}) + \mu \bar{\phi} + S_h + \text{Türbülans terimleri} \quad (3.46)$$

$$\bar{\rho} = \frac{\bar{P}}{R \bar{T}} \cong \frac{\bar{P}_{average}}{R \bar{T}} \quad (3.47)$$

$$\nabla(\bar{\rho} \bar{Y}_i \cdot \vec{V}) = \nabla \bar{J}_i + \bar{R}_i \quad (3.48)$$



Şekil 3.23. Sınır koşulları ve hesaplama alanı.

Reynolds ortalamalı ana denklemler, çok fazlı süreklilik denklemi 3.44, momentum, denklem 3.45, enerji denklemi 3.46, türler denklemi 3.47 ve ideal gaz denklemi 3.48 olmak üzere birlikte çözülmüştür. Türbülans modeli olarak kullanılan RANS tabanlı Realizable k-epsilon türbülans modeli ile birlikte (scalable wall function) ölçeklenebilir duvar foksasyonu kullanılmıştır. Gaz yoğunluğu modeli olarak sıkıştırılamaz ideal gaz kullanılmıştır. Çok fazlı modelleme için ayrık faz modeli (DPM) yaklaşımı kullanılmıştır. DPM, Lagrangian yöntemi olup katı faz modellemesi için kullanılmıştır. Sürekli faz gaz fazı olup Eulerian yöntemi ile modellenmiştir. DPM, adi diferansiyel denklemlerle tanımlanmıştır. Diğer yandan , sürekli faz, yukarıda bahsedilen doğrusal olmayan kısmi diferansiyel denklemlerle tanımlanmıştır. Bu nedenle, DPM kendi sayısal mekanizmalarını ve ayırıklaştırma algoritmasını kullanmaktadır. Ayrık faz değerleri sürekli faz ile çözülen ana kısmi diferansiyel denklemlerinde bulunan kaynak terimler ile birleştirilmiştir. Fazlar arası kütle değişimini hesaba katmak için kütle veya tür kaynakları kullanılmaktadır. Fazların momentum değişimi için ise momentum kaynağı kullanılmaktadır. İki faz arasında ısı transferi için ve buharlaşmadan kaynaklanan sıcaklık düşüşü için ise bir enerji kaynağı kullanılmaktadır.

Sürekli faz ile etkileşimi nedeniyle parçacık hareketi, yörüngesi ve özellikleri sürekli değişkenlik göstermektedir. Parçacık yörüngesi temelleri esas olarak sürüklenme kuvveti, kaldırma kuvveti ve yerçekiminden oluşmaktadır. Taşınım/difüzyon kontrollü model ile katı parçacıktaki nemin buharlaşması hesaplanmaktadır. Katı parçacık devolatilizasyonu, iki rakipli hız modeli kullanılarak modellenmiştir. Sabit karbon oksidasyon ve heterojen gazlaştırma reaksiyonları çok partiküllü yüzey reaksiyon modeli ile modellenmiştir. Işınım ile ısı transferi P1 ile modellenmiştir. FLUENT'teki P-1 modeli uygulaması, RTE'yi (Radiation Transport Equation) ortogonal bir küresel harmonik serisine genişleten genel P-n modelinin dört terimli bir kesmesidir. P1 modeli, gelen radyasyon (G) için basit bir difüzyon denklemini çözer. Bu değer, tüm yönlerdeki tüm ışınım yoğunluğunun toplamıdır. Denklem 3.49'da gösterildiği gibi difüzyon, emisyon ve absorpsiyon terimlerinden oluşmaktadır (ANSYS, 2020).

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial G}{\partial x_i} \right) + 4\alpha\sigma T^4 = \alpha G \quad (3.49)$$

Gazlaştırma işleminin kimyasal reaksiyon hızları aşağıdaki denklemler 3.52 ve 3.53 'de görüldüğü gibi Arrhenius denklemiyle tanımlanmıştır.

$$r_k = k_p C_{bio} \quad (3.50)$$

$$k_p = f T^n A \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.51)$$

Gaz karışımı ve katı partiküllerin malzeme özellikleri gaz karışımı için; Yoğunluk, sıkıştırılamaz ideal gaz dikkate alınarak hesaplanmaktadır. Viskozite 1,72e-05 kg /ms dir. Özgül ısı ise karıştırma kanunu(mixing-law) ile hesaplanmaktadır. Isı iletim katsayısı 0,0454 W/mK'dır. Kütle yayılımı 2,88e-05 m²/s dir. Refraktör indeksi 1 alınmıştır. Katı parçacıklar için ise; Yoğunluk 1300 kg/m³ tür. Özgül ısı 1000 J/kgK ve minimum çap 7e-05 m dir. Maksimum parçacık çapı = 0,0002 m. Ortalama çap 0,000134 m tür. Değişken partikül çapı sayısı 10 dur (Yani program hesaplamalarda 10 farklı partikül çapı kullanmıştır). Akışkan yatak malzemesi ise yine katı yakıt parçacıklarından ve aynı çaplarda seçilmiştir.

Çizelge 3.3 yukarıda bahsedilen denklemleri çözmek için gerekli katı partikül girdilerini göstermektedir. Sınır koşulları, geometrik boyutlar ve malzeme özellikleri, BVP'nin fiziksel özelliklerini tanımlamaktadır. Bu çizelge ile birlikte katı parçacıkların malzeme özellikleri ile ilgili bilgiler verilmektedir.

Çizelge 3.3. Katı parçacık yaklaşık ve kesin analizi.

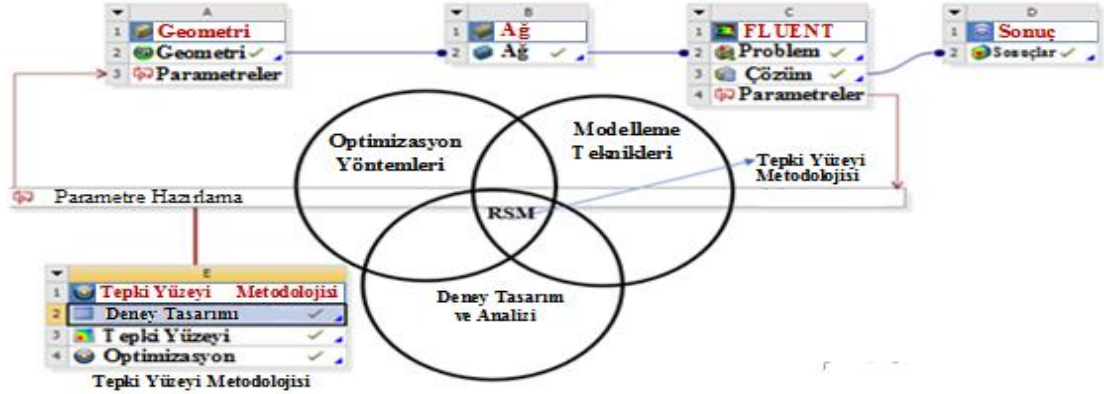
Yaklaşık Analiz	Yüzdesi	Kesin Analiz	Yüzdesi
Uçucu Madde (Volatile material)	0.5	C	0.822
Katı-Karbon	0.3	H	0.096
Kül	0.1	O	0.038
Nem	0.1	N	0.009
-	-	S	0.032

Sayısal Çözüm: Doğrusal olmayan BVP'ini çözmek için önceki analiz adımında tartışıldığı gibi sayısal çözüm esnasında ayırıklaştırma ve doğrusallaştırma hataları meydana gelmektedir. Çözüm menüsünde BVP'nin sayısal olarak çözülürken geliştirilebileceği birçok seçenek bulunmaktadır. Varsayılan ayarlar problemin sayısal çözülmesinde genelde yeterli olmaktadır. Ancak doğru çözüm için uygun yakınsama kriterleri açısından sayısal çözüm sırasındaki nümerik algoritmadaki değerlerin ve yöntemlerin probleme uygun olarak kullanılması gerekir.

Çözücü, BVP'ni ayırıklaştırma adı verilen bir işlemle bir dizi cebirsel denkleme dönüştürmektedir. Bu problemde ayırıklaştırma için ikinci dereceden geriye doğru (second order upwind) şema, ve interpolasyon ise için en küçük kareler yöntemi kullanılmıştır. Hata değerleri birinci dereceden geriye doğru şema ya göre daha düşüktür, fakat daha az kararlıdır. Sayısal problemi çözmek için yazılımın belirlediği yakınsama faktörleri (under relaxation factors) ve SIMPLE algoritması ile basınç-hız birleşimi sağlanarak çözümler yapılmıştır.

3.3.3. Tepki Yüzeyi Metodolojisi

Deney Tasarımı: Tepki yüzeyi metodolojisi (Response Surface Methodology-RSM) kullanımı ile optimizasyon problemini çözmek için ilk olarak hazırlanan analiz ve optimizasyon sistemi proje şemasına yerleştirilmeli ve tüm sistemler şekil 3.24'te görüldüğü gibi bağlanmalıdır.



Şekil 3.24. Optimizasyon adımı için proje şeması.

Bu adımda, her örnekleme noktası için ayrı bir CFD hesaplaması gerektiğinden, örnekleme noktalarının sayısı istatistiksel tekniklerle en aza indirilmiştir ve bu adımın örnekleri tasarım alanındaki belirli noktalardır. Bu adım, optimizasyon hesaplamasının en çok zaman alan adımıdır. Bu parametreler, kısıtlamalarıyla birlikte girdi parametreleri olarak adlandırılan tasarım değişkenleridir. Çıkış parametresi, çizelge 3.4'de gösterildiği gibi amaç fonksiyonudur.

Çizelge 3.4. Tasarım değişkenleri ve çıkış parametresi.

GİRİŞ PARAMETRESİ	GİRİŞ PARAMETRESİ DEĞERİ
P1-Gazlaştırıcı uzunluğu	2 m
P3-Gazlaştırıcı çapı	0,25 m
P4- Katı parçacık giriş yeri yarıçapı	0,013228 m
ÇIKIŞ PARAMETRE	ÇIKIŞ PARAMETRESİ DEĞERİ
P2- Çıkış CO kütle oranı	0,3229

Artık gazlaştıracının çapı ve uzunluğu, çizelge 3.4 ve 3.5'te gösterilen tasarım kısıtlarına olarak uygun şekilde seçilmiştir. Optimizasyon yöntemi, optimizasyon algoritmasına göre en iyi örnekleme noktaları olduğunu düşündüğü noktaları seçmektedir. Bu örnekleme noktalarının mutlaka doğrusal aralıklarla yerleştirilmediği unutulmamalıdır. Çözücü bu aşamada bazı zaman alıcı ters matris hesaplamalarını gerçekleştirmektedir.

Çizelge 3.5. Tasarım değişken kısıtları.

Parametre	Minimum Değeri	Maksimum Değeri
Gazlaştıracı uzunluğu (L)	1,8 m	2,2 m
Gazlaştıracı çapı (D)	0,225 m	0,275 m
Katı parçacık giriş yeri yarıçapı (R)	0,01190m	0,01455 m
Gaz giriş hızı (V)	0 m/sn	10 m/sn

Tepki Yüzeyi: Bu adımda çözücü, önceki adımda seçilen ayırık örnekleme noktalarının interpolasyonu ile bir yüzey sağlamıştır. Bu işlem tasarım uzayında alanın bir modelini oluşturmak olarak düşünülebilir. Tepki yüzeyi, gazlaştıracı çapının, gazlaştıracı uzunluğu ve katı parçacık giriş yeri yarı çapının bir fonksiyonu olarak CO çıkış kütle oranının bir grafiğini görerek tamamlanmıştır.

Optimizasyon Kurulumu: Bu noktada çözücüye, çizelge 3.6'da gösterildiği gibi tasarım değişkenleri kısıtlamalarına bağlı kalarak amaç fonksiyonunun minimize veya maksimize edilmesi gerektiği söylenmektedir.

Çizelge 3.6. Optimizasyon çalışması.

Minimum P3	Amaç Minimum P3
Makimum P2	Amaç Maksimum P2
MOGA Optimizasyon Yöntemi	MOGA metodu, çok amaçlı genetik algoritmalar (Multi Objective Genetic Algorithms)
Kurulum	Başlangıçta 1000 örnek, yineleme başına 200 örnek oluşturulması ve en fazla 20 yinelemede üç en iyi aday bulunması
Durum	1511 değerlendirme adımı sonrası yakınsamıştır

Optimizasyon çalışması tamamlandıktan sonra sonuçları görüntülendiğinde optimizasyon çalışması çizelge 3.7'ye benzer sonuçlar vermiştir.

Çizelge 3.7. Optimizasyon aday değerleri.

Aday Değerleri	Aday değer 1	Aday değer 2	Aday değer 3
P3-Gazlaştırıcı çap (m)	 0,22501	 0,22502	 0,22503
P2- Çıkışta CO kütle oranı	0,3229	0,3229	0,3229

Optimizasyon algoritması, daha önce bahsedildiği gibi, nihayetinde problem kısıtlamalarını karşılayan üç aday nokta bulmaktadır. Bu adımdaki bu optimizasyon hesaplaması çok hızlı olmaktadır çünkü optimizasyon aracı tepki yüzeyi modeli grafiklerini kullanmaktadır. Burada yapılan işlemlerde bir matris ters çevirme yaparak optimizasyon modelini çözmemektedir. Tepki yüzeyi modeli, ilk analiz sonuçlarına göre parametreleri yaklaşık olarak hesaplamaktadır. Sonraki adımda sadece seçilen uç adayın değerlerini modelin kısıtlamalarını doğrulamak için çözmektedir.

3.3.4. Doğrulama ve onaylama

Sayısal hataların seviyesi doğrulama (validation) ve onaylama (verification-iyileştirme) adımıyla kontrol edilmektedir. Ağ yapısı onaylama denklemleri doğru çözmek anlamına gelir. Onaylamanın amacı sayısal çözümün diferansiyel denklemin tam çözümüne Δx

$\rightarrow 0$ ve $\Delta t \rightarrow 0$ olarak yakınsadığını göstermektedir. Onaylama yaklaşımı, problemi farklı Δx ve Δt ile çözmek ve karşılaştırmaktır. Bunun için ilk etapta Ağ Yakınsama Endeksi (Grid Convergence Index-GCI) kullanılmıştır.

Tutarlı bir sayısal analiz, ağ çözünürlüğü sıfıra yaklaştıkça gerçek sonuca yaklaşan bir sonuç sağlayacaktır. Böylece, ayrık denklemler gerçek denklemlerin çözümüne yaklaşacaktır. Celik ve ark. (2008) ağ yakınsama çalışmalarının sonuçlarını tutarlı bir şekilde raporlamak ve çözümün ağ yakınsaması üzerinden bir hata bandı sağlamak için bir ağ yakınsama indeksi kullanımını GCI önermektedir. GCI iki ağ seviyesi kullanılarak hesaplanabilir. Ancak, yakınsama sırasını doğru bir şekilde tahmin etmek ve çözümlerin asimptotik yakınsama aralığında olup olmadığını kontrol etmek için üç seviye (kaba, orta, ince) önerilmektedir.

Adım 1: Ağ yapısından seçilen bir hücre veya eleman boyutu h tanımlanır. Örneğin, üç boyutlu hesaplamalar için,

$$h = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta A_i) \right]^{0.5} \quad (3.52)$$

ΔA_i alanı hücrenin alanıdır. N ise toplam hücre sayısıdır.

Adım 2: Kritik bir değişkeni hesaplamak için üç farklı ağ yapısı oluşturulmalıdır. Benzer geometrilere sahip hücreler tercih edilir. Doğruluk sırası (p) ve ağ iyileştirme faktörü (r) daha sonra aşağıdaki denklemler kullanılarak tahmin edilir. N hücre veya eleman sayısıdır. r ise ağ iyileştirme oranıdır.

$$r = \left(\frac{N_1}{N_2} \right)^{0.5} \quad (3.53)$$

Adım 3: p değeri aşağıdaki denklem ile hesaplanır.

$$p = \frac{\ln\left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1}\right)}{\ln(r)} \quad (3.54)$$

Ağ yakınsama indeksi, Richardson'un Ekstrapolasyonu ile bağlantılı olarak hesaplamadaki hata miktarını belirleme yöntemidir. Bu işlem ağ çözümleme çalışmasının önemli bir parçasıdır ve ayrıca hesaplama doğrulaması için anahtar adımdır. GCI aşağıdaki denklem ile formüle edilmiştir.

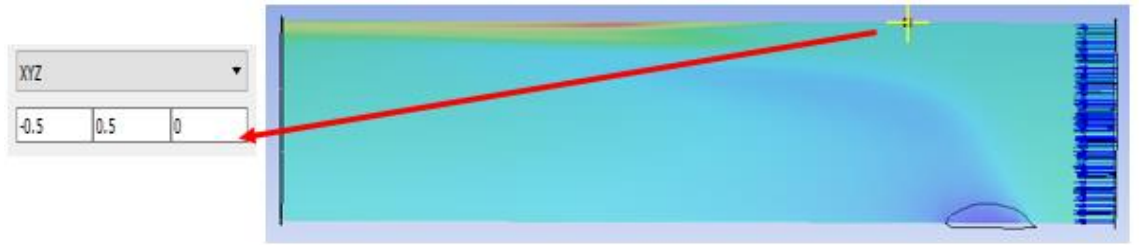
$$GCI = \frac{F_s}{r^p - 1} \left| \frac{f_2 - f_1}{f_1} \right| \%100 \quad (3.55)$$

p, hesaplama yönteminin sırasıdır.

r, ağ iyileştirme oranıdır.

Fs ise bir güvenlik faktörüdür.

Yukarıda bahsedildiği gibi, GCI, hesaplanan çözümün göreceli ayrıklaştırma hatasının bir ölçüsüdür. Benzer şekilde, sıcaklık (T) bir akış parametresi olarak kullanılır. Şekil 3.25 ve çizelge 3.8'de gösterildiği gibi sıcaklık daha sonra farklı üç hücre sayısı için aynı yerden ölçülmüştür.



Şekil 3.25. Ölçüm alınan nokta.

Çizelge 3.8. Üç farklı ağ sayısı için ölçülen sıcaklık değerleri

Eleman Sayısı	Ağ Aralığı Faktör (Grid Spacing)	Sıcaklık, [K]
1 (Sık), 439509	1	1226.37 K, f1
2 (Orta), 64362	2	1244.35 K, f2
3 (Kaba),16999	4	1316.41 K, f3

Çizelge 3.8 aynı zamanda ağ aralığı azaldıkça sıcaklık değerinin asimptotik sıfır ağ aralığı değerine yaklaştığını da göstermektedir. Yukarıda gösterildiği gibi bu ölçümler yapıldıktan sonra, p ve r aşağıdaki gibi hesaplanmaktadır.

$$p = \ln [(1316,41 - 1244,35) / (1244,35 - 1226,37)] / \ln (2,61) = 1,43$$

$$r = (439509/64362) 0,5 = 2,61$$

4. Adım: Aşağıdaki yaklaşık hataları hesaplayın:

Yaklaşık bağıl hata;

$$e_a^{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right| \quad (3.56)$$

Tahmin edilen göreceli hata:

$$e_{extp}^{21} = \left| \frac{\phi_{extp}^{21} - \phi_2}{\phi_{extp}^{21}} \right| \quad (3.57)$$

GCI değeri için; Hesaplamalar sonunda aşağıdaki sonuçların elde edildiği kontrol edilmelidir. Asimptotik aralık değeri yaklaşık 1 olmalıdır.

$$GCI_{ince}^{21} = \frac{1.25 e_a^{21}}{r_{21}^{p-1}} \quad (3.58)$$

P'yi tahmin etmek için üç ağ kullanıldığından güvenlik faktörü $F_s = 1.25$ olarak seçilmiştir. İnce ağ çözümü için ağ yakınsama indeksi şimdi hesaplanacaktır.

Ağ 1 ve 2 için GCI:

$$GCI_{12} = 1.25 | (1244.35 - 1226.37) / 1226.37 | / (1,432,61-1) \% 100 = \% 1,187351397$$

Ağ 2 ve 3 için GCI:

$GCI_{23} = 1.25 \mid (1316,41 - 1244,35 / 1244,35 \mid / (1,432,61 - 1) \% 100 = 4,689891589\%$
 Şimdi çözümlerin asimptotik yakınsama aralığında olup olmadığı kontrol edilecektir;
 Çoğu sayısal çalışmada, $GCI_{23} / (rp \ GCI_{12})$ oranı neredeyse bire eşitse, ağ yeterince iyi kabul edilir ve sonuçlar yakınsar.

$$4,689891589 / (1,432,61 \ 1,187351397) = 1,55$$

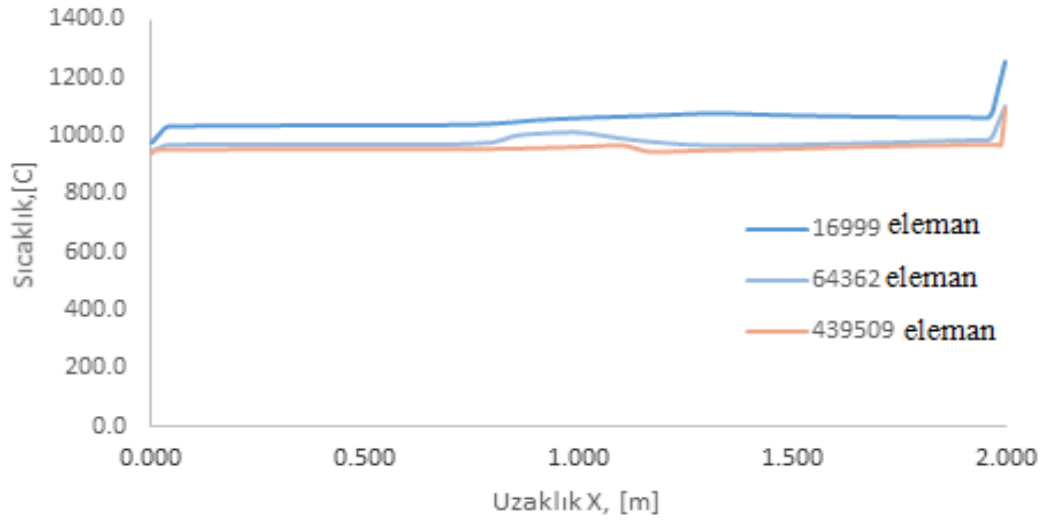
bu yaklaşık olarak bire eşit olduğunu göstermektedir ve asimptotik yakınsama aralığı içindeki çözüm olduğunu teyid etmektedir. Bu çalışma, Sıcaklığın% 4,689891589 veya% 1,187351397'lik bir hata bandı ile 1238,02K'ya eşit olduğu tahmin edildiği söylenebilir. Hesaplama, Richardson Ekstrapolasyonu kullanılarak yapılmıştır.

$$Ph = 0 = 1226,37 + (1244,35 - 1226,37) / (1,432,61 - 1)$$

$$1226,37 + 11,64905706 = 1238,02K$$

Doğrulama ve onaylama işlemlerinin, herhangi bir sayısal yöntemi kullanırken, yapılması büyük önem taşımaktadır. Bu sınır değeri probleminin analitik bir çözümü bulunmamaktadır. Dolayısıyla sonuçlar teori ile karşılaştırılmaz. Bu nedenle, ilk işlem olarak yukarıda detaylıca açıklandığı gibi, GCI işlemi ağ sayısının artırılması ile nümerik çözümün yakınsayıp yada yakınsamadığını onaylama işlemidir. GCI işleminden sonra diğer onaylama ve doğrulama yöntemlerin bu problem için uygulanmasına devam edilmiştir.

Sorunun çözümünün kullanılan ağ çözünürlüğüne bağlı olmadığından emin olmak için ağdan bağımsızlık çalışması yapılmıştır. Element sayısı artırıldığında sıcaklık yüzde değişimi birbirine çok yaklaşmaktadır. Bu nedenle, şekil 3.26'da da görüleceği üzere, orta ağ, 64362 tüm simülasyon uygulamaları için seçilmiştir. Çünkü ince ağ 439509 ve orta ağın sıcaklık değerleri yalnızca yüzde birden daha az değişim göstermektedir. Grafik sıcaklık değerlerinin eleman sayısının artmasıyla çok az bir değişim gösterdiğini sergilemektedir.



Şekil 3.26. Ağ iyileştirme çalışması.

Ağdan bağımsızlık çalışmasından sonra, optimizasyon yöntemini doğrulamak amacı ile ayrıca optimizasyon sonuçları, farklı optimizasyon yöntemleri kullanılarak elde edilen sonuçlar ile karşılaştırılarak doğrulanmıştır. Optimizasyon metodun doğrulamaı CFD kodunda bulunan dört farklı optimizasyon yönteminin her biri kullanılarak yapılmıştır. Bu çalışmanın optimizasyon hesaplamaları için MOGA optimizasyon yöntemi kullanılmıştır. Aşağıdaki çizelge 3.9'da görülebileceği gibi, dört yöntemin sonuçları arasında önemli bir fark olmadığı sonucuna ulaşılmıştır.

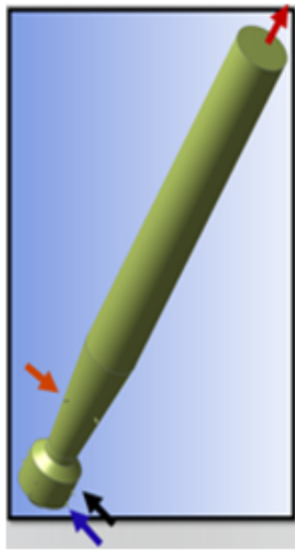
Çizelge 3.9. Optimizasyon yöntemi doğrulaması

Optimizasyon yöntemi	Giriş gaz hızı	Gazlaştırıcı uzunluğu	CO çıkış kütle oranı
MOGA	4,3921 m/sn	2,199 m	0,34601
NLPQL	4,4398 m/sn	2,2 m	0,34982
Screening	6,5577 m/sn	2,199m	0,34959
MISQP	4,4398 m/sn	2,2 m	0,34982

Optimizasyon yönteminin doğrulanmasından sonra onaylama ve doğrulama ile ilgili son işlem ise, geliştirilen modelin ve modelde kullanılan ana denklemlerin doğrulama

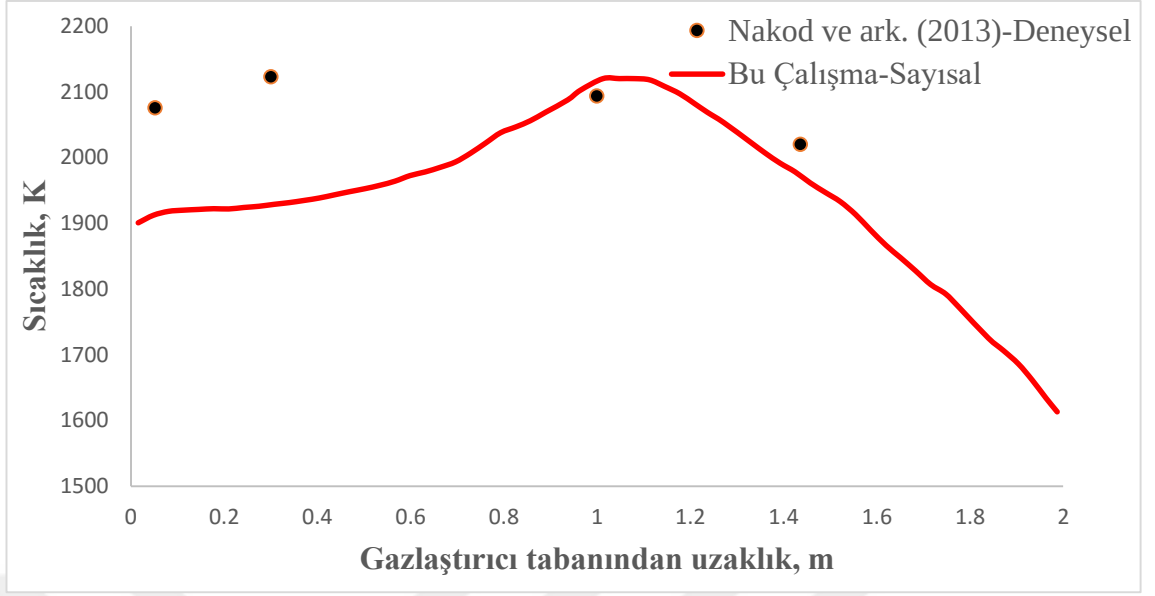
işlemidir. Doğrulama, doğru denklemleri çözmek anlamına gelir. Doğrulama amacı, diferansiyel denklemlerin problemin fiziğini doğru bir şekilde modellediğini göstermektir. Doğrulama yaklaşımı aynı zamanda hesaplamalı çözümleri deneysel sonuçlarla karşılaştırmaktır. Bu nedenle,

Bu akışkan yatak gazlaştırma çalışmasında Nakod ve ark. (2013)'lerinin bir sürüklemeli tip gazlaştırma deney seti ve deneysel verileri kullanılmış ve şekil 3.27'de gösterilmiştir. Doğrulama çalışmasında Nakod ve ark. (2013)'larındaki aynı sınır koşulları ve geometri kullanılmıştır. Şekil 3.28'de görüleceği üzere, deneysel çalışma sonuçların bu sayısal çalışma sonuçları ile uyumlu olduğu sonucuna varılmaktadır. İki aşamalı, yukarı akışlı, prototip sürüklemeli gazlaştırıcı, 200 TPD MHI kömür gazlaştırıcı isimli test düzeneği kullanılmıştır. Çalışma basıncı 2,70 MPa'dır. Sınır şartları; Yanma brülörleri; Hava → 4 brülörden toplam 4,708 kg / sn., 521K, Kömür → 0,472 kg / sn. Char brülörleri Hava → 4 brülörden toplam 4,708 kg / sn., 521K, Kömür → 1,112 kg / s. İndirgeyici brülörleri; Hava → 4 brülörden toplam 1,832 kg / sn., 521K, Kömür → 1,832 kg / sn. Çıkış → Basınç çıkışı



Yaklaşık Analiz	Yüzde (%)	Kesin Analiz	Yüzde (%)
Uçucu Madde	46.80	C	78.25
Sabit Karbon	35.80	H	6.50
Kül	12.10	O	13.90
Nem	5.30	N	1.13
HHV, J/kg	2.704e+07	S	0.22

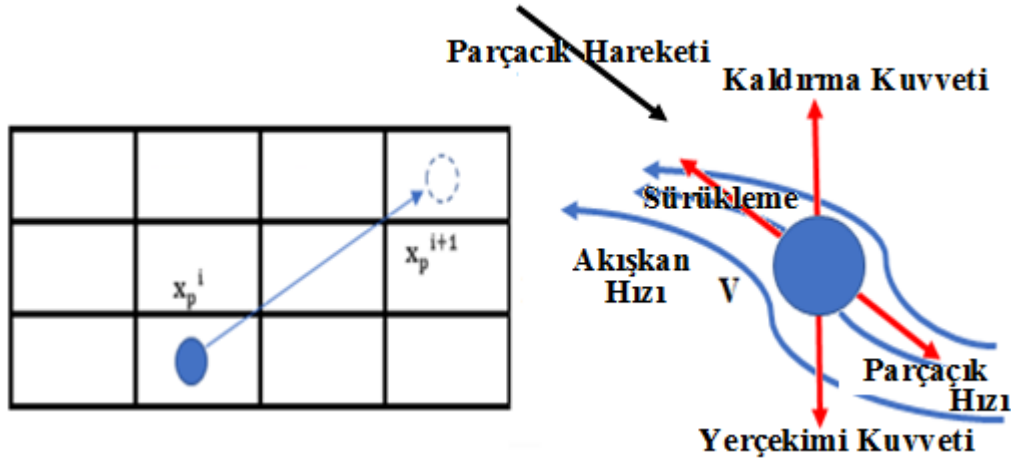
Şekil 3.27. Doğrulama test geometrisi ve sınır koşulları (Nakod ve ark. 2013).



Şekil 3.28. Şimdiki çalışma ile doğrulama sonuçları (Nakod ve ark. 2013).

3.4. Büyük Girdap Simülasyonu (LES) ile Modelleme

Önceki bölümlerde uygulanan farklı modelleme teknikleri olduğu üzere, bu bölümde ise gazlaştırma problemleri için Büyük Girdap Simülasyonu (LES) modelleri uygulanması ile çözümler yapılmıştır. Çok fazlı akış çözücüsü olarak parçacık dağılımını modellemek için lagrangian yaklaşım bir önceki bölümde olduğu gibi tekrar burada da kullanılmıştır. Şekil 3.29'da gösterildiği gibi partikülün aldığı yolun eğrisini çıkarmak için 3.59, 3.60 ve 3.61 denklemlerini içeren Euler açık zaman adımlaması kullanılmıştır. LES ile yapılan çözümler için zaman terimininde denklemler içerisinde yer alması gerekmektedir. Problem başlangıç-sınır değer problemi olarak düşünülüp çözümler gerçekleştirilmiştir.



Şekil 3.29. Lagrangian parçacık izleme ve ayrıklaştırma şeması.

$$\frac{dx_p}{dt} = V_p \quad (3.59)$$

$$\frac{x_p^{i+1} - x_p^i}{\Delta t} = V_p^i \quad (3.60)$$

$$x_p^{i+1} = x_p^i + V_p^i \Delta t \quad \text{and } V_p \neq V \quad (3.61)$$

Parçacığın ağırlık kuvveti olduğundan V_p 'yi hesaplamak için kuvvet dengesi kullanılmalıdır. Kuvvet dengesi kütlesi olan bir katı parçacık için denklem 3.62 ile yani Newton'un ikinci yasası ile hesaplanır.

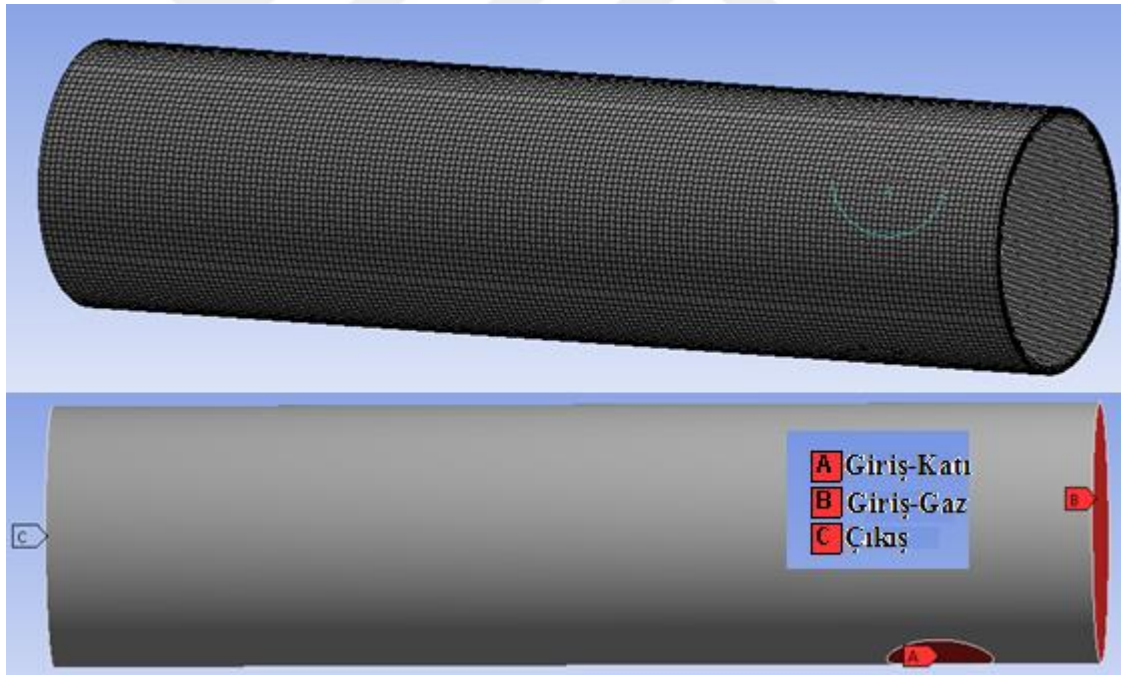
$$F = m_p a \quad (3.62)$$

$$F = m_P \frac{dV_P}{dt} \quad (3.63)$$

Tüm kuvvetler aşağıdaki denklem içerisinde yazılmıştır.

$$F_{Diğer} + F_{Kaldırma} + F_{Sürüklenme} = m_P \frac{dV_P}{dt} \quad (3.64)$$

Sıcak gaz içerisinde hareket eden parçacıkları denklemleri ile birlikte tanıttıktan sonra, LES modelleme ile ilgili hesaplama alanı üç boyutlu kararsız (Geçici rejim-transient) akış olarak aşağıdaki şekil 3.30'da görüldüğü gibi bir gazlaştırıcı olarak düşünülerek hazırlanmıştır. LES ile yalnızca zamana bağlı simülasyonlar ile çözüm elde edilebilir. LES modelleri kullanıldığında doğru sonuçlar elde etmek için daha ince ağ ve çok küçük bir zaman adımı kullanımı gerekmektedir. Hesaplama alanı, ağ yapısı, hücre sayısı aşağıdaki şekil 3.30'da gösterilmektedir.

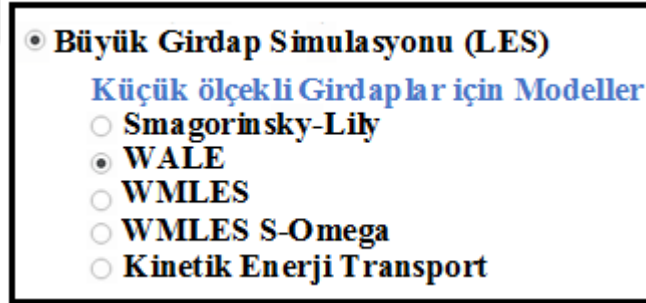


Şekil 3.30. Geometri-ağ-sınır koşulları.

Liu (2014) doktora tezinde, LES yöntemlerinin, gelecekteki önerilerde RANS tabanlı türbülans modellerini kullanmak yerine, CFD modellerinin doğruluğunu artırmak için gazlaştırma problemlerine uygulanması gerektiğini belirtmiştir. Chen ve Ghoniem (2012)

de LES türbülans modellerinin, RANS tabanlı türbülans modellerine kıyasla CFD simülasyon çözümlerini daha doğru tahmin ettiğini belirtmişlerdir. Bu literatür bilgileri ışığında da bu bölümde LES modeli gazlaştırma problemlerine adapte edilmiştir.

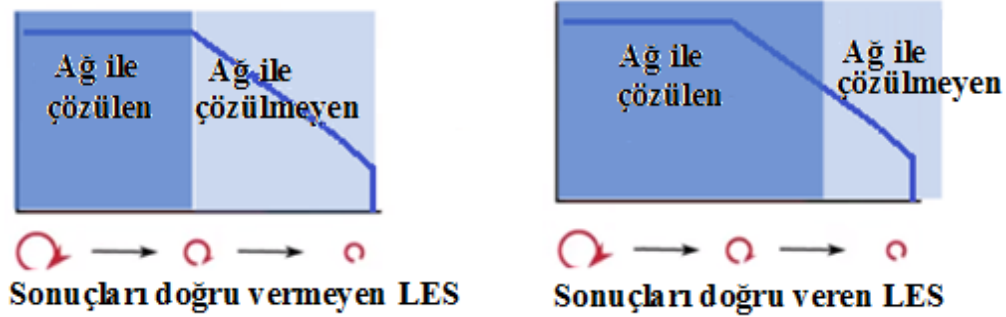
Bu LES türbülans modellemesinde anlık hız $V(r, \theta, z, t)$, filtrelenmiş bir bileşen $\bar{V}(r, \theta, z, t)$ ve bir geri kalan(residual) bileşen $\hat{V}(r, \theta, z, t)$ olarak ayrıştırılmıştır. Filtrelenmiş hız bileşeni, büyük ölçekli kararsız hareketleri temsil etmektedir. Büyük ölçekli türbülanslı hareketler doğrudan temsil edilirken, küçük ölçekli türbülanslı hareketlerin etkileri modellenmiştir. Filtrelenmiş hız için filtrelenmiş denklemler yine Navier-Stokes denklemlerinden elde edilmektedir. Momentum denklemindeki doğrusal olmayan taşınım terimi, artık (residual) hareketlerden kaynaklanan bir artık gerilim tensörünü ortaya çıkarır. Bu artık gerilim tensörü çözüm için kapanması gereklidir ve bu nedenle küçük ölçekli girdaplar için modelleme gerektirmektedir. Sonuçlarını karşılaştırmak için bu bölümde basitten karmaşıklığa kadar LES modelleri kullanılmıştır. Şekil 3.31'de gösterildiği gibi, bu çalışmada kullanılan LES türbülans modelleri aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.31. LES türbülans modelleri.

LES $\bar{V}(r, \theta, z, t)$ 'yi çözen ve ortalama ve kök ortalama kare (r.m.s.) hızları gibi istatistikleri toplayan zamana bağlı bir simülasyondur. Başlangıçta LES model simülasyonlarını, sadece ortalama hız için çözen k-ε türbülans modeli ile karşılaştırmak için istatistiksel olarak durağan bir duruma ulaşılması gerekmiştir. Sınırlı ikinci dereceden zamana bağlı (Bounded Second-Order transient) formülasyon kullanılmıştır. LES enerji içeren girdapları çözmek için yeterince ince ağ ve küçük zaman adımlı boyutları gerektirmektedir. Yüksek Re sayısı akışlarda duvara yakın bölgeyi çözmenin maliyeti de

oldukça yüksektir. Ağ çözünürlüğü, Şekil 3.32'de gösterildiği gibi, türbülanslı kinetik enerjinin doğrudan çözülen kısmını belirlemektedir.



Şekil 3.32. Büyük ve küçük girdapların LES çözümlemesi.

Hız dalgalanma algoritması izgesel sentezleyiciye (spectral synthesizer) ayarlanmıştır (bu girişteki hızı dalgalandırmak için gereklidir). Türbülans spesifikasyon yöntemi de yoğunluk ve türbülans şiddeti olarak % 10 ve 0,0127 m giriş sınır şartı olarak ayarlanmıştır. Reynolds-Gerilme spesifikasyon yöntemi ise şekil 3.33'te gösterildiği gibi K veya türbülans şiddeti olarak ayarlanmıştır. Aynı zamanda şekil 3.33 ten parçacık ve gaz parametreleri için giriş sınır şartı değerleri görülebilmektedir.

Parçacık Çeşidi	
• Yanıcı	
Malzeme	Parçacık Çapı Dağılımı
Kömür-mv	Rosin rambler
Buharlaşma Türü	Dülatilasyon Türü
Su Buharı	Mv-uçucu madde

Değişken	Değeri
Sıcaklık	300 K
Başlama Zamanı	0.05 sn
Bitiş Zamanı	1800 sn
Hızın Şiddeti	15 m/sn
Akış Debisi	0.1 kg/sn
Minimum Çap	7e-05
Maksimum Çap	0.0002 m

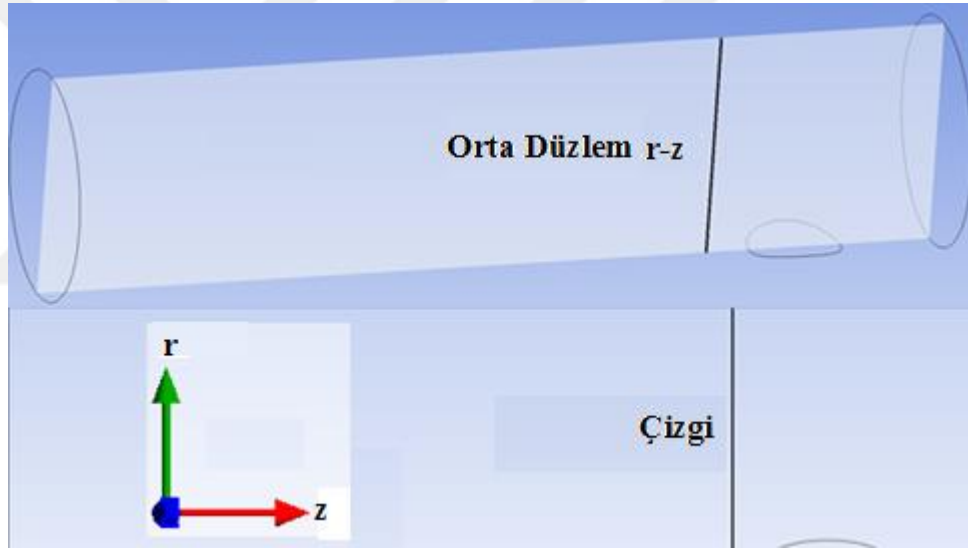
☒ Giriş Yüzeyine Dik Yönde Püskürtme

- **Hız Giriş**
- **Gaz Karışımı**
- **Hız Yönü**
- **Sınır Yüzeyine Dik**
- **Hız Şiddeti**
- **15 [m/sn]**
- **Hız Dalgalanma Algoritması**
- **İzgesel Sentezleyici**
- **Türbülans**
- **Tanımlayıcı Yöntem**
- **Şiddet ve Hidrolik Çap**
- **Hidrolik Çap**
- **0.0127 [m]**
- **Reynolds Gerilmesi Tanımlayıcı Yöntem**
- **K yada Türbülans Şiddeti**
- **Türbülans Şiddeti**
- **% 10**

Hız Dalgalanma Algoritması: Fluctuating Velocity Algorithm
İzgesel Sentezleyici: Spectral Synthesizer

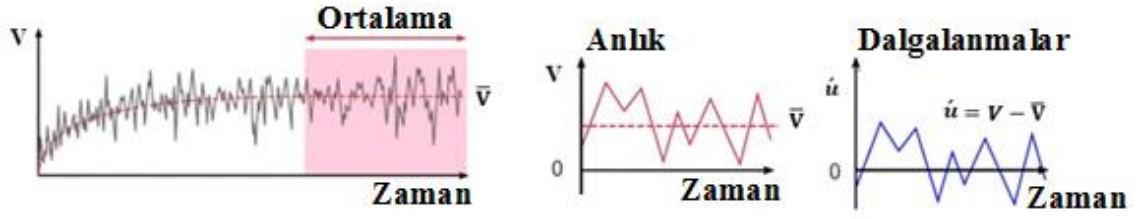
Şekil 3.33. Giriş hızı değerleri.

Sayısal hesaplamalardan sonra, elde edilen sonuçlar, şekil 3.34'te gösterildiği üzere orta düzlem r - z kontur grafikleri ve bir dikey çizgiden alınan çizgisel grafikler ile görselleştirilmiştir. Daha önce belirtildiği gibi, bir LES simülasyonunda iki tür hız vardır. Bunlar anlık hız ve ortalama hızlardır. Anlık hız etki alanında herhangi bir andaki gerçek hızdır. Zaman ortalamalı ortalama hızı elde etmek için istatistikler değerlerin toplanması ile belirlendiği daha önce belirtilmişti. Anlık eksenel hızın ve ortalama eksenel hızın değerlerine bir orta düzlem ile kontur grafikleri şekline bakılmıştır. LES simülasyonundan elde edilen ortalama hız, k - ϵ RANS tabanlı türbülans modelinden elde edilen ortalama hız ile karşılaştırılmıştır. Farklı türbülans modellerinden elde edilen ortalama hızlar, şekil 3.34'te gösterildiği gibi, radyal mesafenin tersine belirli bir çizgideki değerlerin grafikleri ile bir arada karşılaştırılmıştır.



Şekil 3.34. Orta z - r düzleminin ve çizgisinin görünümü.

Bu CFD kodu anlık hızı (V) hesaplar ve zaman ortalamalı ortalama hız ($\bar{V}$) istatistiksel ortalama yöntemiyle hesaplanmaktadır. Zamana bağlı olan bu simülasyon ortalama alınamayan ilk bölgeyi geçtikten sonra, ortalama hız değeri şekil 3.35'te gösterildiği gibi istatistiksel olarak kararlı bölgeden alınmaktadır.



Şekil 3.35. Anlık, ortalama ve dalgalanan hız.

LES modelleri şekil 3.36'da gösterildiği gibi RANS modellerinden k-ε modeli ile karşılaştırılmıştır. RANS türbülans modellerinde, momentum denklemlerini kapatmak için bir türbülans / girdap viskozitesi (μ_t) hesaplanmalıdır. Türbülans veya girdap viskozitesi, türbülans dalgalanmaları tarafından sağlanan ilave karıştırmayı açıklamaktadır. Realizable k-ε modeli ve duvara yakın bölümleri hesaplamak için geliştirilmiş duvar fonksiyonu seçilmiştir. Türbülansın çözümünü yapmak için kullanılan denklemler ise aşağıda gösterilmiştir.

Viskoz Model

- ☐ Viskoz olmayan akış
- ☐ Laminer akış
- ☐ Spalat-Allmaras (1 denklem)
- ☒ k-epsilon (2 denklem)
 - ☐ Standart
 - ☐ RNG
 - ☒ Realizable
- ☐ k-omega (2 denklem)
- ☐ Geçiş bölgesi k-k1-omega (3 denklem)
- ☐ Geçiş bölgesi SST (4 denklem)
- ☐ Reynolds Gerilme (7 denklem)
- ☐ SAS
- ☐ DES
- ☐ LES

Yakın Duvar Yaklaşımı

- ☐ Geliştirilmiş Duvar Yaklaşımı

Şekil 3.36. RANS tabanlı viskoz model paneli.

$$\frac{\partial(\rho V)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V V) = -\nabla P + \nabla \cdot \left[(\mu + \mu_t) ((\nabla V) + (\nabla V)^T) \right] - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot V) I + \rho g \quad (3.65)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k V) = \nabla \cdot \left[(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \nabla k \right] + P_\varepsilon - \rho \varepsilon \quad (3.66)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varepsilon V) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} P_k \frac{\varepsilon}{k} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.67)$$

$$\mu_t = C_\mu \frac{\rho k^2}{\varepsilon} \quad (3.68)$$

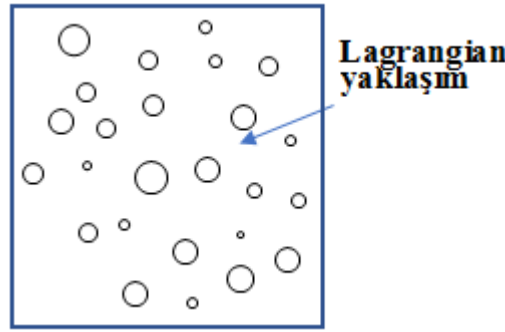
$$C_\mu = 0.09 \quad (3.69)$$



3.5. DDPM, Makroskopik(MPM) ve PBM ile Modelleme

Üç Boyutlu Akışkan Yataklı Gazlaştırma için Yoğun Ayırık Faz Modelinin Geliştirilmesi(DDPM)

Euler-lagrangian çerçevesi (DDPM), Euler-euler yaklaşımının(KTGF) ve yalnızca Lagrangian çerçevesinin(DPM) hesaplama limitleri göz önünde bulundurulduğunda, hız, basınç, sıcaklık ve gaz bileşiminin daha doğru değerlerini hesaplamak için kullanılabilir. DPM yöntemi katıların düşük hacimli oranları için sadece daha iyi bir yaklaşımdır ve katı hacim oranı ihmal edilmiştir. Parçacıkların birbiri ile etkileşimi göz ardı edilmiştir ve şekil 3.37'de gösterildiği gibi akışkan hareketini etkileyemezler.

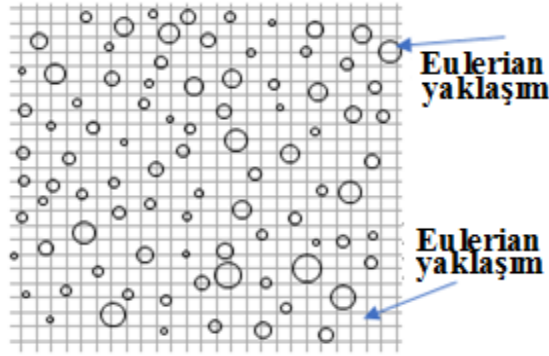


Şekil 3.37. Lagrangian ayırık faz modeli (DPM).

Dolayısıyla, Navier-Stokes denklemlerinde hacim oranı hesaplanmaz. Parçacığın kuvvet dengesi denklemi, ayırık bir katı faz parçacığı ile birleştirilmiştir ve her parçacığın hesaplama alanı içerisindeki aldığı yol bu şekilde tahmin edilmiştir. Katı parçacıklar, sürüklenme kuvveti nedeniyle doğrudan yalnızca gaz fazıyla etkileşime girmektedir. Bu model kullanımında katı parçacıkların çarpışmaları hesaba katılmamıştır. Isı transferi yalnızca katı parçacıklar ile gaz fazı arasında olmaktadır. Katı parçacıklar arasındaki ısı transferi ihmal edilmektedir.

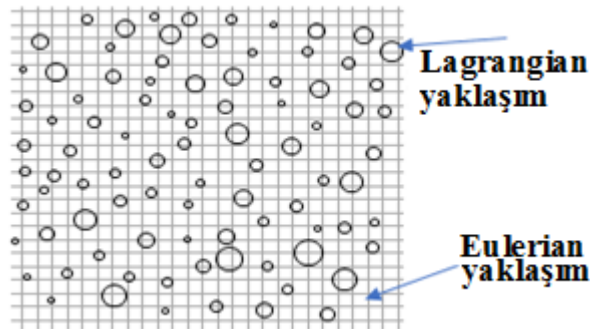
Euler-granüler yöntem (KTGF) sadece genel akış karakterine işaret etmektedir. Hacim oranı da hesaplanmaktadır. Çok fazlı bir akış yöntemidir ve Navier Stokes denklemleri katı parçacıklar ve gaz fazı için çözülmüştür. Parçacık yüzey reaksiyonları hesaplamada

bulunmamaktadır. Tanecikli (granüler) özellikler katı kinetik enerji teorisi kullanımı ile ek bir denklem çözülerek katı faza eklenmiştir. Katı ve gaz fazlar, şekil 3.38'de gösterildiği gibi aynı kısmi diferansiyel denklemleri çerçevesinde birlikte hesaplanmıştır.



Şekil 3.38. Euler-eulerian çok fazlı akış.

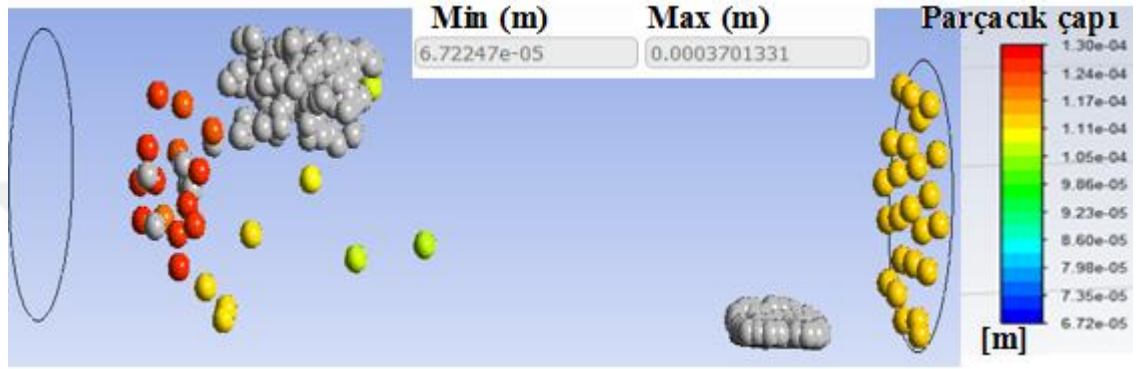
Şekil 3.89 DDPM yaklaşımını göstermektedir. Yoğun ayrık faz modeli ve ayrık eleman yöntemi (DDPM-DEM), ve granüler akış ile birlikte kullanılması ile (DDPM-KTGF) iki farklı yapıda olduğu bahsedilmelidir. DDPM Euler-lagrangian yaklaşımı ile çözülmektedir ve çok fazlı bir yaklaşım olduğunu göstermektedir. Bu yaklaşım gazlaştırma işleminin çok fazlı akışını daha doğru hesaplaması beklenmektedir. Lagrange formülasyonu, parçacık boyutu dağılımını modellemektedir. Ayrık bir parçacığın yörüngesi parçacığın kuvvet dengesi denklemini çerçevenin Lagrangian referansına entegre ederek hesaplanmaktadır.



Şekil 3.39. Euler-Lagrangian çok fazlı akış.

Euler referans çerçevesi başlangıçta Navier-Stokes denklemlerini gaz fazı için çözmektedir. İkinci aşamada parçacıkların etkileşimlerinin hesaplanması için

parçacıkların konumları Euler referans çerçevesi üstüne çakıştırılmaktadır. Etkileşimler daha sonra Euler çerçevesinde hesaplanmaktadır. Euler çerçevesinde hesaplanan etkileşim terimleri tekrar parçacık konumları ile çakıştırılarak hesaplamaların birlikte aynı çerçeve üzerinde yapılması sağlanmaktadır. Bu şekilde tüm parçacık ile gaz ve parçacıklar arası etkileşimler hesaba dahil edilmiş olmaktadır. Şekil 3. 40 farklı parçacık çaplarını ve parçacıkların gazlaştırıcı içerisindeki dağılımını göstermektedir.



Şekil 3.40. Yoğun ayırık faz modeli parçacık hareketi ve çapları.

Diğer bir model yaklaşımı ile Makroskobik Parçacık Yaklaşımı (MPM) ise ileri parçacık akışkan modellerinden biridir. Bu gelişmiş yaklaşım parçacıkların davranışını doğru bir şekilde tahmin edebilir ve parçacık-parçacık, parçacık ile gazlaştırıcı duvarları ve parçacık-sıvı, arasındaki etkileşimleri analiz edebilme kabiliyetine sahiptir. PBM model ise parçacıkların büyüklüklerini dağılımını daha doğru sağlayan model olup hesaplamalarda kullanılmıştır.

3.6. Yeni Alt Modelleme Teknikleri Kullanımı

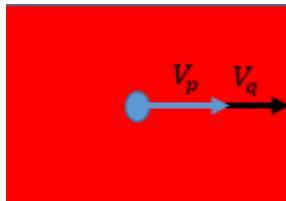
Burada tamamı ile Eulerian yaklaşımı kullanılmıştır. Eulerian- grauler yöntem kullanılmıştır. Zamana bağlı bir çalışma yapılmıştır. Ayrıca, gazlaştırma sürecinin hesaplamalı olarak çözülmesinde bazı fiziksel ve kimyasal basitleştirmeleri azaltmak için altı farklı alt model geliştirilmiş ve geleneksel kullanılan modele adapte edilmiştir. Eulerian çok fazlı model ayırık-sürekli faz etkileşimlerini ve sürekli-sürekli faz etkileşimlerini açıklayabilir. Ayırık fazlar parçacıklar (katılar), damlacıklar (sıvılar) veya kabarcıklar (gaz) şeklinde olabilir. Sürekli-sürekli faz etkileşimleri birbiriyle karışmaz. Bu nedenle, birbirleri için ayrı bir momentum ve enerji denklemi çözülmemektedir. Çözülen çoklu fazlar ortak bir basınç alanına sahip olmaktadır (bu nedenle P'nin alt indisi yoktur). Eulerian model denklemleri aşağıdaki şekilde formülize edilmektedir.

$$\frac{\partial(r_q \rho_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_q \rho_q V_q) = \sum_{p=1}^N (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (3.70)$$

$$\frac{\partial(r_q \rho_q V_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_q \rho_q V_q V_q) = -r_q \nabla P + \nabla \cdot \tau_q + \sum_{p=1}^N (D_{pq} + \dot{m}_{pq} V_{pq} - \dot{m}_{qp} V_{qp}) \quad (3.71)$$

Hacim oranı denklemi, her ilave faz için hacim oranı için çözülmüş bir transport denklemdir. N adet hacim oranı denklemleri çözülmektedir. Hacim oranların toplamı 1'e eşit olması gerektiğinden, (3.71) dnkleminde de gösterildiği üzere, birincil fazın yani gaz fazının hacim oranını hesaplanabilmektedir. Katı parçacık gaz ara yüz etkileşimi ise Şekil 3.41'de gösterilmiştir.

$$\frac{\partial r_q}{\partial t} + \nabla \cdot (r_q V_q) = 0 \quad \sum_{q=1}^N r_q = 1 \quad (3.72)$$



Şekil 3.41. Arayüz sürüklenme kuvveti / momentum aktarımı.

Her faz için ayrı momentum ve süreklilik / kütle koruma denklemleri çözüldüğünden, hücre merkezindeki her faz için ayrı bir hız alanı elde edilmiştir. Denklemler, her fazın hacim oranıyla çarpılır. Sürtünme ve diğer arayüz kuvvetleri nedeniyle hızlar farklıdır. Gazlaştırma işlemi sırasında fazlar arasında kütle transferi sağlanmaktadır. Birim hacim başına sürüklenme kuvveti ise aşağıdaki denklem ile verilmektedir.

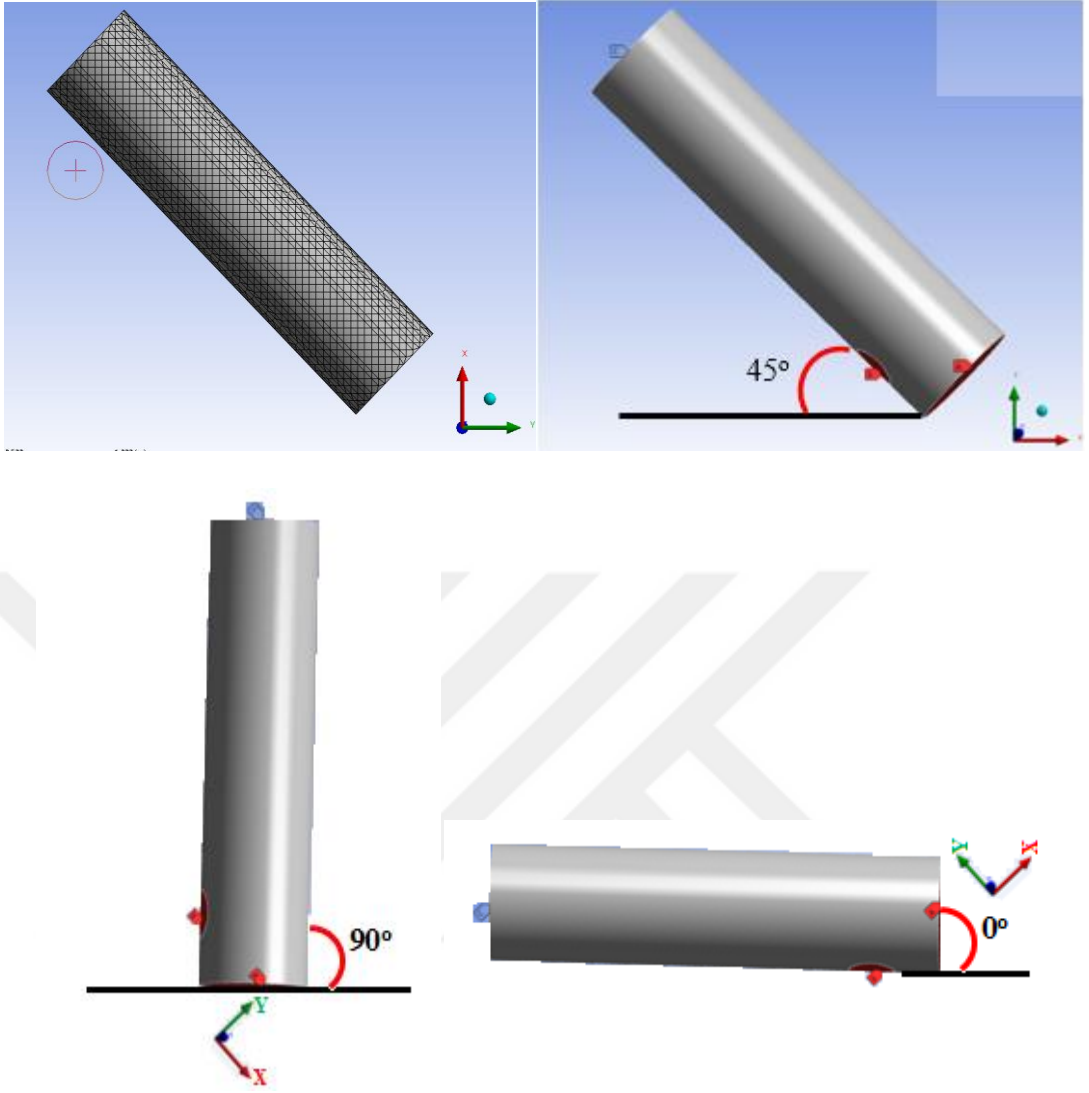
$$D_{pq} = \frac{1}{2} \rho_q C_D \left(\frac{A_p}{V} \right) (V_p - V_q) |V_p - V_q| \quad \dot{m}_{pq} \equiv \dot{m}_{p \rightarrow q} \quad (3.73)$$

Partikül gaz modellemesine kısa bir giriş yaptıktan sonra, bu özel durumun kimyasal kinetik doğruluğunu iyileştirmek için divolatilizasyon ve sabit karbon yakma alt modelleri geliştirilmiştir. Diğer geliştirilen ısı iletkenlik alt modeli aynı zamanda katı parçacıklar arasında ısı iletimi sağlamaktadır. Sürüklenme alt modeli, şekil 3.42'de gösterildiği gibi katı parçacık sürüklenme hesaplamalarını daha iyi yapmak için geliştirilmiştir. Buharlaştırma ve radyasyon alt modelleri ise fazlar arası daha doğru kütle transferi ve radyasyon ile ısı transferini hesaplamak için geliştirilip mevcut modele adapte edilmiştir.



Şekil 3.42. Yeni alt modeller ile sürecin şematik gösterimi.

Bu geliştirilen model ile iki farklı çalışma yapılmış olup, ilk çalışmada, şekil 3.43'te gösterildiği gibi 0, 90°, 45° açılar ile gazlaştırıcı konumunun verimine etkileri incelenmiş olup hangi açının veriminin daha yüksek olduğu sonucuna ulaşılmıştır. İkinci durumda ise bu model ile katı parçacıklarda olabilecek gözenekli yapının gazlaştırma işlemi sonucu çıkan ürünlere olan etkileri incelenmiştir.



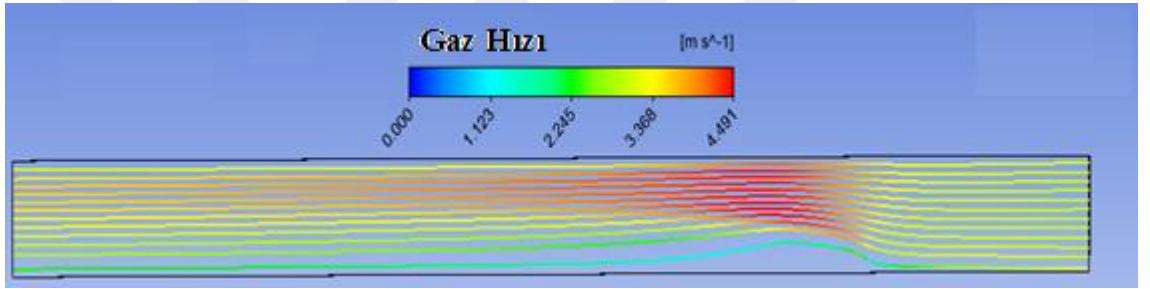
Şekil 3.43. Geometrik konum.

4. BULGULAR ve TARTIŞMA

4.1. Gazlaştırma Hidrodinamiği

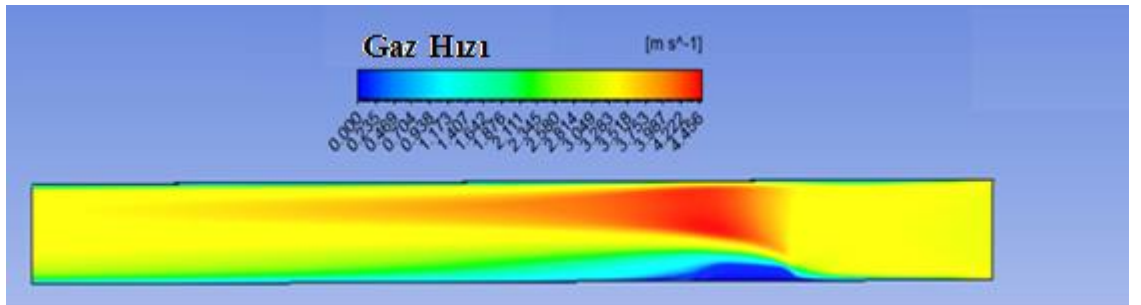
4.1.1. Gazlaştırma Hidrodinamiğinin iki boyutlu (2-D) incelenmesi

Bu bölümde 2-D, 3-D, ve yenilenmiş sürüklenme modeli ile 3-D çalışmaları karşılaştırmak için aynı sınır koşulları ve geometrik boyutlar kullanılmıştır. Şekil 4.1 ve Şekil 4.2 akışkanlaşma hızının yaklaşık 3 m/s olduğunu ve sürüklenme modeli parametrelerinin bu akışkanlaşma hızına göre düzenlenmesi gerektiğini göstermektedir. Şekil fiziksel olarak gaz karışımının hesaplama bölgesinde akım çizgilerini göstermektedir.



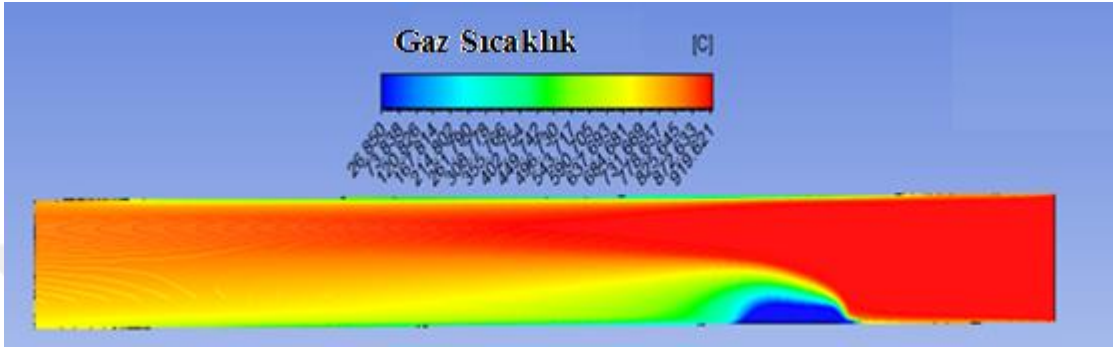
Şekil 4.1. Gaz karışımı akım çizgileri.

Gaz hızı, Şekil 4.2'de gösterildiği gibi katı partiküller ile karıştırıldığında maksimuma çıkmaktadır. Yapılan heaplama sonucunda iki boyutlu gaz karışım hız dağılımını göstermektedir.



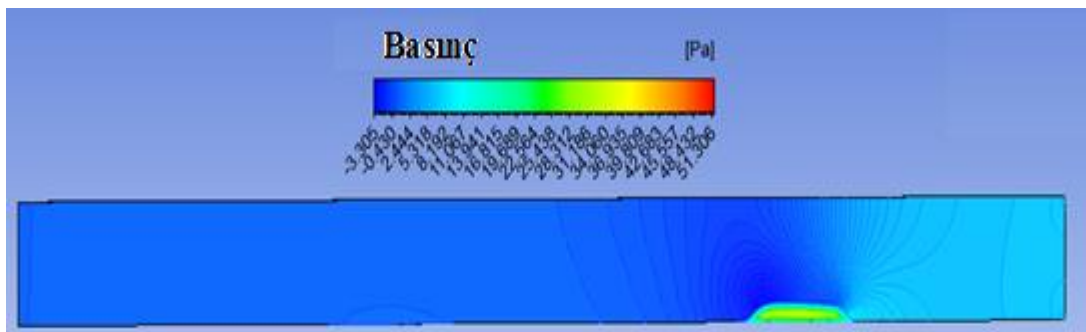
Şekil 4.2. Gaz karışım hız dağılımı.

Partiküllerle etkileşimden sonra gaz karışım sıcaklık dağılımı değişmiştir. Katı partiküller ile sıcak gaz arasında oluşan taşınım ve ışıınım ve kendi aralarında çarpıştıklarında iletim ile ısı transferi meydana gelmektedir. Bu ısı transferi yaklaşımları durumunda, Şekil 4.3de gösterildiği sıcaklık dağılımı meydana gelmiştir. Parçacıklar arasında meydana gelen iletimle ısı transferi hesaplamaları bu aşamada dikkate alınmamıştır.



Şekil 4.3. Gaz karışım sıcaklık dağılımı.

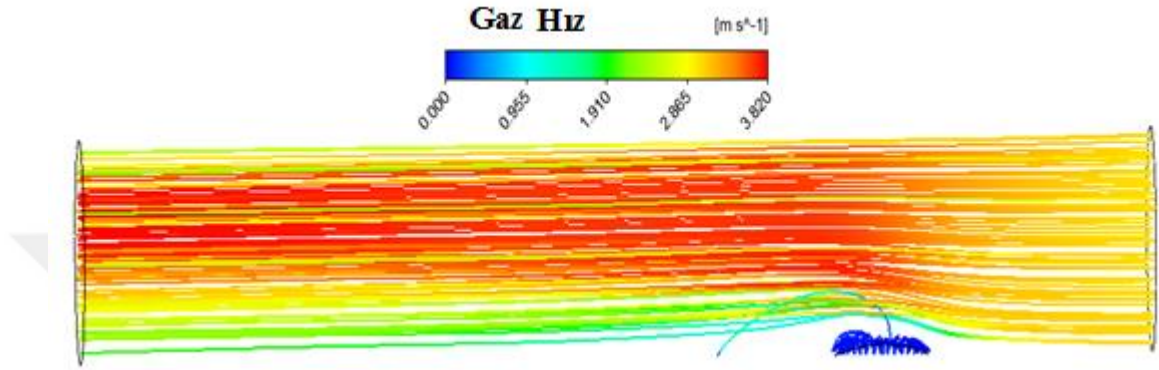
Hesaplama çalışma basıncı meydana gelebilecek nümerik hataları önlemek açısından atmosfer basıncı 101325 Pa'ye eşit alınarak yapılmaktadır. Bu nedenle basınç dağılımı sonuçları mutlak değildir. Mutlak basınç değerlerini bulmak için atmosferik basınç ile eklenmelidir. Şekil 4.4'de gösterildiği gibi basınç dağılımı katı-gaz etkileşimini ilk olarak gerçekleştiği bölgelerde en yüksek değerlerde gözükmemektedir. Basınç maksimum değeri 51Pa dır.



Şekil 4.4. Basınç dağılımı.

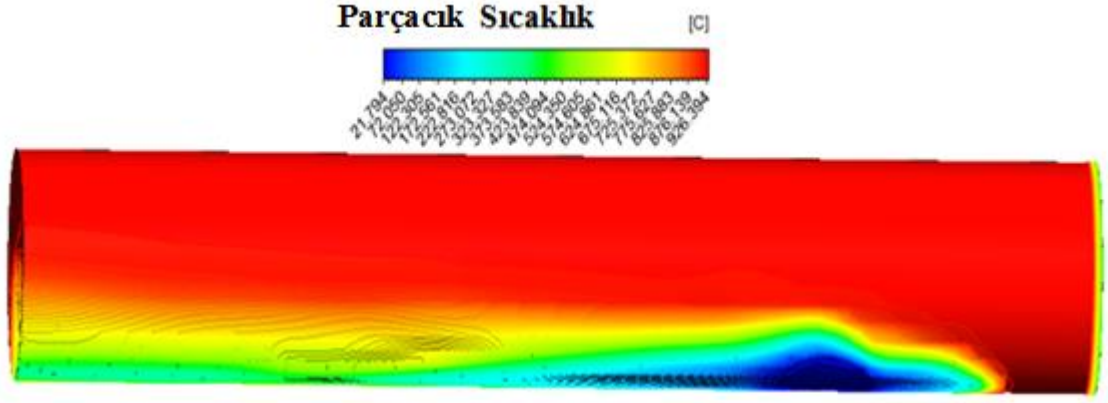
4.1.2. Gazlaştırma Hidrodinamiğinin Üç Boyutlu (3-D) İncelenmesi

Sistemin hidrodinamik davranışı üç boyutlu (3-D) olarak incelendiğinde maksimum hız değeri iki (2-D) boyutlu olarak elde edilen değerden daha düşüktür. Parçacık hızı giriş bölümünde oldukça yavaştır fakat sıcak gaz ile temasından sonra özellikle hesaplama bölgesinin ortalarına doğru hızlarında artış meydana gelmektedir. Üç boyutlu hesaplama alanında akım çizgileri şekil 4.5'te gösterilmektedir.



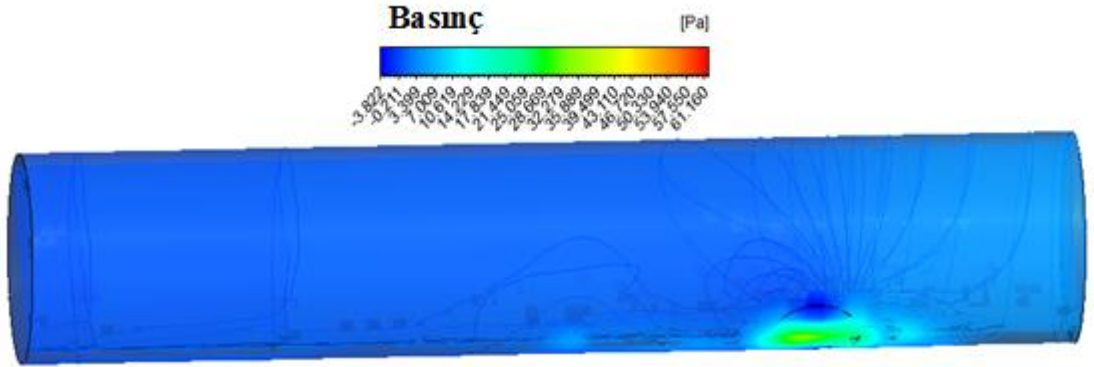
Şekil 4.5. Gaz karışım (3-D) akım çizgileri.

Parçacık sıcaklık dağılımı 3-D hesaplama alanında şekil 4.6'da gösterilmiştir. Sıcaklık dağılımının daha düşük olduğu bölgeler sıcak gaz ile daha düşük sıcaklıktaki parçacıkların ilk bir araya gelip karıştıkları bölgeler olmaktadır. Daha düşük sıcaklıklı bölge gazlaştırıcının alt kısmında görülmektedir. Sıcaklık ve hız dağılımları akışkan yatak içerisinde parçacıkların homojen olarak dağılımını gösteren önemli sonuçlardan olup, gazlaştırma verimliliği önemli ölçüde, bu parçacıklar ile sıcak gaz arasında meydana gelen momentum, kütle ve ısı transferine bağlı bulunmaktadır. Buda akışkan ile parçacık arasındaki etkileşimin en yüksek olduğu homojen bir karışım meydana getirmek ile olmaktadır. Akışkan yatakta homojen bir karışım sağlayabilmek için akışkan yatak hidrodinamiğini yanı basınç, sıcaklık ve hız dağılımlarını çok iyi hesaplamak gerekmektedir.



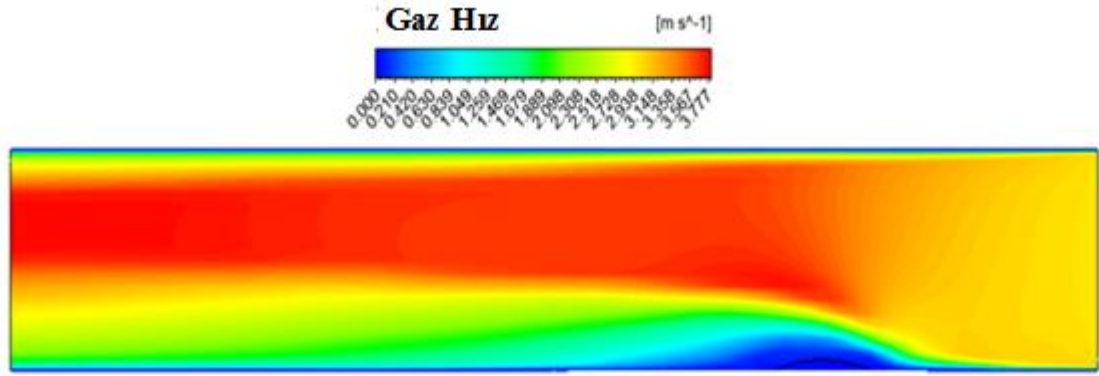
Şekil 4.6. Parçacık sıcaklık dağılımı.

Şekil 4.7’de gösterildiği üzere 3-D alanındaki basınç maksimum değeri yaklaşık 61 Pa dır. Öte yandan şekil 4.4’de görüldüğü gibi, 2-D’nin sonucu olan basınç maksimum değeri yaklaşık 51 Pa’dır. Sonuçlar karşılaştırıldığında basınç değerleri arasında 10 Pa lık bir fark oluşmaktadır.



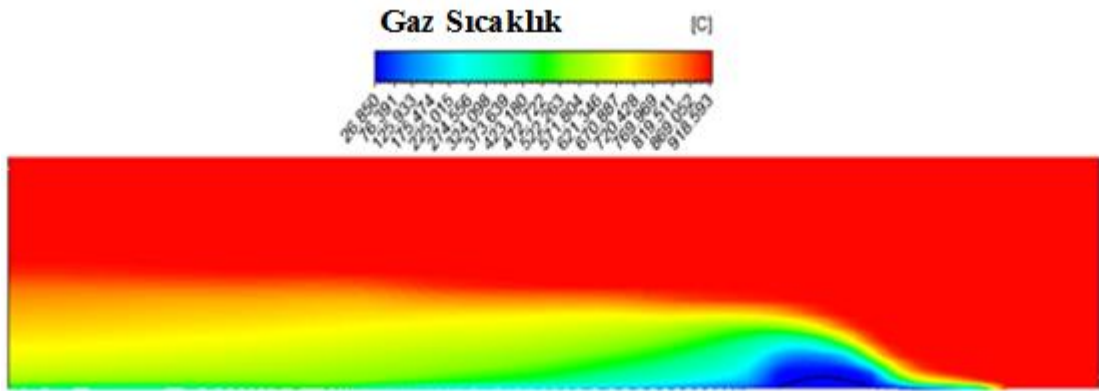
Şekil 4.7. Basınç dağılımı.

Şekil 4.8 ve şekil 4.9’da görüldüğü gibi, gaz karışımının (Faz 1) orta düzlem kontur grafikleri, yani 3-D geometrinin merkezinden geçen düzlemin, hız ve sıcaklık çözümleri iki boyutlu (2-D) hız ve sıcaklık kontur sonuçları ile karşılaştırılmıştır.



Şekil 4.8. 3-D geometri merkez düzlem gaz karışım hız dağılımı.

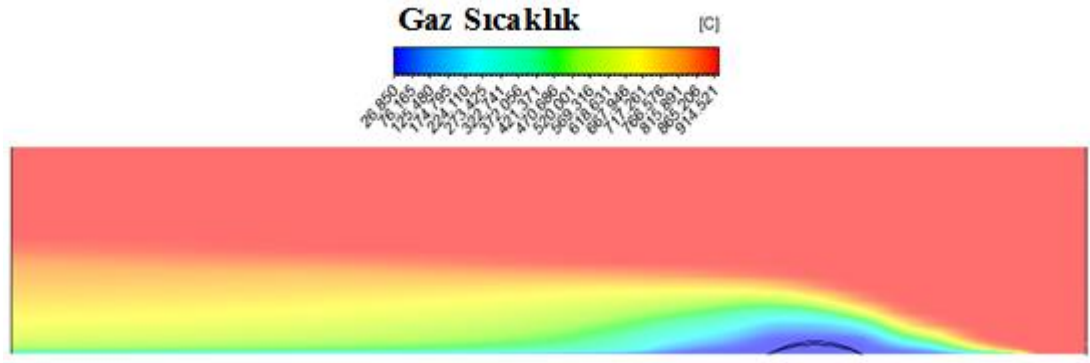
Faz 1 hızının maksimum değeri 2-D alanında daha yüksek tahmin edilmiştir. 2-D'de maksimum değer 4,456 m/s olduğundan, 3-D alanının maksimum değeri 3,77 m/s olmuştur. Şekil 4.9'da gösterildiği gibi 3-D ve 2-D için maksimum sıcaklık değerleri sırasıyla 918,593°C ve 919,621°C olarak hesaplanmıştır. Sıcaklık değerleri birbirine yakın gözükmemektedir.



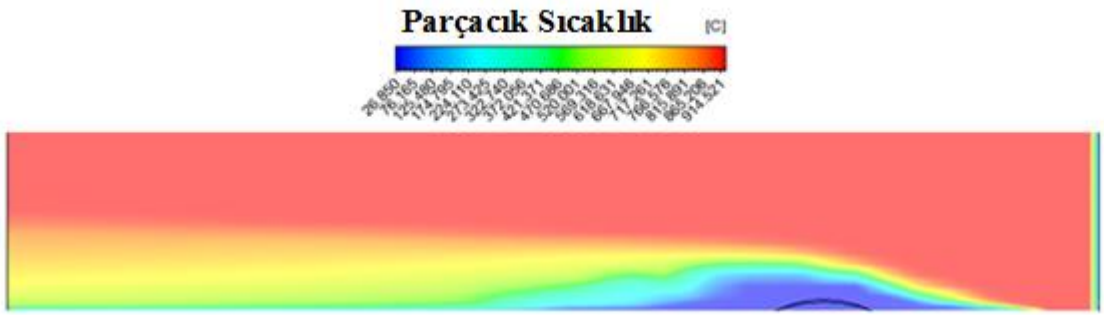
Şekil 4.9. 3-D geometri merkez düzlem gaz karışım sıcaklık dağılımı.

4.1.3. Gazlaştırma Hidrodinamiğinin Yenilenmiş Sürükleme Modeli ile Üç Boyutlu (3-D) İncelenmesi

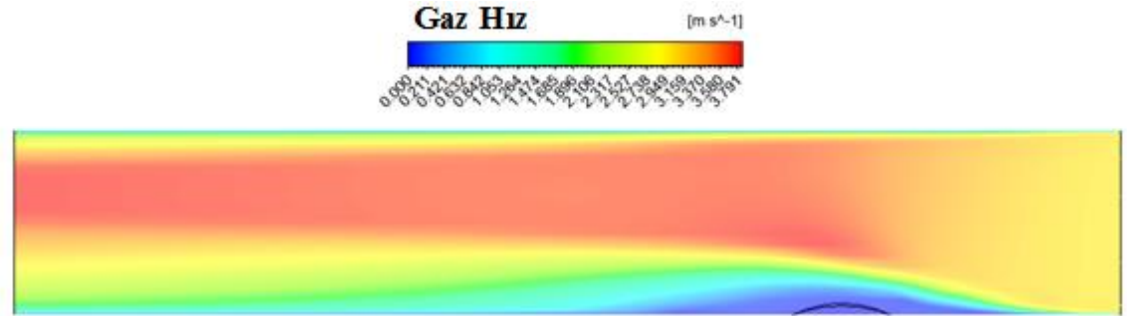
Yenilenmiş sürükleme modelinin sonuçları, hem gaz karışımı için hem de katı parçacıklar için sıcaklık ve hız dağılımının, şekil 4.10, şekil 4.11 ve şekil 4.12'de gösterildiği gibi, normal sürükleme modelinin sonuçlarına kıyasla belirgin bir şekilde değiştiğini göstermiştir.



Şekil 4.10. 3-D geometri merkez düzlem gaz karışım sıcaklık dağılımı.

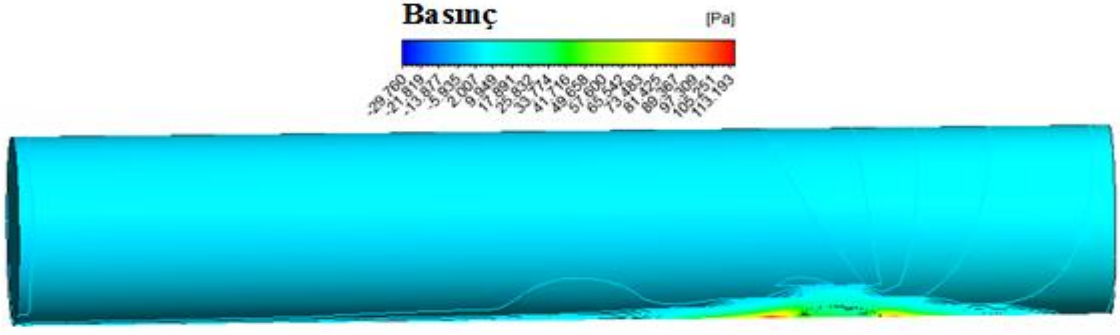


Şekil 4.11. 3-D geometri merkez düzlem parçacık sıcaklık dağılımı.



Şekil 4.12. 3-D geometri merkez düzlem gaz hız dağılımı.

Basınç düşüşü, şekil 4.13'te gösterildiği gibi, değiştirilmiş sürüklenme modeli ile hesaplanmıştır. Bu modifiye model ile basınç düşüşü yaklaşık 113 Pa olarak elde edilmiştir. Sürüklenme modeli değiştirmeden elde edilen değerler 61 Pa 3-D durum için ve 51 Pa ise 2-D için bulunmuştur. Özellikle basınç değerleri hesaplanırken modifiye sürüklenme modeli daha farklı sonuçlar meydana getirdiği gözlemlenmiştir.



Şekil 4.13. Yeniden düzenlenmiş sürükleme modeli (3-D) basınç dağılımı.

Modifiye edilmiş sürükleme modeli ile birleştirilmiş üç boyutlu kararlı durum hidrodinamik çalışmalar 2-D modellere göre gazlaştırıcıda daha doğru türbülanslı akış yapısı sunmaktadır. Sonuç olarak, basınç, sıcaklık, hız profilleri ve katı hacim oranları doğru bir şekilde hesaplanabilmekte ve birbirleriyle karşılaştırılmaktadır. Bu da akışkan yataklı gazlaştırıcıların hidrodinamiğinin daha derin bir şekilde anlaşılmasına yardımcı olmaktadır. Daha sonraki tez bölümlerinde görüleceği üzere, akışkan yatağın yeterli hidrodinamik hesaplamalarından sonra, iki aşamalı veya çok aşamalı kimyasal reaksiyon mekanizmaları , gazlaştırıcı simülasyonunun daha fazla detayını sunmak için gazlaştırma işlemine verimli bir şekilde uygulanmıştır.

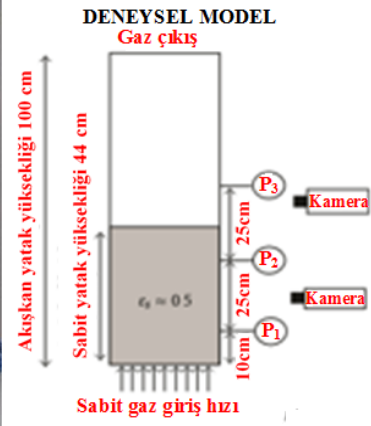
4.1.4 Deneyel Verilerle Doğrulama

Doğrulama çalışması için modellenmeye uygun literatürdeki deneyel çalışmalar ve 27.11.2019 tarihinde ziyaret edilen Bursa Teknik Üniversitesi (BTÜ) Kimya Mühendisliği Bölümü'ndeki soğuk akış akışkan yatak deney seti incelenmiştir. Bu inceleme ışığında şekil 3.21'de görüldüğü gibi, daha önce ziyaret edilen deney setine çok benzer bir deneyel çalışma (Hamzadei 2011) kullanılarak doğrulama çalışması yapılmıştır. Elde edilen sayısal sonuçlar Hamzadei'nin (2011) hem sayısal ve hem de deneyel sonuçlarına karşılaştırılmıştır. Basınç ve sıcaklık gibi temel parametrelerin ölçülmesini sağlamaktadır.

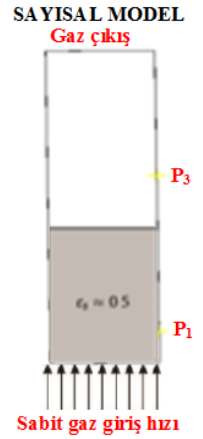
Deney seti ile herhangi bir deney yapılmamasına rağmen, literatürden çok benzer bir çalışmanın deneyel sonuçları ve sayısal sonuçları ile bu mevcut sayısal çalışma karşılaştırılmıştır. Şekil 3.21'de deney seti gösterilmektedir.



(a)

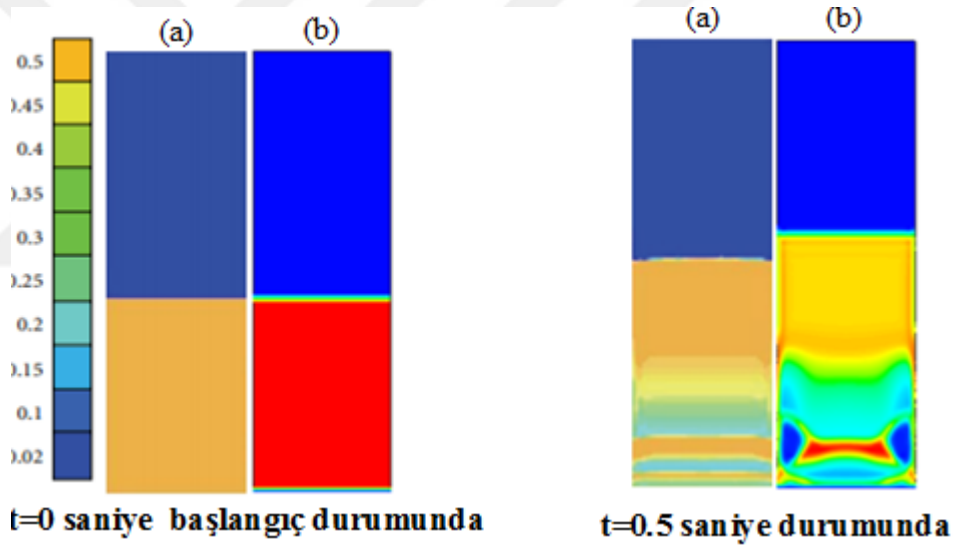


(b)

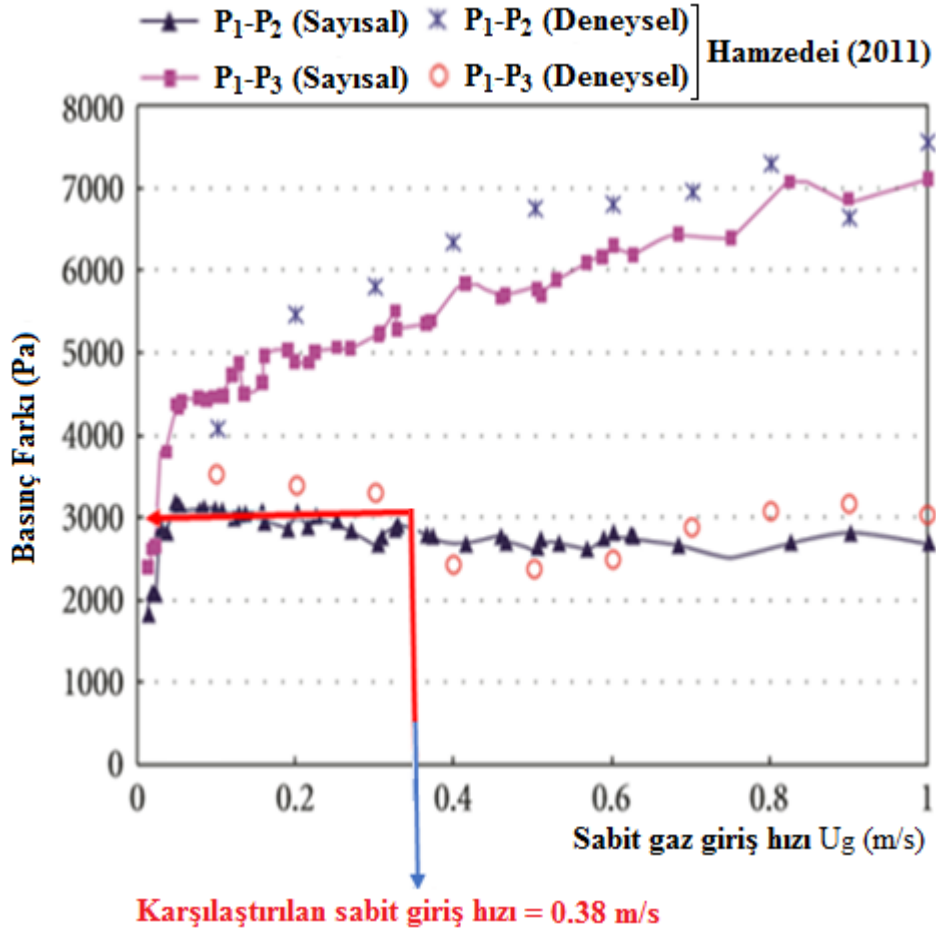


(c)

Şekil 4.14. Deneysel ve sayısal modeller a) BTÜ’deki deney düzeneği b) BTÜ’deki deney düzeneğine benzer Hamzadei’nin (2011) deneysel modeli ve c) Bu çalışmadaki sayısal model



Şekil 4.15. Katı hacim oranı sayısal sonuçlarının iki farklı zamanda literatürdeki sayısal sonuçlarla karşılaştırılması a) Hamzadei, 2011(Sayısal) b) Bu çalışma (Sayısal).



Şekil 4.16. 0.38 m sabit gaz giriş hızı için basınç farkının Hamzedei'nin (2011) sayısal ve deneysel sonuçlarıyla ve bu çalışmadaki sayısal sonucun karşılaştırması (P_1 , P_2 ve P_3 basınç ölçüm noktaları için Şekil 4.14'e bakınız).

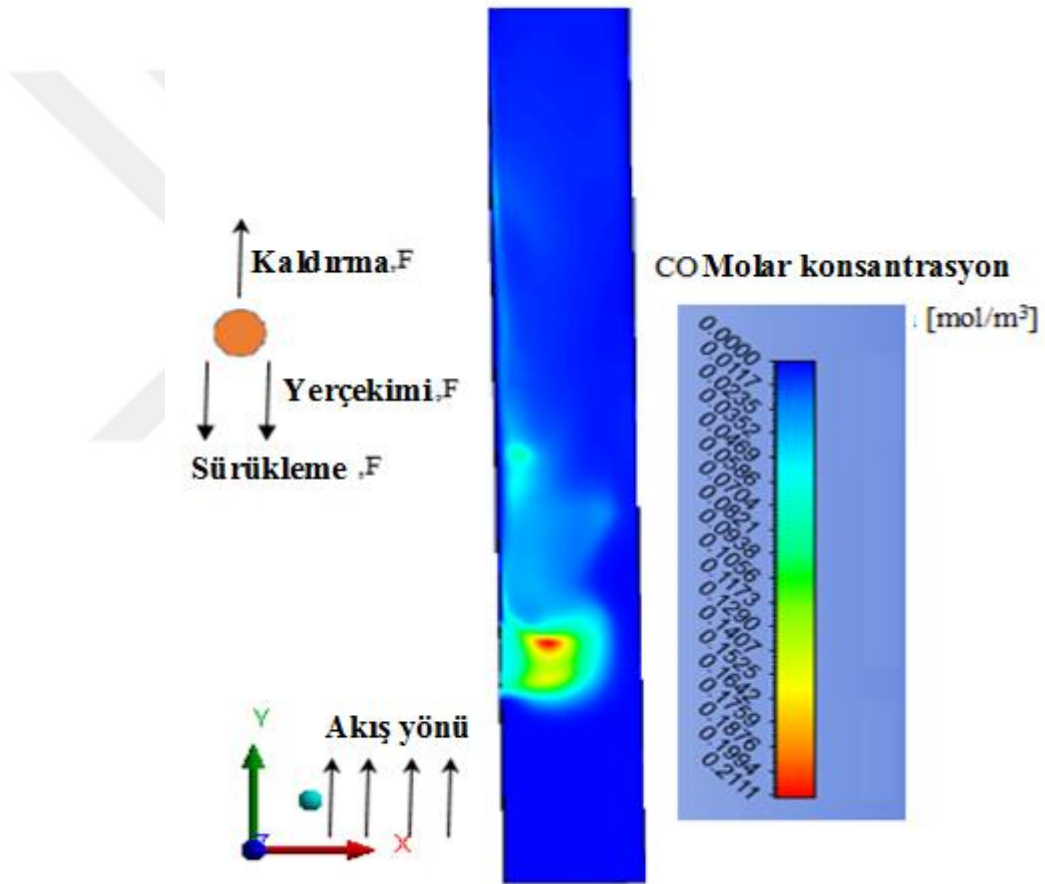
CFD ile basınç düşümü hesaplaması

$$\begin{aligned} \text{Basınç düşmesi} &= \text{Ortalama (Basınç) @ } P_1 - \text{Ortalama (Basınç) @ } P_3 \\ &= 2993,86 \text{ [Pa]} \end{aligned}$$

Deneysel Basınç düşümü=3000 [Pa] Ölçüm hatalarında dikkate alındığında yaklaşık %3 lük bir hata ile sonuçların birbiri ile tutarlı olduğu görülmüştür.

4.2. İki Boyutlu (2-D) Reaktif Akış Modelleme

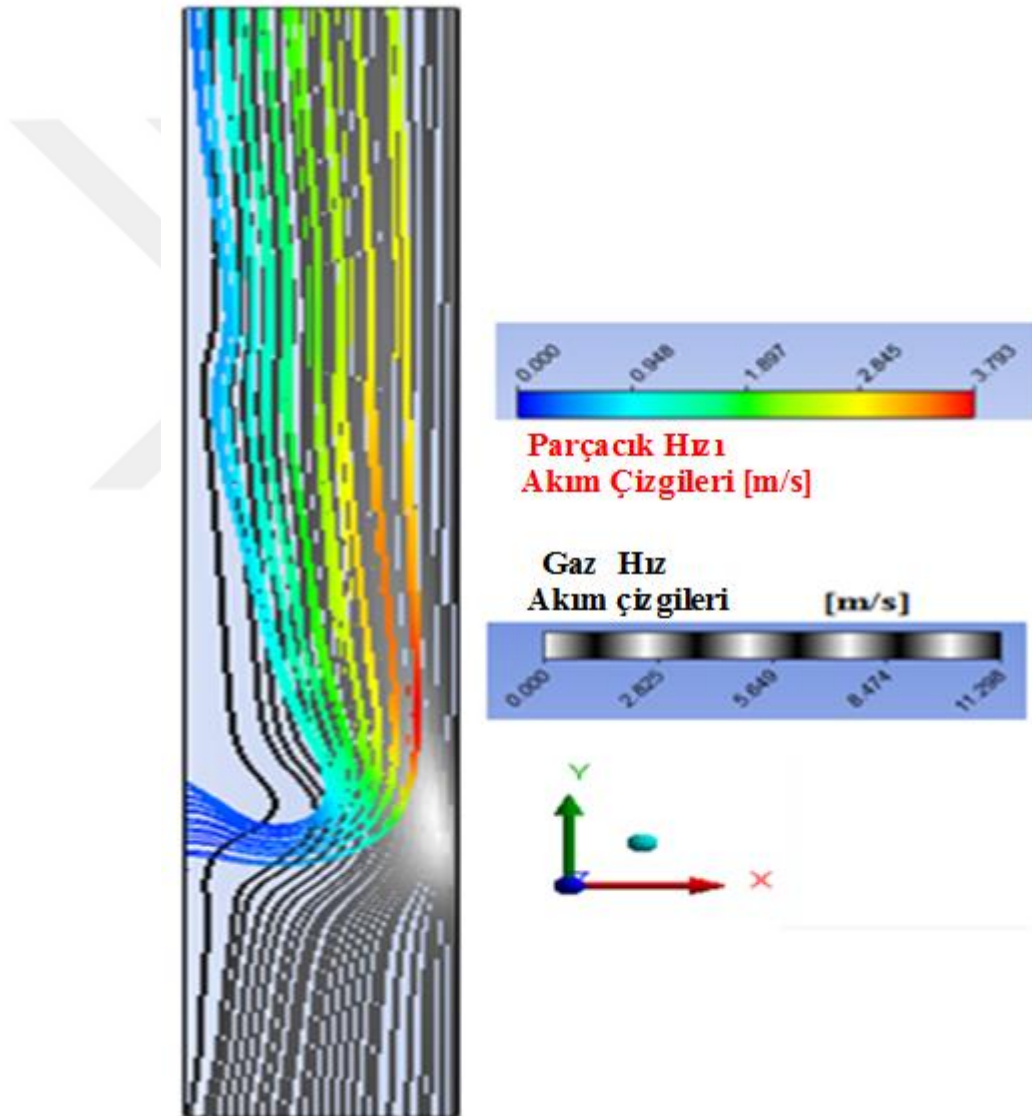
Bu geliştirilen CFD modeli ile tamamı ile liner olmayan birleşik kısmi diferansiyel denklemleri çözdükten sonra, sonuçlar ilk olarak hesaplama alanındaki CO dağılımının molar konsantrasyonu olarak şekil 4.17'de görüldüğü gibi renkli grafikte görselleştirilmiştir. Karbon monoksit, gazlaştırma işleminin ana ürünüdür. Bu nedenle, CO miktarının analiz edilmesi başlangıçta kritiktir. Aynı zamanda gazlaştırmanın meydana gelmiş olduğu yerleri de göstermektedir.



Şekil 4.17. CO molar konsantrasyonu.

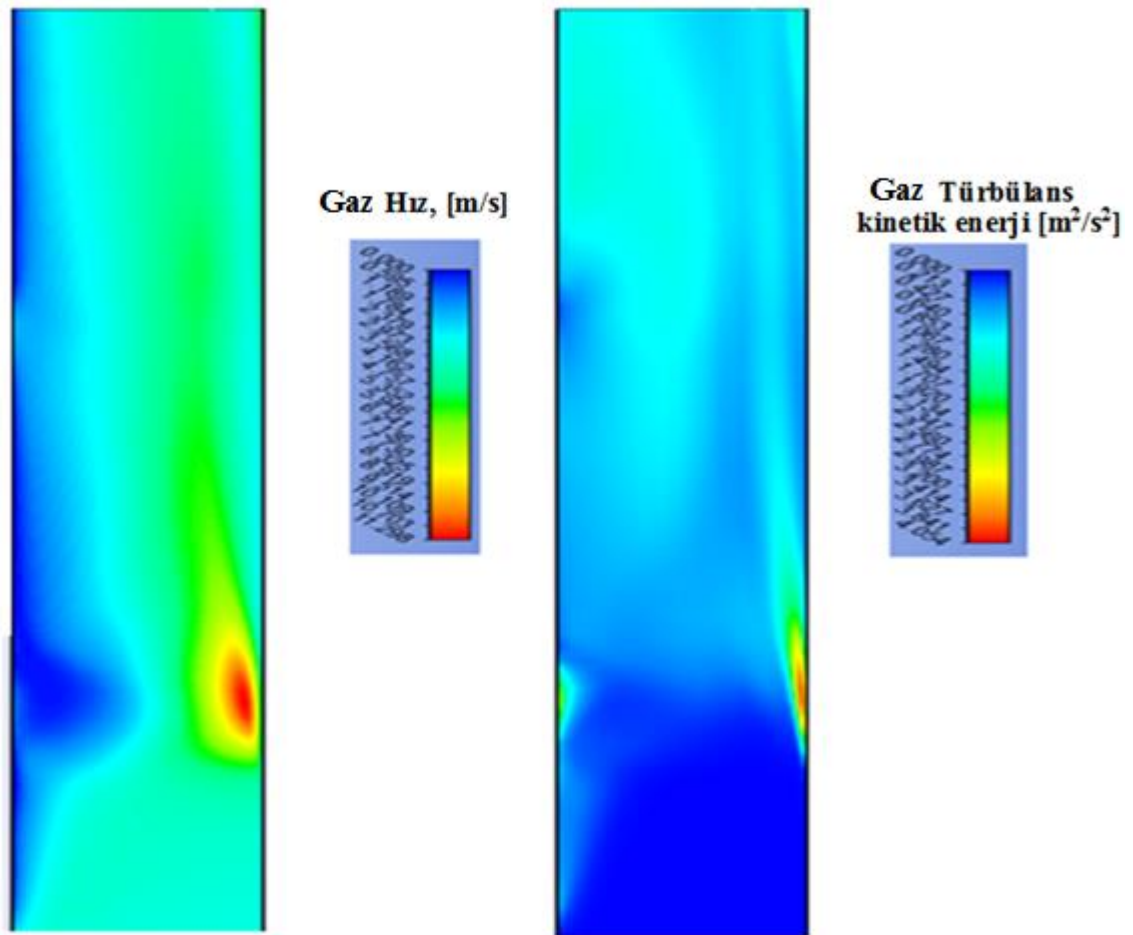
Bu geliştirilen CFD modeli sayesinde gazlaştırma ile ilgili çok sayıda parametre hesaplanabilmektedir. Örneğin, bu çok fazlı reaktif akışın dinamik viskozitesi, ısı taşınım katsayısı, iletim katsayısı, işlem sırasında meydana gelen bileşik veya element konsantrasyonları, basıncı, hızı ve sıcaklık dağılımları gibi önemli özellikleri

incelenebilmektedir. Şekil 4.18'de görüldüğü gibi hem gaz karışımı hem de parçacıklar için hız dağılımı analiz edilmiştir. Partiküllerin akış alanı içerisindeki izlemiş olduğu yolları ve gaz akım çizgileri şekil 4.18'de birlikte verilmiştir. Şekil 4.18 partiküllerin sıcak gaz akışındaki davranışlarını göstermektedir. Gazlaştırma için uygun gaz-katı karışımı ve daha verimli gazlaştırma işlemlerini sağlayabilmek için hem partiküllerin sıcak gaz içerisindeki davranışlarını hem de gaz akım çizgilerini görselleştirmek son derece önemlidir.



Şekil 4.18. Gaz hızı ve parçacık akım çizgileri.

Şekil 4.19 türbülans kinetik enerjisi ve hız ilişkilerini göstermektedir. Türbülans kinetik enerjisi, kimyasal reaksiyonların meydana geldiği yerde daha yüksektir ve sıcak gazın parçacıkları ile birleştiğinde, hem parçacıkların hem de gazın hızları yükselmektedir. Türbülans kinetik enerjisi, akışta meydana gelen türbülans şiddetini gösterir ve akış alanındaki daha yüksek türbülans konumlarını görselleştirir. Bir gazlaştırıcı tasarımı için hız dağılımı da kritiktir. Sıfıra yakın minimum hız değerleri, akış alanındaki ölü bölgeleri gösterir ve maksimum hız değerleri, özellikle partikül yüksek hızlarının gazlaştırıcı duvarlarına zarar verebileceğini gösterir. Bu arada, homojen dağılım hızı, homojen gaz ve katı karışım anlamına gelir. Doğru karıştırma, gazlaştırma veya yanma işlemlerinin verimliliğini artırır. Türbülans kinetik enerjisi arttığında, gazlaştırma verimliliği artacak ve daha uygun karıştırma koşulları oluşacaktır.



Şekil 4.19. Gaz karışım türbülans kinetik enerjisi ve hız dağılımı.

Enerji performansı ve gazlaştırma verimliliği hesaplaması denklem 3.31 ve 3.32 'ye göre hesaplanmıştır. Hesaplamalar aşağıdaki formulasyonlar ile verilmektedir.

Soğuk gaz verimliliği;

$$\eta_m = \frac{H_g Q_g}{H_s M_s} \times 100 \quad (4.1)$$

$$\eta_m = \frac{15000 \frac{kJ}{m^3} \times 3,385786 m^3/sn}{13400 \frac{kJ}{kg} \times 6,4067 kg/sn} \times 100$$

$$\eta_m = \% 59$$

Sıcak gaz verimliliği ;

$$\eta_m = \left(\frac{H_g Q_g + Q_g \rho C_g (T_g - T_a)}{H_s M_s} \right) \times 100 \quad (4.2)$$

Burada

$$H_{sıcak gaz} = Q_g C_p \rho (T_g - T_a) \quad (4.3)$$

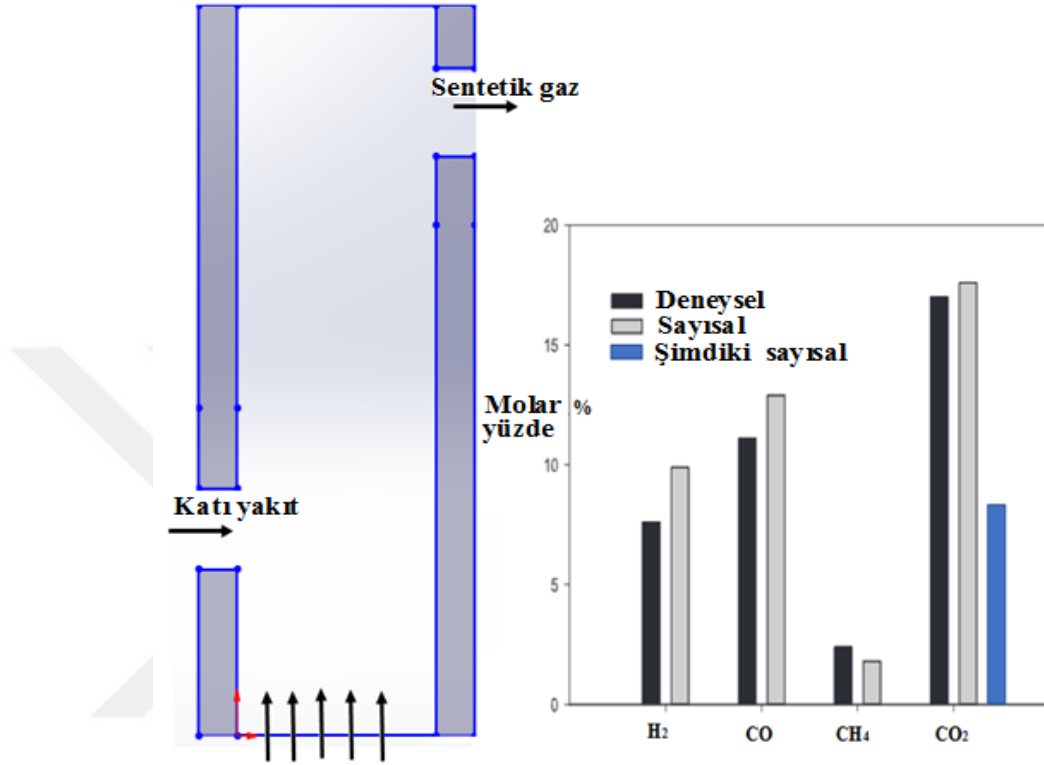
$$\eta_m = \frac{15000 \times 3.385786 + 6200 kJ/sn}{13400 \frac{kJ}{kg} \times 6,4067 kg/sn} \times 100$$

$$\eta_m = \% 66$$

Gazlaştırma verimliliği, ekonomik fizibilite açısından bir gazlaştırıcının parametrelerini oluşturmada önemli bir faktördür. Termal uygulamalar için, sentetik gaz yanma işleminden önce soğutulmuyorsa, gazlaştırma verimliliği, yukarıdaki korelasyonlarda gösterildiği gibi, gazın duyulur ısısının eklenmesi olarak formüle edilir. Elde edilen % 59 soğuk gaz verimi ve % 66 sıcak gaz verimi en yüksek verime oldukça yakın değerlerdir. Proses ve tasarım parametreleri optimizasyonu ile gazlaştırıcı verimliliği daha da artırılabilir.

Bu çalışma Couto ve ark. (2015)'nin yapmış oldukları çalışma ile de karşılaştırılmıştır. Couto ve ark. (2015) şekil 4.20'de görüldüğü gibi Couto ve ark. (2015)'nin araştırması ve bu mevcut çalışma, geometri boyutları ve sınır koşulları kullanımı açısından farklılık göstermektedir. Bu farklı iki çalışmanın CO₂ mol oranı konturları karşılaştırılmıştır.

Karbon dioksit te ayrıca gazlaştırma işleminin sonucu çıkan bir üründür. CO₂ miktarını hesaplamak ve akış alanındaki CO₂ dağılımını görselleştirmek yine önemli bir sonuç çalışması olarak düşünülmelidir.



Şekil 4.20. Couto ve ark.'nın deneysel ve sayısal sonuçları ile mevcut sonuçların mol oranı karşılaştırması (Couto ve ark. 2015).

Yukarıdaki bulgular ve açıklamalara ek olarak, gazlaştırma performansı partikül boyutu çapı açısından değerlendirilmiştir. Bir kaç hesaplama yapıldıp sonuçlar değerlendirildiğinde katı partikülün çapı azaldığında sentez gazı verimliliği artmaktadır. Örneğin partikül çapı 0,00050 m, sentez gazı akış hızı 0,121 kg /s iken çap 0,00001 m'ye düşürüldüğünde sentez gazı akış hızı 0,0125 kg/s'ye çıkmaktadır. Aynı şekilde yatak malzemesi olarak ta yine aynı çaplardaki tanecikler kullanılmaktadır. Katı partikül çapı, temel proses parametrelerinden biri olarak optimize edilmeye çalışılmıştır.

Gazlaştırıcı tasarımı için türbülans modellemesi, gazlaştırma performansı ve sentez gazı kalitesi açısından dikkatlice araştırılmıştır. Aşağıda gösterildiği gibi, RANS tabanlı yaygın olarak kullanılan türbülans modellerinin çizelge 4.1, 4.2, 4.3 ve 4.4' te görüleceği

üzere sonuçları, başlangıçta çeşitli duvar fonksiyonları için birbirleriyle karşılaştırılmıştır. Türbülans modellerini karşılaştırmak için iki farklı ağ yapısı kullanılmıştır. İlk ağ yapısı, geliştirilmiş duvar fonksiyonu yaklaşımlarının tümü için kullanılmıştır ve y^+ değerini 1,5 civarında yapacak şekilde hazırlanmıştır. İkinci olarak hazırlanan ağ yapısı y^+ değerini yaklaşık olarak 4 yapacak şekilde hazırlanmış olup geliştirilmiş duvar fonksiyonu yaklaşımı dışındaki diğer tüm duvar yaklaşımları için kullanılmıştır.

Çizelge 4.1'de görüldüğü üzere, geliştirilmiş duvar fonksiyonu ile birlikte kullanılan Reynolds gerilim türbülans modeli, şekil 4.19 ve şekil 3.17 deki bulunana değerler ile kıyaslandığında, katı hacim oranını ve gaz karışım hızını doğru şekilde hesaplamıştır. Öte yandan, standart duvar fonksiyonuna sahip Reynolds gerilme modeli katı hacim oranını çok doğru bir şekilde hesaplamasına rağmen (0,5959424), gaz karışım hız değerini, geliştirilmiş duvar fonksiyonu ile elde edilen sonuçlar kadar, doğru hesaplayamamıştır (18,85557 m/s). Bu standart duvar fonksiyonu kullanılırken duvar ile ilk ağ arasındaki mesafe artırılmalıdır. Standart duvar fonksiyonları için daha doğru sonuçlar alabilmek için, y^+ değeri en az $30 < y^+ < 300$ olacak şekilde artırılmalıdır. Genel olarak değerlendirildiğinde, bu Reynolds gerilim türbülans modelleri k- ϵ modelleri ile karşılaştırıldıklarında, hesaplamalar uzundur ve nümerik algoritmayı çözüm için hata vermeden dengelemek zordur.

Çizelge 4.1. Reynolds Gerilim (RSM) türbülans modelinin duvar fonksiyonlarıyla karşılaştırılması

Reynolds Gerilim (RSM) Türbülans Modelleri	Duvar Fonksiyonu	Katı Hacim Oranı	Faz1 Hız
Reynolds Gerilme modeli (RSM)	Geliştirilmiş duvar fonksiyonu	0,629496	11,24822 m/s
Reynolds Gerilme modeli (RSM)	Standart duvar fonksiyonu	0,5959524	18,85557 m/s

Standart k- ω , SST ve BSL modelleri çizelge 4.2'de gösterildiği gibi karşılaştırılmıştır. k- ω modelleri kullanılırken y^+ değerinin 1 olması gerektiğinden duvar fonksiyonu

işlemine ihtiyaç duymazlar. Kullanılan ağ yapısının ürettiği y^+ değeri maksimum 1,5'e eşittir. Sonuçlar kabul edilebilir aralıklarda olmaktadır; ancak, bu modeller tarafından hesaplanan katı hacim oranı ve gaz karışım hızının doğru sonuçlardan biraz uzakta hesaplandığı görülmüştür. Öte yandan, Reynolds stres modellerine kıyasla sayısal kararlılık ve zaman alıcı faktörler göz önüne alınarak değerlendirildiğinde sonuçları oldukça tatmin edici bulunmuştur.

Çizelge 4.2. Çeşitli k- ω türbülans modellerinin karşılaştırması

RANS tabanlı Türbülans Modelleri	Duvar Fonksiyonu	Katı Hacim Oranı	Faz 1 Hız
SST k- ω model	-	0,629496	10,54487 m/s
BSL k- ω model	-	0,5620949	12,12203 m/s
Standart k- ω model	-	0,629496	12,99466 m/s

RANS, RSM'den (Reynolds Stres Models) tamamen farklı yapılardan meydana gelmektedir. Dolayısı ile bu farklı yapıdaki türbülans modellerinin sonuçlarının yani RANS ile RSM modellerinin kıyaslandığı da görülmektedir. RANS (Reynolds Ortalamalı Navier-Stokes Denklemleri) tabanlı türbülans modelleri çizelge 4.3 ve 4.4. 'te görüldüğü gibi birbirleri arasında da karşılaştırılmıştır. Genel olarak tüm tablolardaki sonuçlar değerlendirildiğinde, çizelge 4.3'te de görüleceği üzere, k- ϵ standart türbülans modeli ile standart duvar fonksiyonu kullanıldığında sonuçların çok daha tutarlı olduğu görülmektedir. Çizelge 4.1'de görüleceği üzere, beş denklemlili Reynolds gerilme denklem modeli de geliştirilmiş duvar fonksiyonu kullanıldığında oldukça tutarlı sonuçlar üretmiştir. Uygunluk için şekil 4.19 ve şekil 3.17'deki üretilen maksimum faz1(gaz karışım) hızı ve kati hacim oranı değerleri baz alınmıştır.

Sayısal hesaplamalarda duvar yaklaşımları için standart duvar fonksiyonu kullanıldığında y^+ değeri $30 < y^+ < 300$ aralığında olmalıdır. y^+ plus değeri 1'e eşit olduğunda ise geliştirilmiş duvar fonksiyonu kullanılması özellikle iki denklemlili k- ϵ türbülans modelleri için önerilmektedir. Yukarıdaki elde edilen tablosal sonuçlara ek olarak, güvenilir bir türbülans modeli seçerken, daha yüksek yakınsama aralığı, sayısal

kararlılık ve daha hızlı çözme gibi önemli özellikler de göz önünde bulundurulmalıdır. Bu bölümdeki çalışmada yapılan hesaplamalarda maksimum y^+ değerleri 1.5 ve 4 olacak şekilde kullanılmıştır.

Çizelge 4.3. Std. k- ϵ türbülans modelinin çeşitli duvar fonksiyonlarıyla kullanımı.

RANS tabanlı Türbülans Modelleri	Duvar Fonksiyonu	Katı Hacim Oranı	Faz 1 Hız
Standart k- ϵ model	Menter-Lechner	0,629496	14,50941 m/s
Standart k- ϵ model	Geliştirilmiş duvar fonksiyonu	0,629496	19,85524 m/s
Standart k- ϵ model	Denge dışı duvar fonksiyonu	0,629496	8,876338 m/s
Standart k- ϵ model	Ölçeklenebilir duvar fonksiyonu	0,629496	9,869212 m/s
Standart k- ϵ model	Standart duvar fonksiyonu	0,615978	10,77692 m/s

Bu oluşturulan gazlaştırma modelinin uygunluğunu kontrol ve modelin performansı çeşitli duvar fonksiyonlarına sahip RNG k- ϵ modeli kullanımı ile de değerlendirilmiştir. Sonuçların, yukarıdaki çizelgede belirtildiği gibi, Standart k- ϵ modeli ile kıyaslandığında birbirine çok yakın sonuçlar olduğu ve tatmin edici olduğu gözükmemektedir. Standart duvar fonksiyonlu k- ϵ modeli, yukarıdaki türbülans modelleri arasında en uygun sonuçları vermiştir. Çizelge 4.4'te belirtildiği gibi, y^+ değeri 4 civarında olsa bile RNG k- ϵ türbülans modeli de standart duvar fonksiyonlu standart k- ϵ modeli de çok benzer sonuçlar ile birlikte kullanılan bu modeller arasındaki en iyi sonuçları üretmişlerdir. Çizelgelerde mavi renkli boyalı türbülans modellerinin diğerlerine göre daha uygun olduğu vurgulanmaktadır.

Çizelge 4.4. RNG k- ϵ türbülans modelinin çeşitli duvar fonksiyonlarıyla kullanımı

RANS tabanlı Türbülans Modelleri	Duvar Fonksiyonu	Katı Hacim Oranı	Faz 1 Hız
RNG k- ϵ model	Menter-Lechner	0,629496	10,62368 m/s
RNG k- ϵ model	Geliştirilmiş duvar fonksiyonu	0,629496	11,66239 m/s
RNG k- ϵ model	Denge dışı duvar fonksiyonu	0,629496	8,876338 m/s
RNG k- ϵ model	Ölçeklenebilir duvar fonksiyonu	0,629496	9,93663 m/s
RNG k- ϵ model	Standard duvar fonksiyonu	0,615978	10,77692 m/s

Bu 2-D boyutlu çalışmada, akışkan yataklı bir gazlaştırıcı içindeki karmaşık gazlaştırma süreci, iki heterojen ve bir homojen reaksiyon dikkate alınarak bir CFD modeli geliştirilerek modellenmiştir. Akışkan yataklarda yanma ve gazlaştırma işlemleri için türbülanslı akışın modellenmesinde genellikle RANS tabanlı standart duvar fonksiyonlu standart k- ϵ türbülans modelinin kullanılması tavsiyesi yapılmıştır.

Daha fazla reaksiyonla birlikte, gazlaştırma işleminin verimliliği daha yüksek ve çok daha doğru olacağı ve ayrıca gazlaştırma işlemi simülasyonu gerçek gazlaştırmaya çok daha yakın olacağı da bu çalışma sonucu vurgulanmıştır. Gazlaştırıcı alanında daha doğru bir sıcaklık dağılımı elde etmek için ışıınım ile ısı transferinin de hesaplamasının da dikkate alınması vurgulanmıştır. Bu çalışma, ışıınım ile ısı transferi dikkate alınmadan sadece kimyasal reaksiyonlarla birlikte çok fazlı akışın kullanımını göstermektedir.

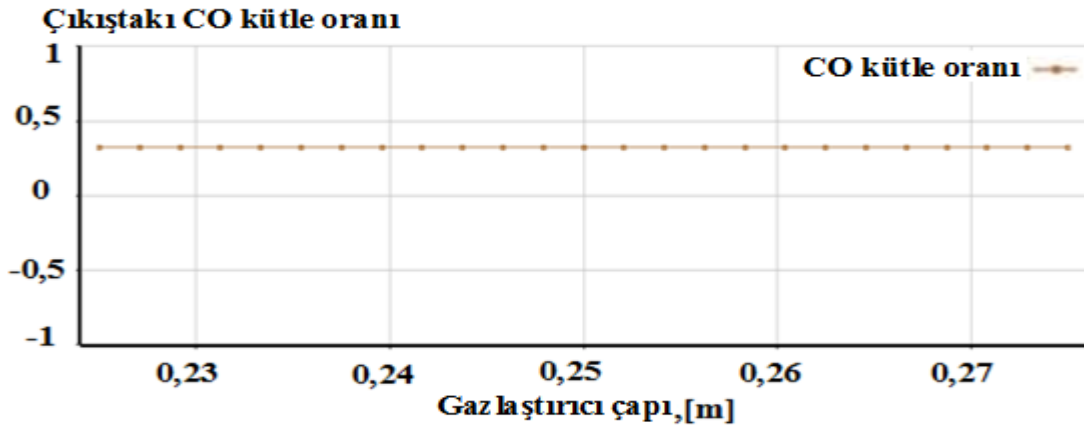
4.3. Üç Boyutlu (3-D) Gazlaştırma İşlemi Modellemesi ve Optimizasyonu

CO kütle oranı ve gazlaştırıcı uzunluğu, gazlaştırıcı çapı ve katı parçacıklar için giriş yarıçapının optimizasyon sonuçları aşağıdaki şekil 4.21'de gösterilmiştir. Elde edilen sonuçlar hesaplama yapmak için nispeten önemsiz gözükmemektedir. Şekilde de görüleceği üzere, amaç fonksiyonunu maksimum yapmak açısından dizayn parametreleri değişimleri herhangi bir değişiklik göstermemiştir.

Dizayn Noktaları Tablosu					
	A	B	C	D	E
1	İsim	P1-Gazlaştırıcı Boyu	P3-Gazlaştırıcı Çapı	P4-Parçacık Giriş Yarıçapı	P2-CO Çıkış Kütle Oranı
2	Birimler	m	m	m	
3	DP 0 (Mevcut)	2	0,25	0,013228	0,3229
4	DP 1	1,8	0,25	0,013228	0,3229
5	DP 4	2,2	0,25	0,013228	0,3229
6	DP 16	2,1626	0,27033	0,014304	0,3229
7	DP 17	1,8811	0,23513	0,012442	0,3229
8	DP 18	1,8811	0,23513	0,014015	0,3229
9	DP 19	1,8811	0,26487	0,012442	0,3229
10	DP 20	1,8811	0,26487	0,014015	0,3229
11	DP 21	2,1189	0,23513	0,012442	0,3229
12	DP 22	2,1189	0,23513	0,014015	0,3229
13	DP 23	2,1189	0,26487	0,012442	0,3229
14	DP 24	2,1189	0,26487	0,014015	0,3229
15	DP 25	1,8	0,225	0,013228	0,3229
16	DP 26	1,8	0,2375	0,013228	0,3229
17	DP 27	1,8	0,2625	0,013228	0,3229
18	DP 28	1,8	0,275	0,013228	0,3229
19	DP 29	1,8	0,22503	0,013228	0,3229
20	DP 30	1,8	0,22503	0,013228	0,3229
21					

Şekil 4.21. CO kütle oranı ile gazlaştırıcı hacmi arasındaki ilişki.

Aşağıdaki Şekil 4.22 çıkışın CO kütle oranını gazlaştırıcı çapının bir fonksiyonu olarak eğrisel olarak göstermektedir.



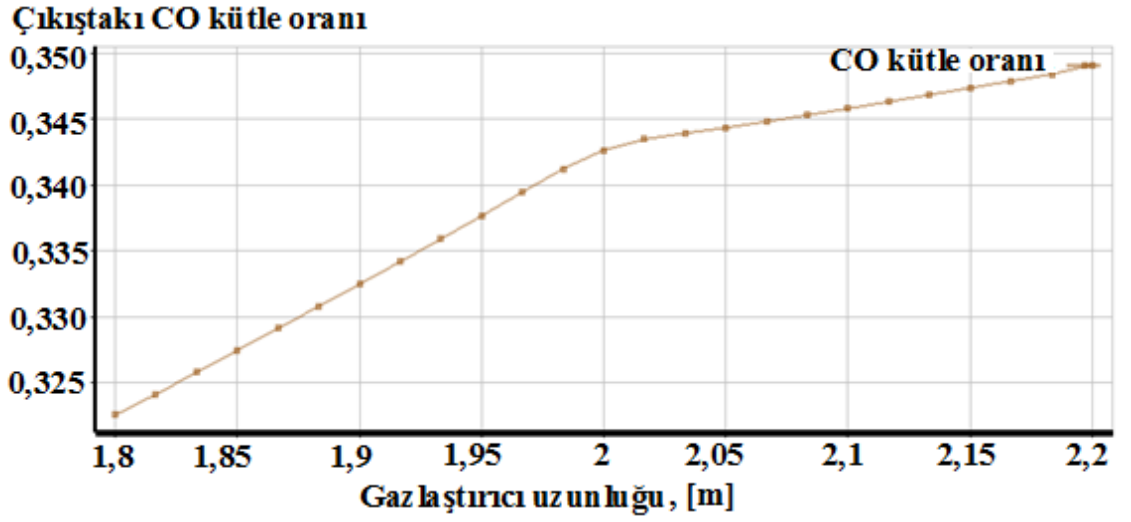
Şekil 4.22. Gazlaştırıcı çapı ve çıkış CO kütle oranı değişimi.

Bu durumda, optimizasyonun gerçekleştirilmesinden sonra sonuçlar, CO kütle oranının bu geometrik tasarım değişkenleri ve kısıtları içerisinde değişmediğini göstermektedir. Bu aynı zamanda gazlaştırıcı hacminin tek başına gazlaştırma verimini etkilemediği anlamına gelmektedir. İkinci optimizasyon çalışmasında, çıkıştaki CO kütle oranını maksimize etmek için giriş gazı hızı ve gazlaştırıcı uzunluğu dizayn parametreleri olarak optimizasyon hesaplamaları yapılmıştır. Giriş gazı hızının ve gazlaştırıcı boyunun çıkış CO kütle oranını ne kadar artırdığı gösteren optimizasyon sonuçları şekil 4.23'de gösterilmektedir.

Dizayn Noktaları Tablosu		Deney Tasarımı		
	A	B	C	D
1	İsim	P5-Gazlaştırıcı Uzunluğu (m)	P6-Gaz Giriş Hızı (m/sn)	P2-CO Çıkış Kütle Oranı
2	1	2	5	0,33663
3	2	1,8	5	0,32176
4	3	2,2	5	0,34979
5	4 DP 0	2	0	0,34514
6	5 DP 8	2	10	0,33689
7	6	1,8	0	0,32258
8	7	2,2	0	0,34872
9	8	1,8	10	0,32183
10	9	2,2	10	0,34923

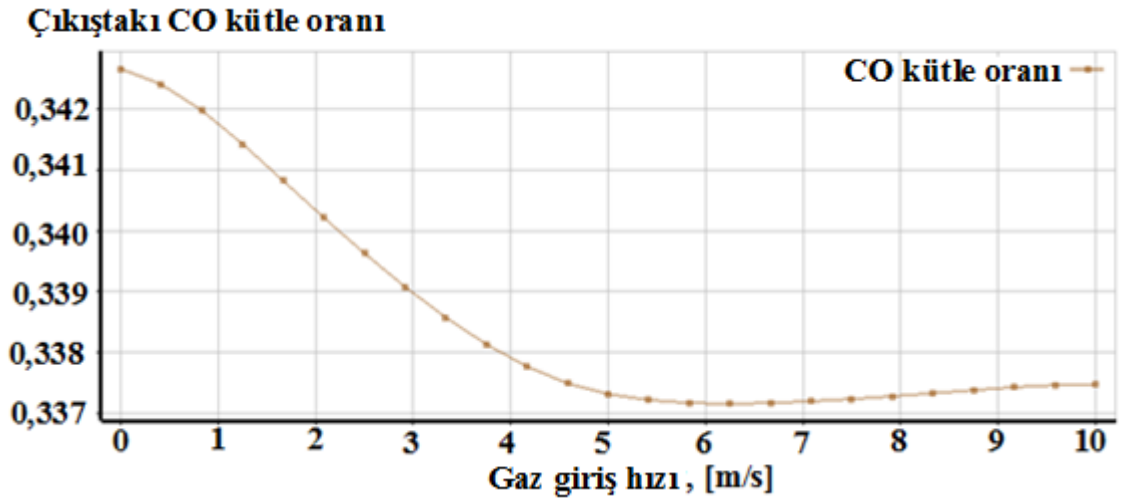
Şekil 4.23. Gazlaştırıcı uzunluğu ve giriş gazı hızı ile CO kütle oranı değişimi.

Şekil 4.24. gazlaştırıcı uzunluğunun bir fonksiyonu olarak CO kütle oranının (amaç fonksiyonu) bir grafiğini görüntülemektedir. Y eksenine atanan değer CO kütle oranı değişimini göstermektedir. Beklendiği gibi, gazlaştırıcı uzunluğu arttıkça CO kütle oranı artmaktadır.



Şekil 4.24. Gazlaştırıcı uzunluğu ile CO kütle oranı değişimi.

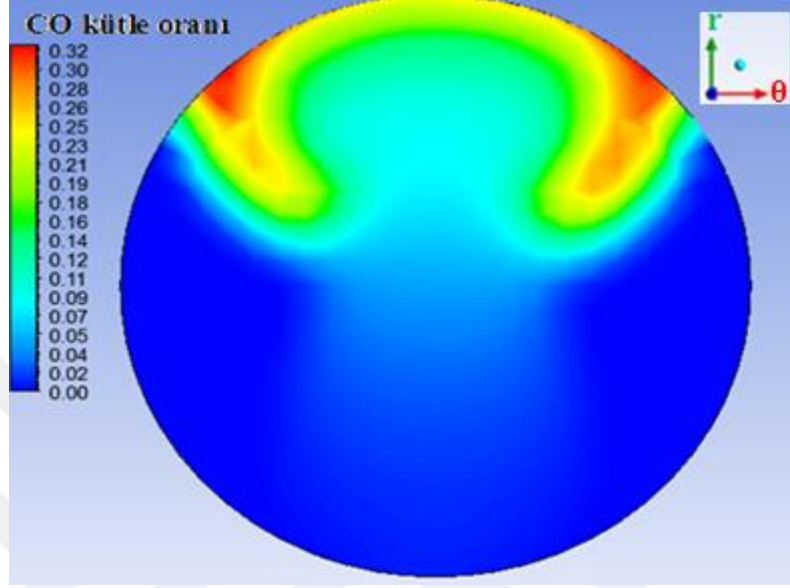
Şekil 4.25 grafiği giriş gazı hızının bir fonksiyonu olarak CO kütle oranını göstermektedir. Giriş gazı hızı azaldıkça CO kütle oranı maksimum değerine ulaşmaktadır. Buradaki değişim durumu gazlaştırıcı uzunluğu ile meydana gelen değişimin tam tersidir.



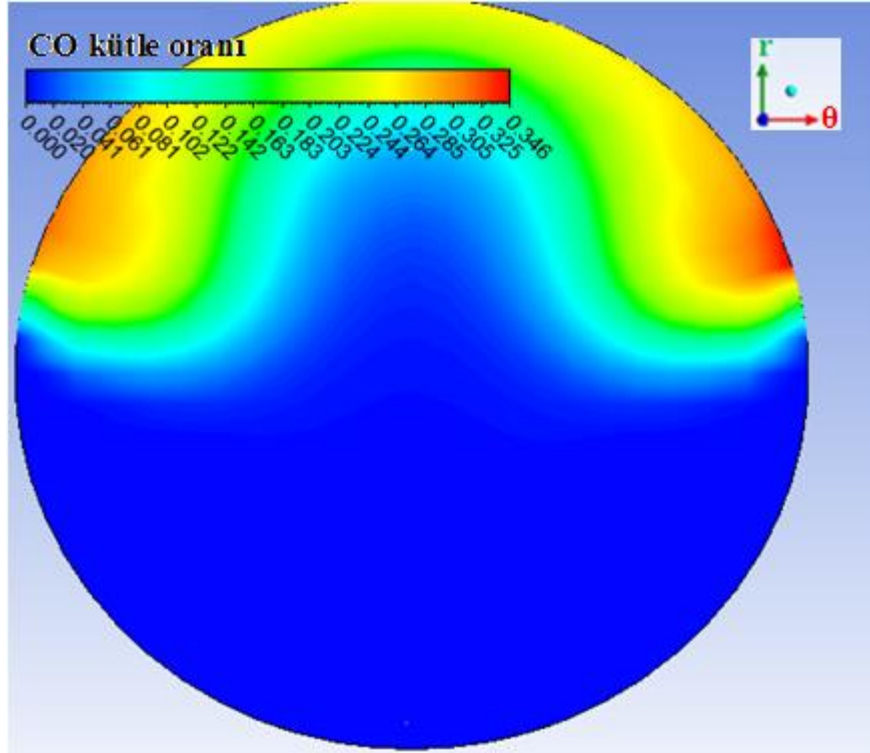
Şekil 4.25. Giriş gazı hızıyla CO kütle oranı değişimi.

Optimizasyon çalışmasında son aşamada elde edilen en iyi uç aday tasarım noktaları arasından en iyi tasarım noktası seçilmiştir. CO kütle oranı ilk orijinal geometriden seçilen bu yeni tasarım noktası ile yeniden hesaplanmıştır. Ardından, optimize edilmiş

gazlaştırıcı ile modelin sonuçları elde edilmiştir. Şekil 4.26 ve 4.27'de görüldüğü gibi optimizasyon probleminin çözümünden sonra sonuçların çok daha iyi hale geldiğinin farkına varılmaktadır. CO kütle oranı 0,32 değerinden 0,35 değerine yükseltilmektedir.

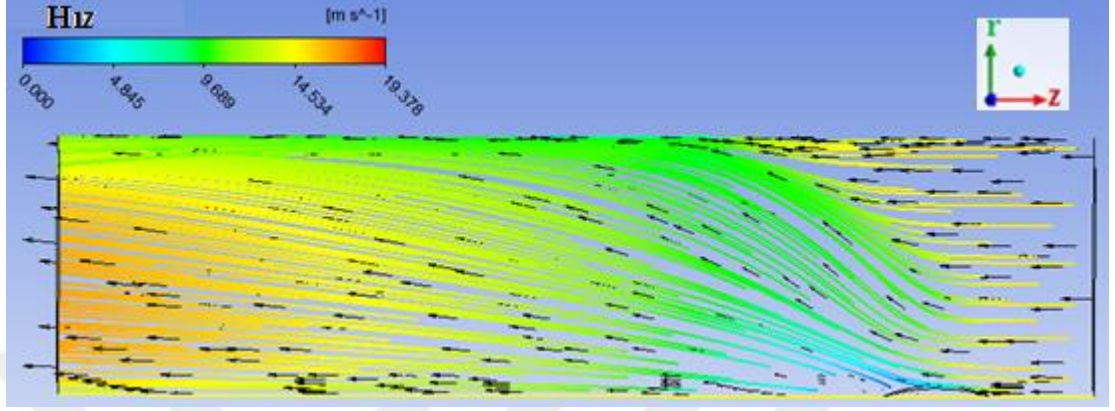


Şekil 4.26. Optimizasyondan önce çıkışta CO kütle oranı dağılımı.



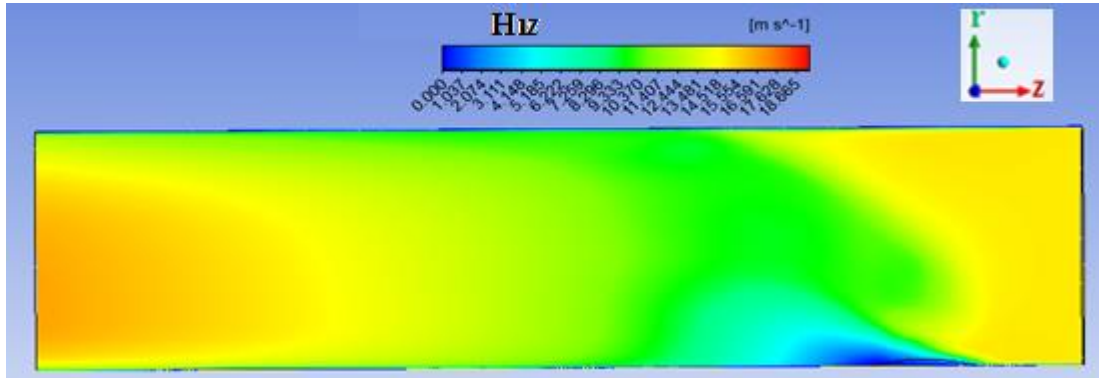
Şekil 4.27. Optimizasyondan sonra çıkışta CO kütle oranı dağılımı.

Şekil 4.28’de gaz fazının ve katı parçacık karışımının hız büyüklüğünü ve yönlerini göstermektedir. Her ikisi de birbirleriyle reaksiyona girmek için karıştırılmaktadır.



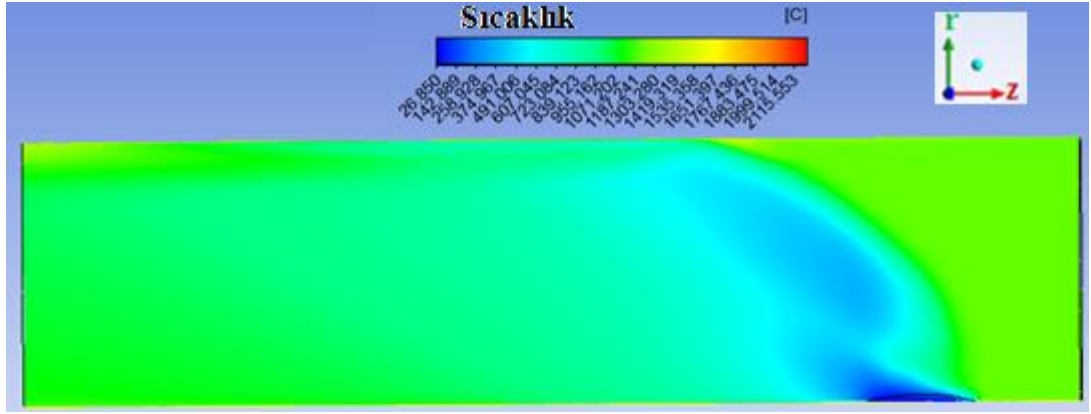
Şekil 4.28. Hesaplamalı alanın akış çizgileri ve vektör dağıtımı.

Karıştırma bölgesinde hız büyüklüğü azalmaktadır. Karışım yeri de kimyasal reaksiyonların başlangıcında aynı bölgedir. Kimyasal reaksiyonlar ve karıştırma işlemi, çok fazlı akışı biraz yavaşlatır, ancak karıştırma ve reaksiyon işleminden sonra, Şekil 4.29’da gösterildiği gibi hız tekrar artar.



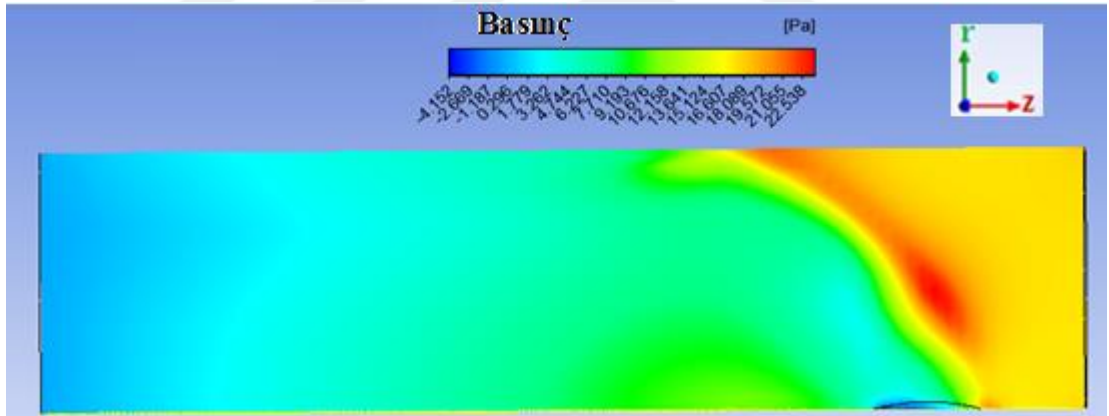
Şekil 4.29. Sınır değer probleminin hız dağılımı, $\vec{V} = V_z \hat{e}_z + V_r \hat{e}_r + V_\theta \hat{e}_\theta$

Reaksiyon ve karıştırma yerinin başlangıcında sıcaklık dağılımı da azalmaktadır. Ancak bu sebep, soğuk katı partiküllerin sıcak gaz akışıyla karışmasından kaynaklanmaktadır. Reaksiyondan sonra, sıcaklık değerleri, Şekil 4.30’da gösterildiği gibi çıkışa kadar önemli ölçüde artırılmaktadır.



Şekil 4.30. Sınır değer probleminin sıcaklık dağılımı , $T(r, \theta, z)$.

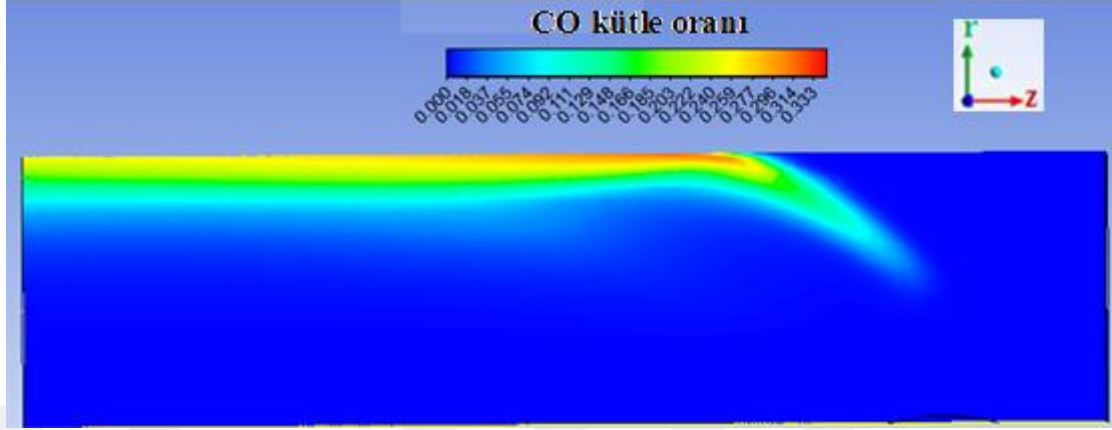
Şekil 4.31 girişten çıkışa kadar olan basınç aralığını göstermektedir. Reaksiyon ve karıştırma işlemlerine başlandığında basınç değerleri düştüğü ve çıkış bölgesine kadar aynı dağılımda kaldığı gözlemlenmiştir.



Şekil 4.31. Sınır değer probleminin basınç dağılımı, $P(r, \theta, z)$.

Şekil 4.32. gazlaştırmadan sonraki ana ürün olan CO kütle oranını göstermektedir. Bu şekil aynı zamanda reaksiyonların tam olarak nerede meydana geldiğini de göstermektedir. Kimyasal reaksiyonlar çoğunlukla üst duvar yakınlarında meydana gelmektedir. Buradan katı partiküllerin ve gaz karışımının gazlaştırıcının her bölümünde yeterince bir araya gelemediği sonucunu da çıkarmak mümkündür. Daha homojen gaz katı karışımı ile gazlaştırma verimini biraz daha artırmanın mümkün olduğunu aşağıdaki şekil

4.32 önemle vurgulamaktadır. Reaktif bölgenin tüm gazlaştırıcı hacmi ile kıyaslandığında oldukça küçük bir bölümünde meydana geldiği görülmektedir.

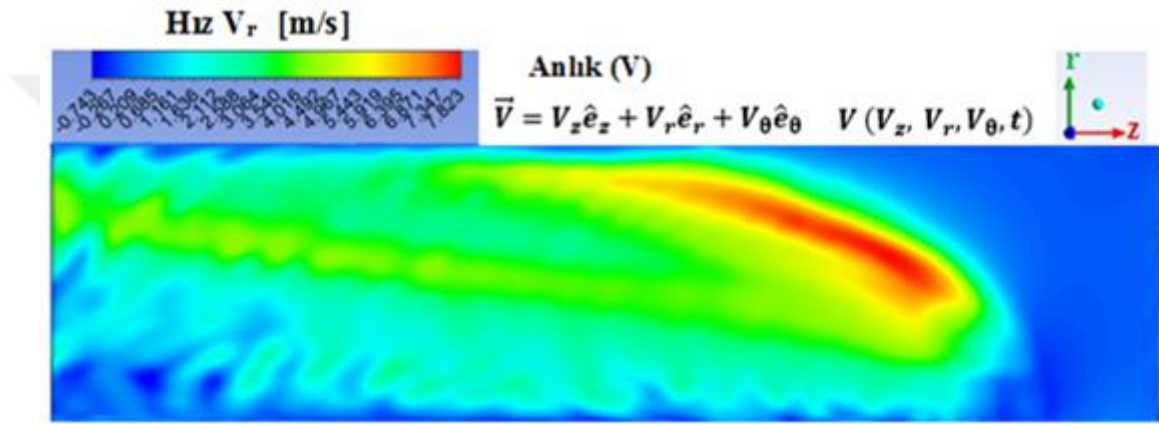


Şekil 4.32. Hesaplama alanının CO kütle oranı dağılımı.

Araştırmanın nihayet ara takım üretimini ortadan kaldırması, geliştirme maliyetlerini düşürmesi ve konseptten prototipe geçiş süresini en aza indirmesi konularında yardımcı olacağı beklenmektedir. Öte yandan bu çalışma, geometri, şekillendirilebilirlik ve sentetik gaz kalitesi arasındaki optimize bağlantı yoluyla eşzamanlı mühendisliği kolaylaştıracak şekilde özetlenebilir. Çalışma, daha iyi kalite ve miktara sahip bir yeni nesil alternatif optimizasyon ve modelleme tekniklerinden biri olduğunu göstermektedir

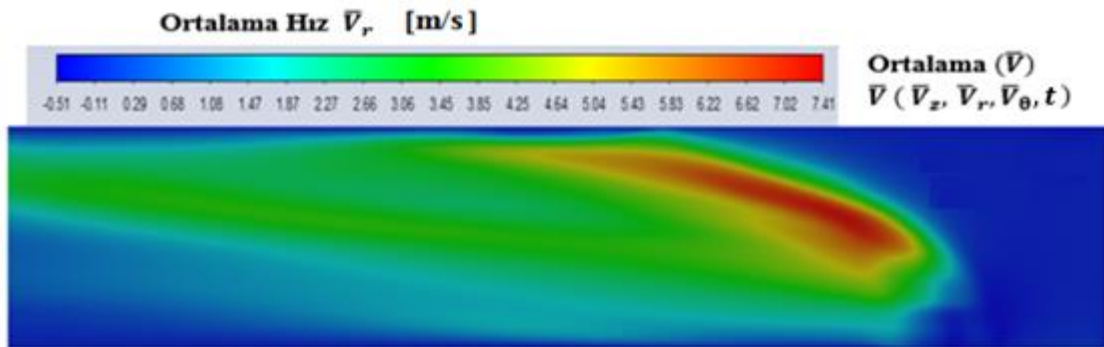
4.4. Büyük Girdap Simülasyonu (LES) ile Modelleme

Smagorinsky-Lilly LES Modeli, esasen ağ ile çözülemeyen modelleyerek elde edilen gerilmerin çözülmüş hız ölçekleri kullanılarak parametrelendirildiği bir cebirsel modeldir. Büyük girdaplar ağ içerisinde çözülmüştür. Küçük girdaplar ise Smagorinsky-Lilly modeli ile modellenmiştir. Büyük girdapların çözümlere nasıl görüntülediği şekil 4.33'te görsellenmiştir. Büyük girdaplar LES türbülans modeli tarafından açıkça gözlemlenmiştir.



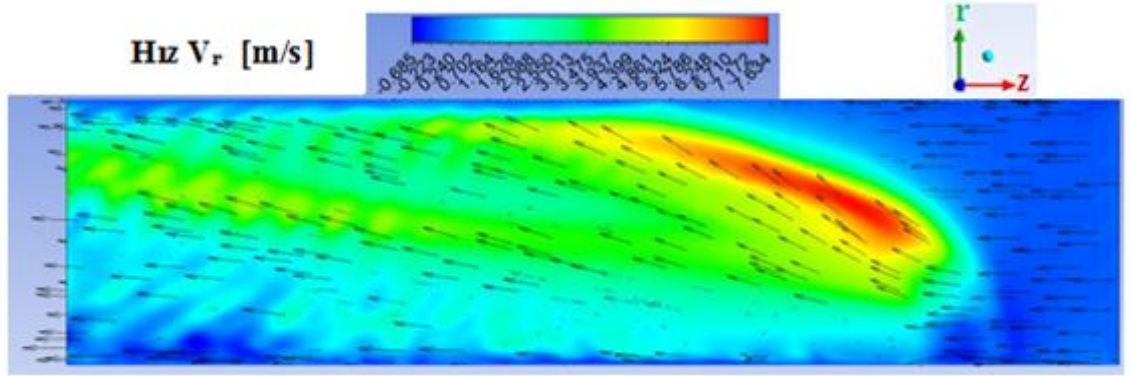
Şekil 4.33. Smagorinsky-Lilly modeli orta düzlem anlık hız.

Şekil 4.33 ve şekil 4. 34 te elde edilen iki farklı kontur grafikleri ile anlık ve ortalama hızlar arasındaki fark belirgin bir şekilde görselleştirilmiştir. Şekil 3.34 ortalama eksenel hızın kontur grafiğini göstermektedir. Zaman ortalamalı bir hız dağılımı çözümüdür. Gaz ve katı partiküllerin karıştığı bölümde hız dağılımı maksimum seviyededir.

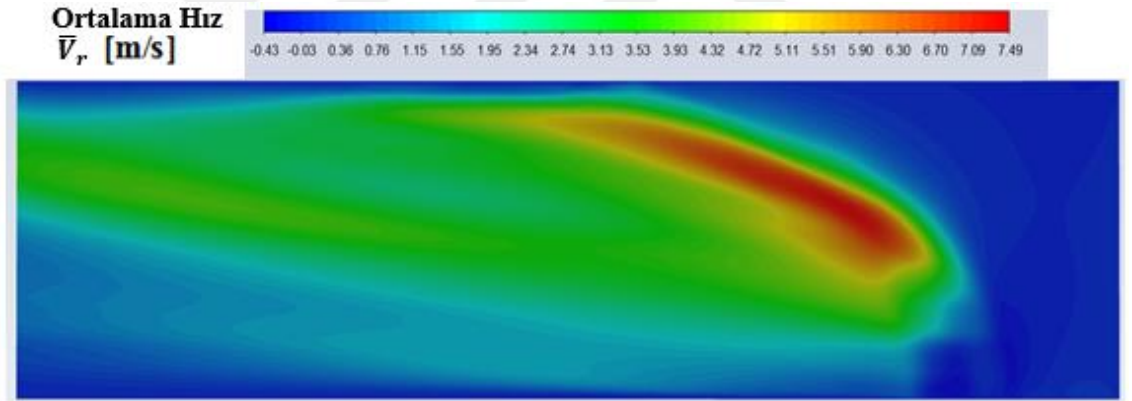


Şekil 4.34. Smagorinsky-lilly modeli ortalama hız.

WALE LES modeli duvara uyarlama yerel girdap viskozitesi (WALE) modeli, duvarla sınırlı akışlar için doğru duvar asimptotik davranışını oluşturmak için tasarlanmıştır. WALE LES Modeli kullanılarak yapılan çözümde ise şekil 4.35 ve şekil 4.36 ile paylaşılmıştır.

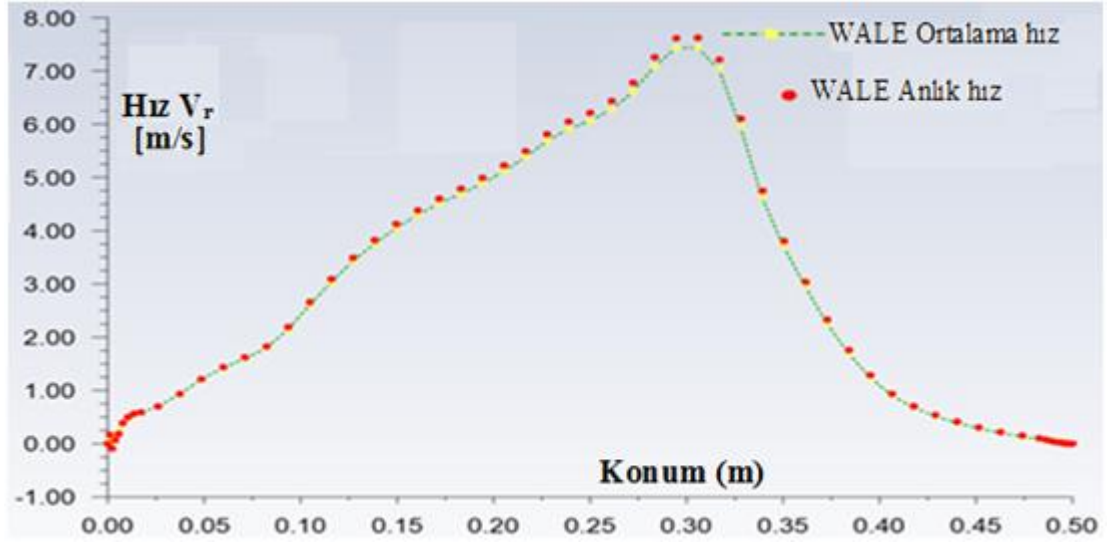


Şekil 4.35. WALE modeli orta düzlem anlık hız.



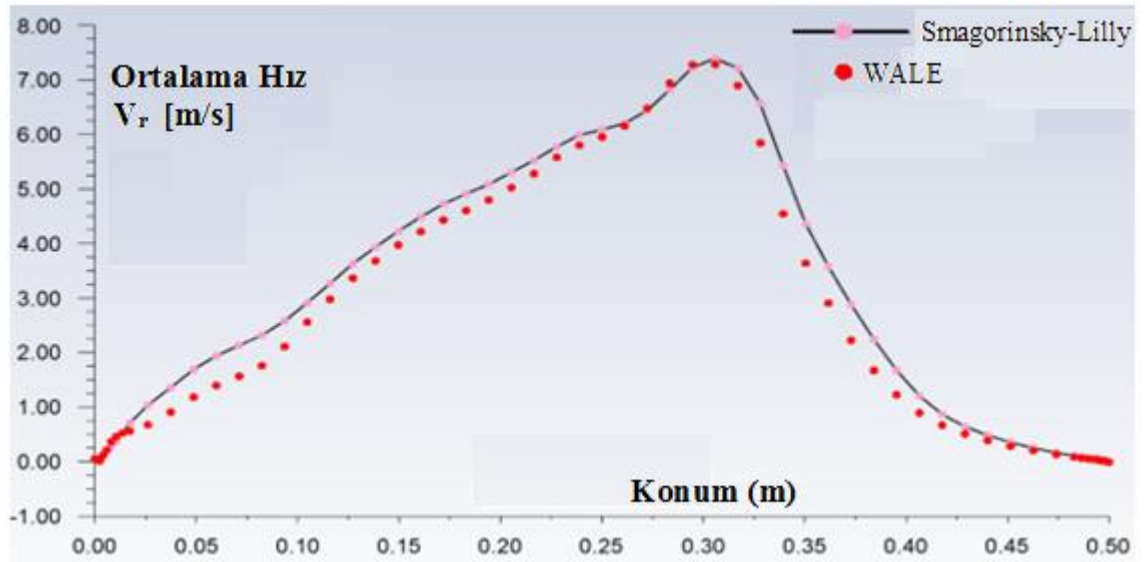
Şekil 4.36. WALE modeli ortalama hız.

Ortalama hız ve anlık hız değerleri, şekil 4.37'de gösterildiği gibi yalnızca pik değerlerinde farklılık göstermiştir. Fakat akışın görsellenmesi açısından düşünüldüğünde türbilansli akışta oluşan gidaplar doğru bir şekilde contour grafikler ile görsellenmiştir.



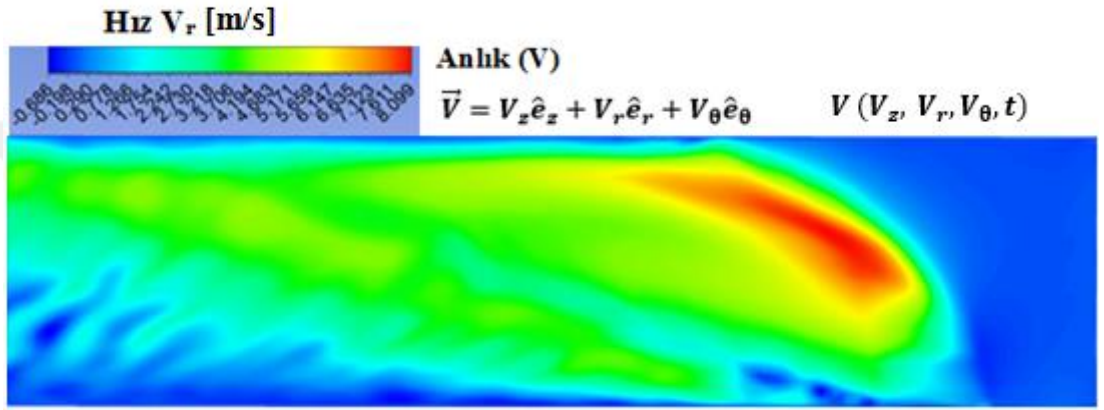
Şekil 4.37. WALE modeli ortalama ve anlık hızın karşılaştırılması.

Bu aşamada şekil 4.38'de görüldüğü üzere Smagorinsky-Lilly ve WALE modelleri karşılaştırılmıştır ve maksimum ortalama hız değerleri 7,49 m/s ve 7,41 m/s olarak özellikle grafiğin pik noktasında bir birine çok yakın olmaktadır. Grafiğin sol ve sağ traflarında farklı değerler gözlemlenmekle birlikte genel bir bakış açısı ile bakıldığında bu iki modelin benzer sonuçlar verdiği sonucuna varılmıştır.



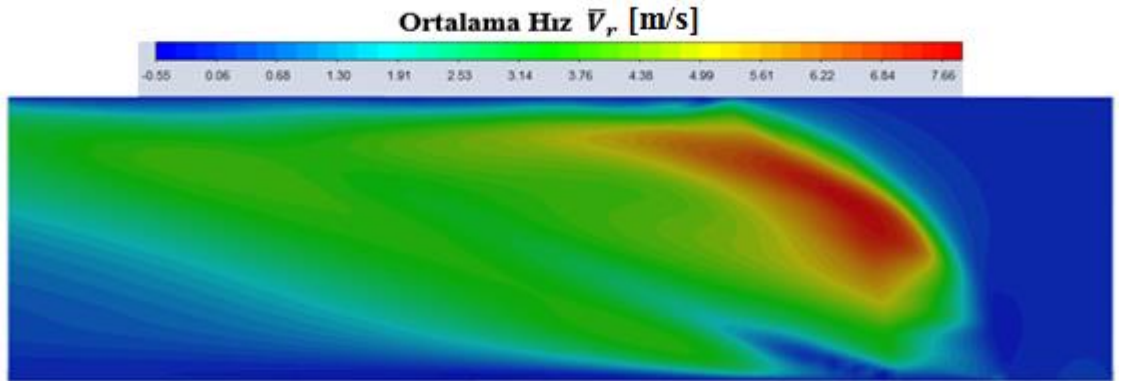
Şekil 4.38. Smagorinsky-Lilly ve WALE modellerinin karşılaştırılması.

WMLES Modeli ise wall modelli büyük girdap simülasyonudur. LES'in yüksek Reynolds sayılı akışlarda duvarla sınırlı akışlar için endüstriyel kullanımı, özellikle duvara yakın bölgeyi çözümlemek için, hesaplama açısından oldukça pahalı olduğundan günlük olarak pratik uygulamalarda kullanılması hala zordur. Bu nedenle bu model yüksek Reynolds sayılı akışları LES ile modelleyip pratik uygulamalarda kullanabilmek için geliştirilmiştir. Şekil 4.39 ve 4.40'te görüldüğü gibi, WMLES duvara yakın akışı doğru şekilde belirleyebilmek için geliştirilen modelin sonuçları verilmektedir.



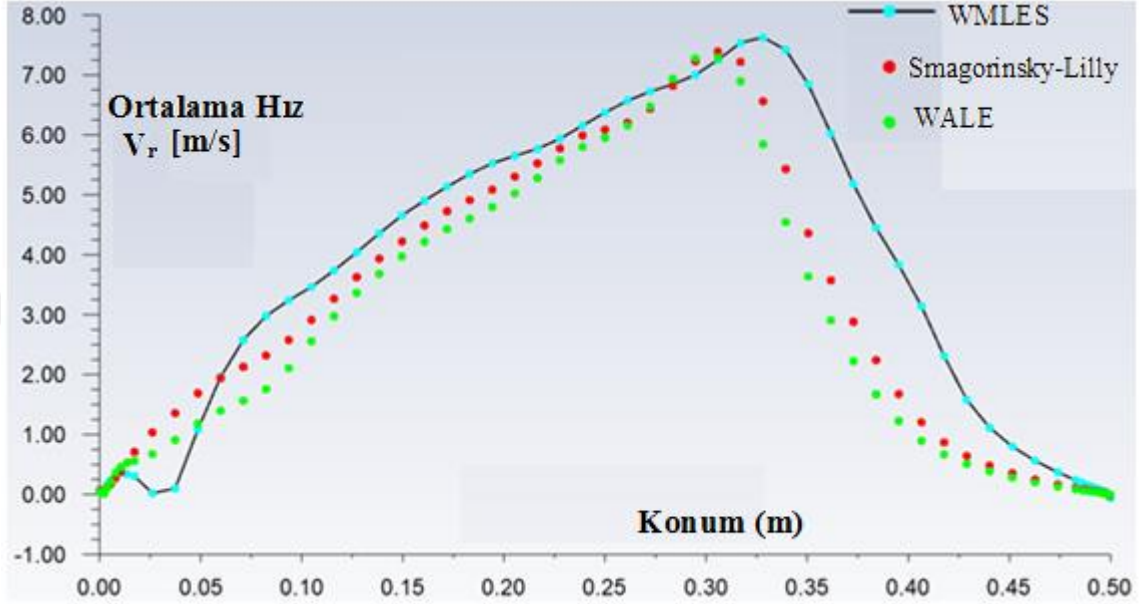
Şekil 4.39. WMLES modeli orta düzlem anlık kesit hızı dağılımı.

Bu model şekillerde görüldüğü üzere duvara yakın bölümleri doğru hesaplamak için geliştirilmiş olmasına rağmen akışın orta bölümlerinde hız dağılımını detaylı olarak hesaplayamamıştır. Yukarıdaki LES in diğer modelleri ile ayrıntılı olarak görşeleştirilen akışın çatallanması bu model ile görselliği ayırt edilememiştir.



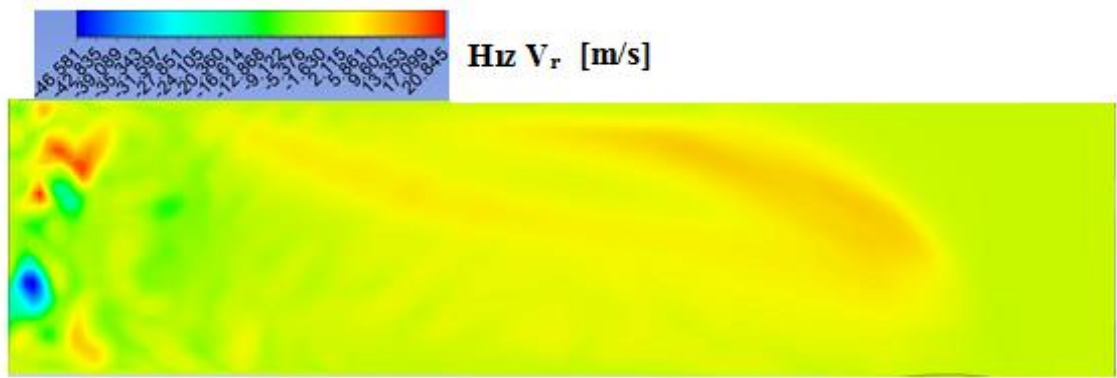
Şekil 4.40. WMLES modeli ortalama hız.

Bununla birlikte, WMLES modeli, WALE ve Smagorinsky-Lilly'nin sonuçları ile karşılaştırıldığında oldukça farklı sonuçlar üretmiştir. Şekil 4.41'de görüldüğü gibi, bu model pik noktası değerini 7,66 m/s 'ye yükseltmiştir; özellikle, grafiğin sağ taraftaki bu modelin sonuçları dikkate değer bir fark göstermektedir.



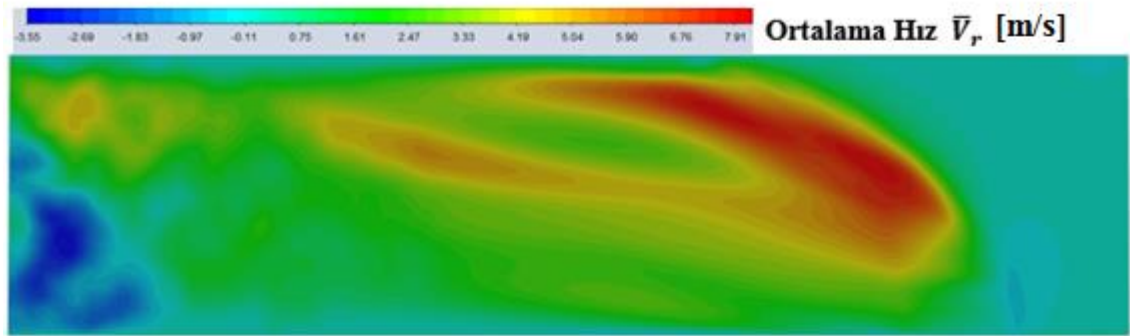
Şekil 4.41. Smagorinsky Lilly, WALE, ve WMLES modellerinin karşılaştırılması.

Kinetik Enerji Aktarımı (Kinetic Energy Transport) LES Modeli doğru sonuçlar vermediği şekil 4.42 ve şekil 4.43 ile gösterilmiştir. Anlık hız değerlerinin sonuçları aşağıdaki şekil 4.42 de görüldüğü gibi çok yüksek hesaplanmıştır. Hız dağılımı değerleri sadece sabit bir değer olarak hesaplanmış gibi gözükmemektedir. Negatif hız değerleri üretilmiştir ve çok yüksek değerler olarak hesaplanmıştır. Bu negatif hız değerleri çok küçük bir çember şeklinde özellikle çıkış bölgesine yakın yerlerde anlamsız bir bölge meydana gelmektedir. Yine de katı ve gaz birleşimi noktasında akışın çatallanmasını az çözünürlüğe sahip olmasına rağmen görselleştirmeyi başarmıştır. Oluşan büyük girdaplar da yine bazı bölgelerde gözlemlenmektedir.



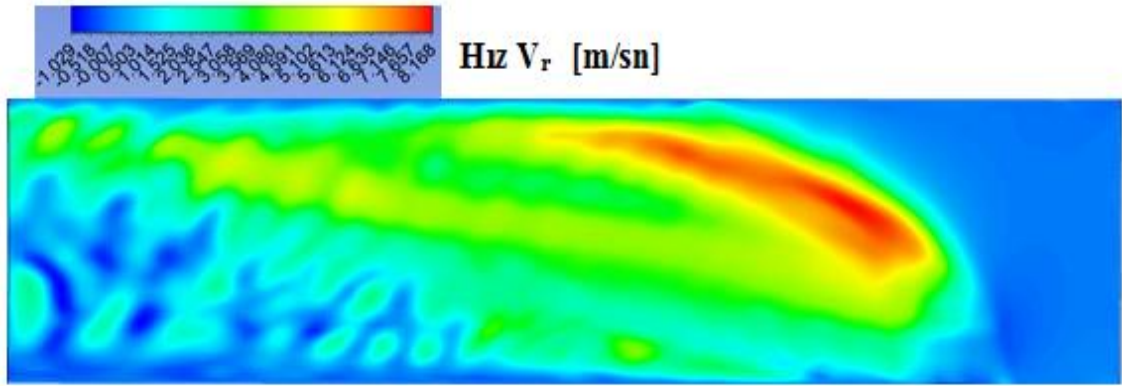
Şekil 4.42. Kinetik enerji aktarımı modeli orta düzlem kesit hız dağılımı

Modelin ortalama hız değerlerine bakıldığında ise, anlık hız değerlerine göre daha tutarlı sonuçlar üretilmiştir. Ortalama hız değerleri kabul edilebilir aralıkta bulunmuştur; ancak bu ortalama değerler, şekil 3.43'de gösterildiği gibi, diğer LES modellerine göre daha kötü sonuçlar üretmiştir.



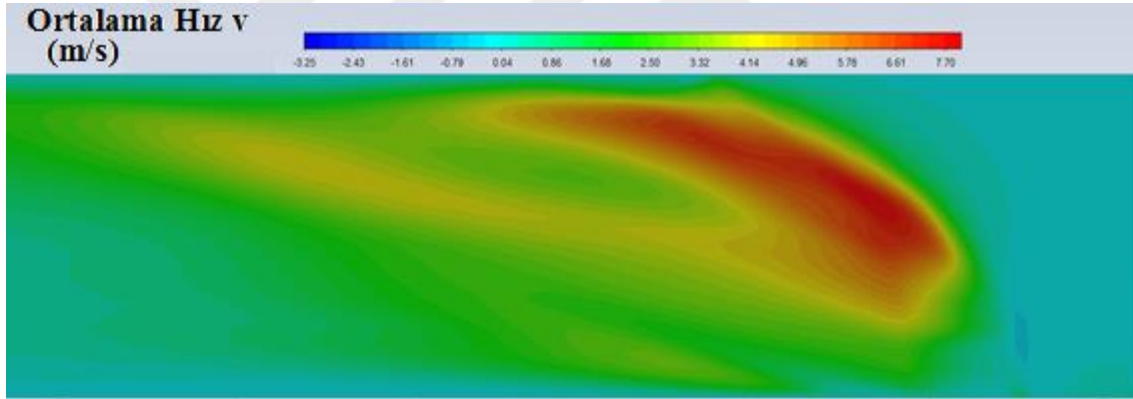
Şekil 4.43 Kinetik enerji aktarım modeli ortalama hız.

WMLES S-Omega LES Modeli ile elde edilen sonuçlar şekil 4.44 ve şekil 4.45 ile paylaşılmıştır. Sonuçların girdapları yakalaması ve akış çatallanmasını görünür şekilde görselleştirmesi nedeni ile tutarlı olduğu kabul edilebilir.



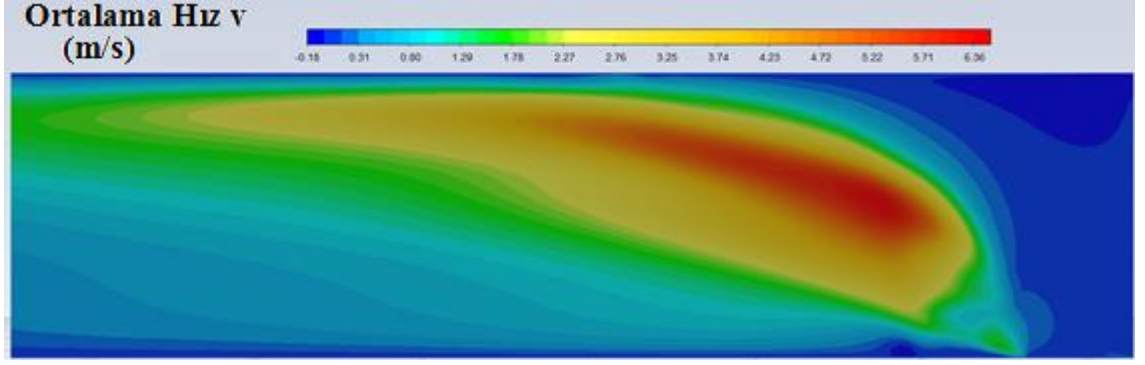
Şekil 4.44. WMLES S-Omega modeli anlık hız.

Fakat yine bu modelin sonuçları ilk iki modelin ürettiği sonuçlara göre yine yüksek olduğu ilk etapta göze çarpmaktadır.



Şekil 4.45. WMLES S-Omega modeli ortalama hız.

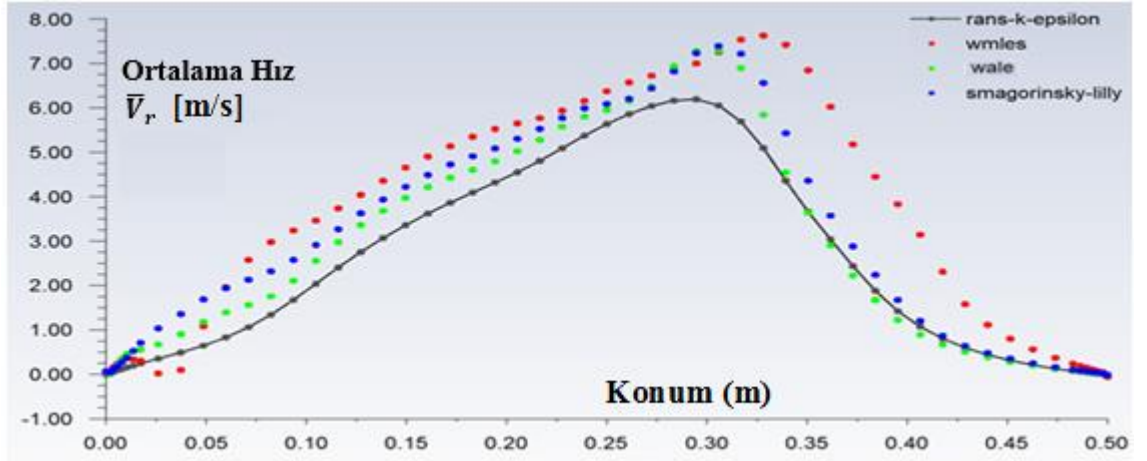
Farklı LES türbülans modeli ile sonuçları elde edtikten sonra, doğrulama ve onaylama için, türbülanslı reaktif akışı bir başka deyişle zamana bağlı LES çözümünü doğrulamak için standart k- ϵ modelinin çözümü karşılaştırılmıştır. k- ϵ (2 denklem) modeli, gösterildiği gibi türbülanslı gazlaştırıcı içerisindeki reaktif akışı için viskoz model sonuçları aşağıdaki şekil 4.46 ile verilmiş ve aşağıda görüleceği üzere farklı grafikler içerisinde LES modelleri ile karşılaştırılmıştır.



Şekil 4.46. RANS tabanlı k-epsilon modeli ortalama hız.

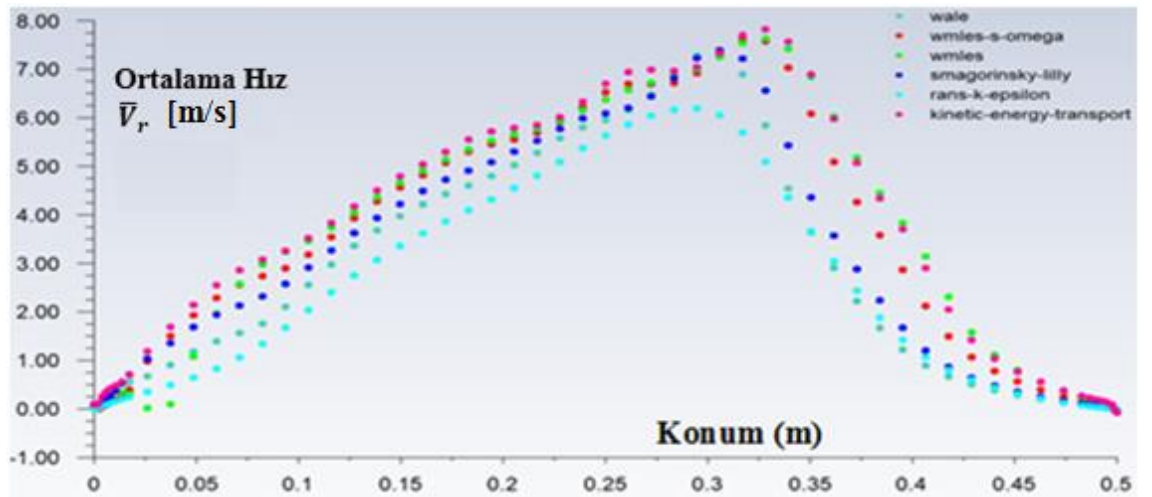
Aşağıdaki şekil 4.47 ile r - z düzleminde bir çizgi üzererinden alınan k - ϵ ve LES modeli ortalama hız değerleri karşılaştırma yapılmıştır. Ortalama hızları karşılaştırmak amacı ile alanın merkezinde gazlaştırıcı boyuna dikey bir çizgi çizilerek ve üzerinden değerler alınarak yapılmıştır. RANS sonuçları ile LES ile elde edilen sonuçların bir birine oldukça yakın sonuçlar olduğu görülmektedir. Bu da LES simülasyonu için kullanılan gazlaştırma için reaktif akış çözüm prosedürünü doğruladığını göstermektedir.

Şekil 4.47 ve 4.48'de gösterildiği gibi, LES türbülans modelleri ve RANS k - ϵ türbülans modelleri arasında bazı farklılıkların meydana geldiği kolaylıkla görülebilmektedir. Şekil 4.48'de de gösterildiği gibi, gazlaştırıcıdaki reaktif türbülanslı akış daha yakından analiz edildiğinde, WALE LES modelinin bu LES modelleri arasında k - ϵ modeli ile en yakın sonuçları ürettiğinden dolayı en uygun sonuçları veren model olduğuna karar verilmiştir. WALE sonuçları, RANS'ın sonuçlarına çok yakın gözükmemektedir. Dikkat çekici bir farklılaşma sadece pik noktasında görülmektedir. WALE modeli ile k - ϵ modeli nin sonuçları özellikle grafiklerin sol ve sağ taraflarında özellikle birbirine çok yakın değerler olduğu gözükmemektedir.



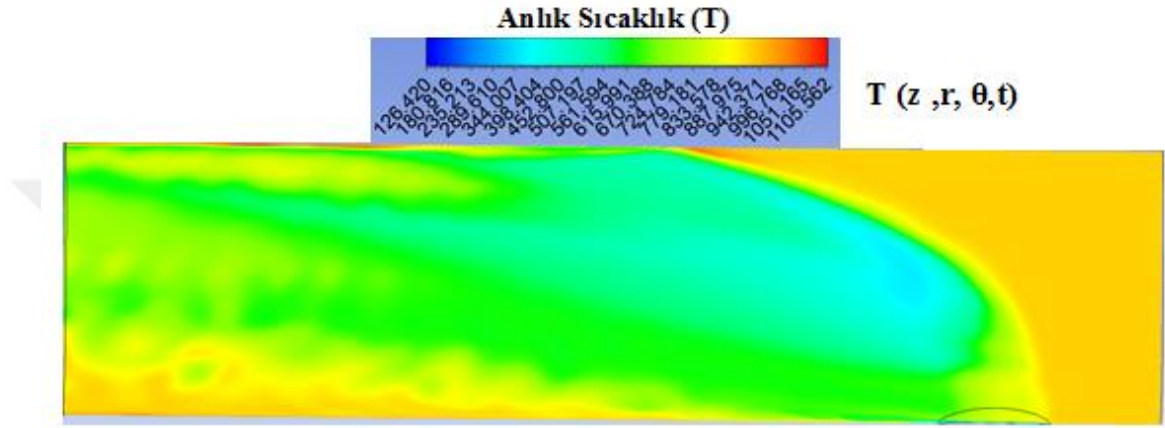
Şekil 4.47. Smagorinsky-Lilly, WALE, WMLES, ve k-ε modellerinin karşılaştırılması.

Tüm LES modelleri ve RANS modeli aşağıdaki Şekil 4.48'te birlikte görüntülenmiştir. Ortalama hız değerleri karşılaştırıldığında, LES sonuçlarının meydana getirdiği oldukça küçük olan tutarsızlıkların da çok daha ince ağ yapısı ve daha küçük zaman adımı kullanımı ile giderileceği düşünülmektedir. Buradan çıkarılacak diğer önemli bir sonuç ta LES modeli ile problem çözümlerinin hesaplanmasında çok ince bir ağ yapısı kullanmanın ve çok küçük zaman adımları ($t=0.001s$ zaman adımı kullanılmıştır.) ile işlem yapmanın gerekli olduğudur.



Şekil 4.48. LES modellerinin RANS k-ε modeli ile karşılaştırılması.

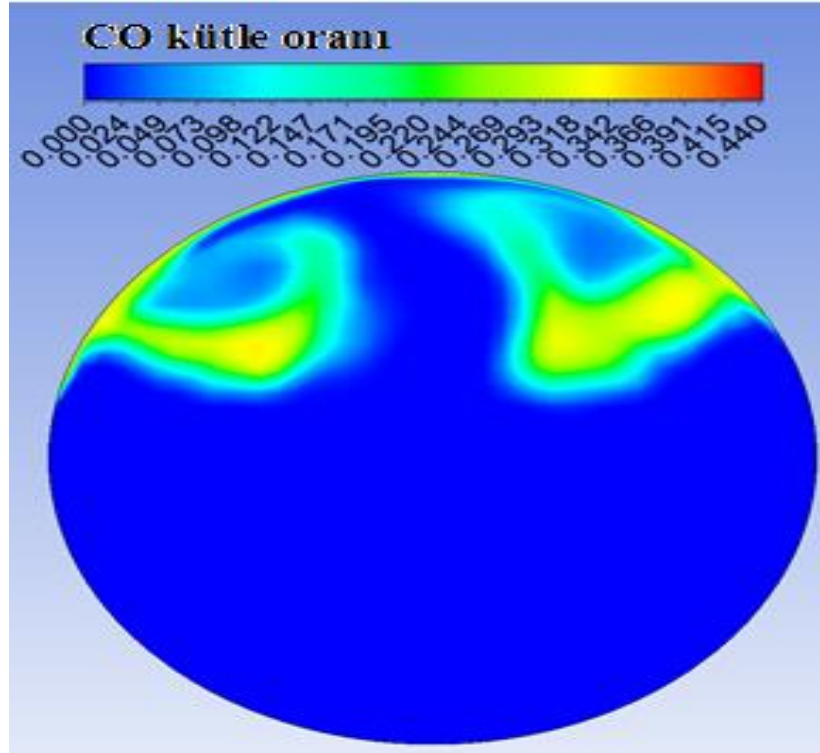
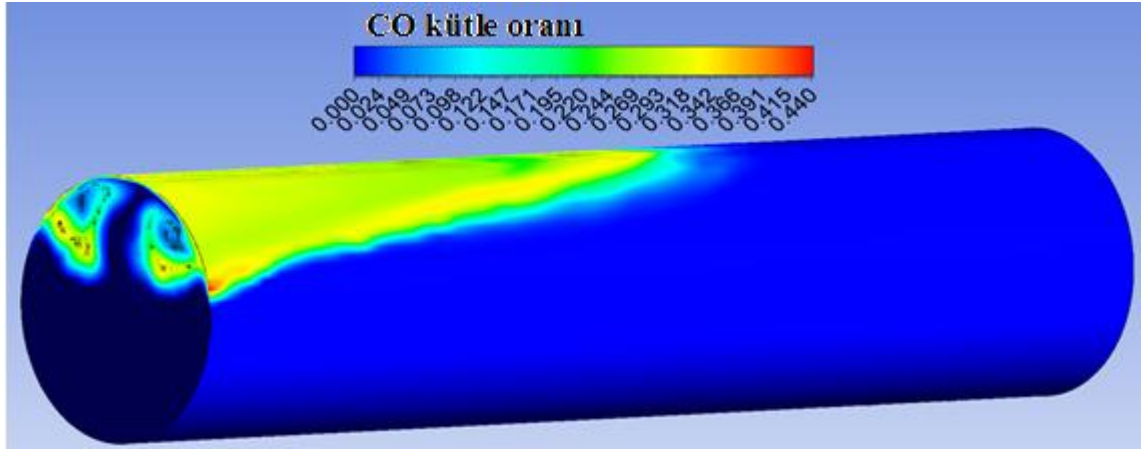
Yukarıdaki elde edilen bu sonuçlar ışığında, en iyi LES türbülans modelinin WALE modeli olduğu yukarıdaki değerlendirmeler ile karar verildiğine göre, bundan sonra WALE modeli ile gazlaştırma hesaplamaları devam edilerek $t = 6$ s sonunda aşağıdaki şekil 4.49 ve şekil 4.50 de görüleceği üzere bazı gazlaştırma parametre değerleri contur grafikleri ile görselleştirilmiştir. Şekil 4.49 r - z orta kesit düzlemi sıcaklık dağılımı göstermektedir.



Şekil 4.49. Orta düzlem anlık statik sıcaklık dağılımı.

Sıcaklık dağılımının anlık değerler olduğu ve 6 saniye sonundaki sıcaklık dağılımından alındığı unutulmamalıdır. LES modeli ile yine sıcaklık dağılımında da türbülanslı akış ile oluşan girdapların nasıl nerelerde ve ne kadar büyükte oldukları görülebilmektedir. Gaz katı karışımının olduğu bölgeler daha düşük sıcaklıklı bölgeler olarak da görülmektedir.

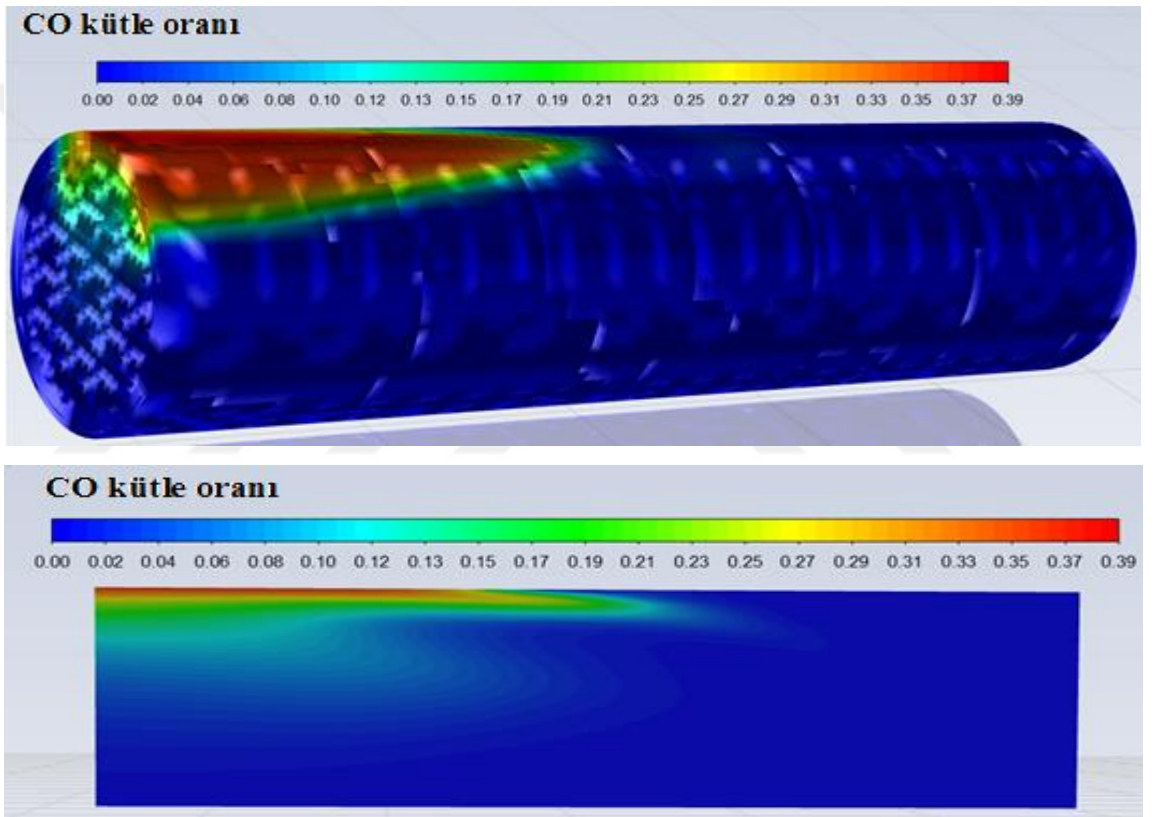
Şekil 4.50 ise gazlaştırma ana ürünlerinden CO kütle oranını göstermektedir. Maksimum kütle oranı ve CO oluşum bölgeleri bu şekil ile gösterilmiştir. Bu şekil ile birlikte aynı zamanda çıkış bölgesindeki CO miktarıda dağılımı ile birlikte gösterilmiştir. Yüksek oranlarda CO miktarı üretildiği gözükmemektedir. LES modeli ile daha gerçekçi bir gazlaştırma çalışması yapıldığı düşünülmektedir.

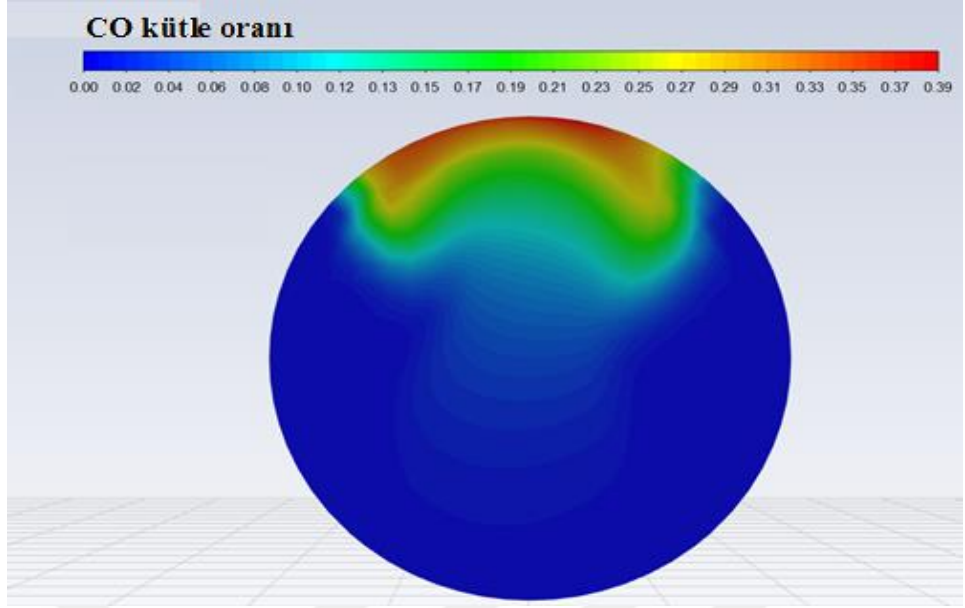


Şekil 4.50. CO Kütle oranı dağılımı.

3.5. DDPM, Makroskopik ve PBM ile Modelleme

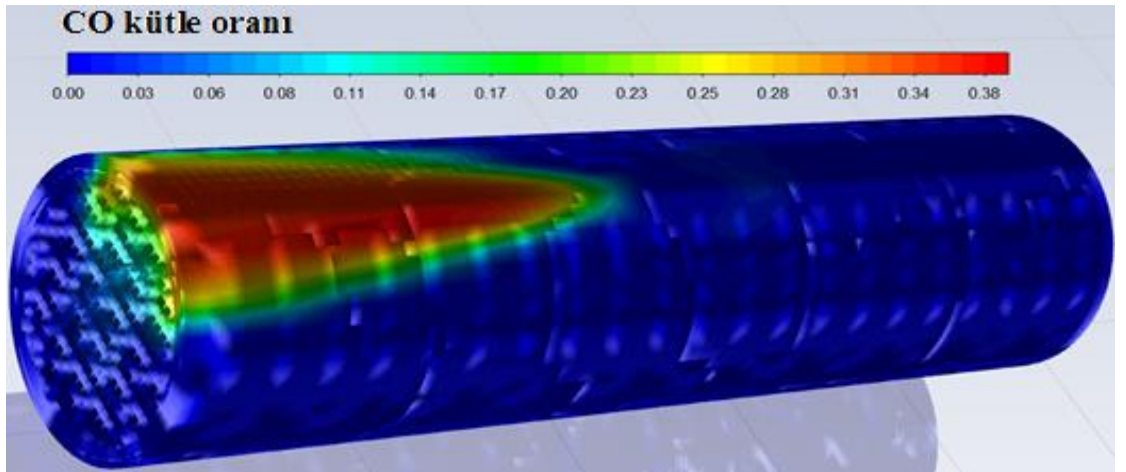
Şekil 4.51. DDPM-DEM yaklaşımıyla sonuçları göstermektedir. Bu yaklaşım partiküller için granüler kinetik teori kullanmamıştır. Element yöntemi isimli yaklaşım ile parçacık dağılımlarını sıcak gaz ile birlikte hesaplamalarını yapmıştır. Orta düzlem kesit olarak, çıkış bölümünde ve tüm geometri olarak CO oranı hesaplanıp diğer yöntemler ile karşılaştırılmıştır. Burda LES yöntemi kullanılmamış olup türbülans yöntemi olarak yine k- ϵ seçilmiştir.

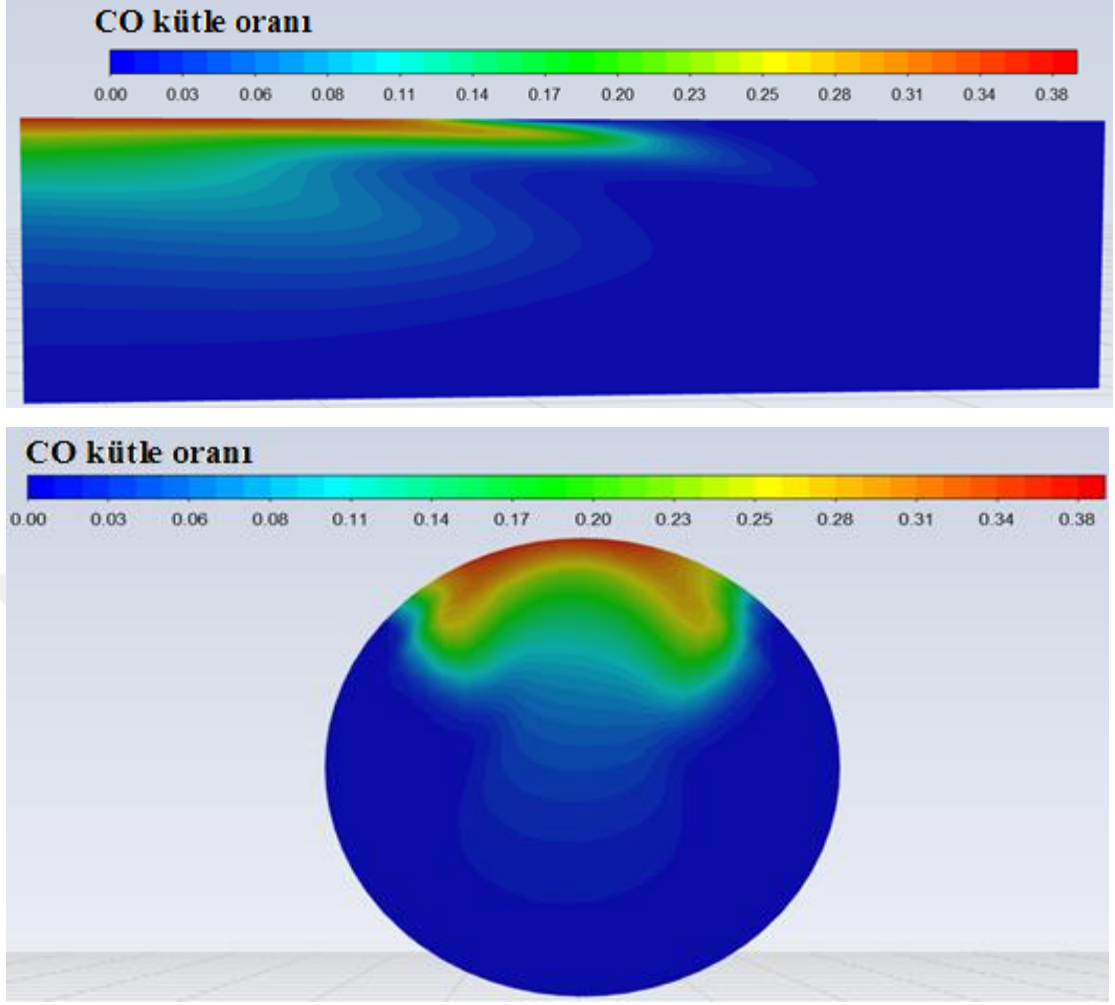




Şekil 4.51. DDPM-DEM ile çıkışta CO kütle oranı dağılımı.

Şekil 4.52. DDPM-KTGF sonuçlarını gösterir. Yoğun ayrık faz modeli (DDPM) granüllü akışların kinetik teorisini (KTGF) kullanarak parçacık çarpışmalarını ve sıcak gaz ile olan arayüz etkileşimini hesaplamıştır. Yukarıdaki DDPM-DEM modeli ile benzer sonuçlar üretmiştir. İki yönteminde DPM yöntemine göre daha kullanışlı olduğu görülmektedir. CO ürünlerini daha yüksek miktarda hesaplamaktadır.





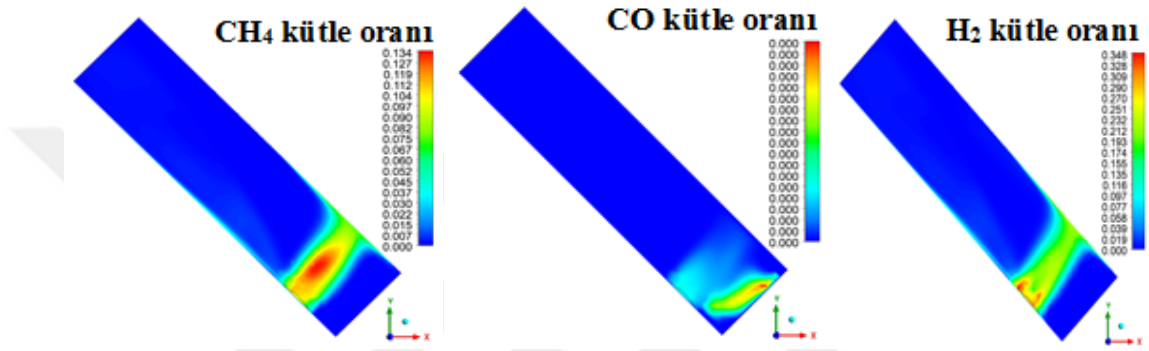
Şekil 4.52. DDPM-KTGF ile CO kütle oranı dağılımı.

Makroskobik partikül (MPM) ve popülasyon dengesi modeli(PBM) ile modelleme, yalnızca giriş seviyesi analizleri için kullanılmıştır. Sonuçlar aşağıdaki şekil 4.53 ile paylaşılmıştır. Gazlaştırma analizlerine özellikle akışkan yatak ile gazlaştırma çalışmalarına oluşturulan modelin verimliliğini artıcı yönde kayda değer katılar sağlayacağı düşünülmektedir. İlk etapta PBM modeli ile CO kütle oranı ile ilgili istenilen sonuçlara ulaşılamasada, Daha doğru parçacık hareketleri için MPM ve parçacıkların boyut dağılımları ise PBM modeli ile daha doğru sonuçlar verebileceğini görebilmek için detali çalışmalar bu tezin tavsiyelerinden biridir.

138

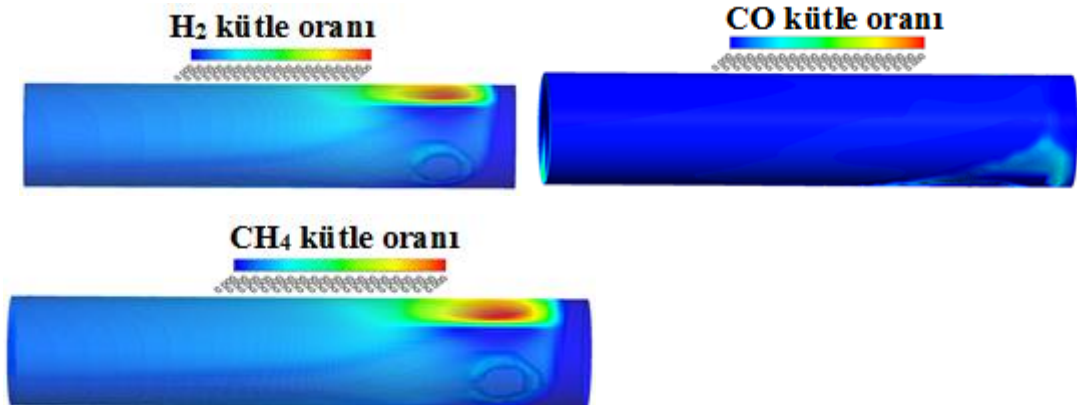
4.6. Yeni Alt Modelleme Teknikleri Kullanımı

Karışım, ısı, kütle transferi, hidrodinamik ve reaksiyon verimleri yani bunları içine alarak kapsayan gazlaştırma verimi gazlaştırıcının yatay ile yaptığı açılarda 0° , 45° , ve 90° derece olmak üzere üç farklı açıda araştırılmıştır. Hesaplamalar zamana bağlı olarak gerçekleştirilmiştir. RANS tabanlı türbülans modeli kullanılmıştır. Sonuçlar, şekil 4.54'te gösterildiği gibi simülasyon süresi $t = 1,5$ s civarında olduğunda alınmıştır.



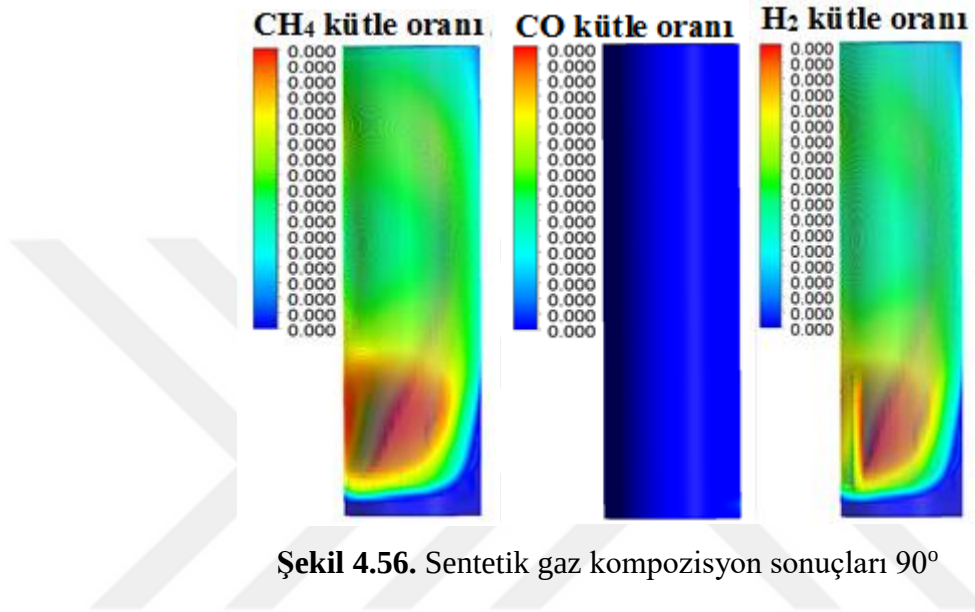
Şekil 4.54. Sentetik gaz kompozisyon sonuçları 45° .

Şekil 4.55'te gösterildiği gibi, sentez gazı bileşimleri, simülasyon süresi $t = 1,5$ s civarında olduğunda alınmıştır. Bu sonuçlar gazlaştırıcının yatayla yapmış olduğu açı 0° olduğunda elde edilmiştir. Sonuçlar incelendiğinde gaz kompozisyonu miktarının 45° ye göre oldukça düşük olduğu gözükmemektedir.



Şekil 4.55. Sentetik gaz kompozisyon sonuçları 0°

Şekil 4.56'da gösterildiği gibi gazlaştırıcı yatayla yapmış olduğu açı 90° olduğunda gazlaştırma sonucu çıkan gaz karışımı miktarı incelenmiştir. Sonuçlar yine simülasyonun başlangıcında $t = 1,5$ s civarında alınmıştır. 90° ve 0° derece ile elde edilen sonuçlar birbirine yakın sonuçlar olmalarına rağmen 45° ile elde edilen sonuçların çok daha yüksek olduğu gözlemlenmiştir.



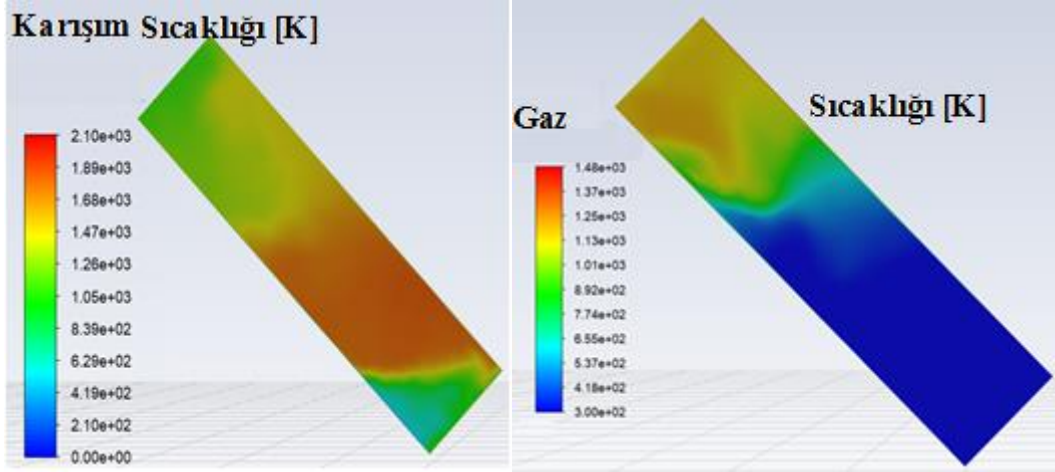
Şekil 4.56. Sentetik gaz kompozisyon sonuçları 90°

Burada karışım parametrelerinin hesaplanması için, yani katı parçacıklar ve gazların birleşimi ile oluşan çok fazlı akış karışımı için, bazı formülasyonlar verilmiş ve karışım sıcaklık değeri hesaplanmıştır.

Karışım ısı iletim katsayısı, gaz ısı iletim katsayısı çarpı gaz hacim oranı artı katı parçacık ısı iletim katsayısı çarpı katı parçacık hacim oranı ile formüle edilir. Ortalama ısı transfer katsayısı (h) ise aşağıdaki formülizasyon ile hesaplanmaktadır.

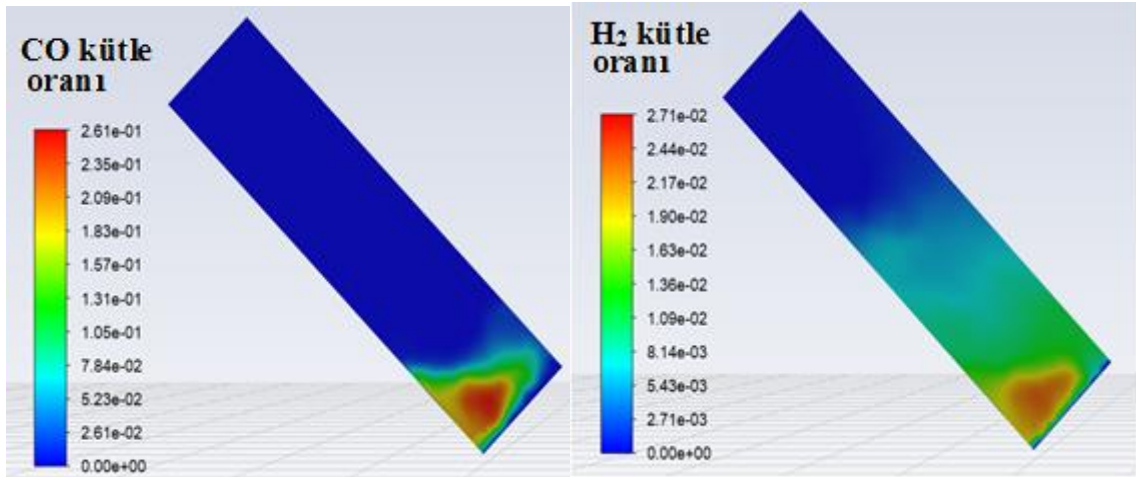
$$h = k_{mix} * (T_{mix} - 273) / (58.5 * 10^{-6}) / 80$$

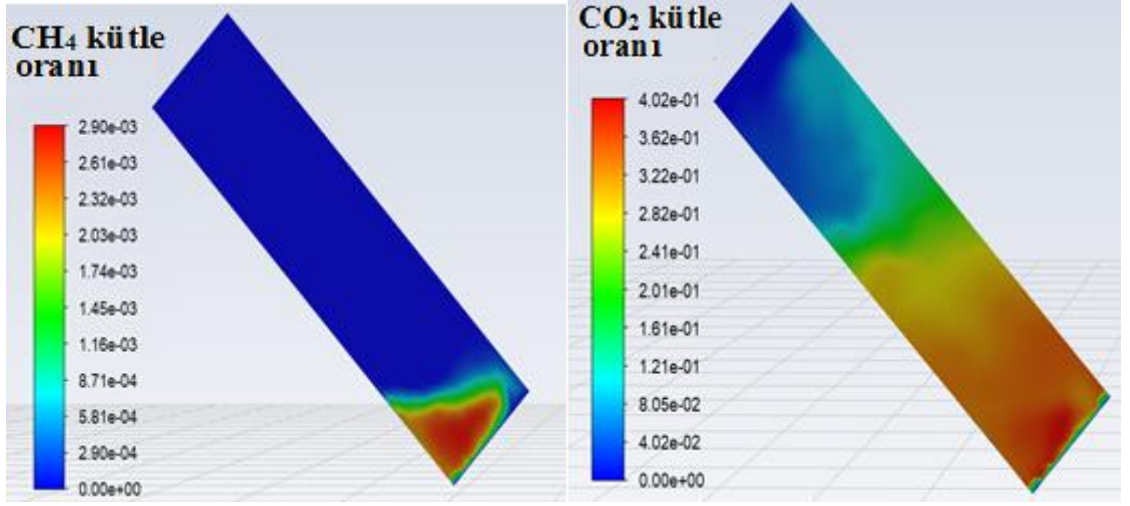
Karışım sıcaklığı, şekil 4.57'de gösterildiği gibi, gaz sıcaklık çarpı gaz hacim oranı artı katı parçacık sıcaklık çarpı katı parçacık hacim oranı ile hesaplanmaktadır. Bu yöntem ile etapta bazı parametreler her faz için farklı hesaplanabilirken çok fazlı karışım için de tek bir parametre hesaplanabileceği gösterilmektedir.



Şekil 4.57. Karışım ve gaz sıcaklığı.

Bu bölümün son işlemi ise, granüler dolgulu yatak yaklaşımı ile katı parçacıklardaki gözenekliliği araştırmıştır. Buradaki gözenekli yapı araştırma, araştırma yöntemi, hesaplamaları ve elde edilen sonuçların sadece bir başlangıç çalışması olduğu kabul edilmelidir. Gözenekli yapıyı katı parçacık içerisinde tanımlayan model oldukça basit bir yapıya sahip olup, gerçek gözenekli yapıdan uzak bir yaklaşım olduğu da kabul edilmelidir. Bir adım daha ileri götürülmeli ve daha detaylı bir araştırmaya gereksinim duyduğu belirtilmelidir. Simülasyon için sonuçları $t = 16,5$ s için alınmıştır ve aşağıdaki şekil 4.58'de gösterilmiştir.





Şekil 4.58. Sentetik gaz kompozisyonuna gözenekli yapı etkisi.

Şekil 4.58'de gösterildiği gibi, katı parçacıkların gözenekliliği, ürün gazının ana türlerinin kütle oranını azaltmıştır. İlk araştırma, sonuçları verimliliğin daha düşük yönünde olduğunu belirtmektedir. Gözenekli yapı katı parçacık miktarını azaltacağı için çıkan gaz miktarında ona göre azalacağı düşünülmelidir.

5. SONUÇ

Bu doktora (Ph.D.) tezinin içeriğinden çıkarılacak sonuçlar ise, akışkan yatak gazlaştırmanın CFD modellemesi ve uygulanmış farklı geliştirilmiş modelleme teknikleri ile, şimdiye kadar yapılmış olan çalışmalara kıyasla daha kapsamlı bir bakış açısı sağlayacağı düşünülmektedir. Aynı zamanda gaz bileşimi, basınç, hız ve sıcaklık sonuçları gibi parametrelerin ve gazlaştırıcı proses araştırması, tasarımı, optimizasyonu için değerli bir çalışma olduğu da kabul edilmektedir. Katı parçacıkların gazlaştırılması işlemi CFD açısından gelişmekte olan bir konu olup, özellikle CFD simülasyonlarının biyokütle sistemlerinin tasarımı ve işletiminde gerçek bir değer yaratacağı düşünülmektedir. Bu çalışmanın ilgili araştırma alanına farklı bir bakış açısı yeni bir yaklaşım, yöntem ve daha farklı ışık tutacağına da inanılmaktadır.

Bu çalışmada kısaca özetlemek gerekir ise, CFD yöntemleri kullanılarak gazlaştırma prosesinde ısı transferi, kütle transferi, kimyasal reaksiyonlar ve çok fazlı akışa ait ileri düzey bir matematiksel ve fiziksel model geliştirilmiştir. Bu model ile daha sonra proses verimliliğine etki eden parametrelerin etki oranları, optimum çalışma ve dizayn koşulları tespit edilmiştir.

Çalışmalar sırasında Eulerian-eulerian ,Eulerian-lagrangian çok fazlı modeller yaklaşımları kullanılmıştır. Akışkan yatak gazlaştırıcı basıncı 101305 Pa olarak atmosfer basıncı alınmıştır. Partikül boyutu ortalama 0,5 mm, yanma sıcaklığı 900-1200 °C, gaz çıkış sıcaklığı 700-900 °C soğuk gaz verimi, sıcak gaz verimi de hesaplanarak değerlendirmeleri bölümler içerisinde yapılmıştır. Yatak malzemesi de yine yakıt malzemesinden aynı boyutlarda seçilmiştir.

Öncelikle giriş ve literatür araştırmasından sonra, bölüm 3.1’de gazlaştırma hidrodinamiğini incelemek olmuştur. Hidrodinamiği ve parametreleri bölüm içerisinde detaylıca açıklanmış , özellikle sürüklenme modelinin kullanılması ile ilgili önemli bilgiler verilmiş olup, bu çalışmaya özel bir sürüklenme modeli geliştirilmiş ve hesaplama algoritmasına ilave edilmiştir. Yapılan simülasyon çalışmalarının literatürde sanal deneyler olarak da kabul edildiği belirtilmiştir. Deneysel bir model ile de elde edilen

sayısal sonuçların karşılaştırılarak çalışmanın yani geliştirilen hidrodinamik modelin doğrulama ve onaylaması da yapılmıştır.

Tezin 3.2 bölümünde ise, 2-D bir gazlaştırma modeli geliştirilmiş olup, akışkan yatak gazlaştırma işlemi, farklı türbülans modelleri ve duvar fonksiyonları kullanılarak CFD yaklaşımı ile modellenmiştir. Önceikle, iki heterojen ve bir homojen reaksiyon olmak üzere bu çalışmada üç kimyasal reaksiyon kullanılmıştır. Gazlaştırma işleminin iki önemli reaksiyonu olan uçucu madde devolatilizasyonu ve sabit karbon (char) yanması ile ilgili detaylı alt modeller geliştirilerek problem çözüm algoritmasına eklenmiştir. Geliştirilen CFD modeli, tam doğrusal olmayan bağlı kısmi diferansiyel denklemleri çözdükten sonra, CO molar konsantrasyonu, gaz karışım ve katı parçacık karışım akım çizgileri, gaz karışım türbülans kinetik enerjisi ve hız dağılımı ve CO₂ mol oranının kontour grafikleri elde edilmiştir. Gazlaştırma verimliliği, ekonomik fizibilite açısından bir gazlaştırıcının parametrelerini oluşturmada önemli bir faktördür. Soğuk gaz verimi ve sıcak gaz verimi %59 ve %66 olarak hesaplanmıştır. Işınım ile ısı transfer hesaplamalar ve katı parçacıklar içerisinde bulunan nemin buharlaşması hesaplamalara dahil edilmemiştir. Farklı türbülans modelleri içerisinde bu çalışma için en uygun modelin Standart k- ϵ olduğu tespit edilmiştir.

Tezin 3.3 bölümünde ise 3-D boyutlu bir gazlaştırma modeli geliştirilmiştir. Bu model bir önceki bölümde geliştirilen 2-D modeline göre daha kapsamlı bir çalışma olmuştur. Çok sayıdaki meydana gelen kimyasal reaksiyonlar modellenmiş, radyasyon ile ısı transferi ve buharlaşma ise model içerisine adapte edilmiştir. Bir sınır değer problemi çözümü olduğu vurgulanmıştır. Bir optimizasyon çalışması da modele dahil edilerek bu çalışma, içerik, elde edilen kazanımlar ve sonuçlar cinsinden daha zengin duruma getirilmiştir. Bu geliştirilen CFD modeli, gazlaştırıcı tasarımını, süreç optimizasyonunu önemli ölçüde etkileyecektir. Bu çalışma, kimyasal türlerin taşınması, karıştırılması ve reaksiyonu için bir model sağlamıştır. Endüstride veya akademide kullanılması faydalı ve etkili olacaktır. Reaksiyon tasarımı, enerji şirketlerinin ticari, hükümet ve akademik pazarlarda kimyasal süreçlerin analizini otomatize ederek temiz teknoloji hedeflerine hızla ulaşmalarına yardımcı olacağı beklenmektedir. Bu reaksiyon modeli ayrıca birçok

mühendis ve araştırmacının gazlaştırma sistemlerini optimize etmesine ve verimliliği artırmasına yardımcı olacaktır.

Tezin 3.4 bölümünde ise, geliştirilen gazlaştırma modellerine LES türbülans modelleri dahil edilerek çalışmalar yapılmıştır. Gazlaştırma çalışmalarına çok az sayıda LES modeli uygulaması olduğu için bu bölümde bu çalışmaya yer verilmiş ve önemi vurgulanmıştır. Öncelikli olarak LES ile yapılan çalışmanın zorluklarından bahsedilmiş olup daha sonra LES modelleri ile sonuçlar alınarak değerlendirmeleri yapılmıştır. Kullanılan farklı LES türbülans modelleri ile çalışmalar yapılmış ve aralarındaki farklar belirlenmiştir. RANS tabanlı k- ϵ türbülans modeli ile de karşılaştırılarak sonuçların doğruluğu açısından ortalama hız değerleri karşılaştırılmıştır. Belirlenen en uygun LES modeli WALE model olarak kabul edilmiş ve bu model ile gazlaştırma sonuçları elde edilmiş olup değerlendirmeleri yapılmıştır. Şimdiye kadar zamandan bağımsız çalışmalar yapılmıştı. Bu bölümde ise sonuçlar zamana bağlı elde edilmiştir. Sentetik gaz ana bileşenlerinden olan CO kütle oranının RANS türbülans modelleri kullanımı ile karşılaştırıldığında daha yüksek oranda hesaplandığı gözlemlenmiştir.

Tezin 3.5 bölümünde ise DDPM modelleri ile bir çalışma yapılmış olup burda daha farklı bir çok fazlı akış yaklaşımı ile ilgili model kullanılmıştır. Radyasyon ile ısı transferi modellemesinde farklı bir model olan Discrete Ordinate(DO) modeli kullanılmıştır. Sonuçlar oldukça tutarlı ve yüksek miktarda CO kütle oranı üretilmiştir.

Tezin 3.6 bölümünde ise 3-D boyutlu bir Eulerian-eulerian yaklaşımı ile kullanılan alt modeller ile yeni bir gazlaştırma çözüm modeli geliştirilmiştir. Geleneksel modeller de kullanılan basitleştirmeler bu geliştirilen yeni alt modeller sayesinde ortadan kaldırılmıştır. Yenilenmiş sürükleme modeli, divolatilizasyon modeli, sabit karbon yanma modeli, parçacıklar arası ısı iletimi modeli, buharlaşma modeli ve parçacıklar,gaz ve gazlaştırıcı duvarları arası radyasyon alt modelleri ile birlikte bir çözüm yapılmış olup yeni bir gazlaştırma modeli oluşturulmuştur. Geliştirilen alt modeller UDF ile çözüm algoritmasına adapte edilmiştir. Bu model ile gazlaştırıcının yatay konumu ile yaptığı açının 0°, 45° ve 90° derece de meydana getirdiği sentetik gaz bileşenlerinin kütle miktarları incelenmiştir. Yine bu çalışma literatürde çok az bulunan bir çalışma olup, bu

tez ile yapılan bu katkının gazlaştırıcı tasarımına ve gazlaştırma araştırmasına farklı bir bakış açısı getireceği beklenmektedir. Ayrıca fazlar arası karışım fömülizasyonları ve hesaplamaları yapılmış olup, son olarak katı parçacıkların gözenekli yapısı ile ilgili bir hesaplama da ilave edilmiştir.

Gelecek çalışmalar için öneriler ise akışkan yataklı gazlaştırma sistemi için en uygun analitik yöntemin geliştirilmesi için çalışmaların teorik olarak ta yapılması beklenmektedir. Bu geliştirilen modelin farklı akışkan yatak örneğın dolaşımlı akışkan yatak yada basınçlı akışkan yatak sistemlerine de uygulanması diğerk bir tez önerisidir. Enerji ve ekserji analizlerinin de yapılması uygun bir çalışma olarak gözükmektedir. Reaksiyon tasarımı, CHEMKIN-CFD yazılım modülü kullanılarak da modellenebilir. Reaktif akış, tam gelişmiş akış etkilerinin de dikkate alınmasıyla modellenebilir. Gazlaştırma işleminin özelliklerini ölçmek için akışkan yatak gazlaştırma için bir gazlaştırma testi ekipmanı detaylı olarak kullanılması sayısal hesaplamalar ile paralel önemli bir çalışma olacaktır. Özellikle , basınç, hız ve sıcaklık dağılımını ve üretilen sentetik gazı miktarını ölçmek için özel ölçüm ekipmanları sağlanmalıdır. MPM ve PBM modellerinin kullanıldığı daha fazla çalışmalara yer verilmelidir. DNS türbülans hesaplama yönteminin gazlaştırma işlmine uygulanarak hesaplamaların yapılabileceğı de gösterilmelidir. Optimizasyon çalışmaları daha farklı paramereler için de uygulanarak farklı optimizasyon yöntemleri ile genişletilmelidir. MATLAB yazılımı modellemesi ile CFD çalışmaları birleştirilip gazlaştırma araştırmalarına farklı bir derinlik kazandırılmalıdır.

Gazlaştırma işlemi ayrıca besleme malzemesi ve yatak malzemesi partiküllerinin boyutu, partiküllerin şekli, malzemenin yapısı (gözenekli, gözeneksiz), ortam (reaktif hava / oksijen, inert Azot / Argon) ile optimize edilmelidir, ortamın akışı ve ısıtma hızı (yavaş-hızlı), Sıcaklık (Düşük <500 °C, Yüksek> 500 °C) şartlarında çalışmalar genişletilmelidir.

KAYNAKLAR

- Addison, K. S., Altantzis, C. Bates, R. B., Ghoniem, A. F. 2016.** Towards an advanced reactor network modeling framework for fluidized bed biomass gasification: incorporating information from detailed CFD simulations. *Chemical Engineering Journal*, 303: 409-424.
- Adeyemi I., Arink T., Janajreh, I. 2015.** Numerical modeling of the entrained flow gasification (EFG) of kentucky coal and biomass. *The 7th International Conference on Applied Energy, Energy Procedia* ,75:232 – 239.
- Agung, M., S., A., Wijayanta T., Nakaso, K., Fukai, J. 2015.** Study on coal gasification with soot formation in two-stage entrained-flow gasifier. *Int J Energy Environ Eng*, 6:255–265.
- Ahmad, A. A., Zawawi, N. A., Kasim, F. H., Inayat, A., Khasr, A. 2016.** Assessing the gasification performance of biomass: A review on biomass gasification process conditions, optimization, and economic evaluation, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 53:1333–1343.
- Alam, S. M., Tri, A., Nakaso, K. W., Fukai, J. 2015.** Study on coal gasification with soot formation in two-stage entrained-flow gasifier, *Int J Energy Environ Eng*, 6:255–265.
- Anderson, J.D. Jr. 1996.** Basic philosophy of CFD: computational fluid dynamics an Introduction, Ed.: Wendt, John F., A VKI Book, Springer, Germany, pp: 3-14.
- Andersson, B., Andersson, R., Hakadnsson, L., Moertensen, M., Sudiyo, R., Wachem, B.V. 2011.** Computational fluid dynamics for engineers. Cambridge University Press, New York, USA, 186 pp.
- Anonim 2020.** GSTC Global syngas technologies council. <https://www.globalsyngas.org/resources/the-gasification-industry->(Eriřim tarihi 05/12/2020).
- Anonim 2016.** History of gasification.<http://www.gocpc.com/what-is-gasification.html1#:~:text=History%20of%20Gasification&text=Initially%20in%20the%20US%2C%20gasification,was%20used%20to%20make%20electricity-> (Eriřim tarihi 15/03/2021).
- ANSYS, Inc. 2020.** Modeling heterogeneous reactions with eulerian-granular flow.;16-25.
- ANSYS, Inc. 2020.** Heat transfer modeling using ANSYS Fluent, radiation heat transfer lectures.
- Bakul, J.E.C., Gershtein, Y.V., Xianming, L. 2001.** Computational fluid dynamics in industrial combustion. CRC Press, New York, USA, 431pp.

- Baruah D, Baruah D. C. 2014.** Modeling of biomass gasification: a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 39: 806-815.
- Becket, R. B., Fricke A. G. 1997.** Modeling transport processes in heat and mass releasing porous media. *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 24:439-448.
- Begum, S., Rasul, M. G., Akbar, D. 2013.** A Numerical investigation of municipal solid waste gasification using aspen plus. *Procedia Engineering*, 90 : 710–717.
- Billaud J., Valin S., Peyrot M., Salvador S. 2016.** Influence of H₂O, CO₂ and O₂ addition on biomass gasification in entrained flow reactor conditions: Experiments and modelling. *Fuel*, 166:166-178.
- Belhadj, E., Chilton, S., Nimmo, W., Roth, H., Pourkashanian, M. 2016.** Numerical simulation and experimental validation of the hydrodynamics in a 350 kW bubbling fluidized bed combustor. *Int J Energy Environ Eng*, 7:27–35.
- Benim, A. C., Stegelitz, P., Epple, B. 2005.** Simulation of the two-phase flow in a laboratory coal pulveriser. *Forsch Ingenieurwes*, 69: 197–204
- Beyazoglu, E., Pulat, E. 2019.** Turbulence modeling on fluidized bed gasification, 22nd Int. Thermal Science and Technology Congress, 11-14 September, 2019, Kocaeli, TURKEY
- Beyazoglu, E., Pulat, E. 2020.** Modelling and optimization of a fluidized bed gasification, 15th International Combustion Symposium, 17-19 September, 2020, Kayseri, TURKEY
- Bhatia, S., Perlmutter, D. 1980.** A random pore model for fluid-solid reactions: Isothermal kinetic kontrol. *AIChE J*, 26:379-85.
- Bocci, E., Carlo, A., D., Vecchione, L., Villarini, M., Falco, M., D., Era, A., D., 2013.** Technical-economic analysis of an innovative cogenerative small scale biomass gasification power plant. *ICCSA*, 7972: 256–270.
- Bogdanova, V., George, E., Meynet, N., Kara, Y., Barba, A. 2017.** Numerical CFD simulations for optimizing a biomass gasifier and methanation reactor design and operating conditions. *Energy Procedia*, 120:278–285.
- Brown, B. M., Smoot L. D., Smith, P. J., Hedman, P. O. 1988.** Measurment and prediction of entrained-flow gasification processes. *AIChE J*, 34:435-46.
- Cavazzuti, M., Corticelli A. M., Nuccio, A., Zauli, B. 2013.** CFD analysis of a syngas-fired burner for ceramic industrial roller kiln. *Journal of Mechanical Engineering Science*, 227(11): 2600–2609.

Celik, B. I., Ghia, U., Roache J. P., Freitas J. C., Coleman H., Raad, E. P. 2008. Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications. *Journal of Fluids Engineering, ASME*, 130:1-4.

Chalermssinsuwan, B., Thummakul, T., Gidaspow, D., Piumsomboon, P. 2014. Characterization of fluidization regime in circulating fluidized bed reactor with high solid Particle concentration using computational fluid dynamics. *Korean J. Chem. Eng.*, 31(2): 350-363.

Chen, L., Ghoniem, A. F. 2012. Simulation of oxy-coal combustion in a 100 kWth test facility using RANS and LES: A validation study. *Energy & Fuels*, 26:4783-4798.

Couto, N., Silva, V., Monteiro, E., Paulo, B. P., Rouboa, A. 2015. Using an eulerian-granular 2-D multiphase CFD model to simulate oxygen air enriched gasification of agroindustrial residues. *Renewable Energy*, 77:174-181.

Davidson, L., Nielsen, P. V. 1996. Large eddy simulations of the flow in a three dimensional ventilated room, ROOMVENT'96 5. Int. Conf. On Air Distribution in Rooms, July 17-19, 1996, Yokohama, Japan.

Dernbecher A., Alonso A. D., Ortwein A., Tabet, F. 2019. Review on modelling approaches based on computational Akişkan dynamics for biomass combustion systems. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 9:129-182

Dowd, R. A. 2000. Wabash river coal gasification repowering project. *The U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy, Final Technical Report*, 2000.

Dolu, C., Kuddusi, L. 2017. The Effect of reactor height on coal gasification. *Thermal Science*, 21: 1937–1951.

Gant, E.S. 2010. Reliability issues of LES-related approaches in an industrial context. *Flow Turbulence Combustion*, 84:325-335.

Gerber, S., Behrendt, F., Oevermann, M. 2010. An Eulerian modeling approach of wood gasification in a bubbling fluidized. *Fuel*, 89:2903–2917.

Gunn, D., J. .1978. Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidized beds. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 21:467-476.

Gunarathne, S. D., Chmielewski, K. J., Yang, W. 2014. Pressure drop prediction of a gasifier bed with cylindrical biomass pellets. *Applied Energy*, 113: 258-266.

Gunarathne, S. D., Mueller, A., Fleck, S., Kolb, T., Chmielewski, K. J., Yang, W., Blasiak, W. 2014. Gasification characteristics of steam exploded biomass in an updraft pilot scale gasifier. *Energy*, 71: 496-506.

Farmer, R., Pike, R., Cheng, G. 2005. CFD analyses of complex flows. *Computers and Chemical Engineering*, 29: 2386-2403.

Fletcher F., D., Haynes B., S., Chen J., Joseph D., S. 1998. Computational fluid modelling of an entrained flow biomass gasifier. *Applied Mathematical Modelling*, 22:747-757

Fox, R. O. 2003. Computational models for turbulent reacting flows. New York, USA: 149 *Cambridge University Press*, 477pp.

Halama, S., Spliethoff, H. 2016. Reaction kinetics of pressurized entrained flow coal gasification: computational fluid dynamics simulation of a 5MW siemens test gasifier. *Journal of Energy Resources Technology, ASME*, 138:042204-1.

Hamada, M., Abdelmotalib, M., Youssef, A., Hassan, A, A., Youn, S., B., Im, I. T. 2015. Numerical study on the wall to bed heat transfer in a conical fluidized bed combustor. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, 16:1551-1559

Hamzehei, M., 2011. CFD modelling and simulation of hydrodynamics in a fluidized bed dryer with experimental validation. *International Scholarly Research Network ISRN Mechanical Engineering*, 1:doi 10.5402/2011/131087

Hamzehei, M., Rahimzadeh, H., Ahmadi, G. 2010. Computational and experimental study of heat transfer and hydrodynamics in a 2D gas-solid fluidized bed reactor. *Ind. Eng. Chem. Res.*,49(11):5110-5121.

Herzog, N., Schreiber, M., Egbers, C., Krautz J. H. 2012. A comparative study of different CFD-codes for numerical simulation of gas-solid fluidized bed hydrodynamics. *Computers and Chemical Engineering*,39:41-46.

Höhne, T., Mehlhoop J. P. 2014. Validation of closure models for interfacial drag and turbulence in numerical simulations of horizontal stratified gas–liquid flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 61:1-16.

Horton, R., S., Zhang, Y., Bennett, A. C., Klein, T., M., Petrocelli, F. 2016, Molecular-level kinetic modeling of biomass gasification. *Energy&Fuels*, 30: 1647–1661.

Hwang, M., Song, E., Song, J. 2016. One-dimensional modeling of an entrained coal gasification process using kinetic parameters, *Energies*, 9: 99-120.

Jeong, J. H., Seo, K., D., Hwang, J. 2014. CFD modeling for coal size effect on coal gasification in a two-stage commercial entrained- bed gasifier with an improved char gasification model. *Applied Energy*, 123:29-36.

Jurascik, M., Sues, A., Ptasiński, K., 2010. Exergy analysis of synthetic natural gas production method from biomass. *Energy*, 35:880-888.

Kantarelis, E., Yang W., Blasiak, W. 2014. Effect of zeolite to binder ratio on product yields and composition during catalytic steam pyrolysis of biomass over transition metal modified. *Fuel*, 122:119-125.

Kegerreis, C. K., Schweizer, A. E., and Welch, R. C. W. 1998. The Fluid bed reactor, *ACS Office of Communications*, Baton Rouge, Louisiana.

Kondjoyan, A., Boisson, H. C. 1997. Comparison of calculated and experimental heat transfer coefficients at the surface of a circular cylinders placed to a turbulent cross flow of air. *Journal of Food Engineering*, 34:123-143.

Kondjoyan, A., Daudin, J. D. 1995. Effects of free stream turbulence intensity on heat and mass transfer at the surface of circular cylinder and an elliptical cylinder, axis ratio 4. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38:1735-1749.

Kondjoyan, A., Daudin, J. D. 1993. Heat and mass transfer coefficients at the surface of elliptical cylinders placed in a turbulent air flow. *Journal of Food Engineering*, 20:339-367.

Kumar, S., Shukla, S., K. 2016. Performance of cyclone separator for syngas production in downdraft gasifier. *Advances in Energy Research*, 4: 223-237.

Kumar, M., Ghoniem, A., F. 2012. Multiphysics simulations of entrained flow gasification. part I: Validating the nonreacting flow solver and the particle turbulent dispersion model. *Energy Fuels*, 26:451-463.

Kumar M., Ghoniem A. F. 2012. Multiphysics simulations of entrained flow gasification. Part II: Constructing and validating the overall model, *Energy Fuels*, 26: 464-479.

Kwiatkowski, K., Dudynski, M., Bajer, K. 2013. Combustion of low-calorific waste biomass syngas. *Flow Turbulence Combust*, 91:749–772.

Lee, H., Choi, S., Kim, B. 2010. Understanding coal gasification and combustion modeling in general purpose CFD code. *Korea Advanced Institute of Science and Technology*, 15(3):15-24.

Levendis, A. Y., Atal, A., Carlson, B. J., Quintana, M. D. E. 2001, PAH and soot emissions from burning components of medical waste: examination/surgical gloves and cotton pads, *Chemosphere*, 42:775-783.

Lettieri, P., Mazzei, L. 2009. Challenges and issues on the CFD modeling of fluidized beds: a review, *Journal of Computational Multiphase Flows*, 1:83-131.

Li, J., Bonvicini, G., Tognotti, L., Yang, W., Blasiak, W. 2014. High-temperature rapid devolatilization of biomasses with varying degree of torrefaction. *Fuel*, 122: 261-269.

Liu H., 2014. CFD modeling of biomass gasification using a circulating fluidized bed

reactor. *Ph.D. Thesis*, Faculty of Engineering, Waterloo University, Ontario, Canada.

Liu, A., Elkamel, H., Lohi, A., Biglari, M. 2013. Computational fluid dynamics modeling of biomass gasification in circulating fluidized-bed reactor using the eulerian–eulerian approach. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 52(51): 18162–18174

Liu, A., Elkamel, H., Lohi, A., Biglari, M. 2014. Effect of char combustion product distribution coefficient on the CFD modeling of biomass gasification in a circulating fluidized bed. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 53(13):5554–5563.

Ma, J., Zitney, S., E. 2012. Computational fluid dynamic modeling of entrained-flow gasifiers with improved physical and chemical submodels, *Energy&fuels*,26:7195–7219.

Mellin P.,Kantarelis E., Yang W., 2014. Computational fluid dynamics modeling of biomass fast pyrolysis in a fluidized bed reactor, using a comprehensive chemistry scheme. *Fuel*, 117: 704-715.

Mellin, P., Kantarelis, E., Zhou, C., Yang, W. 2014. Simulation of bed dynamics and primary products, from fast pyrolysis of biomass: steam compared to nitrogen as a fluidizing agent. *Industrial Engineering Chemistry Research*, 53: 12129–12142.

Milioni, A. 2015.Gasification process. Gasification industry. <http://www.oil-gasportal.com/gasification-process> -(Erişim tarihi: 11/30/2020).

Monteiro, E., Couto, N. 2015. Numerical and experimental analysis of municipal solid wastes gasification process.*Applied Thermal Engineering* 78: 185-195

NASA Technical Anonymous 2011. Rocket engine innivations advanced clean energy.[https://spinoff.nasa.gov/ Spinoff2011/er_8.html](https://spinoff.nasa.gov/Spinoff2011/er_8.html)-(Erişim tarihi:12/06/2020)

Nakod, P., M., Shelke, R. E. 2014. A review of sub-models for computation fluid dynamics (CFD) modelling of clean coal technology. *International Journal of Advanced Research in Physical Science*, 1: 22-34.

Nakod, P., Orsino, S., Walavalkar, A., Sami, M. 2013. Development, and validation of a volatile break-up approach for gasification simulations.,38th International Technical Conference on Clean Coal and Fuel Systems, 2-6 June 2013, Clearwater, Florida, USA.

Noymer, P. D., Glicksman, L. R. 1999. Near wall hydrodynamics in a scale model circulating fluidized bed. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42:1389-1403

Patankar, V.S. 2002. Computational modeling of flow and heat transfer in industrial applications. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 23:222-231.

Peneau, F., Boisson, H. C., Kondjoyan, A., Djilali, N., 2004. Structure of a flat plate boundary layer subjected to free stream turbulence. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 18(2):175-188.

Peniguel, C., 1998. Heat transfer simulation for industrial applications: needs, limitations, expectations. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 19:102-114.

Perez, H. V., Abdulkadir, M., Azzopardi, B. J. 2010. Grid generation issues in the CFD modelling of two-phase flow in a pipe. *Journal of Computational Multiphase Flows*, 3:13-26.

Phillips, J. 2020. Different types of gasifiers and their integration with gas turbines, *technical notes, EPRI, Advanced Coal Generation*.

Pour S. M., Weihong, Y. 2014. Performance of pulverized coal combustion under high temperature air diluted by steam. *ISRN Mechanical Engineering*, 2014:4-10.

Wang, R. Q., Wing, A., Law K., Adams, E. E. 2014. Large-eddy simulation (LES) of settling particle cloud dynamics. *International Journal of Multiphase Flow*, 67 (2014) 65–75

Lababidi, A. S., Mba, D., Addali, A. 2012. Upstream multiphase flow assurance monitoring using acoustic emission: Acoustic emission, Editor(s): Sikorski, W., Cranfield, UK, pp:10-249.

Shaw, C.T. 1992. Using computational fluid dynamics. Prentice Hall Int. Ltd., Hertfordshire, UK, 251 pp.

Sikarwar, V. S., Zhao, M., Clough, P., Yao, J., Zhong, X., Memon, Z. M., Shah, N., Anthonyf, J. E., Fennell, P. S. 2016. An overview of advances in biomass gasification, Energy and Environmental Science, *The Royal Society Chemistry*, 9:2939-2977.

Schulze, S. A., Richter, M., Vascellari, A., Gupta, B., Meyer, P., Nikrityuk, A. 2016. Novel intrinsic-based sub model for char particle gasification in entrained-flow gasifiers: Model development, validation and illustration, *Applied Energy*, 164: 805- 814.

Singh, R., I., Brink, A., Hupa, M. 2013. CFD modeling to study fluidized bed combustion and gasification. *Applied Thermal Engineering*, 52:585-614.

Silaen, A., Wang, T. 2012. Investigation of the coal gasification process under various operating conditions inside a two-stage entrained flow gasifier, *J. Thermal Sci. Eng. Appl.* 4: 102-113.

Shen, J. 2014. Global analysis of shell key gasification equipment based on finite element method. Proceedings of the ASME 2014 Pressure Vessels & Piping Conference, July 20-24, 2014, Anaheim, California, USA.

Syamlal, M., Bissett, L. A. 1992. METC Gasifier Advanced Simulation (MGAS) model. Technical Note, U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy. Morgantown, West Virginia.

Syamlal, M., O'Brien, T.J. 1987. The derivation of a drag coefficient formula from velocity-voidage correlations. Technical Note, U.S. Department of energy, Office of Fossil Energy, NETL, Morgantown, WV.

Tennekes, H., Lumley, J. L. 1999. A first course in turbulence, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, London, England, pp295.

Van Ommen, J., R., 2015. Choosing the right fluidization regime: JMBC course particleTechnology.https://www2.msm.ctw.utwente.nl/sluding/TEACHING/ParticleTechnology2015/2015PT_Fluidization_vanOmmen.pdf-(Erişim tarihi:11/24/2020).

Vascellaria, M., Roberts G., D., Hla S., S., Harris J., D., Hassea C. 2015. From laboratory-scale experiments to industrial-scale CFD simulations of entrained flow coal gasification. *Fuel* 152: 58–73.

Verdin, P. G., Thompson, C. P., Brown, L. D. 2014. CFD modelling of stratified/atomization gas–liquid flow in large diameter pipes. *International Journal of Multiphase Flow*,67:135-143.

Versteeg, H. K., Malalasekera, W. 2007. An introduction to computational fluid dynamics.Pearson Education Limited, Harlow,UK, pp497.

Verganelakis, K. 2014. Energy waste, report on gasification test program results. LIFE09 ENV/GR/000307.Greece.

YaoSong, C. ,XiaoWen, S., HuDong, C. 2007. New direction of computational fluid dynamics and its applications in industry. *Science in China Series E: Technological Sciences*, 50:521-533.

Yong Z., S., Ghoniem A. 2012. Modeling the slag layer in solid fuel gasification and combustion –Two –way coupling with CFD. *Fuel*, 97:457-466.

Wang, Y., Yan, L., 2009.CFD based combustion model for sewage sludge gasification in a fluidized bed. *Front. Chem. Eng. China*, 3:138–145.

Wang, L., Xie, X., Wei, G., Li, R. 2017. Numerical simulation of hydrodynamics in a gas-solid fluidized bed.*Particulate Science and Technology*, 35:177-182.

Wecel, G. 2006. BEM-FVM Solution of the Conjugate Radiative and Convective Heat Transfer Problem. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 13 (2): 171-248.

Wen, C., Y., Chaung, T. Z. 1979. Entrainment Coal Gasification Modeling, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*,18: 684-695.

Zimmermann, S., Taghipour F., 2005. CFD modeling of the hydrodynamics and reaction kinetics of FCC fluidized-bed reactors. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44:9818-9827

Zhou, C., Stuermer, T., Gunarathne, R., Yang, W., Blasiak, W. 2014. Effect of calcium oxide on high-temperature steam gasification of municipal solid waste. *Fuel*, 122:36-36.



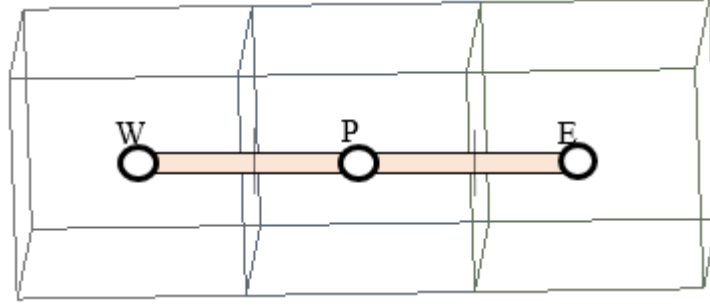
EKLER

EK 1	Tek ve Çok Fazlı Akışlar İçin Sonlu Hacim Yöntemi
EK 2	Buharlaştırma veya Kurutma Temel Denklemleri
EK 3	FLUENT Algoritma Akış Şeması
EK 4	Kullanıcı Tanımlı Fonksiyonlar (UDF)

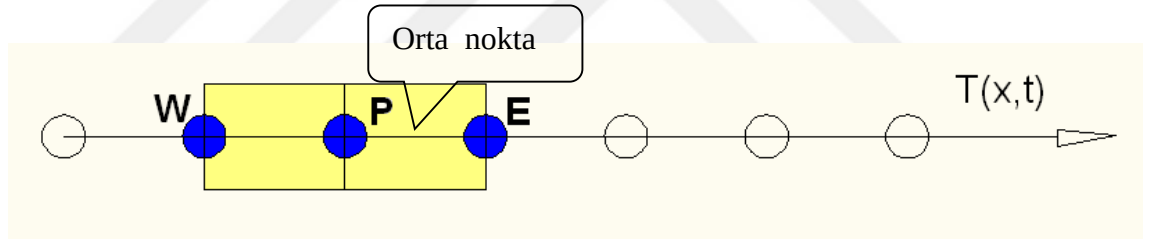


EK 1 Tek ve Çok Fazlı Akışlar için Sonlu Hacim Yöntemi

Çözüm yapılırken komşu hücreler dikkate alınır. Akışın değişkenleri bu hücrelerin merkezinde (P) bulunmaktadır. Genel olarak her hücrenin komşusu W, E noktaları olacaktır.

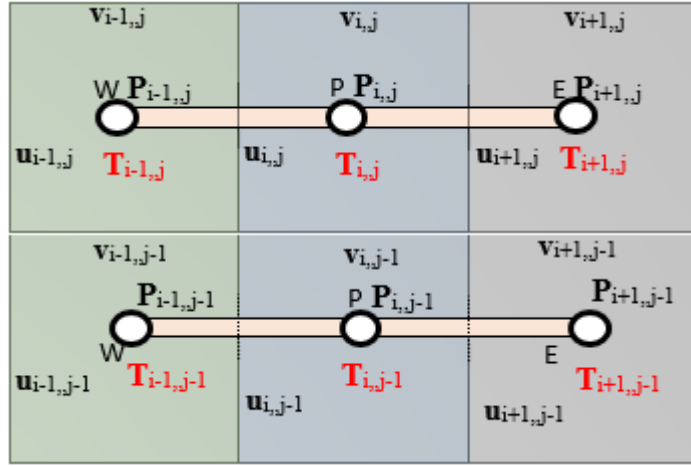


İkinci dereceden sonlu hacim yönteminde, akış değişkenleri (P, T, V) hücre boyunca doğrusal olarak değişir. Değerler hücre ağırlık merkezinde hesaplanır. Sonlu hacimler yöntemi için kontrol hacmi

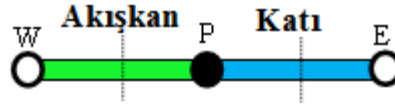


Sonlu hacimler yöntemi yaklaşımı ile hücre merkezi yöntemi (cell center method)

$$\left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t}\right)_P = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t}\right)_{L=W} + \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t}\right)_{R=E} \right] + \bar{H}_i$$



Sonlu hacimler yönteminde ara yüzey



Navier-Stokes denklemlerinin sonlu hacimler formuna dönüştürülmesi

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial x} = 0$$

burada $u=(u, v, w)$ x, y, z yönlerindeki akış hızlarının bileşenleridir ve ρ yoğunluktur. Bir kontrol hacmi (veya sonlu bir hacim) için süreklilik denkleminin integral formu şu şekilde yazılabilir.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \int \rho dV + \int \rho u \cdot dS = 0$$

Burada V control hacmidir, S ise control yüzeyidir. $u=(u, v, w)$, ve S yüzey vektörüdür.

$$\frac{\partial(\rho V)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V V) = -\nabla P + \nabla \cdot \left(\mu (\nabla V) + (\nabla V)^T \right) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot V) I + \rho g$$

SIMPLE algoritması için aşağıdaki matris formunda yazılmıştır.

$$MV = B$$

Burada M matris katsayısıdır. Sabit sıkıştırılmaz N-S denklemleri için;

$$\nabla \cdot (VV) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nabla \cdot (v \nabla V) + g$$

Denklemleri ayırmak için genel bir 3-D çok yüzlü hücre kullanılacaktır ve hücre boyunca N-S denklemlerini integrali alınınca

$$\int \left[\nabla \cdot (VV) + \frac{1}{\rho} \nabla P - \nabla \cdot (v \nabla V) - g \right] dV = 0$$

$$\int [\nabla \cdot (VV)] dV = \int \left[\frac{1}{\rho} \nabla P \right] dV + \int [\nabla \cdot (v \nabla V)] dV + \int g dV = 0$$

Her bir terim ayrı şekilde integrali alındığında sabit kaynak terimleri için,

$$\int g dV = g V_p$$

V_p , P hücresinin hacmidir. Termal (iç) enerji (e) denklemi ise

$$\frac{\partial(e)}{\partial t} + \nabla \cdot (Ve) = -\nabla \cdot q + S_e$$

$$e = C_p T$$



$$\vartheta \frac{\partial V}{\partial y} = \frac{\tau_w}{\rho}$$

$$\alpha \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{q_w}{\rho C_p}$$

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V C_p T) = -\nabla \cdot \vec{q} + S_e$$

$$\text{Isı Akısı}, \vec{q} = -k \nabla T$$

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V C_p T) = k(\nabla^2 T + S_e)$$

Malzeme özellikleri sabit kabul edildiği zaman,

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (VT) \right) = k(\nabla^2 T + S_e)$$

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$$

ANSYS FLUENT basınç ve konveksiyon terimlerini birleştirir

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (V \rho E) + \nabla \cdot (P V) = -\nabla \cdot q + S_e + \nabla \cdot (\tau \cdot V) + \rho g \cdot V$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (V(\rho E + P)) = -\nabla \cdot q + S_e + \nabla \cdot (\tau \cdot V) + \rho g \cdot V$$

Bu yoğunluk tabanlı (density based) çözücü için kullanılan formdur. Basınca dayalı çözücü (pressure based), toplam enerji denklemi yerine dahili enerji denklemini kullanır.

Bazı CFD kodları, dahili enerji (e) yerine entalpi (h) için çözer. Kimyasal reaksiyonlar ve yanmalar için kullanışlıdır. Entalpi;

$$h = e + \frac{P}{\rho}$$

$$\rho h = \rho e + P$$

Toplam enerji denklemi entalpi şeklinde yazılabilir.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho KE) + \nabla \cdot (V \rho h) + \nabla \cdot (V \rho KE) - \frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla \cdot q + S_e + \nabla \cdot (\tau \cdot V) + \rho g \cdot V$$

Katı ve sıvı akışları için benimsenecek doğru enerji denklemi, toplam enerji denklemidir.

Katı bölge için $V = 0$ ve radyasyon, iletim ve taşınımından ayrı olarak düşünülmelidir.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (V(\rho E + P)) = -\nabla \cdot q + S_e + \nabla \cdot (\tau \cdot V) + \rho g \cdot V$$

Sıcaklık cinsinden enerji denklemi (T)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T) + \nabla \cdot (\rho C_p \vec{V} T) = \nabla \cdot (K \nabla T) + S_h$$

$$\text{Burada } S_h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho \Delta H) - \nabla \cdot (\rho \vec{V} \Delta H)$$

$$K = f_{akışkan} k_{akışkan} + f_s k_s$$

ΔH gizli ısı cinsinden ifade edilebilir (L);

Tamamen akışkan bölgede, $\Delta H = L$

Tamamen katı bölgede, $\Delta H = 0$

Karışım bölgesinde , ΔH 0 ile L arasında olmalıdır.

ΔH hesaplama için adımlar

$$[\Delta H]_{n+1} = [\Delta H]_n + \lambda C_p \frac{a_p}{a_p^0} [T - F^{-1}(\Delta H)]$$

Radyasyon alt modeli için çözülen denklem ayrık ordinatlar (DO) radyasyon modelidir.

$$\nabla \cdot (I \vec{s}) + (a + a_p + \sigma_p) I(\vec{r}, \vec{s}) = a n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p + \frac{\sigma}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) \phi(\vec{s}, \vec{s}) d\Omega$$

Dolayısıyla matris formunda

$$MV = B$$

Yüzey enterpolasyonu; CFD kodları, Vf'yi hesaplamak için çeşitli yüz interpolasyon yöntemlerini kullanır. Bu yöntemler

1-Upwind

2 İkinci Derece / Doğrusal Upwind

3-Merkezi Fark

4-Quick

Bu yöntemler, ana hücre (P) ve komşu (E, W) hücre ağırlık merkezlerinin yüzey değerlerini (f) hesaplar.

SIMPLE Algoritma için enerji, türbülans ve diğer denklemler için çözüm süreci; enerji, türbülans skaler (k, w, ε) ve tür transport denklemleri, hacim akısı düzelticisinden sonra döngü içinde çözülür. Örneğin, genişletilmiş bir döngü şöyle olabilir:

$$MV = -\nabla P$$

$$\nabla \cdot (A^{-1} \nabla P) = \nabla \cdot (A^{-1} H)$$

$$V = A^{-1} H - A^{-1} \nabla P$$

$$M_E E = S_E$$

$$M_k k = S_k$$

$$M_\varepsilon \varepsilon = S_\varepsilon$$

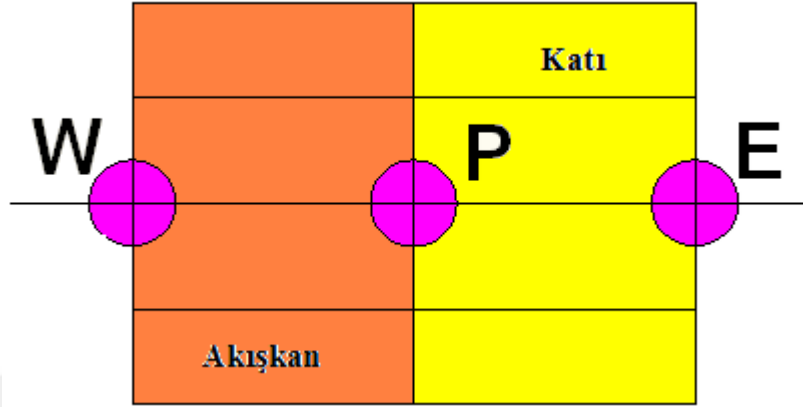
SIMPLE algoritma, basınç için bir poisson denklemini çözdüğümüz için basınca dayalı bir algoritmadır. İzotermal olmayan bir akışta yoğunluk daha sonra ideal gaz denkleminde hesaplanır (örneğin, $\rho = P / RT$).

Yoğunluğa dayalı algoritmalar da mevcuttur ve genellikle sıkıştırılabilir akış için tercih edilir. Bu algoritmalarda, yoğunluk doğrudan süreklilik denkleminde hesaplanır ve bunun yerine basıncı hesaplamak için ideal gaz denklemini kullanılır (örneğin, $\rho = P / RT$) Bu, M matrisinde köşegen ve çapraz olmayan katsayılar ve B matrisindeki kaynaklara yol açar. Örneğin,

$$[\nabla \cdot (VV)] dV \approx \sum_{i=1}^M F_{fi} V_{fi}$$

EK 2 Buharlařma veya Kurutma Temel Denklemleri

Bu alıřmada kurutma iřlemi iin iki yaklařım izlenmiřtir. Bunlardan birincisi Chan ve ark. tarafından geliřtirilen Arrhenius tipi bir kinetik denklem kullanılarak aıklanmıřtır.



$$R_m = (1 - \varepsilon)A_m \exp\left(\frac{-E_m}{RT_s}\right)\rho_m$$

Akıřkan iin özlen denklemler

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$$

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)$$

Katı iin

$$\frac{\partial m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial m}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial m}{\partial y} \right) = 0$$

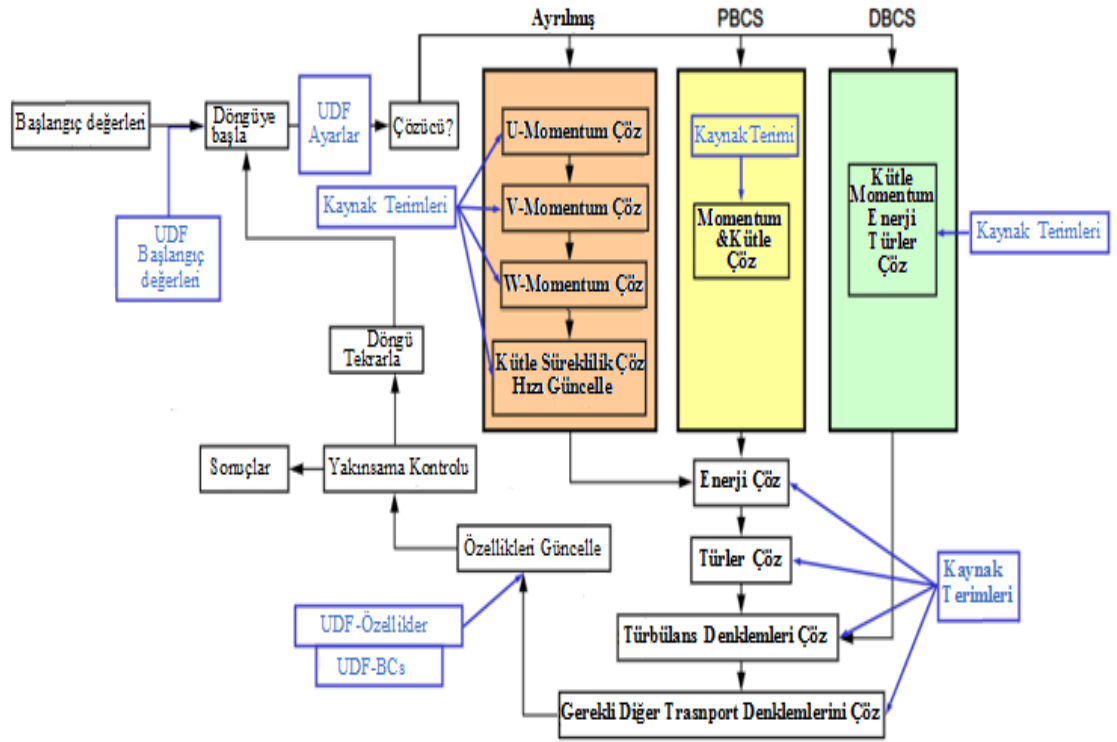
$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Q$$

m kuru esasa gre nem ierięi, D katı malzeme iindeki nem difzyon katsayısı, h entalpi

$$Q = \frac{\rho h_v}{1 + m} \frac{\partial m}{\partial t}, \quad \frac{W}{m^3}$$

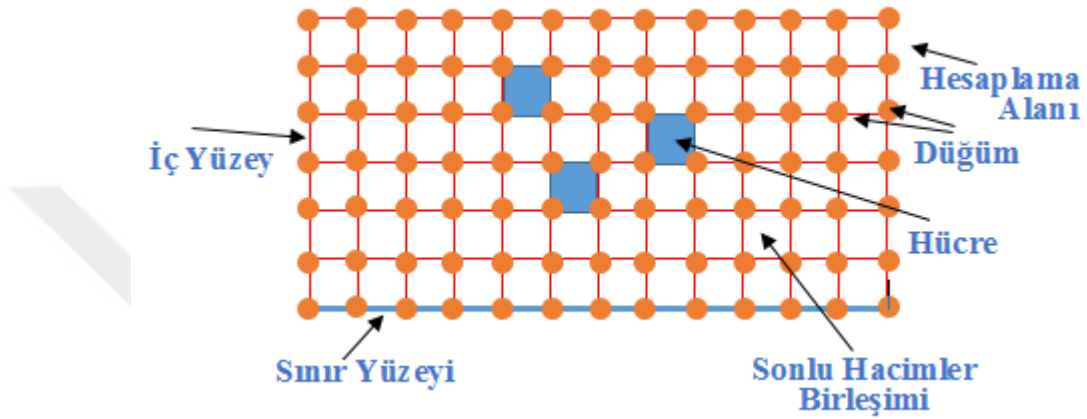
Q, sıvı nemin buharlařmasından kaynaklanan ısı kaynaęıdır.

EK 3 FLUENT Algoritma Akış Diyagramı



EK 4 Kullanıcı Tanımlı Fonksiyonlar (UDF)

C Yazılımı ve FLUENT makroları kullanımı ile geliştirilen ilave kullanıcı tanımlı fonsiyonlar (UDF) divolatilization, sabit karbon yanması, sürkleme hesaplamaları, iletim ile ısı transferi, katı parçacıkların nemlerinin buharlaşması, ve ışıınım ile ısı transferi ile fiziksel ve kimyasal olaylar için geliştirilip birleştirilerek gazlaştırma-yanma modeli için kullanılmıştır.



Gasification-Combustion Model *****/

/* Version: R21

Programer(s):Ebubekir Beyazoglu

Date : 2020

Reviewer(s): Ebubekir Beyazoglu

Date :2020

/ Cell_t declares an integer data type used to identify cells.Face_t declares an integer data type used to identify faces/

Type Variable Meaning of the variable's symbol

Domain *d; d is a pointer to domain thread

Thread *t; t is a pointer to thread

cell_t; c; c is cell thread variable

face_t f; f is a face thread variable

node *node; node is a pointer to a node */

#include "udf.h"

#include "stdio.h"

#include "time.h"

