

151359

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DOĞAL GAZ YANMA MEKANİZMASININ İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ
Sertaç ÇADIRCI
(503011202)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 22 Nisan 2004
Tezin Savunulduğu Tarih : 20 Mayıs 2004

Tez Danışmanı : Prof.Dr. Cem SORUŞBAY
Diğer Jüri Üyeleri Prof.Dr. Metin ERGENEMAN
Doç.Dr. Nurdil ESKİN

151359

MAYIS 2004

ÖNSÖZ

Eğitimin giderek bilimsellikten uzaklaştığı günümüzde, böyle bir çalışma yapmak heyecan vericiydi. Zamanın her şeyden fazla değer kazandığı günümüzde, mühendislikte zamandan ve pahadan kazanç sağlayan simülasyon üzerine çalışma fırsatı bulmuş olmamdan ötürü sevinçliyim.

Bu çalışmada benden destek ve yardımlarını esirgemeyen hocam Sn. Prof. Dr. Cem Soruşbay’a teşekkürlerimi sunuyorum.

Ayrıca bu çalışmada destek ve yardımlarını gördüğüm aileme, Sn Yavuz Karataş’a teşekkürü bir borç bilirim.

Mayıs 2004

Sertaç Çadircı

İÇİNDEKİLER

KISALTMALAR	vi
TABLO LİSTESİ	vii
ŞEKİL LİSTESİ	viii
SEMBOL LİSTESİ	ix
ÖZET	xiii
SUMMARY	xiv

1. GİRİŞ	
1.1. Çalışmanın Tanımı	1
1.1.1. Çalışmada kullanılan sayısal yaklaşım	1
1.1.2. İncelenen olayın tanımı	1
1.2. Çalışmanın Amacı	1
1.3. Çalışmanın Önemi	2
2. DOĞALGAZ YANMA SİSTEMLERİ	3
2.1. Doğalgaz	3
2.1.1. Doğalgazın kullanım alanları	4
2.1.2. Doğalgazın üstünlükleri	4
2.1.3. Doğalgazın diğer yakıtlarla karşılaştırılması	6
2.2. Doğalgazın Özellikleri	8
2.2.1. Yakacak gazların sınıflandırılması	8
2.2.2. Fiziksel özellikler	9
2.2.3. Kimyasal özellikler	11
2.2.4. Metanın ısı değeri bulunması	11
3. HİDROKARBON YAKITLARIN YANMASI VE YANMA KİNETİĞİ	14
3.1. Hidrokarbon yanması	14
3.1.1. Yanma tipleri	14
3.1.2. Hidrokarbonların genel oksitlenme karakteristikleri	15
3.1.3. Dejenere dallanma	18
3.1.4. Başlıca reaksiyon özeti	22
3.2. Metanın Yanma Mekanizması Kinetiği	24
3.2.1. Metan ile O ₂ arasındaki alçak basınç zincir reaksiyonu	24
3.2.2. Metan oksidasyonundaki esas reaksiyonu	26

3.2.3. Metanın yüksek sıcaklıklarda oksidasyonu	31
3.2.4. Yanma kinetiği	33
3.3. Kısaltılmış Mekanizmalar	36
3.3.1. Stiffness (Katılık) problemi	36
3.3.2. İskelet mekanizmalar	40
3.3.3. Temel kısaltılmış mekanizmalar	44
3.3.4. GRI kısaltılmış mekanizmaları	48
3.4. Difüzyon Alevi	48
3.4.1. Difüzyon alevi özellikleri	48
3.4.2. Türbülanslı difüzyon alevi	49
3.4.3. İki boyutlu önkarişimsiz türbülanslı alev formülasyonu	50
4. SAYISAL YAKLAŞIM	58
4.1. Sayısal Akışkanlar Dinamiği	58
4.1.1. Tanım	58
4.1.2. Yöneten denklemler	60
4.1.3. Standart $\kappa - \epsilon$ türbülans modellemesi	63
4.1.4. Isı transferindeki enerji denklemi	67
4.1.5. Konveksiyon-difüzyon problemlerinde ayrıklaştırma	69
4.1.6. Sınır koşulları	76
4.1.7. SAD tekniği ile yanma modellenmesi	80
4.2 Çalışmada Kullanılan Yazılım ve Radyant Isıtıcı	83
4.2.1. Fluent yazılımı ile yanma modellenmesi	83
4.2.2. Yanma modellenmesinde SAD adımları	84
4.2.3. Radyant ısıtma sistemi	85
4.2.4. Çalışmada kullanılan geometri ve model	90
4.2.5. Çalışmada kullanılan sınır koşulları	92
5. DOĞALGAZ YANMASININ FLUENT YAZILIMINDA MODELLENMESİ	96
5.1. Problemin Tanımı	96
5.2. Ağ Sisteminin Oluşturulması ve Özellikleri	96
5.3. Modelin Tanımlanması	98
5.4. Malzemenin Tanımlanması	101
5.5. Sınır Koşullarının Tanımlanması	102
5.6. Sabit Özgül Isı ile Çözüm Başlangıcı	107
5.7. Çözüm	110

6. SONUÇLAR	115
6.1. Test Sonuçları	115
6.2. Çalışmaya İlişkin Sonuçlar	115



KISALTMALAR

2D	: İki Boyutlu
CAD	: Computer Aided Design
GRI	: Gas Research Institute
HC	: Hidrokarbon
LGS	: Line Gauss Seidel Metodu
LPG	: Liquid Petrol Gas
NR	: Farklı Kimyasal Reaksiyonların Toplam Sayısı
NS	: Kimyasal Bileşen Sayısı
ODE	: Adi Diferansiyel Denklem
PGS	: Point Gauss Seidel Metodu
RANS	: Reynolds-Averaged-Navier-Stokes Denklemi
SAD	: Sayısal Akışkanlar Dinamiği
SCRS	: Basit Kimyasal Reaksiyon Sistemi

TABLO LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Tablo 2.1. Doğalgazın sınıflandırılması.....	3
Tablo 2.2. Yakıt bileşimi.....	7
Tablo 2.3. Doğalgazın diğer yakıtlarla karşılaştırılması.....	8
Tablo 2.4. Yakacak gazların sınıflandırılması.....	8
Tablo 2.5. Gaz yakıtların bileşenleri ve ısı değerleri.....	9
Tablo 2.6. Doğalgaz ve metan karakteristik özellikleri.....	10
Tablo 2.7. Doğalgaz kimyasal bileşimi (mol yüzdesi olarak).....	11
Tablo 3.1. Hız parametreleri (a [m ³ /mols] b [kcal/mol]).....	24
Tablo 3.2. Metan oksidasyonunda yer alan reaksiyonlar.....	27
Tablo 3.3. 25 adım iskelet mekanizma.....	43
Tablo 3.4. Temel kısaltılmış mekanizma.....	44
Tablo 4.1. Genel radyant ısıtma sistemlerinin sınıflandırılması.....	86
Tablo 4.2. Brülörün teknik özellikleri.....	88
Tablo 6.1. Test ölçüm sonuçları.....	115
Tablo 6.2. Çalışmanın özeti.....	118

ŞEKİL LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Şekil 3.1 : Ön karışımli yanma.....	14
Şekil 3.2 : Ön karışimsız yanma.....	14
Şekil 3.3 : HC oksidasyonunda ortaya çıkan yanma olayları.....	17
Şekil 3.4 : HC oksidasyonu ile ilgili olaylar.....	18
Şekil 3.5 : Dejenere dallanma.....	19
Şekil 3.6 : İlerleme reaksiyonunda dallanma.....	19
Şekil 3.7 : Dejenere dallanmada reaksiyon davranışı.....	21
Şekil 3.8 : HC oksidasyonunda yer alan ana kimyasal reaksiyonların özeti....	23
Şekil 3.9a : CH ₄ -alçak basınç zincir reaksiyonu.....	24
Şekil 3.9b : Üçlü çarpışma.....	25
Şekil 3.10 : Metan oksidasyonundaki reaksiyonların özeti (Peeters-Mahnen)...	31
Şekil 3.11 : Mol oranları ve sıcaklık profilleri.....	36
Şekil 3.12 : Sabit basınçta mol oranı ve sıcaklık profilleri.....	38
Şekil 3.13 : Akış hızıyla difüzyon alevinin şekil deęiştirmesi.....	49
Şekil 3.14 : Türbülanslı alevde (ön karışimsız) karıştırma modelleri.....	51
Şekil 3.15 : Tek adımlı reaksiyonda kütle oranlarının Z fonksiyonu oluşu.....	57
Şekil 4.1 : κ - ϵ türbülans modeli özeti.....	66
Şekil 4.2 : Tipik bir kontrol hacmi.....	70
Şekil 4.3 : Bir boyutlu ağ sistemi.....	73
Şekil 4.4a : u hızının giriş sınırları.....	76
Şekil 4.4b : v hızının giriş sınırları.....	76
Şekil 4.5a : Çıkış sınırında u kontrol hacmi.....	77
Şekil 4.5b : Çıkış sınırında v kontrol hacmi.....	77
Şekil 4.6 : Duvar sınırında u hızı hücresi.....	78
Şekil 4.7 : Karışımında yakıt-oksitleyici akışları ($f = Z$, $m = X$).....	83
Şekil 4.8 : Deney tesisatı.....	87
Şekil 4.9 : Brülör kesidi.....	90
Şekil 4.10 : Sistemin geometrisi.....	90
Şekil 4.11 : Giriş kısmının ağ sistemi.....	91
Şekil 5.1 : Hücre modeli.....	111
Şekil 5.2 : LGS Metodu.....	113
Şekil 6.1 : Boru yüzeyindeki ölçüm noktaları.....	115

SEMBOL LİSTESİ

A_e, A_n	: Kontrol hacminin yüzeyleri
A_j	: Bir katsayı
AF_m	: Hava yakıt kütleli oranı
a	: Reaksiyon ilerleme derecesi
a_p	: Ayrıklaştırma denklemi
a_{nb}	: Komşu ağ sistemi denklemi
b	: Bir sabit
C'	: Bir sabit
$C_\mu, C_{1\varepsilon}$	: Boyutsuz katsayılar
c_p, c_s, c_t	: Birincil, ikincil, üçüncül aktivasyon derecelerinde C-H bağı frekans faktörü
$c_{p,l}$	: l bileşeni sabit basınç altındaki molar özgül ısısı
D_e	: Difüzyon iletkenliği
D_{hid}	: Hidrolik çap
E	: Birim kütle başına toplam enerji
$E_{d,n}$	: Ayrıklaştırma hatası
E_j	: Aktivasyon enerjisi
$\bar{E}$	: Duvar pürüzlülüğüne bağlı entegrasyon sabiti
F_i	: i doğrultusundaki kuvvet
$\dot{F}_e$	: Doğu yüzeyinden olan kütleli debi
f_ϕ	: Gevşetme faktörü
f_i	: i ürününün net oluşma hızı
f_b, f_p	: Zincir dallanma ve zincir ilerleme reaksiyonlarının hız sabitleri
G_b	: Türbülans kinetik enerjisinin yüzdürme etkisiyle oluşumu
G_κ	: Türbülans kinetik enerjisinin türbülans gerilmesi nedeniyle oluşumu
g	: Yerçekimi ivmesi
H_a	: Üst ısı değeri
H	: Toplam entalpi
h	: Duyulur entalpi
h_j°	: j indisli bileşenin oluşum entalpisi
h_l	: l bileşenin molar özgül entalpisi
I	: $\kappa - \varepsilon$ türbülans şiddeti
$[I_0]$	: Yakıtın başlangıç konsantrasyonu
$[I]$	: Yakıtın konsantrasyonu
J_e	: Doğu yönündeki difüzyon akısı

$J_{j'}$	: j indisli bileşenin difüzyon akısı
$K_{c,j}$	: j reaksiyonunun denge sabiti
k_j, k_{-j}	: İleri ve geri reaksiyonların hız sabitleri
k_1, k_v	: Reaksiyon hız sabitleri
k	: Isıl iletim katsayısı
K	: von Karman sabiti
ℓ	: Türbülans uzunluk ölçeği
M_{gaz}	: Gazın molar ağırlığı
m_i	: i bileşenin kütlesi
$\dot{m}_y, \dot{m}_h$	: Yakıt ve havanın kütledebileri
$m_{hava,min}$	: Minimum kütledebisi
n	: Aktif merkezlerin konsantrasyonları
n'_0	: Başlama reaksiyonu hızı
n_p, n_s, n_t	: Birincil, ikincil, üçüncül aktivasyon derecelerinde C-H bağı sayısı
Δn	: Duvar hücre orta noktası
N_i	: i bileşenin mol sayısı
P	: Pee-fonksiyonu
p	: Statik basınç
p_i	: i bileşenine ait kısmi basınç
Pr_t	: Türbülans akımının Prandtl sayısı
Pe	: Peclet sayısı
$\dot{Q}$	: Yakıcının gücü
q	: f_p / f_b oranı
$\dot{q}'''$	: Hacimsel ısı kaynağı
$\dot{q}_w$	: Duvar ısı akısı
R	: Toplam artık
R_M	: M iterasyonundaki kütle dengesizliği
$\mathfrak{R}, \overline{\mathfrak{R}}$	: Özgül (molar) gaz sabiti
r	: Radyal koordinat
Re	: Reynolds sayısı
R_j, R_{-j}	: j reaksiyonun birim hacim başına ileri ve geri molar hızları
s	: Bir sayı
S_m, S_h, S_ϕ	: Kaynak
T	: Sıcaklık
T^+	: Cidar yakınındaki sıcaklık dağılımı
t	: Zaman
u	: Eksenel hız bileşeni
u^+	: Üniversal hız
u_i, u_k, u_j	: i, k, j doğrultularındaki hız bileşenleri
V	: Hacim
ΔV	: Kontrol hacmi

$\dot{V}_y, \dot{V}_h$	: Yakıt ve havanın hacimsel debileri
v	: Radyal hız bileşeni
v_y, v_h	: Yakıt ve havanın giriş hızları
$\mathcal{G}$	: Türbülans hız ölçeği
$\dot{w}_y$	: Yakıta ait korunan skaler
w	: Girdap hızı
x	: Eksenel koordinat
x_k	: k yönündeki x koordinatı
X_i	: i bileşeninin kütle oranı
y	: N boyutlu rektör
y_n	: Kesme hatası
y_i	: i bileşeninin mol oranı
Z_i	: i bileşeninin karışım oranı
α	: $\frac{[CO]}{[H_2]}$
β	: Isıl genleşme katsayısı
$\beta_{y,o}$	: Yakıt-oksijen için Shvab-Zel'dovich çift parametresi
χ	: Bir değişken
ε	: Türbülans kinetik enerjisi disipasyonu
ε_n	: Toplam hata
ϕ	: Korunan skaler, genel bağımlı değişken
$\tilde{\phi}^{n2}$	: Favre varyansı
Φ	: Akışın bir değişkeni
Γ	: Genelleştirilmiş difüzyon katsayısı
γ	: Gaz ve sıvıların özgül ağırlığı
η_j	: j bileşenine ait kütle değiştirme katsayısı
κ	: Türbülans kinetik enerjisi
λ	: Hava fazlalık katsayısı
μ_t	: Türbülans akımının kinematik viskozitesi
μ	: Molar viskozite
$\bar{\nu}$	: Radikal zincir reaksiyon çevrim sayısı ortalaması
ν'_{ij}	: i reaktantının j reaksiyonundaki stökiyometrik katsayısı
ν''_{ij}	: i ürününün j reaksiyonundaki stökiyometrik katsayısı
θ	: Net dallanma faktörü
ρ	: Yoğunluk
σ	: Başlama reaksiyonunun bağıl hızının bir ölçüsü
σ_i	: i elementinin mol miktarı
ζ	: Prandtl-Kolmogorov sayısı
τ_{ij}	: Gerilme tensörü
τ_w	: Duvar kayma gerilmesi
ω_i	: Reaksiyon hızı

ψ_n : Tam analitik çözüm
 Z : Herhangi bir bileşen



ÖZET

Günümüzde zamanla yarışmanın ve ekonominin önemi geçmişe göre artmıştır. “Doğalgaz Yanma Mekanizmasının İncelenmesi” başlığını taşıyan bu çalışma, mühendislik çalışmalarında yığınla deney yapmanın ve bu deneylerin yol açtığı mali külfetlerin bir nebze önüne geçen simulasyon çalışmalarına bir örnektir.

Çalışmada simülasyonu yapılmak üzere, günümüzde de oldukça geniş bir kullanım alanına sahip olan radyant ısıtma sistemi tercih edilmiştir.

Çalışmanın ikinci bölümünde doğalgaz yanma sistemleri hakkında genel bilgiler verilmiştir. Doğalgazın yakacak olarak özellikleri ve üstünlükleri üzerinde durulmuştur. Bu bölümde doğalgazın fiziksel ve kimyasal özellikleri hakkında da bilgi verilmiştir.

Üçüncü bölümde hidrokarbonların yanma kinetiği ve doğalgazın ana bileşeni olan metanın oksidasyonu üzerinde durulmuştur. Bu bölümde ayrıca kısaltılmış mekanizmalara ve iskelet mekanizmalara yer verilmiştir. Burada türbülanslı difüzyon alevi ve iki boyutlu ön karışimsız türbülanslı alev formülasyonu da anlatılmıştır.

Dördüncü bölümde Sayısal Akışkanlar Dinamiği (SAD), yöneten denklemler ve $\kappa - \varepsilon$ türbülans modeli ile çalışmada kullanılan deney düzeneği hakkında bilgi verilmiştir. Çalışmada kullanılan yazılım ve SAD adımları kapsamlıca ele alınmıştır.

Beşinci bölümde doğalgaz yanmasının Fluent yazılımında modellenmesi ağ sistemi ve sınır koşulları anlatılmıştır. Ağ sisteminin oluşturulması, modelin ve malzemenin tanımlanması sınır koşullarının girilmesi, sabit özgül ısı ile çözüm başlangıcı ve nihayetinde çözüm anlatılmıştır.

Altıncı ve son bölüm deney tesisatı ile önceden yapılmış çalışmanın sonuçları ile bu çalışmanın sonuçlarını içermektedir. Bu bölümde hava fazlalık katsayısı ve brülör kapasitesi ile oynanarak normal durum dışındaki yanma performansı incelenmiştir. Ayrıca gerçeğe yakın sonuçlar elde etmek için neler yapılması gerektiği yorumlanmıştır.

SUMMARY

In this study with the title “Investigation of Natural Gas Combustion” heating system was simulated by using CFD. Nowadays radiant heating systems are very common in use. It was mentioned about the combustion mechanism of methane, which is the main component of natural gas. Then numerical approaches of CFD were given with its advantages. The combustion mechanisms used by Fluent 6.0 were investigated. Finally a simulation of a radiant heating system was done by using Fluent 6.0 and the results were compared with the test results.

General knowledges about natural gas combustion systems were given in the second part. This chapter also touches on the characteristics and superiorities of natural gas as a gaseous fuel. In this chapter physical and chemical characteristics of natural gas have been explained.

Chapter three touches on the combustion mechanism of hydrocarbons and because methane is the main component of natural gas it was focused on its oxidation. This part also includes reduced and skeleton mechanisms. Turbulent diffusion flame and two dimensional non-premixed turbulent flame formulation have been mentioned.

In order to simulate radiant heating system at this study, CFD was used. CFD, its governing equations for combustion modelling, $\kappa - \varepsilon$ turbulence model and the test installation were mentioned in the fourth section of the study. The program that is utilized by modelling the flame and the CFD steps are further themes of this section.

The fifth section touches on the grid of the model, boundary conditions and the modelling of methane combustion. Designing the grid, identifying the model and the material, determining the boundary conditions, initialing the solution with constant specific heat and the final solution have been comprehensively explained.

The last part includes the test results of a licence study on the test installation and the recent test results done by Fluent 6.0. The performance of combustion is investigated by changing the air excess coefficient and the burner capacity. In addition to that it is also tried to find solutions and alternatives for the best results.

1. GİRİŞ

1.1. Çalışmanın Tanımı

Bu çalışmada doğalgaz yanma sistemleri ve kinetik reaksiyonları incelenmiştir. Çalışmada doğalgazın %100 metan gazından oluştuğu varsayılmış ve hesaplamalar metanın termofiziksel özellikleri baz alınarak yapılmıştır. Çalışmada doğalgaz yanma mekanizması incelenmiştir. Doğalgaz radyant ısıtıcıda yakılmaktadır. Yakıcının matematiksel modeli alınmış, iki boyutlu olarak modellenmiş ve Fluent yazılımı kullanarak çözümleme yapılmıştır.

1.1.1. Çalışmada kullanılan sayısal yaklaşım

Çalışmada metanın yanmasıyla oluşan “türbülanslı difüzyon alevi” Fluent yazılımında iki boyutlu olarak modellenmiştir. Sayısal modelleme SAD tekniği kullanılarak sonlu hacimler metoduyla gerçekleştirilmiştir.

1.1.2. İncelenen olayın tanımı

İncelenen olay metanın yanma mekanizmasıdır. Metanın kinetik reaksiyonları 1 adımlı, 2 adımlı olarak ele alınmış ve bunlar Fluent yazılımında ayrı ayrı çözdürülmüştür. Farklı kinetik modellerin sonuçları (akım alanı, hızlar, κ - ϵ değerlerinin değişimi, kimyasal bileşen konsantrasyonları, sıcaklık ve basınç) deney sonuçları ile karşılaştırılarak yorumlanmıştır.

1.2. Çalışmanın Amacı

Bu çalışmanın temel amacı doğalgaz yanma sistemlerinin performansının belirlenmesi, iyileştirilmesi amacı ile kullanılan matematiksel modellerin incelenmesi ve bu modellerde kullanılan metan yanmasına ait kinetik mekanizmaların karşılaştırılmasıdır. Bu işlem Otomotiv Laboratuvarı'nda bulunan bir

“radyant yakıcı” örneği üzerinde incelenmiştir. Sayısal modelleme ile elde edilen sonuçlar daha önce yapılmış çalışmalarda yer alan deney sonuçları ile karşılaştırılmıştır. (örneğin: ısıtıcının yüzey sıcaklığı ile çıkış kesitindeki durumlar vb...)

1.3. Çalışmanın Önemi

Çalışmanın önemi şöyle özetlenebilir: Günümüzde zamanla yarışmanın ve ekonominin önemi geçmişe göre artmaktadır. Bu tez çalışmasında yer alan simülasyon ile yanma konusunda pek çok deney yapmanın ve deneylerin yol açtığı mali külfetlerin biraz olsun önüne geçilmesi amaçlanmıştır.

Çalışmada , oldukça geniş bir kullanım alanına sahip olan radyant ısıtma sisteminin simülasyonu yapılmıştır. Burada radyant ısıtıcı örneğinin seçilmesindeki hedef hem yaygın kullanım alanının olması hem de daha önce aynı düzeneğin üzerinde ölçülmüş değerlerin sayısal modelleme sonuçlarıyla karşılaştırma imkanının olmasıdır.

Çalışmanın öneminin bir diğer boyutu da yanma performansının iyileştirilmesi, emisyonların kontrolü için olayın incelenmesi ve bu konularda sayısal yaklaşımların avantajlarının ortaya konmasıdır. Haliyle daha önce belirtildiği gibi bu işlemler deneye göre daha az zaman ve para gerektirecektir.

2. DOĞALGAZ YANMA SİSTEMLERİ

2.1. Doğalgaz

Doğalgaz, tabiatta doğal olarak bulunan bir gazdır. Doğalgaz bağımsız yataklarda ve petrol yataklarının üstünde yaklaşık 300 bar basınçta bulunur.

Doğalgaz yeryüzünün alt katmanlarında başta metan (CH_4) ve etan (C_2H_6) olmak üzere çeşitli hidrokarbonlardan oluşan yanıcı bir gaz karışımıdır. Çıkarıldığı haliyle kullanılabilir.

Doğalgaz yanıcı, kokusuz, renksiz, havadan hafif bir gazdır. Metan, etan, propan, azot ve az miktarda CO_2 gazlarının birleşiminden ibarettir. Ana bileşeni CH_4 olup inert gazlar dışında (N_2 , CO_2) bünyesinde az miktarda etan, propan, bütan gibi yüksek parafinler bulunur. Doğalgazın sınıflandırılması Anglo Sakson literatüründe azot ve metan yüzdeleriyle yapılırken; DIN 1340'da metan ve kükürt yüzdeleri göz önüne alınarak yapılır. Tablo 2.1'de bu sınıflandırma görülmüyor. [1]

Tablo 2.1 Doğalgazın sınıflandırılması

Anglo Sakson Kaynaklar				
No Türü	Azot (%)	Havaya göre Yoğunluk (kg/m^3)	Metan (%)	Atıl Isıl Değer (MJ/Nm^3)
I Yüksek eylemsiz tür	6,3-16,2	0,66-0,708	71,9-83,2	35-39
II Yüksek metan türü	0,1-2,4	0,59-0,614	87,6-95,7	37-39,6
III Yüksek ısı değeri türü	1,2-7,5	0,62-0,719	85-90,1	39,6-41,6
DIN 1340' a göre sınıflama				
I) Kuru tip doğalgaz : Başlıca metan içerir (%90)				
II) Yaş tip doğalgaz: Metandan başka etan, propan, bütan içerir.				
III) Ekşi tipi doğalgaz : Kurşun asetat deneyine göre 500 mg/Nm^3 de daha fazla hidrojen kükürt ve diğer kükürtlü bileşenleri içerir.				

2.1.1. Doğalgazın kullanım alanları

Gaz yakıtlar (doğalgaz), denetim kolaylıkları, hiç katı artık bırakmayışları, çok az hava fazlalık katsayısına ihtiyaç duymaları, kullanım yerlerinde kükürt içermeyişleri gibi nedenlerle en uygun yakıtlardır. Doğalgaz konutlarda ısıtma ve soğutma, sıcak su elde etme, pişirmede kullanılırken, küçük sanayi atölye fırınlarında üretim amaçlı olarak kullanılır. Cam ve kiremit imalatında ve tekstil sektöründe de önemli bir enerji kaynağıdır. Türkiye’de elektrik ihtiyacının önemli bir kısmı doğalgazla çalışan santrallerden üretilmektedir.

Sanayi için ticari olarak kullanımı olası en önemli yakıt gaz “doğalgazdır.” Doğalgaz sanayide yakıt ve hammadde olarak kullanılır. Yakıt olarak kullanımı da beş grupta toplamak mümkündür.

- Kazanlarda
- Süreçte (Proseslerde)
- Fırınlarda
- Isıtmada
- Elektrik üretiminde

Doğalgazın yanabilmesi için hava ile %5 ile 15 arasında karışım yapması gerekir. Karışım oranı bu aralığın altında ya da üstünde olur ise doğalgaz yanmaz. En iyi karışım yüzdesi % 9 doğalgaz ve % 91 havadır. [1-2]

2.1.2. Doğalgazın üstünlükleri

Doğalgaz havadan daha hafiftir ve kapalı alanlarda sızma ile yukarıda toplanır. Doğalgaz karbon monoksit (CO) içermediğinden zehirleyici değildir. Kapalı ortamlarda çok miktarda bulunduğu zaman oksijen (O₂) azalacağından boğulmaya sebep olur. Bu nedenle doğalgaz kullanılan ortamların mutlaka havalandırılması gerekir.

Doğalgazın en önemli avantajı temiz bir gaz oluşudur. Yandığında kül, CO ve kükürt bileşikler oluşturmaz ve asit yağmuruna sebep olmaz. Yalnızca karbondioksit (CO₂)

ve su buharı (H₂O) oluşur. Ayrıca doğalgazın azot oksit (NO_x) emisyonu diğer yakıtlara oranla da azdır.

Bütün bu bilgiler ışığında doğalgaz en kullanışlı yakıt olma özelliğini kazanmaktadır.

Gaz ve katı yakıtlar genellikle ısınma amaçlı veya enerji üretiminde kullanılmaktadır. Gaz yakıtların çevre koruma bilinci açısından üstünlükleri vardır. Doğalgazın üstünlükleri şöyle sıralanabilir.

- Doğalgaz her an için kullanıma hazırdır.
- Doğalgaz ekonomiktir ve zaman, işgücü tasarrufu sağlar.
- Doğalgaz çevre dostu olup, kalıcı artık bırakmaz.
- Doğalgazlı cihazlarda sıcaklık kontrolü çok hassas yapılır, konfor ve enerji tasarrufu sağlanır.
- Yanmanın hassas olarak kontrol edilebilmesi için yakıt kaybını en aza indirir.
- Uzun zaman dilimi içinde aynı yakıt kalitesi elde edilebilir.
- Gaz olması nedeniyle hava ile çok iyi ve birebir karışabildiğinden yanma verimi yüksektir.
- Alev boyu fueloil ve kömüre göre daha kısadır, yanmayı tamamlamak için gereken zamanda kısadır.
- Ekonomizer ilave edilerek doğalgazın baca sıcaklığı 56°C'ye kadar indirilebilir. Katı ve sıvı yakıtlar yanma ürünü olarak kükürt içerdiğinden, baca gazlarının suyun yoğunlaşma noktasına kadar soğutulması ve böylece suyun gizli ısısından faydalanılması imkanı yoktur.
- Doğalgazda yanma için hava gereksinimi de azdır (%5 ile 10). Ham petrole alternatif bir yakıt olarak stratejik bir avantaj sağlar. Verimli bir yakıt olarak ekonomiktir ve enerji tasarrufu sağlar. [1]

2.1.3. Doğalgazın diğer yakıtlarla karşılaştırılması

Tablo 2.2’de doğalgaz, fuel oil ve kömürün bazı özellikleri bir arada gösterilmiştir. Tablo 2.2 incelendiğinde görülecektir ki :

- a-) Doğalgazın karbon yüzdesi kömüründe (% 78) ve fuel oillinkinden (% 86) daha azdır. Karbon oranının artması alevin rengini kırmızı yapar ve parlak kırmızı alevde ışınlama ısı geçişi fazladır.
- b-) Katı (% 3,5) ve sıvı (% 11) yakıtlar birbirine yakın hidrojen içerirken, doğalgazda (% 24) oldukça yüksektir. Bu yüzden doğalgazın ısı değeri oldukça yüksektir. Üst ve alt ısı değerleri arasındaki fark da en büyük olacaktır.
- c-) Doğalgazda hava kirliliğine yol açan kükürt (S) yok sayılabilir.
- d-) Doğalgaz, kül ve nem içermez. Kömürde ise kül ve nem büyük oranlarda bulunabilir. Nem yanma anında ocak sıcaklığını düşürür. Alt ve üst ısı değerleri arasında farkı büyütür ve baca kayıplarının artmasına yol açar.
- e-) Doğalgaz, kükürt içermediğinden baca gazlarının yoğunlaşma sıcaklığı düşüktür. Kömür ve fuel-oil de 160 ile 180°C dolayında olan çığ noktası doğalgazda 60°C dolayında düşük bir düzeyde olduğundan baca kaybı daha azaltılabilir.
- f-) Doğalgazın azot (N₂) yüzdesi fuel oil’den 35 kat, kömürden 2 kat fazladır. Ayrıca ısı değerleriyle hava fazlalık katsayısı ve ısı yayma katsayısının yüksekliği nedeniyle alev sıcaklığı yükselecek ve NO_x oluşumu tehlikesi artacaktır. Bu nedenle ocak sıcaklığı denetlenerek sıcaklığın 1000°C’ yi aşmaması sağlanmalıdır.
- g-) Diğer yakıtlarda çeşitli oranlarda bulunan oksijen, kükürt, su buharı, kül doğalgazda yoktur. Baca gazındaki CO₂ oranı diğer yakıtlardan azdır.
- h-) Doğalgazda parçacık olmadığı için ısı geçiş yüzeyleri kirlenmez. [2]

Tablo 2.2 Yakıt bileşimi (% Ağırlık)

Yakıt Bileşimi (% Ağırlık)			
	Kömür	PO ₆	Doğalgaz
1.Karbon (C)	77,4	84,58	73,98
2.Hidrojen (H ₂)	3,4	10,90	24,57
3.Oksijen (O ₂)	2,0	0,40	0,07
4.Azot (N ₂)	1,2	0,112	1,43
5.Kükürt (S ₂)	1,0	4,0	-
6.Kül	8,0	-	-
7.Vanadyüm	-	0,008	-
8.Nem	7,0	-	-
H/C oranı (Ağırlık)	0,0439	0,1282	0,3323
Üst ısı değer Kcal/Kg	7,306	9,913	13 025
Alt ısı değer Kcal/Kg	7,003	9,383	11 740
Yanma için gerekli hava g/Kcal	1,38	1,3763	1,3
Baca gazındaki buhar miktarı	0,052	0,10	0,17
Kuru baca gazındaki CO ₂	18,9	15,89	17,28
SO ₂ yayımı (PHH W/W)	1,644	5,5	-
Baca Gazındaki suyun çıkış nokt.(C)	35	49	56

Tablo 2.3’de doğalgazın karşılaştırmalı üstünlükleri görülmektedir. Doğalgazın otomobil motorları için de faydalı olan özellikleri bulunmaktadır. Bunlardan en önemlisi vuruntuya karşı direnç göstermesidir. Vuruntu benzinli motorlarda istenmeyen bir durum olup , motorun ömrünü azaltır. Ayrıca doğalgaz, benzine oranla daha yüksek hava fazlalık değerlerinde tutuşma olanağına sahiptir. Böylece motor fakir karışım ile çalıştırılıp yakıt ekonomisi ve egzoz gazları açısından yarar sağlanabilir. Doğalgazın difüzyon katsayısının benzine oranla iki kat fazla olması, hava ile daha kolay ve hızlı karışması çift yakıtlı motorlarda kullanımı açısından yarar sağlamaktadır. [3]

Tablo 2.3 Doğalgazın diğer yakıtlarla karşılaştırılması

Yakıt Adı	Özgül Ağırlık kg / l	Alt Isıl Değer kj / kg	Tutuşma Sıcaklığı (°C)
Benzin	0,72-0,78	43100	450
Motorin	0,81-0,95	42400	330-520
Doğalgaz	0,73	34000	600
Propan	0,51	46500	510
Bütan	0,58	45400	490

2.2. Doğalgazın Özellikleri

Gaz yakacakların bilinmesi gereken önemli özellikleri; bileşimi, ısıl değerleri ve yoğunluklarıdır. Bileşimi, bileşenlerin hacimsel yüzdesi olarak , ısıl değerleri ise birim kütle veya birim hacim başına verilir.

2.2.1. Yakacak gazların sınıflandırılması

Bu gaz ailelerinin pek çoğunun ana bileşeni içinde metan, etan, propan, bütan, CO₂, N₂ bulunmaktadır. Hava gazı, su gazı gibi yapay olanları ile ham petrolün damıtılmasıyla üretilen sıvılaştırılmış petrol gazı (LPG) ve doğalgaz gibi gaz yakacak türleri bulunmaktadır.

Tablo 2.4 Yakacak gazların sınıflandırılması

Gaz Ailesi	Gösterilişi	Cinsi	Grupları
1	S	Hava Gazı	A: Hava Gazı B: Kok Gazı
2	N	Doğal Gaz	L: Doğalgaz H: Doğalgaz (Petrol esaslı)
3	F	Sıvılaştırılmış Gaz	Propan, Bütan Propan + Bütan Karışımı

Tablo 2.4’de doğalgaz, L (low : düşük) ve H (high : yüksek) olarak verilmiştir. Doğalgaz H tipi petrol gazı olarak adlandırılır ve petrolün açığa çıkan metan yüzdesi doğalgaz L’ ye nazaran daha fazladır. [3]

Tablo 2.5 Gaz yakıtların bileşenleri ve ısı değerleri

Yakıt Cinsi	Isıl değer kJ/l	CH ₄ (%)	C ₂ H ₄ (%)	C ₂ H ₆ (%)	H ₂ (%)	O ₂ (%)	N ₂ (%)	CO ₂ (%)	C ₆ H ₆ (%)
Fırın Gazı	35,97	0,2	-	-	3,6	-	5,7	12,7	-
Hava Gazı	21,59	33,9	5,2	-	47,9	0,6	3,7	2,6	-
Su Gazı	19,54	15,5	4,7	-	34	0,7	6,5	4,3	2,3
Doğalgaz	34,53	90	-	5,3	-	-	2,7	0,6	-

Doğalgaz, hidrokarbonlar (metan, etan, propan, bütan) ve karbondioksit, azot, hidrojen sülfür (H₂S), helyum (He) gazlarının karışımından oluşan renksiz ve kokusuz bir gazdır. Ayrıca yataklara göre oksijen (O₂), argon (Ar) gazları da bulunabilmektedir. Ticari kullanıma sunulan doğalgaz %80 ile 95 arasında metan, %5 ile 19 arasında etan ve propan ile azottan oluşur.

2.2.2. Fiziksel özellikler

Doğalgaz normal şartlar altında gaz halinde bulunmaktadır. Hacimsel olarak %78 ile 98 oranında metan içerdiğinden ve metanın kaynama noktası düşük olduğundan sıvılaştırılması oldukça zordur.

Doğalgaz kuru bir gazdır ve su buharı içermez. Yoğunluğu ise havaya göre 0,58 ile 0,79 arasında değişmektedir. Sıvılaştırılmış doğalgazın yoğunluğu ise 419 kg/m³ dür.

Doğalgazın çevreyi kirleten kükürt oksit (SO_x), uçan kül parçacıkları ve yanmamış gazlar içermemesi önemli avantajlar sağlamaktadır.

- Fiziksel hali : Normal şartlar altında gaz halindedir. Kritik sıcaklıktan daha düşük sıcaklıklarda basınç altında sıvılaştırılabilir.
- Yoğunluk : Havaya göre yoğunluğu 0,58 ile 0,79 arasındadır.
- Renk-koku : Doğalgaz renksiz ve kokusuz bir gazdır, ayrıca yanarken duman çıkarmaz.

- Alev sıcaklığı ve yanma hızı : Doğalgaz, en önemli bileşeni olan metanın simetrik yapısı nedeni ile son derece kararlı bir gazdır. Doğalgaz oksijen alevi 2780°C ve doğalgaz hava adyabatik sıcaklığı 1960°C'dir. Doğalgazın yayınma hızı 0.35 m³/s dir. [1]

Tablo 2.6'da bu fiziksel özellikler özetlenmiştir.

Tablo 2.6 Doğalgaz ve metan karakteristik özellikleri

Özellikler	Metan(CH ₄)	Doğalgaz L	Doğalgaz H
Molekül kütlesi M (kg/mol)	16,043	18,5	17,5
Özgül gaz sabiti R _i (J/kg K)	518,8	449	475
Moleküler hacim V _{mn} (m³/kmol)	22,36	-	-
Yoğunluk ρ _n (kg/m³)	0,7175	0,83	0,79
İzafi yoğunluk	0,555	0,64	0,61
Üst Isıl Değer H _{ü,n} (MJ/ m³) (kWh/m³)	39,819 11,061	35,17 9,77	41,34 11,48
Alt Isıl Değer H _{a,n} (MJ/ m³) (kWh/m³)	35,883 9,968	31,74 8,82	37,35 10,38
Havadaki Ateşleme Sıcaklığı t _{at} (°C)	645	640	640
20°C Sıcaklıktaki yanma sınırı Z _a , Z _ü (%V)	5,1 13,5	5 15	4 16
En büyük alev hızı U _{max} (cm / s)	43	41	43
Özgül Isı C _p , C _v (kJ/kgK)	2,156 1,632	1,86 1,41	2,05 1,57

2.2.3. Kimyasal özellikler

Doğalgaz, esas kimyasal bileşen olarak metan (CH_4) ve daha az oranlarda diğer hidrokarbonlar, azot, karbondioksit, hidrojen sülfür (H_2S), helyum (He) ve çok küçük yüzdelerde oksijen ve argon içerebilir. Tablo 2.7’de verilen özellikler Türkiye’nin Rusya’dan aldığı doğalgazın kimyasal özellikleridir. Bu bileşenler içinde H_2S zararlı bir bileşik olduğundan, dağıtım şebekelerinde ve kullanım yerlerinde korozyona sebebiyet vereceğinden, doğalgaz üretim noktasında bu bileşenden temizlenerek boru hattından pompalanır. [3]

Tablo 2.7 Doğalgaz kimyasal bileşimi (mol yüzdesi olarak)

BİLEŞENLER	MİKTAR
Metan (CH_4)	Min %85
Etan (C_2H_6)	Max %7
Propan (C_3H_8)	Max %3
Bütan (C_4H_{10})	Max %2
Diğer Hidrokarbonlar (C_mH_n)	Max %1
Karbondioksit (CO_2)	Max %3
Oksijen (O_2)	Max %0,02
Azot (N_2)	Max %5
Hidrojen Sülfür (H_2S)	Max %5,1 mg/m ³
Merkaptan Kükürt	Max %15,3 mg/m ³
Toplam Kükürt	Max %102,3 mg/m ³

2.2.4. Metanın ısıl değerinin bulunması

Doğalgazın ana bileşeni olan metanın ısıl değerini hesaplamak için termodinamik özelliklerinden yararlanmak suretiyle bazı çıkarımlar yapılabilir.

Gazların ve sıvıların özgül ağırlığı (γ), yoğunluğunun referans alınan akışkanın yoğunluğuna oranı şeklinde tanımlanmaktadır. Bu referans akışkan sıvılarda su,

gazlarda havadır. Gazlarda yoğunluk; hem sıcaklığın, hem de basıncın bir fonksiyonu olduğundan, bir gazın özgül ağırlığı :

$$\gamma_{gaz} = \frac{\rho_{yakıt} (1 atm, 15.56^\circ C)}{\rho_{hava} (1 atm, 15.56^\circ C)} \quad (2.1)$$

Eğer ideal gaz olarak kabul edilmiş ise, gaz yakıtın molar yoğunluğu ρ şöyle ifade edilir,

$$\bar{\rho} = \frac{P}{\mathfrak{R}T} \quad (kmol / kg) \quad (2.2)$$

ve dolayısıyla bu yakıtın özgül ağırlığı da şöyledir :

$$\gamma_{gaz} = \frac{\left[\left(\frac{M}{\mathfrak{R}} \right) \cdot \left(\frac{P}{T} \right) \right]_{gaz}}{\left[\left(\frac{M}{\mathfrak{R}} \right) \cdot \left(\frac{P}{T} \right) \right]_{hava}} = \frac{M_{gaz}}{M_{hava}} \quad (2.3)$$

Metan yanmasının üst molar ısı değeri :

$$H_U(CH_4) = 212800 \text{ (cal / mol)} \cdot 4,187 = 890994 \text{ kJ / kmol}$$

(2.2) denklemini kullanarak molar yoğunluğu ise :

$$\rho_{CH_4} = \frac{101000 \text{ N / m}^2}{(8314 \text{ kNm / kmolK}) \cdot 298 \text{ K}} = 0,0408 \text{ kmol / m}^3 \text{ dür.}$$

Bu verilenlerden metanın hacimsel ısı değeri ise :

$$H_U(CH_4) = \bar{H}_U(CH_4) \cdot \bar{\rho}(CH_4) \quad (2.4)$$

$$H_U(CH_4) = (890994) \cdot (0,0408) = 36350 \text{ kJ / m}^3$$

Sonuç olarak kütleli bazda ele alırsak üst ısı değeri :

$$H_{\bar{O}}(CH_4) = \frac{\overline{H_{\bar{O}}}(CH_4)}{M} \quad (2.5)$$

$$H_{\bar{O}}(CH_4) = \frac{890994}{16} = 55687 \text{ kJ / kg}$$

olarak bulunur. [4]

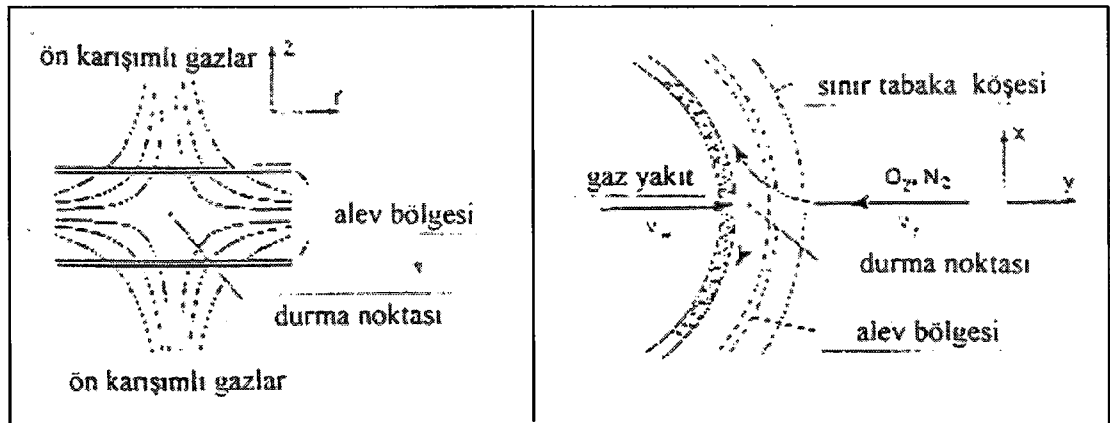
3. HİDROKARBON YAKITLARIN YANMASI VE YANMA KİNETİĞİ

3.1. Hidrokarbon Yanması

3.1.1. Yanma tipleri

Yanma , alevli ve alevsiz olmak üzere iki farklı şekilde meydana gelir. Alev, ön karışımli ve ön karışimsız olmak üzere iki sınıfa ayrılır. Bu iki alev tipi adlarından da anlaşılacağı gibi giren bileşenlerin reaksiyon öncesi birbirleriyle karışıp, karışmamasına göre farklılık gösterir.

Ön karışımli yanmada, yakıt ve yakıcı bileşen, kimyasal reaksiyonun meydana geldiği moleküler seviyede karıştırılır. Ön karışimsız difüzyon alevinde ise giren bileşenler başlangıçta ayrırırlar. Hem karışım hem de reaksiyon, yanma işleminin gerçekleştiği ara bir bölgede meydana gelir.



Şekil 3.1 Ön karışımli yanma

Şekil 3.2 Ön karışimsız yanma

Ön karışimsız alev, temel alev tiplerindendir. Zel'dovich tarafından yapılan araştırmalarda ön karışım alevi üretiminin yayınma işlemi sonucu oluştuğu ve gerekli gradyanların kimyasal işlemler sonucu sağlanabildiği ortaya çıkmıştır. Ön karışimsız alevde kimyasal reaksiyonların desteklediği değişkenler nedeni ile yakıt ve okside edici bileşim, aleve ön taraftan karışır. Alevi okside edici bileşim olmadan alev yakıtın içine yayılamaz ve ara yüzeylerde sıkışır.

Yanma sürecinde, yakıtın yanması sırasında çok sayıda temel reaksiyon meydana gelir. Kimyasal kinetikte, bir kimyasal reaksiyonun hızı, zamana göre ürünlerin bileşimlerin değişimi olarak tanımlanır. Temel reaksiyonlar çift yönlü olarak gerçekleşebilir. Bu şekilde gerçekleşen reaksiyonlar için net hız, reaksiyonun ileri ve geri hızları arasındaki farka eşittir. [5-1]

3.1.2. Hidrokarbonların genel oksitlenme karakteristikleri

Hidrokarbonların genel oksitlenme tepkimesi aşağıda verilmiştir.



Bu tepkime sırasında hidrokarbon yakıtların içerisindeki karbon ve hidrojen, oksijenle birleşerek ısı üretirler. Bu ifadeden de anlaşılabacağı gibi hidrokarbonların yanıcı elementleri karbon ve hidrojendir.

Yanma için gerekli oksijen atmosferden sağlanır. Hava bir gaz karışımı olup hacimsel olarak % 21 oksijen ve % 79 azot ihtiva etmektedir.

Yanma sırasında yakıt partikülleri, kendilerini oluşturan hidrojen ile karbon atomlarına ayrılır ve her element havanın oksijeni ile ayrı ayrı birleşir.

Hidrojenle birleşen oksijen su buharı ve karbonla birleşen oksijen karbondioksiti oluşturur. Yanma için yeterli miktarda oksijen yoksa karbonmonoksit meydana gelir. Bu şekilde yanmadan elde edilecek olan ısı azalır.

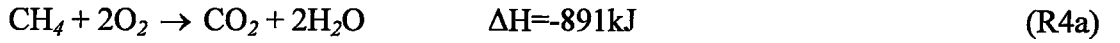
Karbon yandığında yanma şartlarına bağlı olarak CO ve CO₂ oluşur. Sınırlı oksijenle yandığında CO, bol oksijenle yandığında da CO₂ oluşur.



Oluşan CO tekrar oksijenle yakılabilir.



Hidrokarbonların en basiti olan CH_4 ise yandığında ürün olarak CO_2 , CO ve su oluşur. Oksijen miktarına bağlı olarak C, CO ve CO_2 oluşur. Metanın tam yanması ise şöyledir :



Aşırı zenginleştirilmiş karışım durumunda :



Sınırlı hava ile :



Hava fazlası ile :

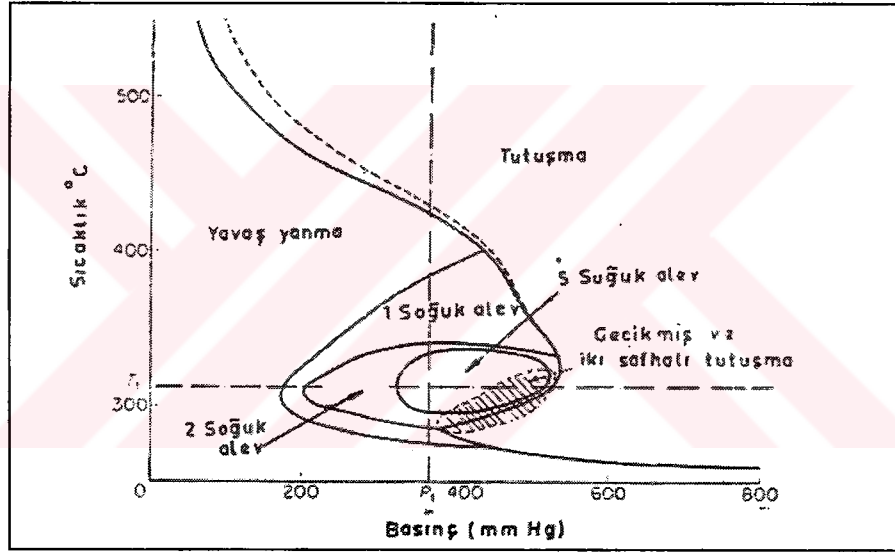


tepkimleri oluşur. [1-6]

Hidrokarbonlarda ve organik maddelerin yanmasında statik bir sistemde eksplozyon, akan bir sistemde ise karbon oluşması nedeniyle ortaya çıkan sarı alevle karakterize edilen kesin bir sınır mevcuttur. Yavaş yanma bölgesinde bir çok değişik olay seçilebilmektedir. Uygun bir P_1 basıncı seçildikten sonra sıcaklık yükseltilmeye başlanır ise, ilk olarak 350 ile 400°C'nin altında yavaş yanma bölgesi ile karşılaşılacaktır. Buna alçak sıcaklıkta yanma adı verilir. Sıcaklık artırıldığı takdirde kabı boydan boya kat eden açık mavi bir alev görülecektir. Bir anlık hızlı yanma darbesi sırasında sıcaklık yaklaşık 150°C artabilecek ve sonra sıcaklık tekrar alçak sıcaklıkta yanmaya dönecektir. Biraz daha yüksek sıcaklıklarda bu “soğuk alevler” birbirlerini takip edeceklerdir. Sıcaklığın daha da artırılması soğuk alevlerin yerlerini mavi bir ışığa terk ederek kaybolmalarına ve sistemin “yüksek sıcaklık” bölgesi diye adlandırılan daha yoğun bir reaksiyon bölgesine girmesine sebep

olacaktır. Sonunda asıl tutuşmaya erişilecek fakat tutuşma sınırının az altındaki sıcaklıklarda oldukça yoğun bir mavi alevin ortaya çıkması sonucu durum bu safhada karmaşıklaşacaktır. Yavaş yanmanın yüksek sıcaklık bölgesi, tutuşma bölgesinde yüksek sıcaklıklarda ortaya çıkan durumdan ayırt edilmelidir. Soğuk alev bölgesindeki yanma, değişik bölgelerdeki izlenen davranışlar arasında bir dalgalanma görünümündedir.

Sıcaklık yerine basınç değiştirildiği takdirde farklı olaylar izlenebilir. 350 ile 400°C altında bir sıcaklık seçtiğiniz zaman ilk olarak alçak sıcaklıkta yanma izlenebilmekte ve basınç arttırıldıkça da soğuk alev bölgesine girilmektedir. Şekil 3.3’de bu durum anlatılmıştır. Sonunda, ikinci soğuk alevin statik bir sistemde eksplozyona, akan bir sistemde ise mavi bir aleve dönüştüğü bir bölgeye erişilir.



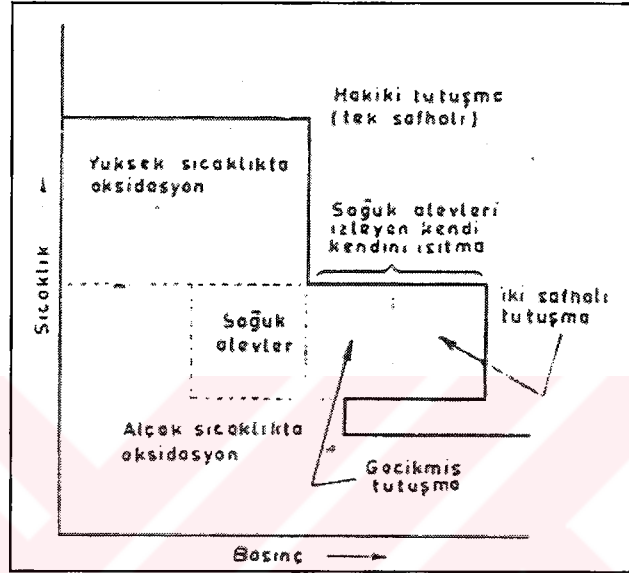
Şekil 3.3 HC oksidasyonunda ortaya çıkan yanma olayları

Reaktantların büyük kısmı ikinci işlemde ürünlere çevrildiği ve entalpinin büyük kısmı da serbest hale geçtiği için bu işleme genellikle tutuşma denir. İki adımlı işlem de “iki safhalı tutuşma” diye adlandırılır. Ancak reaksiyon burada dahi tamamlanmamış olabilir. En azından akan sistemlerde “hakiki tutuşmanın” karakteristiği olan aleve tekabül eden bir sarı alev izlenebilir. Daha yüksek basınçlarda sadece “tek safhada tutuşma” görülebilmektedir.

“Gecikmiş tutuşmada” birden fazla soğuk alevin bölgesinde bir soğuk alev ortaya çıkmakta ve bunu uzun bir süre sonra ikinci soğuk alev ve tutuşma izler. Gecikmiş

tutuşma ve iki safhalı tutuşma soğuk alevin sistemi alçak sıcaklık bölgesinden yüksek sıcaklık bölgesine çıktığını göstermekte ve bu bölgede reaksiyon hızının ve ısı üretiminin artmasına neden olmaktadır. Bu da eksplozyona yol açmaktadır.

Hidrokarbon oksidasyonu ile ilgili olaylar çeşitli yanma bölgelerinde Şekil 3.4’de gösterilmiştir. [7]



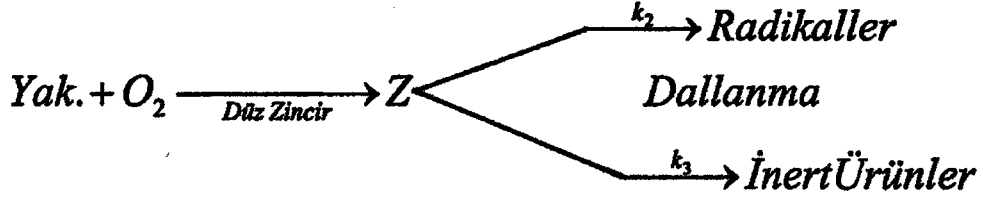
Şekil 3.4 HC oksidasyonu ile ilgili olaylar

3.1.3. Dejenere dallanma

Hidrokarbon oksidasyonu bir endüksiyon zamanına sahiptir ve buna bağlı reaksiyon hızında yavaş bir artış gözlenir. Gerçek patlama meydana gelmeden reaktantlar tüketilir ve hız düşer. Böylece dallanan zincir reaksiyonlar oluşur.

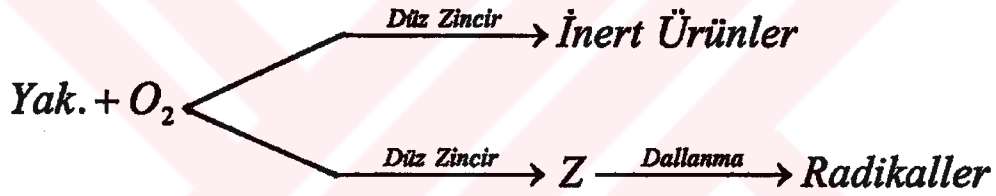
Dallanma, bir radikalle bir yakıt ve yakıcı molekülü arasındaki reaksiyondan kararlı bir ara-ürün oluşması anlamına gelir. Bu ara ürün uzun bir ömre sahip olmakla birlikte iki ayrı şekilde reaksiyona girebilir. Bu iki olay Şekil 3.5 ve Şekil 3.6’da tasvir edilmiştir.

1. Zincir dallanmasına radikaller türeten;
2. Kararlı ürünler veren reaksiyonlar.



Şekil 3.5 Dejenere dallanma

Bu sürece gecikmiş ya da dejenere dallanma, hızın zamana bağlılığına ise dejenere eksplozyon denir. Bütün Z bileşenlerinin dallanmaya yol açmadığı hallerde ise dejenere durum ilerleme reaksiyonunda ortaya çıkmaktadır. Z bileşenleri her zaman dallanmaya yol açmakta ama düz zincir çevrimi vasıtası ile sadece zaman zaman oluşturulmaktadır.



Şekil 3.6 İlerleme reaksiyonunda dallanma

Ürünlerin ortaya çıkması ölçü olarak alınırsa hakiki reaksiyon hızı Semenov'a göre :

$$\frac{d[\text{ürün}]}{dt} = k_3[Z] \quad (3.1)$$

Her çevrim sürecinin bir ara ürün molekülü meydana getirdiği ve bir radikalın zincir sona erinceye kadar yer aldığı çevrim sayısı ortalaması $\bar{\nu}$ ise, Z'nin oluşma hızı :

$$\frac{d(Z)}{dt} = \bar{\nu}k_1 + \bar{\nu}k_2[Z] - k_2[Z] - k_3[Z] \quad (3.2)$$

ifadesiyle yazılır.

k_1 aktif merkezlerin bir başlatma reaksiyonu tarafından türetilme hızıdır. $t=0$ anında $[Z]$ ve $[\text{ürün}]$ sıfır olduğu varsayılır ise ve (3.1) iki defa integre edilir ise :

$$[\text{ürün}] = \frac{\bar{\nu} k_1}{[k_2(\bar{\nu}-1) - k_3]^2} \cdot \left\{ \exp[k_2(\bar{\nu}-1) - k_3] \cdot t - [k_2(\bar{\nu}-1) - k_3] \cdot t - 1 \right\} \quad (3.3)$$

bağıntısı ortaya çıkar. Ürünlerin konsantrasyonu arttığı zaman sadece üstel terim önem kazanmakta gelişme reaksiyonunun zamana bağlılığı da,

$$[\text{ürün}] = C' \cdot e^{\alpha} \quad (3.4)$$

halini almaktadır. Net “dallanma faktörü” θ ile ifade edilip $[k_2(\bar{\nu}-1) - k_3]$ ifadesine eşit olmaktadır.

Knox tarafından ortaya atılan mekanizmada k_3 terimi ihmal edilebilmekte ve $\bar{\nu}$ ise Z' ye yol açan çevrimlerin kesrini gösteren bir β faktörüyle çarpılmaktadır. Böylece dallanma faktörü $k_2(\beta \cdot \bar{\nu} - 1)$ halini alır. Semenov yaklaşımında ise Z uzun ömürlüdür ve inert ürün meydana getirecek şekilde tepkimeye girer.

Semenov kinetik denklemleri şöyle ifade etmiştir :

$$\frac{dn}{dt} = n'_0 + f_b n \quad (3.5)$$

$$-\frac{d[I]}{dt} = n'_0 + f_p n \quad (3.6)$$

$[I]$ ve n yakıtın ve aktif merkezlerin konsantrasyonunu ifade eder. n'_0 başlama reaksiyon hızını ve f_b ile f_p ise zincir dallanma ve zincir ilerleme reaksiyonlarının hız sabitleridir. Dejenere dallanmada $f_p/f_b = q$ denirse q birden büyük olmalıdır. Yakıtın başlangıçtaki konsantrasyonu $[I_0]$ ise reaksiyon ilerleme derecesi a şöyle ifade edilir :

$$a = \frac{[I_0] - [I]}{[I_0]} \quad (3.7)$$

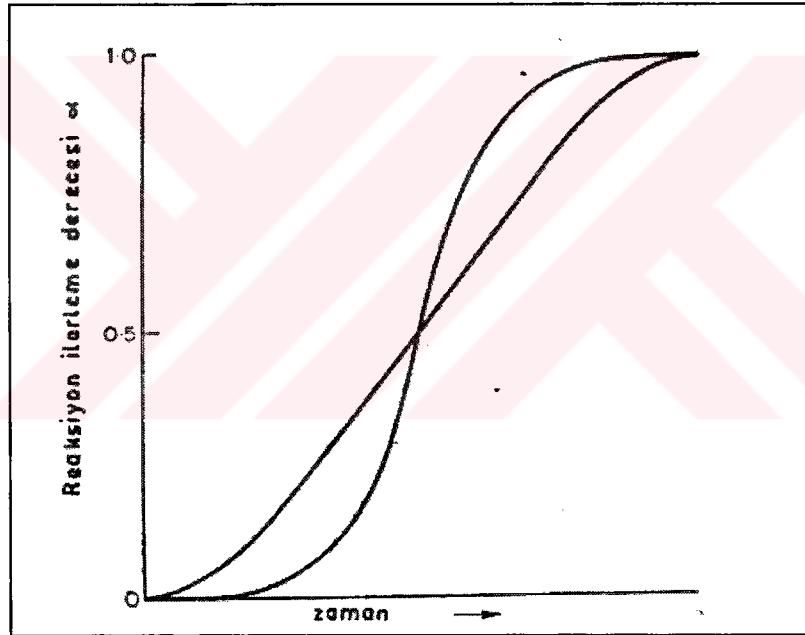
Bu denklemler integre edilirse :

$$t = C \cdot \log \frac{1 + \frac{a}{q\sigma}}{1 - a} \quad (3.8)$$

Burada C sabit bir katsayı, σ da başlama reaksiyonunun bağıl hızının bir ölçüsüdür. İfadesi ise :

$$\sigma = \frac{n'_0}{f_b[I_0]} \quad (3.9)$$

Şekil 3.7'de a 'ya bağlı dejenere dallanma reaksiyon davranışı görülüyor.



Şekil 3.7 Dejenere dallanmada reaksiyon davranışı

$a < \sigma < 1$ olduğu durumlarda reaksiyon üstel bir artış göstermektedir. Eğri uzun zamanlarda S şeklini almaktadır. [7]

3.1.4. Başlıca reaksiyon özeti

Organik bileşenlerin oksidasyonu çok çeşitli reaktif ürünler içine almakta ve karşılığında da çok sayıda ürün türetmektedir. Hidrokarbon oksidasyonunda iki tip reaksiyon karakterize edilir :

1. 500 ile 800 K sıcaklık aralığında yavaş oksitlenme ile ön alev reaksiyonları,
2. Alevde yüksek sıcaklık reaksiyonları.

Hidrokarbonlar doğada çok farklı şekillerde bulunmaktadır. Hidrokarbonların yanma karakteristikleri de doğal olarak hidrojen, karbon atomu oranına (H/C) ve atomlar arası bağ enerjilerine bağlıdır. Bu H/C oranı petrolde 2,0; kömürde ise 0,75'dir. Kömürün bu daha düşük H/C oranı, ondan sentetik yollardan likit yakıt üretiminde kolaylık sağlar, çünkü bu proseste H/C oranı arttırılır. Bu sebepten düşük H/C oranlı hidrokarbonlar gelecekte emisyon ve is konusundaki problemleri aşmada yardımcı olacaktır.

Hidrokarbon oksidasyonunun kinetiği genel bir şema içersinde şöyle özetlenebilir :

- 1.) RH hidrokarbonuna serbest radikalın atak yapması :



- 2.) Ayrışma ya da dekompozisyon; $\dot{R}$ radikali C.C bağı tarafından daha düşük bir hidrokarbon ve CH_3 oluşturmak üzere ayrışır.



- 3.) $\dot{R}$ radikalinin O_2 ile reaksiyonun neticesinde daha da düşük bir hidrokarbon ve HO_2 veya :



O heterosiklo; peroksid yada oksijene olmuş ürünler oluşur :



4.) İzomerizasyon : $\dot{R}O_2$ radikali moleküller arası H atom transferi üzerinden $ROOH$ radikali oluşturmak üzere bozunur.



veya $\dot{R}O_2$ radikali daha düşük hidrokarbon ve basit radikaller vermek üzere bozunur,

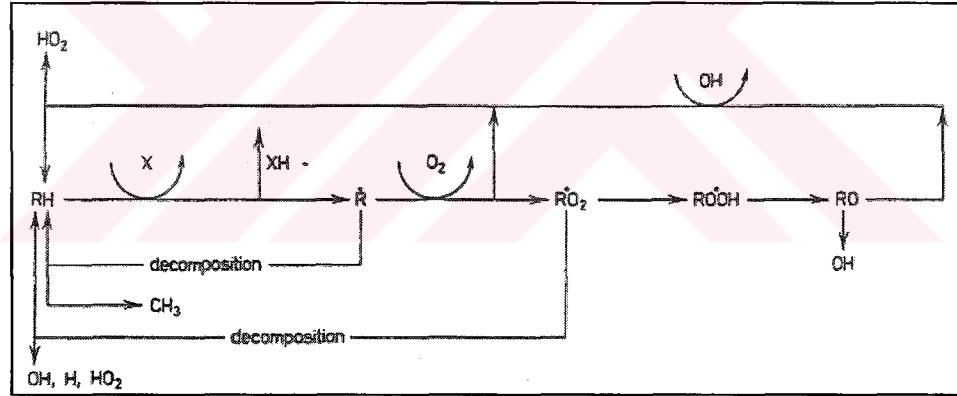


5.) $ROOH$ in dallanma zincirinin dekompozisyonu



6.) Diğer radikallerin kalan yakıt molekülleri ile doğrusal zincir reaksiyonu.

Şekil 3.8’de hidrokarbon oksidasyonunun başlıca “reaksiyon özeti” görülüyor.



Şekil 3.8 HC oksidasyonunda yaralan ana kimyasal reaksiyonların özeti

Belli hidrokarbonlara radikal atağının hızı parametresi aşağıdaki formülle hesaplanabilir :

$$k = n_p c_p e^{-\frac{E_p}{RT}} + n_s c_s e^{-\frac{E_s}{RT}} + n_t c_t e^{-\frac{E_t}{RT}} \quad (3.10)$$

n = C-H bağı sayısı

c = C-H bağı başına frekans faktörü

E = Aktivasyon Enerjisi ; p = birincil , s = ikincil , t = üçüncül

Tablo 3.1’de OH, H ve HO₂ atağı için C-H bağı başına özgül hız parametreleri görülüyor. [8]

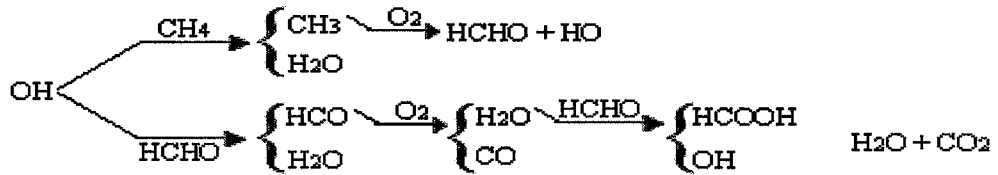
Tablo 3.1 Hız parametreleri a (m³/mol s) b (kcal/mol)

	OH		H		HO ₂	
	c_1^a	E_1^b	c_2^a	E_2^b	c_3^a	E_3^b
Birincil	$6,15 \cdot 10^5$	1,65	$2,2 \cdot 10^7$	9,7	$1,0 \cdot 10^6$	19,4
İkincil	$1,4 \cdot 10^6$	0,86	$5,0 \cdot 10^7$	8,35	$1,0 \cdot 10^6$	17,0
Üçüncül	$1,25 \cdot 10^6$	-0,19	$8,7 \cdot 10^7$	7,0	$1,0 \cdot 10^6$	14,4

3.2. Metanın Yanma Mekanizması Kinetiği

3.2.1. Metan ile O₂ arasındaki alçak basınç zincir reaksiyonu

Şekil 3.9a’da metan oksijen karışımının normal basıncın altında olan veya onu çok geçmeyen basınçlarda gerek borulardan geçirilmesi (dinamik deneyler) gerekse kaplara doldurulması (statik deneyler) hallerinde 420 ile 700°C arasındaki bir sıcaklıkta elde edilen deneysel sonuçlara uygundur.

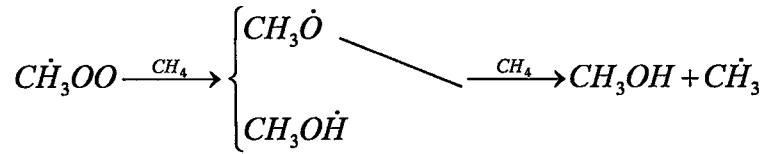


Şekil 3.9a Metanın alçak basınç zincir reaksiyonu

Bu şartlardan başlıca oksidasyon ürünleri CO, H₂O ve HCHO dur. Aynı zamanda az miktarda CO₂ oluşur. Bu CO₂, formaldehitin yüzeyde cereyan eden ve şemada gözükmeyen bir katalitik oksidasyonun ürünüdür. Metil alkol ve H₂O₂ teşekkül etmez. Zincirlerin adi sıcaklıkta bir formaldehidit ve oksijen karışımı içinde

fotokimyasal yolla doğmasına meydan verilirse formik asit (HCOOH), CO ile suyun yanında başlıca ürün olur. Yüksek sıcaklıkta formik asit CO ile H₂O'ya ayrışır. Formaldehit yukarıdaki iki reaksiyon yolundan doğan OH sayıları eşit oluncaya kadar teşekkül eder. Bu halde formaldehit derişikliği, metan derişikliğine göre stasyonere kalır, halbuki bu arada CO₂ ve H₂O devamlı teşekkül etmektedir. O halde formaldehit verimi azdır.

Metanın oksidasyonu çok çeşitli şartlarda incelenmiştir. Bu incelemeler 10 ile 150 atm basınçları aralığında 340 ile 440°C sıcaklıkları arasında yapılmıştır. Karışımın bileşimi takriben 8 kısım CH₄ ile 1 kısım O₂ den ibaretti. Bu şartlar altında yüzey katalizinin ne rol oynadığı belli değildir, fakat reaksiyonun kısmi zincir karakteri bunun tedrici hızlanmasından anlaşılmaktadır. Bu hızlanma hidrokarbonların yavaş yanmasında genel olarak görülmekte ve zincir sayısının zamanla artması şeklinde açıklanmaktadır. Önemli miktarda CH₃OH oluşmuştur ve Jost'a göre denel sonuçlar CH₃OH ile HCHO arasındaki oranın, karışımın basıncı ile orantılı olduğunu göstermektedir. Bu şunu gösterir ki formaldehit CH₃ ile O₂ nin ikili çarpışmasından meydana geldiği halde CH₃OH, CH₃O₂ ve CH₄ gibi üçüncü bir bileşenin üçlü çarpışmasından doğmaktadır, çünkü üçlü çarpışmalar sayısının ikili çarpışmalar sayısına oranı toplam basınçla orantılıdır. Olgular, CH₃+O₂+CH₄ üçlü çarpışmasının ilk ürününün metil peroksit CH₃OO• radikali olduğunu göstermektedir. Bu radikalden de ardışık reaksiyonlar sonunda CH₃OH oluşabilir:



Şekil 3.9b Üçlü çarpışma

Bununla beraber reaksiyonun bu safhasının daha karışık olması mümkündür. Mesela metil-hidroperoksit (CH₃OOH) başlıca



reaksiyonuna göre katalitik olarak ayrışır. CH₃OOH'un karışımı içinde



reaksiyonuna göre teşekkülü mümkündür, fakat bunun yalnız ayrışma ürünleri ele geçebilir (CH_3OH) çünkü kendisi çok kararsızdır. [9]

3.2.2. Metan oksidasyonundaki esas reaksiyonlar

Metanın oksidasyonu bunun en basit hidrokarbon olması nedeniyle geniş şekilde incelenmiştir. “Metil (CH_3)” hakim hidrokarbon radikali olmakta ve oksijenle reaksiyona girerek metilperoksi radikalleri vermektedir.



Bu radikaller sonra formaldehit ve hidroksile ayrılmaktadırlar.



Hidroksil radikallerde zinciri devam ettireceklerdir.



Böylece zincir çevrimlerinin üçüncüsü ortaya çıkmakta, burada ilerlemeye OH radikalleri sebep olmakta ve dejenere dallanma ara ürünü olan formaldehit türetilmektedir.

Başlama muhtemelen :



reaksiyonu vasıtasıyla sağlanmakta, $\dot{\text{H}}\text{O}_2$ radikalleri, sonradan hidrojen-peroksit meydana getirecek şekilde ayrılmaktadır.



Formaldehit oksijenle reaksiyona girerek dallanmaya sebep olmakta



ve $\dot{H}O_2$ radikalleri de ya (R16)'da olduđu gibi metanla yada formaldehitte reaksiyona girmektedirler.



Formaldehit konsantrasyonu yeterli olduđu takdirde,



reaksiyonu vuku bulur.

$CH\dot{O}$ radikalleri oksijenle reaksiyona girerek CO verirler :



Yavaş oksidasyonda reaksiyon zincirleri çeperde sona erecektir. Bu mekanizmada CH_2O , H_2O_2 , H_2O ve CO ürünlerinin hepsine rastlanmaktadır.

Tablo 3.2 Metan oksidasyonunda yer alan reaksiyonlar.

Başlama	$CH_4 + O_2 \rightarrow CH_3 + HO_2$
Primer zincir(dallanmayan)	$CH_3 + O_2 \rightarrow CH_2O + OH$
	$OH + CH_4 \rightarrow H_2O + CH_3$
Dejenere dallanma reaksiyonu	$CH_2O + O_2 \rightarrow CHO + HO_2$
İlave primer zincirler türeten reaksiyon	$HO_2 + CH_4 \rightarrow H_2O_2 + CH_3$
CH_2O 'nun endüktif reaksiyonu(dallanmayan)	$CHO + O_2 \rightarrow CO + HO_2$
	$HO_2 + CH_2O \rightarrow H_2O_2 + CHO$
	$OH + CH_2O \rightarrow H_2O + CHO$
Sona erme	$OH, HO_2 \rightarrow \text{çeperler}$

Öbür ürünler kesinlikle $CH_3\dot{O}_2$ radikallerinin alternatif reaksiyonları sonucu ortaya çıkmaktadırlar. Bu radikaller hidrojeni yakıttan direkt olarak ayırmamakla birlikte öbür öğelerden ayırabilirler.

Örneğin :



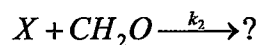
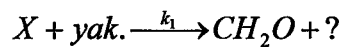
Metilhidroperoksid $CH_3\dot{O}$ radikallerine bölünebilmekte ve bunlarda ayrılarak metanol meydana getirmektedirler. Organik maddelerin karakteristik oksidasyon davranışlarının bir dejenere dallanma ara ürünün oluşmasına bağlı olduğu bilinmektedir. Bu rolü metan yanmasında formaldehit oynamaktadır. Özetle :

- i. Oksidasyon hızının maksimumu CH_2O konsantrasyonunun maksimumu ile çakışmaktadır.
- ii. Formaldehit ilavesi endüksiyon safhasını azaltmakta veya elimine etmekte fakat ilave edilen miktar reaksiyonda oluşandan fazla olmadığı müddetçe maksimum oksidasyon hızını etkilememektedir, fazla olma halinde ise başlangıçta yüksek bir oksidasyon hızı görülmekte ve bu çabucak normal hıza düşmektedir.
- iii. Reaktif karışımın, formaldehitin ayrışmasına sebep olduğu bilinen dalga boylarında fotolize tabi tutulması endüksiyon safhasını azaltıp maksimum hızı artırmaktadır.

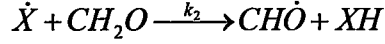
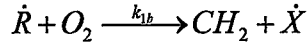
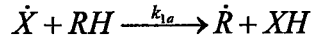
Metanın oksidasyonunda maksimum formaldehit konsantrasyonu reaktant konsantrasyonuna aşağıdaki gibi bir bağıllık gösterir:

$$[CH_2O]_{maks} = k[yak.]^1 [oksijen]^0 \quad (R24)$$

$[CH_2O]_{maks} = \left(\frac{k_1}{k_2}\right) \cdot [yak.]$ olabilmesi için reaksiyon biçimlerinin şu şekilde olması gerekir.



Bu dizi bir adım daha ileri götürülerek aynı sonuçlara yol açan



reaksiyonları elde edilir. Metan oksidasyonunda (R16) ve (R18) reaksiyonları k_{1a} yı ; (R14) ve (R15) k_{1b} yi ve (R20) ve (R21) da k_2 yi temsil etmektedir.

Ancak Norrish bu temel mekanizma üzerinde mutabık değildir. Ona göre reaksiyon



ile başlamakta ve



dejenere dallanma reaksiyonu olmakta ve oksijen atomlarının metanla olan



reaksiyonları da bunları izleyerek ilave primer zincirler üretmektedir. [7]

Metan doğadaki en sık rastlanan hidrokarbondur ve doğalgazın temel bileşenidir. Metanın farkı C-H bağı enerjilerinin diğer hidrokarbonlarından fazla olması ve tek bir karbon atomu olması nedeniyle oksidasyonu esnasında düşük sıcaklıklarda bile zincir dallanmaya neden olan aldehit gruplarının oluşmamasıdır. Bu nedenle metan en az reaktif hidrokarbondur. Peeters ve Mahnen'e göre metan oksidasyonu zincir de şu adımlar yer almaktadır.



1100 ile 1900 K arasında hız sabitleri bu reaksiyonlar için :

$$k_I = 3.10^7 \exp (-3012 / T)$$

$$k_{II} = 1,26.10^8 \exp (-5992 / T)$$

$$k_{III} = 1,70.10^7 \exp (-4410 / T)$$

Bu reaksiyonlarda oluşan metil radikali bir (O) oksijen atomuyla reaksiyona girer.



$$k_{IV} = 1,3 \cdot 10^8 \exp (-1007 / T)$$

Formaldehit hız hesaplanan adım olan termal ayrışma ile partikül oluşumunu sağlayacak şekilde yok olur.



$$k_V = 2,1.10^{10} \exp (-17624 / T)$$



(RVI) reaksiyonu üzerinden bu ayrışma gerçekleşir.

Formaldehitin az bir kısmı oksijen ile reaksiyona girer :



Bu reaksiyonların hız sabitleri $k_6=2,3.10^7$ ve $k_7=1,2.10^7$ dir.

(Sıcaklık aralığı 1400 ile 1800 K)

CHO radikallerinin büyük bir kısmı O_2 ile reaksiyona girer.



$$k_8=3.10^7 \quad (1400 \text{ K} < T < 1800 \text{ K})$$

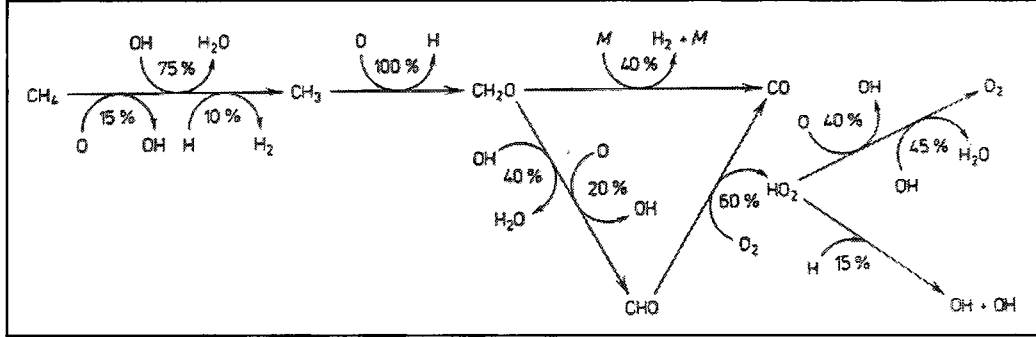
Hidroperoksit radikali O ve H ile tepkimeye girer.



$$k_9 = 5.10^7 \quad (1400 \text{ K} < T < 1800 \text{ K})$$



$$k_{10} = 7.10^7 \quad (1400 \text{ K} < T < 1800 \text{ K})$$



Şekil 3.10 Metan oksidasyonundaki reaksiyonların özeti (Peeters – Mahnen)

Şekil 3.10'da yer alan şemadan da anlaşılacağı gibi; fakir alevlerde metanın %75'i OH ile %15'i O ile, %10' u ise H ile tepkir; CH₃ O atomlarınca parçalanır. CH₂O'nun %40'ı termal ayrışmayla yok olur, %40'ı OH ile ve son %20'si O ile tepkir. CHO, O₂ ile tepkimeye girer. HO₂'nin %45'i OH tarafından harcanır, %40'ı O ve %15'i H tarafından harcanır.

Radikal dengesinden de anlaşılacağı gibi, reaksiyon H₂+O₂ sistemi tarafından desteklenmeli ve H radikali havuz oluşturulmalıdır. CH₄+O₂ ve CO+H₂+O₂ birleşmeleri gözlemlenmektedir.

Ayrıca Warnatz tarafından 23 bileşenli 50 reaksiyonlu ve Coffee tarafından 20 bileşenli 63 reaksiyonlu oksidasyon şemaları oluşturulmuştur. [8]

3.2.3. Metanın yüksek sıcaklıklarda oksidasyonu

Kendiliğinden ilerleyen alevde radikallerin reaksiyon bölgesinin ilerisine itilmekte olmaları



tipinde bir başlama reaksiyonuna gerek olmadığı ve ilavetine $\dot{H}O_2$ radikallerinin reaksiyonda yer almalarının icap etmediği anlamına gelmemektedir.



(R29) reaksiyonu da yakıtça zengin alevlerde önemli olmakla birlikte asıl ilerleme reaksiyonun

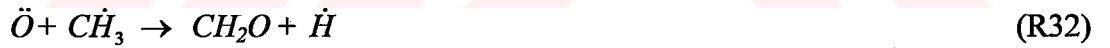


olduğu kesindir.

Oluşan metil radikalleri sonradan reaksiyona girerek formaldehit meydana getirmektedirler. Birincisi önceki gibi molekül halindeki oksijenle reaksiyon



(alev şartları altında çok kısa ömre sahip olan $CH_3\dot{O}_2$ 'nin oluşması ihmal edilebilir), öbürü ise eğer yüksek radikal konsantrasyonları mevcutsa önemli hale geçebilen oksijen atomları ile reaksiyon



olan iki mekanizma öne sürülmüştür.

Formaldehit konsantrasyonunun çok küçük olması bunun radikaller tarafından ortadan kaldırılmasının etkili olduğu sonucunu ortaya çıkartmaktadır.



CH_2O 'nun artık dallanmaya yol açması icap etmediğini ve zincir dallanmasının hidrojen oksijen reaksiyonunda mevcut dizi tarafından ortaya çıkartıldığını belirtmek gerekmektedir.



Yukarıdaki reaksiyon ve



tipindeki reaksiyonlar hidrojen atomları vermektedirler. Yüksek sıcaklıktaki reaksiyonların hidrojen atomlarının sistemdeki mevcudiyet derecesinde ve bununla reaktantların yakıt / oksijen oranına bağlı olduğu görülmektedir.

1. Oksijence zengin halde, alkol radikalleri çarçabuk formaldehit v.s. okside olacaktır.
2. Yakıtça zengin durumunda hidrojen atomlarının ayrılması önem kazanmakta ve oluşan radikaller kendi aralarında reaksiyona girerek az miktarda yüksek hidrokarbon oluşturma imkanına sahiptirler. [7]

3.2.4. Yanma kinetiği

ODE; homojen, statik, gaz fazındaki elementler kimyasal reaksiyonu şu formülasyonla tanımlar :

$$\frac{d\sigma_i}{dt} = f_i(\{\sigma_k\}, T, \rho) \quad i, k = 1 \dots NS \quad (3.11)$$

Burada σ_i , i elementinin mol miktarını (g/karışım), t zamanı, T sıcaklığı, ρ ise karışımın kütleli yoğunluğunu simgeler. NS ise kimyasal bileşen sayısıdır.

i ürününün net oluşma hızı f_i :

$$f_i = \frac{1}{\rho} \sum_{j=1}^{NR} (\nu_{ij}'' - \nu_{ij}') (R_j - R_{-j}) \quad (3.12)$$

Burada NR farklı kimyasal reaksiyonların toplam sayısı, ν'_{ij} 'i reaktantının j reaksiyonundaki stökiyometrik katsayısı; ν''_{ij} ise i ürününün j reaksiyonundaki stökiyometrik katsayısıdır.

j reaksiyonunun birim hacim başına ileri (R_j) ve geri (R_{-j}) molar hızları ise kütle korunumundan :

$$R_j = k_j \prod_{l=1}^{NS} [(\rho\sigma_l)_{ij}]^{\nu'_{lj}} \quad j = 1 \dots NR \quad (3.13)$$

$$R_{-j} = k_{-j} \prod_{l=1}^{NS} [(\rho\sigma_l)_{ij}]^{\nu''_{lj}} \quad j = 1 \dots NR \quad (3.14)$$

Burada ise k_j ve k_{-j} ileri ve geri tepkimelerinin hız sabitleridir. Her k_j sıcaklığın bir üstel fonksiyonudur.

$$k_j = A_j T^{n_j} e^{-\frac{E_j}{RT}} \quad (3.15)$$

Burada ise A_j bir ön katsayı n_j sıcaklığın kuvveti, E_j aktivasyon enerjisi ve R gaz sabitidir. A_j , n_j ve E_j sabit rakamlardır. Tersinir bir reaksiyonda k_{-j} ve k_j arasında konsantrasyon cinsinden ifade edilen denge sabitine bağlı bir bağıntı vardır :

$$k_{-j} = \frac{k_j}{K_{c,j}} \quad (3.16)$$

$K_{c,j}$, j reaksiyonunun denge sabiti olup, sadece ideal gaz karışımının sıcaklığına bağlıdır. Yanma prosesinde sıcaklığın gelişimini çözmek için enerji korunumunun yaklaşımı kullanılır. Örneğin kullanılan adyabatik sabit basınç prosesinin enerji denklemi

$$\sum_{l=1}^{NS} \sigma_l h_l = \text{sabit} \quad (3.17)$$

Buradaki h_l , l bileşeninin molar-özellik entalpisidir. (3.17) denkleminin zamana bağlı türevi alınır, sıcaklık için şu ODE denklemi çıkar:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-\sum_{l=1}^{NS} f_l h_l}{\sum_{l=1}^{NS} \sigma_l c_{p,l}} \quad (3.18)$$

Bu denklemindeki $c_{p,l}$, l bileşeninin sabit basınç altındaki molar özgül ısıdır. İdeal gazlar için h_l ve $c_{p,l}$ gibi termodinamik özellikler sıcaklığın fonksiyonlarıdır.

Adyabatik sabit basınç problemlerinde (3.17) ve (3.18) denklemleri sıcaklığı bulmak için kullanılabilir. Eğer (3.17) denklemi kullanılır ise T sıcaklığı $\{\sigma_j\}$ den ve başlangıç karışım entalpisinden hesaplanır. Yakınsama metoduyla (3.17) denklemini elde edilinceye ve sabitlik sağlanıncaya kadar hesap edilir. Sıcaklık bu şekilde ya (3.17) ile cebirsel yoldan ya da (3.18) kullanılacak ODE ile hesaplanır.

Adyabatik olmayan reaksiyonlarda ise, ısı transferi modellerine ihtiyaç duyulur ve ODE sıcaklık çözülmek zorundadır. Değişken yoğunluklu problemler ya ODE ya da cebirsel denklem ile çözülür. Bu tür problemlerde basınç, zamanın bir fonksiyonudur ve yoğunluk ya da ODE'si ideal gaz denkleminde elde edilir.

Genel ODE denklemi vektör formu şeklinde yazılırsa :

$$\dot{y} \equiv \frac{dy}{dt} = f(y) \quad t_0 \leq t \leq t_{son} \quad (3.19a)$$

$$y(t=t_0) = y_0 = veri \quad (3.19b)$$

Burada “y” N boyutlu vektördür.

$$y_i = \sigma_i \quad i = 1 \dots NS \quad (3.20a)$$

$$y_{NS+1} = T \quad (3.20b)$$

$$y_{NS+2} = \rho \quad (3.20c)$$

$$N = NS + 2 \quad (3.20d)$$

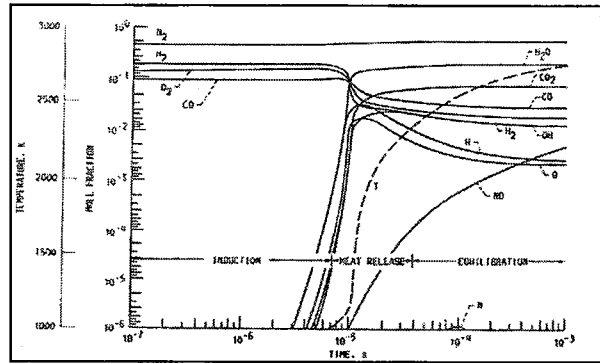
Burada hesaplama problemi y' yi belirli bir zaman intervali sonu için (t_{son}) başlangıç koşulları, reaksiyon mekanizması ve hız sabitleri parametreleri verileriyle çözmektir.

ODE sayısı yanma prosesine katılan ürünlerin sayısına göre büyük olabilir. Doğru bir reaksiyon mekanizması için ODE genel denklemini tekrar tekrar çözmek gerekecektir. Bu nedenle yanma kinetiği problemleri için hızlı ve güvenilir çözüm teknikleri gereklidir. Tepkiyen akış problemlerinde hızlı kinetik çözümler daha kritiktir çünkü hız denklemleri binlerce ağ sistemi noktasında entegrasyon yapma durumundadır. Gerçekten kimyasal kinetik denklemleri çözümü tepkiyen akışkanın en masraflı kısmıdır. [10-11]

3.3. Kısaltılmış Mekanizmalar

3.3.1. Stiffness (katılık) problemi

Şekil (3.11)' de görülmekte olan bileşen konsantrasyonu ile sıcaklığın değişimidir. Bu değişim kıvılcım ve sonraki yanma prosesinde 10 atm'lik sabit basınç altında ve 1000 K'lik başlangıç sıcaklığında gerçekleşmektedir. Reaktantlar CO, H₂ ve hava karışımıdır ve mekanizma 12 reaktant içermektedir.



Şekil 3.11 Mol oranları ve sıcaklık profilleri

Burada üç faz gerçekleşmektedir : endüksiyon, ısı açığa çıkışı ve denge. Reaksiyon, ısı verilmesiyle ya da sisteme şok dalgası verilmesiyle sistemin sıcaklığının artırılıp, başlangıç safhasına getirilmesiyle sağlanır.

Endüksiyon safhasında kimyasal aktif bileşenlerin (O,H,OH) konsantrasyonları hızla artarak H₂, CO ve C oksidasyonunun başlangıcı sağlanır. Isı açığa çıkışı ise endüksiyon periyodunun bitişiyle başlar.

Bu faz sonunda ısı açığa çıkışında temel ürünlerin sıcaklık ve konsantrasyonları hızla artacak ve sıcaklık maksimum değerinin %90' ına ulaşacaktır.

Son fazda ise bütün değişkenlerin asimptotik olarak birbirine yaklaştığı denge periyodudur. Genel olarak ODE'nin nümerik metotlarıyla "fark denklemi" kullanılır:

$$\dot{y} = \frac{dy}{dt} = \frac{\Delta y}{\Delta t} = \frac{y_n - y_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} \quad (3.21a)$$

Sonuç ise adım adım entegrasyonla bulunur.

$$y_n = y_{n-1} + \dot{y} \cdot (t_n - t_{n-1}) \quad n = \text{adım sayısı} \quad (3.21b)$$

Çözümün temel adımları şu şekildedir :

1. Çözüm t₀ anındaki başlangıç koşullarıyla başlar.

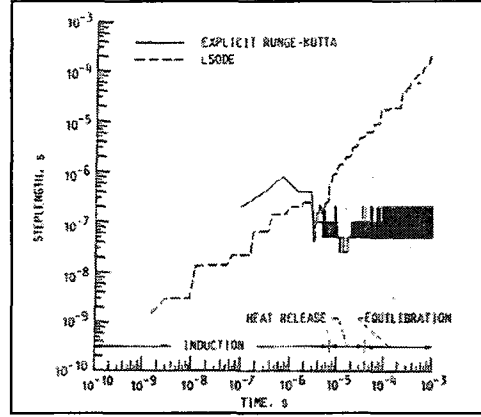
$$y_{0i} = y_i(t_0) \quad i = 1 \dots N \quad (3.22)$$

2. ODE'ye yaklaşım çözüm ayrık zaman noktalarından başlar. (t_n n=1....)

Diferansiyel denklemler doğrusal olmadığı için iterasyon yapılır.

3. Zamanın iki ayrık noktası arasındaki interval (t_n-t_{n-1}) adım büyüklüğü veya adım uzunluğu olarak adlandırılır.

Adım uzunluğu, ekonomik ve tam bir çözüm sağlamak için adımdan adıma değişmektedir. Problemi çözmek için 4.derece Runge-Kutta denklemi yerine kullanılan farklı boydaki adım uzunluğu Şekil (3.12)'de görülmektedir.



Şekil 3.12 Sabit basınçta mol oranı ve sıcaklık profilleri

Adım uzunluğu endüksiyon ve ısı açığa çıkışı kısımlarında, konsantrasyon ve sıcaklıktaki dik artışlar nedeniyle küçük olmalıdır. Isı açığa çıkışı ve denge fazlarında adım uzunluğu daha büyük seçilebilir. Yine de adım boyu ani değişimli bölgelerde tam ve stabil bir çözüm için küçük tutulmalıdır. İhtiyaç durumunda toplam adım sayısını arttırmak ve bilgisayarın CPU zamanı da buna bağlı olarak artırmak gerekebilir. Bundan ötürü hızlı ve daha ekonomik çözüm teknikleri geliştirilmiştir.

$$\frac{\Delta y}{\Delta t} = f(y_{n-1}, t_{n-1}) = \frac{y_n - y_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} \quad (3.23a)$$

ve nümerik entegrasyonla

$$y_n = y_{n-1} + h \cdot f(y_{n-1}, t_{n-1}) \quad h = (t_n - t_{n-1}) \quad (3.23b)$$

Başlangıçta ise $t = t_0$ 'da $y = y_0$ alınmaktadır.

Eğer y_n sayısal yaklaşım ise ve Ψ_n tam analitik çözüm ise, toplam hata :

$$\varepsilon_n = y_n - \Psi_n \quad (3.24)$$

Ψ_n , Taylor serisine açılır ise :

$$\psi(t_n) = \psi(t_{n-1}) + h \cdot \left(\frac{d\psi}{dt} \right)_{n-1} + \frac{h^2}{2} \cdot \left(\frac{d^2\psi}{dt^2} \right)_{n-1} + \dots \quad (3.25)$$

Şayet $y_{n-1} = \Psi_{n-1}$ ise y 'deki toplam hata üç kısım içerir :

i. Birinci derece yaklaşıma göre ayrıklaştırma hatası :

$$E_{d,n} = \frac{h^2}{2} \cdot \left(\frac{d^2 \psi}{dt^2} \right)_{n-1} \quad (3.26)$$

ii. Kesme hatası :

$$y_n = y_{n-1} + h \cdot f(y_{n-1}, t_{n-1}) + E_{t,n} \quad (3.27)$$

iii. İletilen hata :

n. adımının toplam hatası ise :

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + h \cdot [f(y_{n-1}, t_{n-1}) - f(\Psi_{n-1}, t_{n-1})] + E_{t,n} + E_{d,n} \quad (3.28a)$$

veya :

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} \cdot \left[1 + h \cdot \left(\frac{df}{dy} \right)_{n-1} \right] - E_{t,n} + E_{d,n} \quad (3.28b)$$

Curtiss ve Hirschfelder 1952'de “stiff” (katı) tanımını kimyasal kinetikte ODE'nin bazı özelliklerini tanımlamak için kullanmışlardır. Katılık tanımı kolay olmamakla beraber şöyle özetlenebilir :

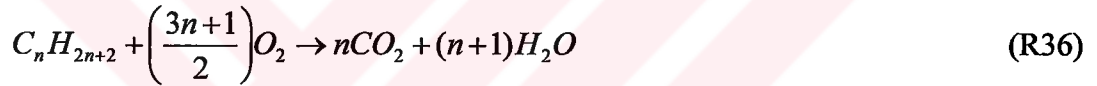
1. Katılık denklemleri geniş bir aralıkta değişen büyüklüğün sabit zamanı tarafından karakterize edilir.
2. Katılık problemleri klasik ODE çözüm metotlarını zorlar ve çözüme asimptotik bir yaklaşım getirir. Ancak katılık problemi için geliştirilen özel programlar (LSODE) değişken adım kullanarak oldukça az adım sayısına ve kısa CPU zamanına ihtiyaç duyarlar. Örneğin 90 adım için 0.35 s gerekirken, LSODE'da 10000 adım için 60 s gerekir.
3. Erken ısı açığa çıkışı fazında konsantrasyonlar ve sıcaklık üstel olarak artar ve ODE'ler instabildir. Bu fazda küçük zaman adımları stabil bir çözüm için seçilmelidir. Geç ısı açığa çıkışında ve denge fazlarında denklemler stabildir. Bu rejimler katıdır ve daha büyük zaman adımları kullanılabilir.

Stabil ve ekonomik olmasının yanında, sayısal metod tam olmalıdır ki instabil modlar elimine edilsin. Sayısal metodun tamlığı tek bir adımdaki kesme ve ayrıklaştırma hatalarıyla ilintilidir. [10-11]

3.3.2. İskelet mekanizmalar

Daha önce de bahsedildiği gibi hidrokarbonlar, karbon (C) ve hidrojenden (H) oluşan bileşiklerdir ve önemli bir yakıt sınıfını oluştururlar. Bunların en basiti olan metan (CH₄) doğalgazın en önemli bileşeni olup, önemli bir yakıttır. Hidrokarbonlar yandığında CO₂ ve H₂O oluşur, ancak oksijen miktarına bağlı olarak C, CO₂ ve CO oluşmaktadır.

Alkanlar C_nH_{2n+2} kapalı formülüyle ifade edilir. Metanda n=1 olmaktadır, dolayısı ile metanın yanma tepkimesi :



şeklinde yazılır.

Buradan da anlaşılacağı gibi 1 mol yakıtı tam olarak yakmak için $\frac{3n+1}{2}$ mol oksijene ihtiyaç vardır. Hidrokarbonun ana bileşenleri olan karbon ve hidrojenin yanmalarına bakılacak olursa :



1 kmol	1 kmol	1 kmol
12 kg	32 kg	44 kg
c kg	8c/3 kg	11c/3 kg



1 kmol	0,5 kmol	1 kmol
2 kg	16 kg	18 kg
h kg	8h kg	9h kg

Bu denklemlerden 1kg hidrokarbon yakıtın tam yanması için gerekli minimum oksijen miktarı kütleli olarak :

$$m_{O_2, \min} = \frac{8c}{3} + 8h + s - o \quad [kgO_2] \quad (3.29a)$$

Kütleli olarak havanın %23,2'si oksijen olduğuna göre yanma için gerekli minimum hava kütleli olarak :

$$m_{hava, \min} = \frac{m_{O_2, \min}}{0,232} \quad [kg \text{ hava}] \quad (3.29b)$$

Yanmada yer alan oksitleyici (hava) gerekli olan miktardan az veya fazla olabilir. Bunu hava fazlalık katsayısı (λ) belirler.

$$\lambda = \frac{m_{hava}}{m_{hava, \min}} \quad (3.30)$$

Tanımdan yola çıkarsak;

$\lambda = 1$ olursa tam yanma (stökiyometrik yanma)

$\lambda > 1$ olursa karışım fakirdir.

$\lambda < 1$ olursa karışım zengindir.

Bu bilgiler ışığında oksitleyici hava olarak alınarak 1kg CH₄ gazının tam yanması için gerekli olan hava kütlesi bulunabilir.

Metanın moleküler ağırlığı $M(CH_4) = 12 + 4 \cdot 1 = 16$ dır.

$$m_{karbon} = \frac{12}{16} \quad m_{hidrojen} = \frac{4}{16}$$

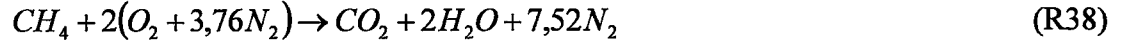
(3.29a) denklemini kullanarak :

$$m_{O_2, \min} = \frac{8}{3} \cdot \frac{12}{16} + 8 \cdot \frac{4}{16} = 16 \text{ kgO}_2 / \text{kg metan}$$

(3.29b) denkleminde de minimum hava miktarı çıkar :

$$m_{hava,min} = \frac{4}{0,232} = 17,24 \text{ kg hava / kg}$$

Yanma denklemi; havanın %79' u azot olduğuna göre :



olarak ifade edilir.

Ayrıca metanın kütle oranı da hesaplanabilir.

$$X_i = \frac{m_i}{m} \quad (3.31)$$

$$m = 16 + 2.(32) + 7,52.(28) = 290,56$$

$$X_i = \frac{16}{290,56} = 0,055 \text{ kgCH}_4 / \text{kg}$$

Metan yanması yüksek derecede egzotermik bir reaksiyondur. Karmaşık ve türbülanslı bir oluşa sahip olan yanma işlemi genellikle geri dönüşümsüz ve tek adımlı bir reaksiyon olarak kabul edilir.

Yukarıda metanın tek adımlı yanması ele alınmış ve 1 kg metanın tam yanması için 17,24 kg havaya ihtiyaç duyulduğu bulunmuştur.

Metan yanması torik olarak incelendiğinde, yanma ürünlerinin sağlıklı bir şekilde tespiti için seçilen temel reaksiyon sayısının olabildiğine çok olması gerekir. Bununla beraber bilgisayarla hesaplama zamanı oransal olarak oldukça arttıran bu sayının en aza indirilmesi de gerekir. [11]

Tam mekanizma ya da “iskelet mekanizma” daha çok deneysel ölçümleri geçerli kılmak için kullanılır. İskelet mekanizma, yanma sırasında oluşan hidrokarbon ve azot kimyasını açıklar. Aşağıda verilmiş olan tabloda C₁ ve C₂ kimyası için 65 adım , azot kimyası için de 55 adım bulunmaktadır. Bu mekanizma ön karışimsız yanma için kullanılmaktadır. Ön karışım yanmalarında bulunan bazı mekanizmalar dışarıda

tutulmuştur. (örneğin: $\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$). Ayrıca tutuşma kimyası ile ilgili bazı reaksiyonlar da ihmal edilmiştir. [3]

Çoğunlukla Smooke ve Giovangigli tarafından geliştirilmiş 25 adımlı iskelet mekanizma kullanışlı olmaktadır. Bu mekanizma tam metan oksidasyon mekanizmasından daha basit bir iskelet mekanizmasıdır.

Tablo 3.3 25 adım iskelet mekanizma

1f	$\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}$	12f	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$
1b	$\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{O}_2$	12b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{OH}$
2f	$\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	13	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$
2b	$\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{O} + \text{H}_2$	14	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$
3f	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	15	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$
3b	$\text{H}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{OH}$	16	$\text{HCO} + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$
4f	$\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	17	$\text{HCO} + \text{M} \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}$
4b	$\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	18	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{O}$
5	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$	19	$\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$
6	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	20	$\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}$
7	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	21	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$
8	$\text{OH} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	22f	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$
9f	$\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	22b	$\text{OH} + \text{OH} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}$
9b	$\text{CO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$	23f	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$
10f	$\text{CH}_4 (+\text{M}) \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H} (+\text{M})$	23b	$\text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH}$
10b	$\text{CH}_3 + \text{H} (+\text{M}) \rightarrow \text{CH}_4 (+\text{M})$	24b	$\text{OH} + \text{H} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}$
11f	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$	25	$\text{H} + \text{H} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2 + \text{M}$
11b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$		

Fakirden stökiyometrik metan alevlerine kadar bir yelpazede, bu iskelet mekanizması tam ve doğru sonuçlar sağlar ayrıca pekçok kısaltılmış kinetik şemasının da temelini teşkil eder. Ancak metanca zengin alevlere bu iskelet mekanizması C_2 'nin eksikliği nedeniyle ve yüksek karbon zinciri reaksiyonları dolayısıyla yeterli olmayabilir.

Yanma düzensiz olduğundan dolayı sayısal olarak tahmin edebilmek için akışkanlar mekaniğinde ve kimyasal kinetik eşitliklerinde birçok reaksiyon hesaba katılmalıdır. Kimyasal kinetik eşitliklerde, yanan bileşiğe ve yanmanın seviyesine bağlı olan birçok zaman sabiti vardır. Bu durum, sayısal hesaplamalardaki problemlerin en önemlilerindendir. Runge- Kutta metodu gibi çeşitli karmaşık metodlar, bu katı kinetik eşitliğin çözümüne yönelik tatminkar sonuçlar önermişlerdir.

Eşitlik, sayısal olarak entegre edilebilmesine karşın, çok sayıda basamak hesaplamak zorunda olduğu için uygulaması pahalı bir yöntemdir. Bundan ötürü iskelet mekanizmaların yerine kısaltılmış mekanizmalar kullanılır. [12]

3.3.3. Temel kısaltılmış mekanizmalar :

Kısaltılmış mekanizma ön karışimsız metan yanmasını ve ilgili azot kimyasını modelleyebilmek için, iskelet mekanizmadan çıkarılmıştır. Kısaltılmış mekanizmanın kinetik olarak daha basit olan hidrojen alevinden değil de metandan çıkarılması ilk bakışta şaşırtıcı olabilir. Bunun sebebi ise metan alevinin temel seviyesinin hidrojen alevinkinden daha düşük olması ve sabit durum ilişkilerinin daha iyi eşitlenmesidir. Daha düşüktür çünkü metan bağları daha kolay yok edilebilir. Bu yakıt reaksiyonundaki bağ kırılmasının sonucu olarak da önceden karıştırılmış metan, havanın ön ısıtma yapılmış bölgesi kimyasal olarak hareketsiz ve sabit kalır. Bu etki aynı zamanda metan alevinin asimptotik analizini de basitleştirir.

Tablo 3.4 Temel kısaltılmış mekanizma

Numara	Global Reaksion
I	$\text{CH}_4 + 2\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 4\text{H}_2 + \text{CO}$
II	$\text{H}_2\text{O} + \text{CO} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CO}_2$
III	$2\text{H} \rightarrow \text{H}_2$
IV	$\text{O}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{H}$
V	$\text{H}_2 + 2\text{CO} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2$
VI	$\text{N}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{NO}$
VII	$3\text{H}_2 + \text{CO} + \text{NO} \rightarrow \text{HCN} + 2\text{H}_2\text{O} + \text{H}$
VIII	$\text{H} + \text{H}_2\text{O} + \text{CO} + \text{NO} \rightarrow \text{HNCO} + \text{O}_2 + \text{H}_2$
IX	$\text{NH}_3 + \text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{NO} + 3\text{H}_2$
X	$\text{N}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{H}_2$
XI	$\text{NO} + 2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O} + 2\text{H}$

Bu mekanizma üç şekilde türetilebilir :

1) Hidrokarbon kimyası tanımlayan 5 adımlık kısaltılmış mekanizma,

2) Hidrokarbon ve azot kimyasını tanımlayan 11 adımlık kısaltılmış mekanizma,

3) Hidrokarbon kimyasını ve NO_x emisyonunu tanımlayan 6 adımlık mekanizma. [3]

Daha önce bahsedilen 25 adımlı iskelet mekanizmadan Seshadri ve Peters çalışmalarında 4 adımlı kısaltılmış mekanizmayı çıkarmışlardır. Bu mekanizma O, OH, HO₂, CH₃, CH₂O ve CHO için sürekli konum kabulüyle 22 elementer reaksiyondan elde edilmiştir. Global reaksiyonlar şöyledir :



Burada reaksiyon hızları şöyle verilebilir :

$$\omega_I = k_{11} [\text{CH}_4] [\text{H}] \quad (3.32)$$

$$\omega_{II} = \frac{k_{10}}{K_3} \frac{[\text{H}]}{[\text{H}_2]} \left\{ [\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}] - \frac{[\text{CO}_2] [\text{H}_2]}{K_{II}} \right\} \quad (3.33)$$

$$\omega_{III} = k_5 [\text{O}_2] [\text{H}] [\text{M}] \quad (3.34)$$

$$\omega_{IV} = k_1 [\text{H}] \left\{ [\text{O}_2] - \frac{[\text{H}]^2 [\text{H}_2\text{O}]^2}{[\text{H}_2]^3 K_{IV}} \right\} \quad (3.35)$$

Bileşen konsantrasyonu :

$$[\text{M}] = \rho \frac{Y_i}{M_i} \quad (3.36)$$

formülasyonu ile hesaplanabilir. Radikal konsantrasyon ise aşağıdaki gibi denge ilişkilerinden bulunur.

$$[O] = \frac{[H][OH]}{[H_2]K_2} \quad (3.37a)$$

$$[OH] = \frac{[H][H_2O]}{[H_2]K_3} \quad (3.37b)$$

k ve denge sabiti K ise Tablo (3.3)'den elde edilebilir. Sürekli ve kararlı durum kabulünden yola çıkarak H (hidrojen) radikali için, 4 adımlı kısaltılmış mekanizma 3 adıma indirgenebilir :



Burada da yine reaksiyon hızları :

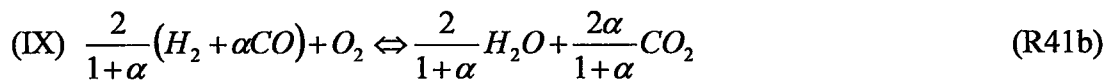
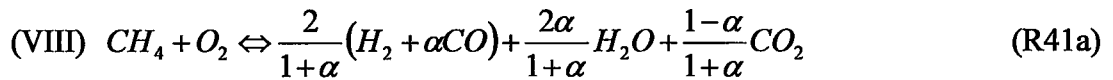
$$\omega_V = \omega_I \quad (3.38a)$$

$$\omega_{VI} = \omega_{II} \quad (3.38b)$$

$$\omega_{VII} = \omega_{III} \quad (3.38c)$$

şeklinde önceki gibi hesaplanabilir.

Daha da ileri giderek kısmi denge kabulü ile 3 adımlık mekanizma iki adıma indirgenebilir :



Burada $\alpha = \frac{[CO]}{[H_2]}$ 'i temsil etmektedir. Yine ilgili reaksiyon hızları :

$$\omega_{VIII} = \omega_I \quad (3.39a)$$

$$\omega_{IX} = \omega_{III} \quad (3.39b)$$

şeklinde bulunabilir.

Bilger tarafından göz önüne alınan 4 adımlı kısaltılmış mekanizma ise şöyledir :



Burada da yine reaksiyon hızları şöyle hesaplanır :

$$\omega_{I'} = \omega_{13} \quad (3.40a)$$

$$\omega_{II'} = \omega_9 \quad (3.40b)$$

$$\omega_{III'} = \omega_5 + \omega_{10b} \quad (3.40c)$$

$$\omega_{IV'} = \omega_1 + \omega_{10b} \quad (3.40d)$$

İlgili indislere ait hız değerleri Bilger'in tablosundan yani Tablo 3.3'den alınır. k ürününün oluşma hızı ω_k ise :

$$\omega_k = \sum (\nu''_{k,n} - \nu'_{k,n}) \omega_n \quad (3.41)$$

şeklinde ifade edilir ki , formülde $\nu''_{k,n}$ ile $\nu'_{k,n}$ n reaksiyonunda ileri ve geri adımlara da k bileşeninin mol miktarını ifade eden stökiyometrik katsayılarıdır. [12]

Seshadri Peters'in 4 adımlı kısaltılmış mekanizmasında (R39) birinci reaksiyon zincir kırma reaksiyonu olarak adlandırılır ve yakıt ile CO ve H₂ gibi ara ürünlerini oluşturan kök elementleri arasındaki reaksiyonu temsil eder. İkinci reaksiyon, CO'nun son ürün olan CO₂'yi oluşturmak üzere yaptığı oksidasyonu gösterir. Üçüncü reaksiyon, üçüncül kütlelerin birleşmesini ve bu nedenle olan küçük ısı azalmalarını

temsil eder. Dördüncü ve son reaksiyon ise zincirin kollara ayrılmasını göstermektedir. Basitlik için birinci ve üçüncü reaksiyonlar geri dönüşümsüz varsayılmıştır. [1]

3.3.4. GRI kısaltılmış mekanizmaları :

Metan hava yanmaları birçok araştırma kurum ve kuruluşu tarafından incelenmektedir. Bunlardan biri olan GRI (Gas Research Institute) doğalgaz yanmalarında CH₄ / NO_x kimyasını kesin olarak tanımladıkları iddiasındalar. GRI 2.11 adı verilen mekanizma gereksiz bileşenler çıkarılarak ve bilgisayarla kısaltılarak 5-9 adımlık CH₄ ve NO_x kimyasını içeren kısaltılmış mekanizmalara dönüştürülmüştür. Böylece 5-9 adımlık mekanizmalardan biri seçilerek yanmanın kısaltılmış modeli elde edilmiş olur. 276 adımlık GRI 2.11 mekanizmasından kısaltılmış modeller arasında en kullanışlı olanı ise 5 adımlık mekanizmadır. Bu mekanizmanın denklemleri :



Bu mekanizma birçok türün sabit durumda olduğu varsayılarak hesaplanmıştır. [3]

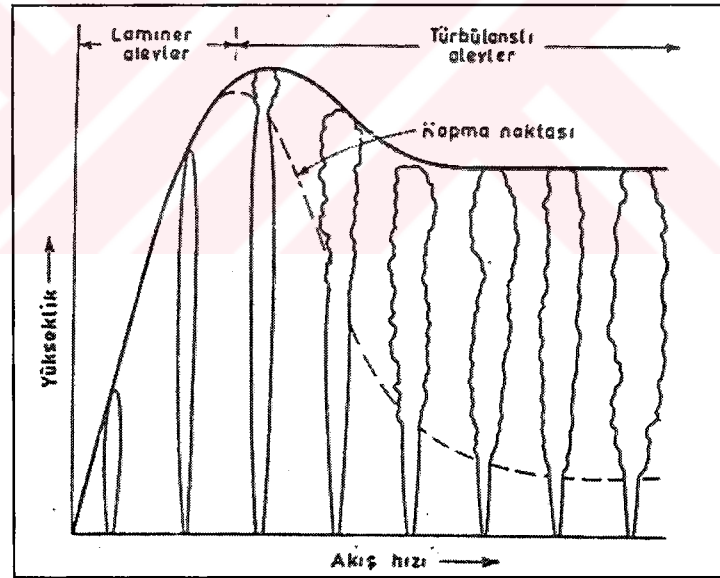
3.4. Difüzyon Alevi

3.4.1. Difüzyon alevi özellikleri

Difüzyon alevlerinde yanma, gaz durumundaki yakıt ve oksidantın temas yüzeylerinde olur ve yanma olayı mevcut kimyasal olayların reaksiyon hızından ziyade karışım olayına bağlıdır. Alevin karakteri genellikle (Re) Reynolds sayısı ile belirtilen gaz akışına bağlıdır.

Ancak türbülanslı akışta şu sonuç görülür : Reynolds sayısı, kinematik viskozite ile ters orantılıdır. Bu parametrenin değeri yanma bölgesinde şiddetli bir şekilde artmaktadır. Dolayısıyla yakıcılarda yüksek Re sayılarıyla laminar bir akışa dönüşmekte ve böylece uzun, silindirik alevli tipik laminar akış davranışları görülmektedir. Bu nedenle türbülanslı karışımdan ziyade moleküler difüzyon ile cereyan eden bir karışma olmaktadır. Şu halde kritik olarak alev sınırı bölgesindeki akışın tipi göz önüne alınmalıdır.

Eğer lüle hızı artırılırsa, türbülanslı karışım vuku buluncaya kadar laminar alevin yüksekliği doğrusal bir şekilde artacaktır. Türbülanslı karışma önce tepeden başlamakta ve akış hızı arttıkça aşağıya doğru inmektedir. Türbülanslı karışma bölgelerinde alev boyu da azalmakta ve gözle görünen kısım kalınlaşmaktadır. Belirli bir lüle hızından sonra alevin yüksekliği ile laminardan türbülanslıya geçişi gösteren kopma noktası sabit bir konumda kalmaktadır. Bu durumlar Şekil (3.13)'de görülmektedir. [7]



Şekil 3.13 Akış hızıyla difüzyon alevinin şekil değişimi

3.4.2. Türbülanslı difüzyon alevi :

Önceden karışmamış reaktantlar bölgesinin ötesinde bir akış bölgesi incelenmektedir. Gazın moleküler difüzyon kabiliyeti sıfır ise, akışın ayrılma ve gelişme kısmında reaktantları devamlı ayıran bir yüzey tanımlanabilir. Türbülanslı akımda bu yüzey

zamanla beraber dalgalanacaktır ve sürekli olarak sonsuza doğru böyle kalacaktır. Burada yüzeyden kütle transferi olmadığından akışın hız vektörü buna paralel olacaktır.

Moleküler difüzyon küçük fakat sonlu kabul edilirse, ayırıcı sınıra yakın bölgedeki reaktantların iki taraflı girişi görülebilir. Reaktantların moleküler difüzyon bölgesinde yanma (kıvılcım) ortamı oluşturmasıyla beraber, alev belirecektir. Önemli olan soru bu alevin yapısı ve dağılımı nasıl olacaktır. Bir taraftan türbülanslı akışın yüzeyinin artışı yanma yüzeyini de büyütecektir, diğer taraftan yanma bölgesinde reaktantların harcanması alevin büzülmesine neden olacaktır. Belli bir süre sonra bu ikisi dengeye erişecektir. Bundan ayrı olarak alevin gerilmesi, soğuma nedeniyle reaksiyon hızını azaltacaktır. Küçük ölçekte türbülans dalgalanmaları yanma bölgesinde moleküler prosesleri şiddetlendirecektir. Yanma şiddetlenecek ve tekrar bir denge durumuna ulaşılacaktır.

Reaksiyon sonu oluşma prosesi, yapısı ve stabilitesiyle ön karışımli duruma benzeşim sağlanır. Ancak difüzyon alevinde reaksiyon bölgesi çoğalmaz, kendini reaktant tedarikine adapte eder. Ayrıca difüzyon bölgesinin geniş ölçüleri nedeniyle, alev oluşumu ve onun türbülansla olan etkileşimiyle ilintili lokal etkiler daha az önemlidir.

Reaksiyon bölgesinin şekil ve boyutuyla ve reaksiyon hızıyla ilgili kabuller difüzyon tarafından kontrol edilir. Bu da olayın sayısal modellenmesini kolaylaştırır.

Ön karışimsız reaktantlı türbülans akışına en iyi yaklaşımı Bilger sergilemiştir. Ön karışimsız reaktantlarda türbülans akışı modellemedeki problem temel kimyasal üretim ifadelerinde ve türbülans strüktürünün ısı açığa çıkarmasında yatmaktadır. Çeşitli yaklaşımlardan en önemlileri yüksek sıcaklıklarda “hızlı kimya” veya yüksek türbülans şiddetlenmeleri için “hızlı karıştırma”dır. Bunlardan önce “skaler korunum yaklaşımını” incelemek gerekmektedir. [8-4]

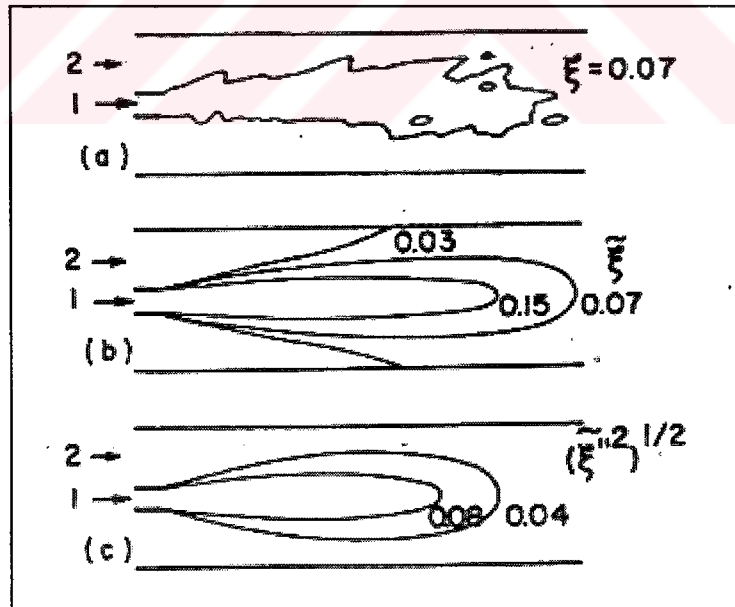
3.4.3. İki boyutlu ön karışimsız türbülanslı alev formülasyonu

Pekçok kimyasal reaksiyonun hızları yüksektir ve reaktantlar karıştığı anda tamamlanmış sayılabilirler. Eğer reaksiyon zamanı karıştırma zamanına göre ihmal edilebilir mertebede ise, türbülanslı alev “hızlı kimya yaklaşımıyla” ele alınabilir.

Bilger'e göre bu kabul ani moleküler bileşen konsantrasyonları ve sıcaklık, o andaki korunan Skaler konsantrasyonun bir fonksiyonudur. Hızlı kimya limitinde, kimya türbülans etkileşimi problemleri, moleküler bileşen konsantrasyonları korunan ölçeğe bağlı olduğu müddetçe ve bütün termodinamik büyüklüklerin istatistikleri bu ölçeğin istatistik bilgilerinden elde edilebildiğince basitleştirilebilir. Bu nedenle esas reaksiyon hızlarını çözümlmek gereksizdir. Örneğin, denge kompozisyonu, sıcaklık ve gaz karışımın yoğunluğu, bütün bileşenlerin elementel kütle oranları, basınç ve entalpi bilinirse hesap edilebilir. Tipik bir korunan skaler değişken karışım oranı " Z_i " dir. Z_i , yanmamış yakıt kütesinin, yanmamış yakıt kütesi artı oksitleyici kütesine oranı olarak tanımlanır.

$$Z_i = \frac{m_f}{m_f + m_o} ; m_f = \text{yakıt kütesi} ; m_o = \text{oksitleyici kütesi} \quad (3.42)$$

Hızlı kimya olaylarında bileşen konsantrasyonlarının ve sıcaklığın anlamlarını korunan skalere bağlamak gerekmektedir. Bu bağdaştırma bu büyüklüklerin fonksiyonlarının korunan skalere olan ilişkisinin doğrusal olmaması sebebiyle kolay değildir.



Şekil 3.14 Türbülanslı alevde (ön karışimsız) karıştırma modelleri

Şekil (3.14)'de türbülanslı difüzyon alevinde karıştırma modelleri resmedilmiştir. Şekil(3.14-a)' da ise korunan skaler $\xi (= \phi)$ 'in ani isoplet'i görülüyor. Bu karıştırma modelleri inert maddelerden birinin konsantrasyonunun deneysel yoldan belirlenmesi suretiyle ölçülebilir. Konsantrasyon ölçümleri lazer Raman spektroskopisiyle olur. Bileşen konsantrasyonu ise lazerli kıvılcım spektroskopisiyle olur. Emisyonların spektroskopik analizleri bileşen konsantrasyonları hakkında bilgi verir. Bu da onların atomik veya iyonik durumlarının konsantrasyonlarıyla orantılı olmasından kaynaklanır.

“Korunan skaler” yaklaşımı ve hızlı kimya, formülasyonda kullanılacak bazı temel kavramlar şunlardır :

1-) Kütle Oranı : Kütle oranı (X_i) homojen bir gaz karışımında i bileşeninin kütlesinin toplam karışım kütlesine oranıdır.

$$X_i = \frac{m_i}{m} ; m_i = i \text{ bileşeninin kütlesi} ; m = \text{toplam karışım kütlesi} \quad (3.43a)$$

Aynı zamanda X_i şöyle de ifade edilebilir :

$$X_i = \sum_{j=1}^N \mu_{ij} Y_j \quad i = 1, 2, \dots, L \quad (3.43b)$$

Burada işleme katılan L sayıda bileşen için (L-1) sayıda değişken vardır. Dolayısıyla

$$\sum_{i=1}^L X_i = 1 \quad (3.43c)$$

ifadesi oluşur.

Formülde geçen μ_{ij} ise :

$$\mu_{ij} = \frac{j \text{ bileşi min içindeki } i \text{ elementin gramı}}{j \text{ bileşi min 1 gramı}} \quad (3.43d)$$

2-) Mol Oranı : n komponentli homojen bir gaz karışımında i bileşenini mol sayısının (N_i), karışımının toplam mol sayısına (N) oranıdır.

$$y_i = \frac{N_i}{N} \quad (3.44a)$$

Kütle oranına benzer olarak :

$$\sum_{i=1}^L y_i = 1 \quad i = 1, 2, 3, \dots, L \quad (3.44b)$$

Kütle oranı ve mol oranı arasında :

$$X_i = \frac{M_i}{M} \cdot y_i \quad (3.44c)$$

bağıntısı bulunur. Burada M_i bileşeninin moleküler ağırlığı, M ise N mol içeren karışıma ait moleküler ağırlıktır.

3-) Konsantrasyon : $[]$ ile ifade edilir ve karışımın birim hacmindeki bileşen mol sayısıdır.

$$[] = \frac{N_i}{V} \quad (3.45)$$

4-) Kısmı Basınç : i bileşeni içinde bulunduğu ideal gaz ile aynı hacmi paylaşıyorsa (V) kısmı basınç :

$$p_i = \frac{N_i RT}{V} \quad (3.46a)$$

şeklinde ifade edilir. Kısmı basınç ile mol oranı arasında şu bağıntı bulunur.

$$y_i = \frac{p_i}{p} \quad (3.46b)$$

Benzer şekilde kısmı basınç toplamaları, karışım basıncını verir : $[11]$

$$\sum_{i=1}^L p_i = p \quad (3.46c)$$

Kimyasal reaksiyon esnasında korunan pekçok skaler değişken bulunur. Ön karışimsız akışta bunlar parametre olarak alınır. Bunlardan biri kütle oranı X_i 'dir. (3.43a) kütle oranı ifadesinde kimyasal bir terim bulundurmadağı için skalerdir ve korunum denklemi :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho X_i) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k X_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho \phi \frac{\partial X_i}{\partial x_k} \right) \quad i = 1 \dots L \quad (3.47a)$$

şeklinde yazılır.

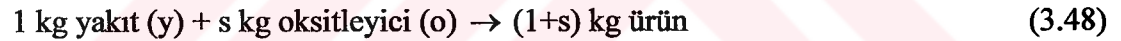
Kimyasal terim yok olmuştur çünkü kimyasal reaksiyonlarda kütle korunur.

Favre' in ortalama bileşen korunumu denklemi ise :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{X}_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\bar{\rho} \phi \frac{\partial \tilde{X}_i}{\partial x_k} - \bar{\rho} u_k'' \tilde{X}_i'' \right) \quad (3.47b)$$

(L-1) sayıda eşitliğin $\tilde{X}_i$ için çözümü temel elementel kompozisyonu türbülans akım alanı için verecektir. (Şekil 3.14-b), bu elementel kompozisyonun hareketle moleküler bileşen kompozisyonu da hızlı kimya kabulü ile belirlenir.

Tek atomlu bir yanma prosesi ele alınacak olursa :



Bu reaksiyonda basit olarak korunan skalerler kullanılabilir :

$$\dot{w}_y = \frac{1}{s} \dot{w}_o = -\frac{1}{s+1} \dot{w}_a \quad (3.49)$$

Bu nedenle Shvab –Zel dovich çift parametreleri kullanılabilir :

$$\beta_{yo} \equiv X_y - \frac{X_o}{s} \quad (3.50a)$$

$$\beta_{ya} \equiv X_y + \frac{X_a}{s+1} \quad (3.50b)$$

$$\beta_{oa} \equiv X_o + \frac{s \cdot X_a}{s+1} \quad (3.50c)$$

Bütün korunan skalerler birbiriyle ilişkilendirildiğinde, birinin çözümü diğerlerinin de çözümüne yarayacaktır. Korunan skaler seçimi türbülansın Re sayısına, kimyasal kinetik mekanizmanın karmaşıklığına ve reaktant besleme sisteminin uniform olmasına bağlıdır.

Genellikle türbülanslı akışlarda yüksek Re sayılarıyla, böyle diferansiyel difüzyon etkileri ihmal edilebilir. Yani (3.47b)'deki moleküler difüzyon terimi, türbülans difüzyon terimine göre ihmal mertebesinde. Korunan skaler ($\xi = \phi$) bu (3.47b) dan yola çıkarak yüksek Re sayılarında şu denklemde yer bulur :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho \tilde{u}_k \tilde{\phi}) = - \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{\rho u_k'' \phi''} \quad (3.51)$$

Korunan skalerde lineerlik ancak iki üniform reaktant besleme akımı olursa vardır. Eğer entalpiler korunan skalere katılırsa, iki besleme akımında entalpileri üniform olmalı ve zamana bağlı hız değişimine sahip olmalıdır. Shvab-Zel'dovich çift parametreleri tek adımlı reaksiyonlarda kullanışlıdır. Çok adımlı daha karmaşık kimyasal sistemlerde yüksek ısı açığa çıkışı da olduğu için, element bazlı skaler kullanımı daha elverişlidir.

İki besleme akışlı sistem için karışım oranı (eşit bileşen kütle difüzyonu kabulüyle) :

$$Z \equiv \frac{X_i - X_{i2}}{X_{i1} - X_{i2}} = \frac{\beta - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2} \quad (3.52)$$

Burada 1 ve 2 üniform kompozisyonu iki besleme akımı için temsil ederken β Shvab-Zel'Dovich çift parametresidir. Z skaler olduğu müddetçe :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k \phi) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho \phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \right) \quad (3.53)$$

eşitliği yazılabilir.

ϕ için Favre varyans stasyoner türbülantsta $\tilde{\phi}''^2$ aşağıdaki denklikle ifade edilebilir :

$$\underbrace{\overline{\rho \tilde{u}_k} \frac{\partial \tilde{\phi}^{n2}}{\partial x_k}}_A = - \underbrace{2 \overline{\rho u_k'' \phi''} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k}}_B - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_k'' \phi''})}_C - \underbrace{2 \overline{\rho \phi''} \frac{\partial \phi''}{\partial x_k}}_D \quad (3.54)$$

A = Konveksiyonla $\tilde{\phi}^{n2}$ transferi

B = Ortalama gradyan üretimi

C = Hız çalkantılarıyla olan difüzyon

D = Moleküler difüzyonla olan disipasyon

Bu denkleğin çözümü ise (3.34-c)'de görülüyor. İki akışlı besleme ile karışım oranının yeni bir kavramı ortaya çıkar : Z_{st} . Bu kavram stökiyometrik koşullara göre davranır. Basit bir tek adımlı reaksiyonda (3.48) yakıt besleme sisteminde hiç oksitleyici bulunmaması ve oksitleyici besleme sisteminde hiç yakıt olmaması ile şu ifade ortaya çıkar :

$$Z_{st} = \frac{X_{o2}}{s \cdot X_{y1} - X_{o2}} \quad (3.55a)$$

Yakıtça fakir hızlı kimya durumlarında yanmış karışımlar için şu durum söz konusudur. ($Z \leq Z_{st}, \beta_{FO} \leq 0$)

$$X_y = 0 \quad (3.55b)$$

$$X_o = s \cdot \beta_{yo} = s \cdot X^* (Z_{st} - Z) \quad (3.55c)$$

$$X_a = (s + 1) \cdot X^* Z (1 - Z_{st}) \quad (3.55d)$$

ki burada

$$X^* \equiv X_{y1} + \frac{1}{s} X_{o2} = \frac{X_{y1}}{1 - Z_{st}} \quad (3.56)$$

olmaktadır.

Yakıtça zengin hızlı kimya durumlarında ($Z \geq Z_{st}, \beta_{FO} \geq 0$)

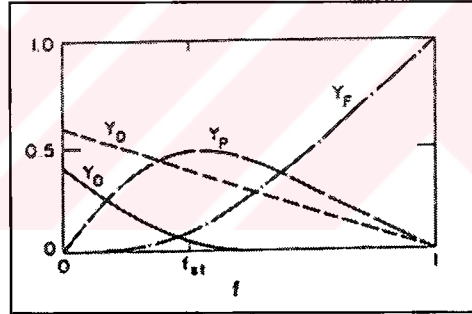
$$X_y = X^*(Z - Z_{st}) = \beta_{yo} \quad (3.57a)$$

$$X_o = 0 \quad (3.57b)$$

$$X_a = (s+1) \cdot X^* Z_{st} (1-Z) \quad (3.57c)$$

Eğer lokal karışım izoleliyse ve reaksiyon için yeterli zamanı varsa karışımın, kimyasal dengedeki ani kimyasal kompozisyonu dengededir. Bileşen konsantrasyonları Z 'nin fonksiyonudur. Denge ile reaksiyon bitmiş ise bu ilişki geçerlidir. Reaksiyon geri dönüşümlü ise, geri reaksiyon nedeniyle Z_{st} yakınında yakıt ve oksitleyici bulunacaktır.

Şekil 3.15' te bu görünmektedir. [4]



Şekil 3.15 Tek adımlı reaksiyonda kütle oranlarının Z fonksiyonu oluşu

4. SAYISAL YAKLAŞIM

4.1. Sayısal Akışkanlar Dinamiği (SAD)

4.1.1. Tanım;

Sayısal Akışkanlar Dinamiği yada SAD, içinde akışkan akışı, ısı transferi ve bunlarla ilişkili olan fenomenleri (örneğin: kimyasal reaksiyonlar) bulunduran sistemlerin analizinin bilgisayar tabanlı simülasyonudur. Bu teknik hem akademik hem de endüstriyel amaçla kullanılmaktadır. Örnek vermek gerekir ise :

- Uçak ve taşıtların aerodinamiği
- Gemi hidrodinamiği
- Güç santralleri ; gaz türbini ve içten yanmalı motorlarda yanma
- Türbomakinalar
- Kimyasal prosesler : Karıştırma, ayırıştırma v.s.
- Meteoroloji
- Biyomedikal mühendislik : kan akışının incelenmesi

SAD kodunun nasıl çalıştığını anlamak için, bütün kodların üç temel öge içerdiğini bilmek gerekir.

i-) Pre-prosesör

ii-) Solver (Çözücü)

iii-) Post-Prosesör

i-) Pre-Prosesör, SAD programına operatörce anlaşılabilecek bir akım geçiş yüzeyi ve bu girdinin çözücü tarafından kullanılabilir uygun bir forma dönüştürülmesi görevini yapar. Kullanıcının burada yapması gereken :

- İlgilenilen geometrinin tanımı, sayısal alan oluşturma,
- Ağ sistemi, sayısal alanın daha küçük birbiriyle çakışmayan ve örtüşmeyen alt alanlara bölünmesi, hücrelerin (kontrol hacimlerinin) ağ sisteminin oluşturulması.
- Modellenecek fiziksel ve kimyasal olayın seçimi,
- Akışkan özelliklerinin tanımlanması,
- Alanın sınırlarında bulunan veya ona değen hücrelerin sınır koşullarının belirlenmesidir.

ii-) Çözücüde ise şu adımlar gerçekleştirilir :

- Bilinmeyen akış değişkenlerine basit fonksiyonlar şeklinde yaklaşım,
- Bu yaklaşımları yöneten denklemlere ve matematiksel kullanıma ayırıştırma,
- Cebirsel denklemin çözümü.

Çözücünün kullanıldığı nümerik algoritma “sonlu hacimler yöntemidir” . Bu algoritma şu adımları içerir :

- 1-) Çözüm alanına ait bütün sonlu kontrol hacimlerine ait yöneten denklemlerin formal entegrasyonu,
- 2-) Entegre edilen ve akış prosesini (konveksiyon, difüzyon, kaynak) temsil eden denklemlerdeki terimlerin yerine sonlu farklar tipinde bir yaklaşım konulması ile ayırıştırma ve
- 3-) İteratif metodlar ile cebirsel denklemlerin çözümüdür.

iii-) Post Prosesör veri canlandırılır. Bu da şu adımlardan oluşur :

- Alan geometrisi ve ağ sistemi gösterilişi,
- Vektör grafiği,
- Düz ve renk ayrıntılarıyla kontür grafiği,
- 2 ve 3 boyutlu yüzey grafiği (plotu),
- Partikül parçalanması,
- Dönüştürme, rotasyon, ölçülendirme gibi görünüm özellikleri,

- Renkli çıktı.

Çözücüde akışın bir değişkeni olarak tanımlanan Φ (hız ya da entalpi v.b) olabilir, sonlu kontrol hacminde artmaya yada azalmaya eğilimi olan çeşitli prosesler arasındaki denge olarak ifade edilir ise şu denklik oluşur : [13]

$$\begin{aligned} \Phi\text{'nın kontrol hacminde} &= \Phi\text{'nın konveksiyon nedeniyle} \\ \text{zamana bağlı değişim hızı} &\text{ kontrol hacmine net akışı} \\ &+ \Phi\text{'nın difüzyon nedeniyle} \\ &\text{kontrol hacmine net akışı} \\ &+ \text{Kontrol hacmi içersinde } \Phi \\ &\text{oluşumunun net hızı} \end{aligned} \quad (4.1)$$

4.1.2. Yöneten denklemler

Çalışmada kullanılan Fluent yazılımının “akış ve ısı transferi” için kullandığı fiziksel modellerde de alınan denklemler yöneten denklemlerdir.

i-) Kütle korunumu denklemi :

Kütle korunumu için yazılan denklem aynı zamanda “süreklilik denklemi” olarak da bilinmektedir. Denklem şöyle ifade edilir :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = S_m \quad (4.2a)$$

Bu denklem kütle korunumu için yazılan genel bir ifade olup, sıkıştırılabilir ve sıkıştırılamayan akışkanlar için geçerlidir. S_m ile temsil edilen kaynak süreklilik arz eden faza, ayrı bir ikinci fazdan (buharlaşma yada likid damlacık) kütle ilavesi anlamına gelir. S_m koşullara göre pekala 0 olabilir. Yoğunluğu ifade eden ρ ve hız

bileşeni u_i kütle korunumu için süreklilik denklemi anlamına gelen bir zorunluluğun sonucu kullanılırlar.

Hız bileşeni olan u_i momentum denklemleri tarafından yönetilse de ve yoğunluk, sıcaklık ve konsantrasyonla ilişkili olsa dahi sonuç ρ ve u_i değerleri (4.2a) denklemini sağlamak zorundadırlar.

İki boyutlu (2D) aksenal simetrik geometrikler için süreklilik denklemi şöyle bir hal alır :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho v) + \frac{\rho v}{r} = S_m \quad (4.2b)$$

Bu denklemde yer alan x aksenal koordinatı, r radyal koordinatı, u aksenal hızı ve v radyal hızı ifade etmektedir.

ii-) Momentumun korunum denklemi :

Eylemsiz (ivmelenmeyen) referans sistemi içersinde yer alan i . doğrultudaki momentumun korunumu şu formülasyona uyar :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i + F_i \quad (4.3a)$$

Burada p statik basınç, τ_{ij} gerilme tensörü ve ρg_i ile F_i de yerçekimsel kuvvet ve dış kuvvettir. Bunlar ayrı fazlarla etkileşimden kaynaklanır. Doğrultuları i ile gösterilmiştir. F_i ayrıca diğer modellere bağlı kaynak terimleri de ihtiva edebilir. (örneğin ; merkezkaç ve Coriolis kuvvetleri, poröz ortam ve kullanıcının seçeceği kaynaklar...)

Gerilme tensörü τ_{ij} şöyle ifade edilir :

$$\tau_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \quad (4.3b)$$

Burada ise μ moleküler viskozite ve sağ el tarafında yer alan ikinci terim ise hacmin genişlemesidir. İki boyutlu aksenal-simetrik geometriler, aksenal ve radyal momentum korunum kanunu denklemleri şöyle verilir :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(r \rho u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] \\ + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + F_x \end{aligned} \quad (4.3c)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(r \rho u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v v) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] \\ + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] \\ - 2 \mu \frac{v}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} (\nabla \cdot \vec{v}) + \rho \frac{w^2}{r} + F_r \end{aligned} \quad (4.3d)$$

w bu denklemde girdap hızıdır.

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} \quad (4.3e)$$

iii-) Enerjinin korunumu denklemi :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i} [u_i (\rho E + p)] = \frac{\partial}{\partial x_i} k \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial x_i} + u_j \tau_{ij} \right) + S_h \quad (4.4a)$$

Bu denklemde :

E = Birim kütle başına toplam enerji

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{u_i^2}{2} \quad (4.4b)$$

h = Duyulur entalpi

k = Isı iletim katsayısı

S_h = Enerji kaynağı

Kimyasal bileşenlerin transportunu türbülans miktarını ve diğer ilgilenilen değişkenleri ifade etmek için ilave denklemler kurulabilir. [14]

4.1.3. Standart $\kappa - \varepsilon$ türbülans modellenmesi:

Çalışmada kullanılan standard $\kappa - \varepsilon$ modeli yarı empirik modeldir. Model denklemleri Reynolds-Averaged Navier Stokes (RANS) denklemlerinden türetilmiştir. Bu türetilmede kabul olarak akışın tam türbülanslı olduğu ve moleküler viskozitenin etkilerinin ihmal mertebesinde olduğu alınmıştır. Bu nedenle standart $\kappa - \varepsilon$ modeli sadece tam türbülanslı akışlar için geçerliliğini korumaktadır.

Standard $\kappa - \varepsilon$ modeli diğer türbülans modelleri gibi yöneten denklemlerin Reynolds ortalamalarını temel almaktadır. Reynolds ortalamasında orijinal Navier-Stokes denklemlerindeki bütün çözüm değişkenleri, ortalama ve dalgalanan bileşenlere ayrılırlar. Hız bileşenleri :

$$u_i = \overline{u_i} + u'_i \quad (4.5a)$$

şeklindedir. Burada $\overline{u_i}$ ortalama hız , u'_i ise ani hız bileşenidir. ($i = 1, 2, 3$).

Aynı şekilde basınç ve diğer skaler için de :

$$\phi = \overline{\phi} + \phi' \quad (4.5b)$$

ifadesi yazılabilir. Korunan skaler ϕ basınç, entalpi, konsantrasyon gibi büyüklüklerdir.

Akış değişkenlerinin bu formdaki ifadelerini ani süreklilik ve momentum denklemlerine koymak ve bir zaman ortalaması almak ile zaman ortalamalı momentum denklemleri elde edilir. Bunlar Kartezyen tensör formu şeklinde yazılabilirler :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (4.6a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial x_i} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho u'_i u'_j) \end{aligned} \quad (4.6b)$$

(4.5a) ve (4.5b) denklemleri (RANS) denklemleridir ve hız ve zaman ortalama değerleri temsil eden diğer çözüm değişkenlerini barındıran ani Navier-Stokes denklemleriyle aynı forma sahiptirler. RANS denklemlerinde türbülans etkisi “Reynolds Gerilmesi” $(-\overline{\rho u'_i u'_j})$ tarafından temsil edilir. Bu Reynolds gerilmeleri (4.5b) denklemini kapatmak için kullanılır. (4.5a-b) denklemleri Favre-ortalama Navier-Stokes denklemleri olarak da anılır ki burada hızlar kütle ortalama değerleri temsil ederler.

Standart $\kappa - \varepsilon$ modelinde Reynolds gerilme denklemleri (4.5a-b) Boussinesq hipoteziyle modellenir :

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho \kappa + \mu_t \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \delta_{ij} \quad (4.7)$$

Eddy yada türbülans viskozitesi μ_t , türbülans kinetik enerjisi κ ve onun disipasyonunu ε hesaplamak yine modellenmiş transport denklemleriyle mümkündür. Hız ölçeği $\mathcal{U}$ ve uzunluk ölçeği ℓ ile gösterilir ise :

$$\mathcal{U} = \sqrt{\kappa} \quad (4.8a)$$

$$\ell = \frac{\kappa^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon} \quad (4.8b)$$

olur.

Bunlardan eddy viskozitesi bulunur :

$$\mu_t = \rho C_\mu g \ell = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (4.8c)$$

Buradaki C_μ boyutsuz bir katsayıdır. Standart model $\kappa - \varepsilon$ için şu transport denklemlerini kullanır :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \kappa) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \kappa) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \right] + G_\kappa + G_b - \rho \varepsilon \quad (4.9a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} \{ G_\kappa + (1 - C_{3\varepsilon}) G_b \} \\ & - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \end{aligned} \quad (4.9b)$$

Burada G_κ türbülans kinetik enerjisinin türbülans gerilmesinden dolayı oluşumudur ve ifadesi şudur :

$$G_\kappa = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (4.10a)$$

G_b ise türbülans kinetik enerjisinin yüzdürme etkisinden kaynaklanan oluşumu olup şöyle ifade edilir :

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (4.10b)$$

Pr_t , sıcaklık yada entalpi için türbülans Prandtl sayısı, β ise ısı genleşme katsayısıdır.

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad (4.10c)$$

İdeal gazlar için (4.10b) denklemi basitleştirilerek :

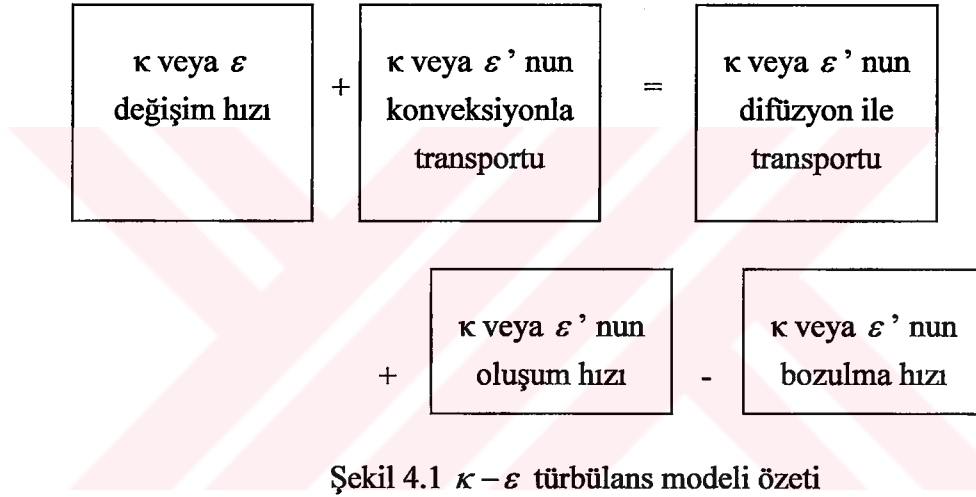
$$G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho Pr_t} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (4.10d)$$

Model sabitelerinin değerleri ise :

$$C_{1\varepsilon} = 1,44; C_{2\varepsilon} = 1,92; C_\mu = 0,09; Pr_\kappa = 1,0; Pr_\varepsilon = 1,3; Pr_t = 0,85$$

olarak alınır.

Genel bir bakış ile bu bilgiler ışığında standard $\kappa - \varepsilon$ modelinde yer alan denklemler şu şekilde özetlenebilir.



Standard $\kappa - \varepsilon$ modelinde ısı ve kütle transferi modellenmesi içinde yine türbülanslı momentum transferine Reynolds analogisiyle yaklaşmak lazımdır. Modellenmiş enerji denklemi :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(k + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} \right] + \frac{D_p}{D_t} + (\tau_{ik})_{eff} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + S_h \quad (4.11)$$

şeklindedir.

Bu denklemdeki gösterimler :

h = Duyulur entalpi

k = Moleküler iletkenlik katsayısı

τ_{ik} = Türetilmiş gerilme tensörü

Pr_t = Sıcaklık yada entalpi için türbülanslı Prandtl sayısı

Türbülanslı ısı transferi, türbülans (eddy) viskozitesi μ_t ve Pr_t tarafından belirlenir.

Pr_t 'nin alacağı değer 0,85 dir. Bu değer “Viskoz Model” panelinde değiştirilebilir.

Türbülanslı kütle transferi ise yine momentum transferini Reynolds analojisiyle kullanarak gerçekleştirilir. Türbülanslı Schmidt sayısı 0,70’dir. Bu veride yine değiştirilebilir. [13-14]

4.1.4. Isı Transferindeki enerji denklemi :

Enerji denklemi, duyulur entalpi h terimiyle beraber ifade edilir :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i}(k + k_t) \frac{\partial T}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j'} h_{j'} J_{j'} + \frac{D_p}{D_t} + (\tau_{ik})_{eff} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + S_h \quad (4.12)$$

Denklemdaki gösterimlerin açılımları şöyledir :

k = Moleküler ısı iletkenlik katsayısı

k_t = Türbülans transportuna göre ısı iletkenlik katsayısı

$$k_t = \frac{c_p \mu_t}{Pr_t} \quad (4.13)$$

$J_{j'}$ = j indisli bileşenin difüzyon akısı

S_h = Kaynak (kimyasal reaksiyon ısısı, fazlar arası ısı alışverişi, volumetrik ısı kaynakları v.b.)

Duyulur entalpi h şöyle tanımlanır :

$$h = \sum_{j'} X_{j'} h_{j'} \quad (4.14a)$$

$$h_{j'} = \int_{T_{ref}}^T c_{p,j'} dT \quad (4.14b)$$

ki $T_{ref} = 298 \text{ K}$ alınır.

Fluent yazılımı (4.12) denklemindeki sıcaklığı bağımlı değişken olarak kullanılır . (4.12) denkleminin sol el tarafı (4.14a ve b) denklemlerinin kullanılmasıyla sıcaklık formuna dönüştürülmüştür :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i H) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k_t}{c_p} \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) + \tau_{ik} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + S_h \quad (4.15)$$

Bu denklemde yer alan H şöyle tanımlanır :

$$H = \sum_{j'} X_{j'} H_{j'} \quad (4.16a)$$

$$H_{j'} = \int_{T_{ref}}^T c_{p,j'} dT + h_{j'}^\circ(T_{ref,j'}) \quad (4.16b)$$

$h_{j'}^\circ(T_{ref,j'})$ j' indisine sahip bileşenin referans sıcaklığı $(T_{ref,j'})$ daki oluşum entalpisini göstermektedir.

Aynı (4.12) denklemi bileşen difüzyonundan kaynaklanan entalpi geçişinin etkisini de içerir.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j'} h_{j'} J_{j'} \quad (4.17)$$

Bu difüzyon özellikle Lewis sayısının 1 olmadığı durumlarda enerji dengesine katılır.

Reaksiyondan kaynaklanana enerji kaynakları yani S_h incelenecek olursa

$$S_{h-reak} = \sum_{j'} \left[\frac{h_{j'}^\circ}{M_{j'}} + \int_{T_{ref,j'}}^{T_{ref}} c_{p,j'} dT \right] R_{j'} \quad (4.18)$$

denklemini ortaya çıkar.

Burada yer alan h_j° , j` bileşenin oluşum entalpisi,  $R_j$  ise j` bileşenin oluşumunun hacimsel hızıdır. İletken katılarda enerji denklemini kuracak olursak, katı üzerinden kondüksiyon ile gerçekleşen ısı akışı ve katı cisimdeki hacimsel ısı kaynağı incelenmelidir :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho h = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \dot{q}''' \quad (4.19)$$

Denklemdaki terimlerin açılımı :

ρ = Yoğunluk

h = Duyulur entalpi $\int_{T_{ref}}^T c_p dT$

k = Isıl iletkenlik katsayısı

T = Sıcaklık

$\dot{q}'''$ = Hacimsel ısı kaynağı

(4.19) denklemi enerji transport denklemiyle, (4.12) akış alanlarında tam eşleşmiş kondüksiyon / konveksiyon ısı transferini haber verecek şekilde çözülür. [14]

4.1.5. Konveksiyon difüzyon problemlerinde ayrıklaştırma

Pratik çalışmalarda sonlu sayıda hücre kullanılır. sayısal sonuçlar, eğer ayrıklaştırma şeması belirli temel özellikleri sağlar ise, fiziksel gerçekliğe yaklaşılır. Bunlardan en önemlileri :

i-) Korunurluk

ii-) Sınırlılık

iii-) Transport edilebilme

Genel olarak bakıldığında aşağıdaki diferansiyel denklem pekçok olay için genelleştirilmiş denklem olarak alınır :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S \quad (4.20)$$

Bu denklemde ϕ genel bağımlı değişken, Γ genelleştirilmiş difüzyon katsayısı ve S kaynak terimidir. Γ ve S belli anlamdaki ϕ ye göre özgülüdür. Bu genel diferansiyel denklem dört terimden oluşur : süreksizlik terimi , konveksiyon terimi, difüzyon terimi ve kaynak terimidir.

Genel ayrıklaştırma denkleminin türetilmesinde de bu (4.20) denklemi kullanılır. Bu denklemi belli bir kontrol hacmi üzerinden entegre ederek ve çeşitli terimleri bu entegrasyona yaklaştırarak onların ağ sistemi noktası değerleri ϕ ler şeklinde ifade edilmeleri sağlanır.

(4.20) nin bir kontrol hacmi üzerinden entegrasyonu, konveksiyon ve difüzyon akıları birleştirilir. J_i toplam akı olmak kaydıyla : (i yönündeki toplam konveksiyon ve difüzyon) :

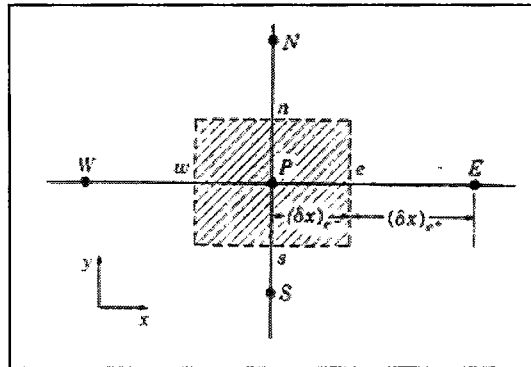
$$J_i = \rho u_i \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (4.21a)$$

şeklinde yazılır.

Böylece (4.20) denklemi şu şekilde yazılabilir :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial J_i}{\partial x_i} = S \quad (4.21b)$$

Bir kontrol hacmi örneği Şekil (4.1)'de görülmüyor.



Şekil 4.2 Tipik bir kontrol hacmi

e, w, n, s kontrol hacminin dört yüzünü temsil ediyor. Üç boyutlu sistemde bunlara t ve b de eklenecektir. (4.21b) denkleminin kontrol hacmi üzerinden entegre edilmesiyle :

$$\left(\rho_P \phi_P - \rho_P^o \phi_P^o\right) \frac{\Delta V}{\Delta t} + J_e A_e - J_w A_w + J_n A_n - J_s A_s + J_t A_t - J_b A_b = \bar{S} \cdot \Delta V \quad (4.21c)$$

elde edilir. Burada “o” t zamanındaki ρ ve ϕ ’nin bilinen değerlerini simgeler. Üssünde “o” olmayan değerler ise $(t + \Delta t)$ anındaki bilinmeyen değerlerdir. Kontrol hacmi ΔV , ve A’lar kontrol hacminin altı yüzünün alanıdır. Ortalama kaynak terimi $\bar{S}$ ’dir. J’ler kontrol hacmi yüzeylerinden olan toplam akılardır.

Doğu yüzeyinden gerçekleşen bir boyutlu konveksiyon difüzyon problemi P ve E noktaları arasında çözülecek olursa toplam akı :

$$J_e A_e = \dot{F}_e \left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\exp(Pe_e) - 1} \right) \quad (4.21d)$$

ile ifade edilir. Burada Pe_e boyutsuz ağ sisteminin Peclet sayısıdır ve

$$Pe_e = \frac{\dot{F}_e}{D_e} \quad (4.21e)$$

ile hesaplanır. Burada $\dot{F}_e$ e yüzeyinden olan kütsel debiye ait hız, D_e ise difüzyon iletkenliğidir :

$$\dot{F}_e = (\rho u)_e A_e \quad (4.21f)$$

Difüzyon katsayısı Γ her kontrol hacmi için üniform alınırsa D_e şöyle bir hal alır :

$$D_e = A_e \cdot \left[\frac{(\delta x)_{e-}}{\Gamma_P} + \frac{(\delta x)_{e+}}{\Gamma_E} \right] \quad (4.21g)$$

$(\delta x)_{e-}$ ve $(\delta x)_{e+}$ uzaklıkları Şekil 4.2’ de gösterilmiştir.

(4.21d)’ de verilen ifadedeki üstel kısım hesaplanması açısından zaman kaybına neden olduğundan, akıya ilişkin bazı yaklaşımlar aranmıştır.

Örneğin :

$$J_e A_e = \dot{F}_e \Phi_p + \{D_e A(|Pe_e|) + \|\dot{F}_e, 0\|\}(\phi_p - \phi_e) \quad (4.22a)$$

burada :

$$A(|Pe|) = \left\| 0, \left(1 - 0,1 \cdot |Pe|^5\right) \right\| \quad (4.22b)$$

ile ifade edilir. Burada $\|a, b\|$ sembolü a ve b nin büyük olanını simgeler. Bu şema beşinci kuvvetinden ötürü kuvvet-kanunu şemasıdır. Buradaki denklem ile bilgisayarda hesaplama fazla vakit almaz.

Bunun dışında $\bar{S}$ da doğrusal bir fonksiyon olan ϕ_p ile ifade edilir. $\bar{S}$ için doğrusallaştırılmış formül :

$$\bar{S} = S_C + S_p \phi_p \quad (4.23)$$

S_p, ϕ_p 'nin katsayısı, S_C ise $\bar{S}$ nin açık olarak ϕ_p 'ye bağlı olmayan terimidir.

Süreklilik denkleminin ayrıklaştırılmasıyla :

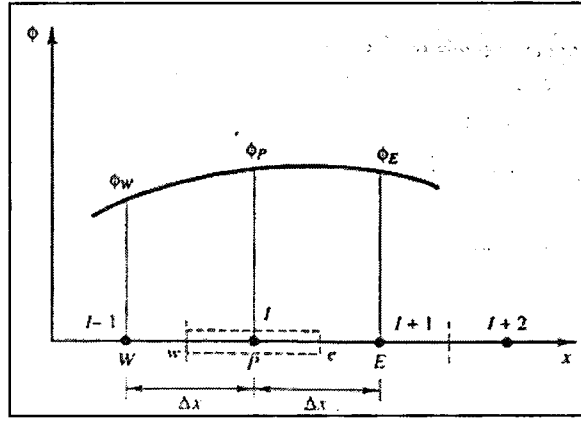
$$(\rho_p - \rho_p^o) \frac{\Delta V}{\Delta t} + \dot{F}_e - \dot{F}_w + \dot{F}_n - \dot{F}_s + \dot{F}_t - \dot{F}_b = 0 \quad (4.24)$$

elde edilir. Bununla beraber sonuç ayrıklaştırma denklemi ise $a_p = \rho_p \cdot \frac{\Delta V}{\Delta t}$ eşitliğini de göz önünde tutarak :

$$a_p \phi_p = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (4.25)$$

olarak yazılır. nb P noktasına komşu ağ sisteminin noktasını ifade eder. Buraya kadar anlatılanlar “eliptik sistemlerde” ayrıklaştırmanın “sonlu farklar metoduyla” yapılmasını anlatmaktadır. [15]

Akı simülasyonunun tamlığını sınamak ve teorik temelini anlamak açısından şu örneği incelenmekte fayda vardır. Bir boyutlu ağ sistemi (aralığı = Δx), Şekil 4.3’de gösterilmiştir.



Şekil 4.3 Bir Boyutlu Ağ Sistemi

$\Phi(x)$ fonksiyonu için i noktası etrafında $\Phi(x + \Delta x)$ 'in Taylor serisi açılımı :

$$\Phi(x + \Delta x) = \Phi(x) + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_x \Delta x + \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right)_x \frac{\Delta x^2}{2} + \dots \quad (4.26a)$$

olarak yazılır.

Notasyonda $\Phi(x)$ ve $\Phi(x + \Delta x)$ fonksiyonları için Φ_P ve Φ_E ayrıklaştırılmış değerlerini kullanırsa :

$$\Phi_E = \Phi_P + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_P \Delta x + \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right)_P \frac{\Delta x^2}{2} + \dots \quad (4.26b)$$

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_P \Delta x = \Phi_E - \Phi_P - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right)_P \frac{\Delta x^2}{2} - \dots \quad (4.26c)$$

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_P = \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta x} + \text{budaanmış terimler} \quad (4.26d)$$

Buradan sonuç olarak :

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_P \cong \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta x} \quad (4.26e)$$

yazılabilir. Budanmış terimin ihmal edilmesiyle şu ifade ortaya çıkar.

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_P = \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta x} + 0 \cdot (\Delta x) \quad (4.27)$$

E ve P noktaları için $x_E > x_P$ kabulüyle, P noktasındaki gradyeni $\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_P$ geliştirmek için (4.27)'deki ileri yön fark formülü kullanılır. Aynı P noktasındaki $\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_P$ gradyeni için geri-yön fark formülünü de geliştirilebilir.

$$\Phi(x - \Delta x) = \Phi(x) - \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_x \Delta x + \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}\right)_x \frac{\Delta x^2}{2} + \dots \quad (4.28a)$$

Böylece P noktasındaki gradyen için de :

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_P = \frac{\Phi_E - \Phi_W}{\Delta x} + 0 \cdot (\Delta x) \quad (4.28b)$$

yazılır. İleri ve geri yön fark formülleri sadece iki noktadaki Φ değerlerine katılırlar. (4.28b)'den (4.28a) çıkarıldığı zaman :

$$\Phi(x + \Delta x) - \Phi(x - \Delta x) = 2\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_P \Delta x + \left(\frac{\partial^3\Phi}{\partial x^3}\right)_P \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (4.29a)$$

elde edilir. Bu da dönüştürüldüğünde :

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_P = \frac{\Phi_E - \Phi_W}{2 \cdot \Delta x} + 0 \cdot (\Delta x^2) \quad (4.29b)$$

oluşur.

(4.29b) formülüyle E ve W noktaları ortasındaki P deki gradyen hesaplanır ve buna “ortalama fark formülü” denir. Bu denklem ikinci derecedendir.

e (doğu) hücre yüzeyinde “sonlu hacimler metoduyla” ayrıklaştırma yapılırsa :

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_e = \frac{\Phi_E - \Phi_W}{\Delta x} = \frac{\Phi_E - \Phi_W}{2 \cdot \left(\frac{\Delta x}{2}\right)} \quad (4.30)$$

bulunur.

Bu Taylor serisini üçüncü dereceden yapılmak istendiğinde Quick fark alma metodu kullanılır. Orta nokta hücre yüzeyinden olan konvektif akı için yine doğu yüzeyin deki Φ_e değeri hesaplanacak olursa :

$$\Phi_e = \frac{3}{8}\Phi_E + \frac{6}{8}\Phi_P - \frac{1}{8}\Phi_W \quad (4.31)$$

ifadesi ortaya çıkar.

Taylor serisi açılımından yararlanarak :

$$\Phi_E = \Phi_e + \frac{1}{2}\Delta x \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_e + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\Delta x\right)^2 \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}\right)_e + 0 \cdot (\Delta x^3) \quad (4.32a)$$

$$\Phi_P = \Phi_e - \frac{1}{2}\Delta x \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_e + \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\Delta x\right)^2 \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}\right)_e + 0 \cdot (\Delta x^3) \quad (4.32b)$$

$$\Phi_W = \Phi_e - \frac{3}{2}\Delta x \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_e + \frac{1}{2}\left(-\frac{3}{2}\Delta x\right)^2 \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}\right)_e + 0 \cdot (\Delta x^3) \quad (4.32c)$$

elde edilir. Sonra (4.32a,b,c) denklemlerinde (4.31) formülü ilgili yerlere konursa :

$$\frac{3}{8}\Phi_E + \frac{6}{8}\Phi_P - \frac{1}{8}\Phi_W = \Phi_e + 0 \cdot (\Delta x)^3 \quad (4.33)$$

ifadesi oluşur. [13]

4.1.6. Sınır koşulları

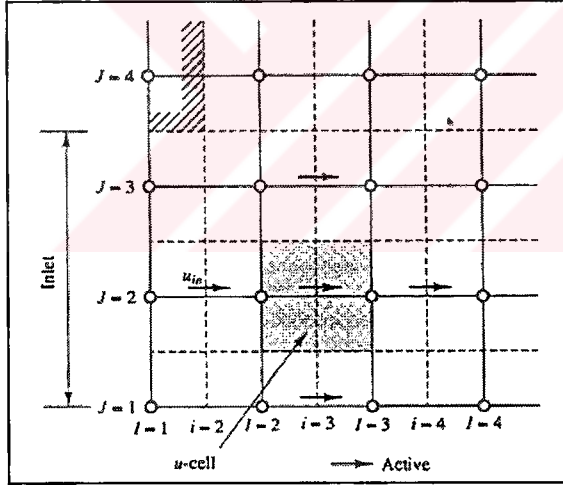
Modellemeden sonra Fluent’de yapılacak adımlar doğru sonuçların elde edilmesi açısından çok önemlidir. Fluent programında kullanılabilen sınır koşulları :

i-) Giriş sınır koşulları

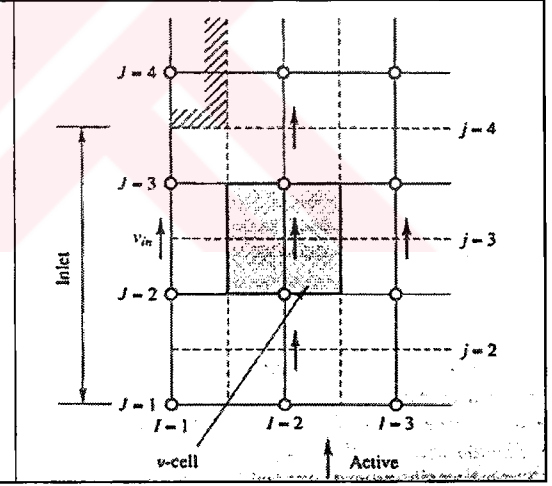
- Hız girişi
- Basınç girişi
- Süpersonik giriş

olabilir.

Şekil 4.4a-4.4b’de görülenler, u ve v momentum, skaler ve basınç düzeltme denklem hücreleridir. Akış soldan sağa doğru olup, $I = 1$ doğrusu boyunca (veya $i = 2$ u hızı için) akış değişkenlerinin giriş değerlerini oluşturmak için kullanılmıştır. (u_{in}, v_{in}, P_{in})



Şekil 4.4a u hızının giriş sınırları



Şekil 4.4b v hızının giriş sınırları

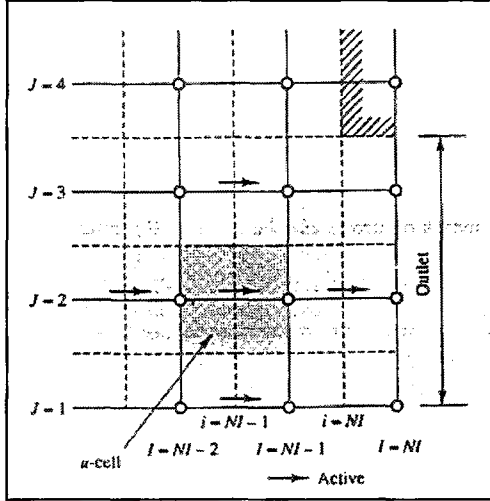
En doğru simülasyon türbülans kinetik enerjisi κ ve türbülans kinetik enerjisinin disipasyonu ε kullanılmasıyla sağlanır. ($\kappa - \varepsilon$ giriş sınırları).

ii-) Çıkış sınır koşulları

- Basınç Çıkışı
- Tahmini Çıkış

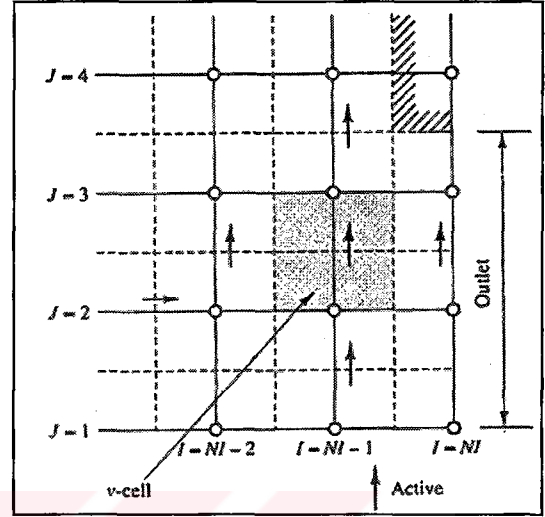
- Girdap akışlarında radyal denge

Şekil 4.5a-4.5b’de çıkış sınırındaki u-kontrol hacmi ve v kontrol hacmi görülüyor.



Şekil 4.5a

Çıkış sınırında u-kontrol hacmi

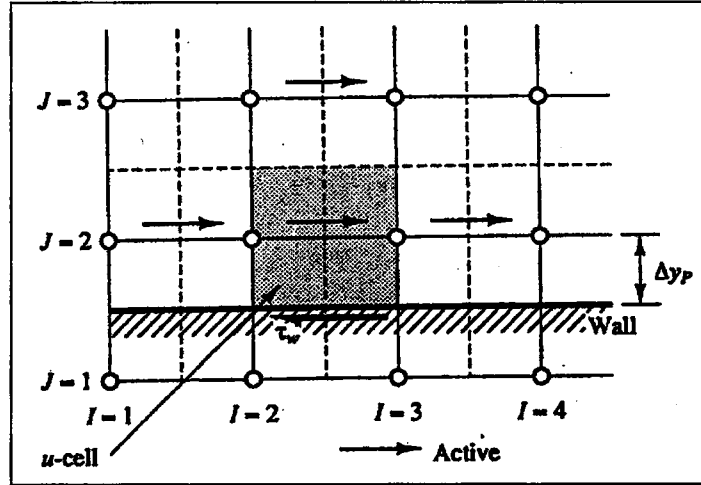


Şekil 4.5b

Çıkış sınırında v-kontrol hacmi

iii-) Duvarlar

- Sabit
- Hareketli
- Isıl sınır koşulları (sabit sıcaklık – sabit ısı akışı veya konveksiyon...)



Şekil 4.6 Duvar sınırında u hızı hücresi

Hareket etmeyen duvarda ($u = v = 0$) katı duvarlarda hız için uygun koşullardır. Türbülanslı akışlarda duvar sınır koşullarının tamamlanması şu eşitlikle olur :

$$y^+ = \frac{\Delta y_p}{\zeta} \cdot \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}; \quad u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (4.27)$$

Buradan Δy_p (Şekil 4.6) da gösterilen P duvar nodunun katı yüzeye olan uzaklığıdır. Şayet $y^+ > 11, 63$ ise akış türbülanslıdır. Duvar kayma gerilmesi τ_w orijinde viskoz kabul edilir. ζ Prandtl-Kolmogoro sayıdır.

Toparlamak gerekir ise $\kappa - \varepsilon$ modeli için duvar yakınındaki bağıntılar şöyle özetlenebilir :

1. Duvara teğet momentumun denklemi :

$$\circ \text{ Duvar kayma gerilmesi : } \tau_w = \rho C_\mu^{\frac{1}{4}} k_p^{\frac{1}{2}} \frac{u_p}{u^+} \quad (4.28a)$$

$$\circ \text{ Duvar kuvveti : } F_s = -\tau_w \cdot A_{cell} \quad (4.28b)$$

2. Duvara dik momentum denklemi :

$$\circ \text{ Dik hız} = 0$$

3. Türbülans kinetik enerji denklemi :

$$\circ \text{ Hacim başına net } \kappa - \text{ kaynağı : } \left(\tau_{\omega} u_p - \rho C_{\mu}^{\frac{3}{4}} k_p^{\frac{3}{2}} u^+ \right) \frac{\Delta V}{\Delta y_p} \quad (4.29)$$

4. Türbülans kinetik enerjisinin disipasyon denklemi (ε) :

$$\circ \text{ Nodal değeri : } \varepsilon_p = \frac{C_{\mu}^{\frac{3}{4}} k_p^{\frac{3}{2}}}{K \cdot \Delta y_p} \quad (4.30)$$

5. Enerji denklemi :

$$\circ \text{ Duvar ısı akısı : } \dot{q}_{\omega} = -\rho c_p C_{\mu}^{\frac{1}{4}} k_p^{\frac{1}{2}} (T_p - T_{\omega}) \cdot \frac{1}{T^+} \quad (4.31)$$

Bu denklemlerdeki ; c_p akışkanın özgül ısı değeri P indisli değerler P noktasına; ω indisli değerler duvara ait değerlerdir.

$$u^+ = \frac{1}{K} \ln(\bar{E} \cdot y_p^+); \quad 30 < y_p^+ < 500 \quad (4.32a)$$

u^+ , üniversal hız, K von Karman sabitesi, $\bar{E}$ ise duvar pürüzlülüğüne bağlı entegrasyon sabitesidir. ($K = 0,4187$ ve $\bar{E} = 9,793$ alınır.)

$$T^+ = \text{Pr}_{T,l} \left(u^+ + P \left[\frac{\text{Pr}_{T,l}}{\text{Pr}_{T,t}} \right] \right) \quad (4.32b)$$

T^+ üniversal sıcaklık, $\text{Pr}_{T,l}$ laminar Prandtl sayısı $\text{Pr}_{T,t}$ türbülanslı Prandtl sayısı 0.90 ve $P \left[\frac{\text{Pr}_{T,l}}{\text{Pr}_{T,t}} \right]$ “pee fonksiyonudur.”

$$P \left[\frac{\text{Pr}_{T,l}}{\text{Pr}_{T,t}} \right] = 9,24 \left[\left(\frac{\text{Pr}_{T,l}}{\text{Pr}_{T,t}} \right)^{0,75} - 1 \right] \cdot \left\{ 1 + 0,28 \exp \left[-0,007 \left(\frac{\text{Pr}_{T,l}}{\text{Pr}_{T,t}} \right) \right] \right\} \quad (4.32c)$$

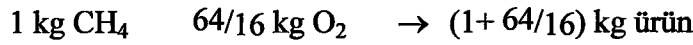
Bunun dışında u hızı, ρ yoğunluğu, k ısı iletkenlik katsayısını temsil eder. [13]

4.1.7. SAD tekniđi ile yanma modellenmesi

Tek adımlı yanmanın SAD uygulaması şöyle gerekleşmektedir :



Bu tepkimeyi metan için yazmak gerekir ise :



(SCRS)' de yani basit kimyasal reaksiyon sistemlerinde reaksiyonun hızlı olduđu ve ara reaksiyonların göz ardı edildiđi varsayılır. Yakıt ve oksijenin kütle oranların transport denklemleri :

$$\frac{\partial(\rho X_y)}{\partial t} + \text{div}(\rho X_y u) = \text{div}(\eta_y \text{grad } X_y) + S_y \quad (4.35a)$$

$$\frac{\partial(\rho X_o)}{\partial t} + \text{div}(\rho X_o u) = \text{div}(\eta_o \text{grad } X_o) + S_o \quad (4.35b)$$

Bir χ deđişkeni atamak gerekirse :

$$\chi = s \cdot X_y - X_o \quad (4.36)$$

Bir kabul olarak bütün kütle deđiştirme katsayısı η_j bütün bileşenler için aynı olursa:

$$\eta_y = \eta_o = \eta_\chi$$

(4.35a - b) den χ için yeni bir denklem çıkarılabilir.

$$\frac{\partial(\rho \chi)}{\partial t} + \text{div}(\rho \chi u) = \text{div}(\eta_\chi \text{grad } \chi) + (s \cdot S_y - S_o) \quad (4.37)$$

Tek adımlı reaksiyonlarda $(s \cdot S_y - S_o) = 0$ olarak alınabilir.

χ burada pasif bir skalerdir ve boyutsuz değişken Z (karışım oranı) χ ler ile ifade edilir ise :

$$Z = \frac{\chi - \chi_0}{\chi_1 - \chi_0} \quad (4.38a)$$

0 oksijen akımını, 1 ise yakıt akımını ifade etsin.

$$Z = \frac{(s \cdot X_y - X_o)_1 - (s \cdot X_y - X_o)_0}{(s \cdot X_y - X_o)_1 - (s \cdot X_y - X_o)_0} \quad (4.38b)$$

Akımda sadece yakıt varsa :

$(X_y)_1 = 1, (X_o)_1 = 0$ yazılır.

Oksitleyici akımında hiç yakıt yoksa :

$(X_y)_0 = 0, (X_o)_0 = 1$ olur.

Bu koşullarda (4.38b) şu hali alır :

$$Z = \frac{(s \cdot X_y - X_o)_1 - (-X_o)_0}{(s \cdot X_y)_1 - (-X_o)_0} = \frac{s \cdot X_{y,1} - X_{o,0} + X_{o,0}}{s \cdot X_{y,1} + X_{o,0}} \quad (4.38c)$$

Stökiyometrik karışımda ürünlerde ne oksijen ne de yakıt olduğundan stökiyometrik karışım oranı :

$$Z_{st} = \frac{X_{o,0}}{s \cdot X_{y,1} + X_{o,0}} \quad (4.39)$$

şeklinde yazılır.

Hızlı kimyada belli bir noktada oksitleyici fazlası varsa, ürünlerde hiç yakıt olmayacaktır. ($X_y = 0$ eğer $X_o > 0$)

$$Z < Z_{st} \text{ ise } Z = \frac{-X_o + X_{o,0}}{s \cdot X_{y,1} + X_{o,0}} \quad (4.40a)$$

Karışım da yakıt fazlası varsa ve ürünlerde hiç oksitleyici kalmamışsa :

($X_o = 0$ eğer $X_y > 0$)

$$Z > Z_{st} \text{ ise } Z = \frac{s \cdot X_y + X_{o,0}}{s \cdot X_{y,1} + X_{o,0}} \quad (4.40b)$$

Bu formüllerden de anlaşılacağı üzere X_y ve X_o , karışım oranı Z ile doğru orantılıdır.

Buradan yola çıkarak :

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \text{div}(\rho Z u) = \text{div}(\eta_y \text{grad} Z) \quad (4.41)$$

formülü türetilir. (4.41) denklemi uygun sınır koşulları verilmek suretiyle (yakıtın ve oksitleyicinin karışım oranları biliniyor ve katı duvar boyunca Z nin dik akısı sıfır) Z 'in dağılımı elde edilebilir. Sonuç karışım oranlarının verilmesiyle (4.40a ve b) denklemlerinden yanma sonrası oksijen ve yakıt için kütle oranları yazılabilir.

$$Z_{st} \leq Z < 1 \quad X_o = 0; \quad X_y = \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \cdot X_{y,1} \quad (4.42a)$$

$$0 \leq Z < Z_{st} \quad X_y = 0; \quad X_o = \frac{Z_{st} - Z}{Z_{st}} \cdot X_{o,0} \quad (4.42b)$$

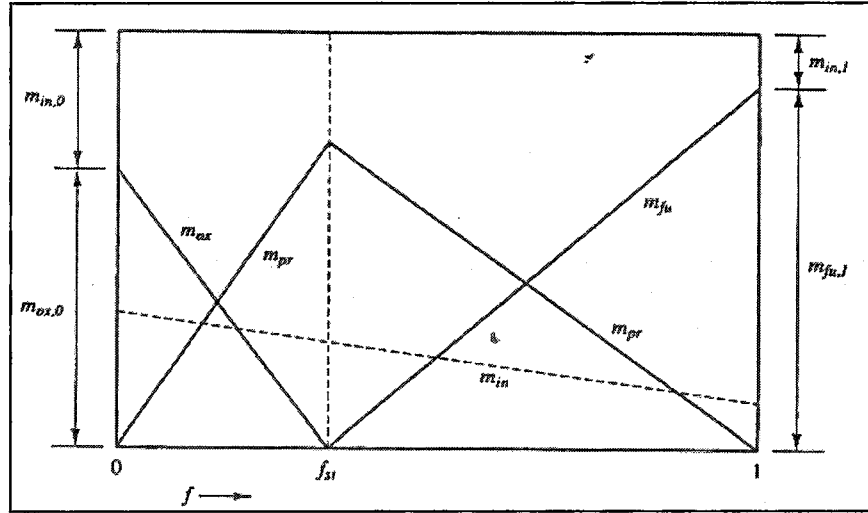
Reaktantlar içinde inert gazlar (N_2) da bulunabilir. İnert gaza ait kütle oranı X_{inert} yanma sonrası :

$$X_{inert} = X_{inert,0}(1 - Z) + X_{inert,1}Z \quad (4.43a)$$

olarak bulunur. Ürünlere ait kütle oranı ise ;

$$X_{ürün} = 1 - (X_y + X_o + X_{inert}) \quad (4.43b)$$

şeklinde yazılır. [13]



Şekil 4.7 Karışımında yakıt oksitletici akışları ($f = Z$, $m = X$)

4.2. Çalışmada Kullanılan Yazılım ve Radyant Isıtıcı

4.2.1. Fluent yazılımı ile yanma modellemesi

i) Uygulama alanları : Yanma modellemesinde Fluent'in tepkimeye giren homojen ve heterojen akışlar için geniş bir uygulama alanı vardır. Çalışmadaki örnek bir radyant ısıtıcıdır. Sıcaklık, hız dağılımları ve bileşen konsantrasyonlarında gerçeğe yakın sonuçları bildirmesi muhtemeldir.

ii) Yanma modelleri : Çalışmadaki yanma modeli gaz fazında olup, ön karışımсыzdır.

Yöneten transport denklemleri ise :

- Kütle
- Momentum (türbülans)
- Enerji

denklemleridir.

iii) Kullanılan türbülans modeli standart $\kappa - \varepsilon$ olup, kirlenici modeli (NO_x , SO_x) kullanılmamıştır.

4.2.2. Yanma modellemesinde SAD adımları :

Çalışmadaki SAD analizinde ele alınması gereken temel adımlar şunlardır.

- 1) Modelleme amaçları belirlenmelidir. Elde edilmek istenen sonuçlar sıcaklık, hız, $\kappa - \varepsilon$ ve bileşen konsantrasyonları profilleri olup mümkün olduğunca gerçeğe yakın sonuçlar istenmektedir.
- 2) Modelleneyecek alan tanımlanmalıdır. Modelleneyecek alanda sayısal alan gaz ile havanın temasa geçtiği brülörden başlamakta ve egzoz gazlarının çıktığı kesit alanı ile sonlanmaktadır. Problem eksenel simetrik olarak iki boyuta indirgenebilir.
- 3) Ağ sisteminin dizayn edilmesi gerekmektedir. Kullanılacak ağ sisteminde dörtgen yapı olacaktır. Problem ağ sistemi için gerekli herhangi bir dörtgen yapı sayısı yoktur. Problemi çözmede 128 mb bilgisayar belleği yeterli olacaktır.
- 4) Akış rejimi türbülanslıdır. Geometri basit olduğu için rahatlıkla Fluent yazılımı seçilebilir.
- 5) Fiziksel model sürekli ve viskoz akıştır. Türbülans modeli olarak standart $\kappa - \varepsilon$ modeli seçilmiştir. Isı transferi konveksiyon ve kondüksiyon şeklinde olacak, radyasyon ihmal edilecektir. İki fazlı akış söz konusu değildir.
- 6) Malzeme özelliklerini belirlemek gerekmektedir. Akışkan özelliği ideal gaz özelliğidir. Akışın termofiziksel özellikleri sıcaklığa bağlı değildir. Katı malzeme özellikleri yazılım tarafından belirlenir.
- 7) Giriş sınır koşulları yakıt ve havanın giriş hızlarıdır. Çıkış sınır koşulu ise basınç çıkışıdır. Cidarlar sabit olup sabit sıcaklık ve ısı akısı sınır koşuluna maruz bırakılmıştır.
- 8) Çözücü kontrolü girilmelidir. Çözücü Fluent 5/6 olarak seçilmektedir. Çözümün sağlıklı olması için çeşitli büyüklüklerde gevşetme faktörleri girilir. Stabilitayı sağlamak açısından da $\kappa - \varepsilon$, sıcaklık, yoğunluk ve basınç gevşetme faktörleri kullanılmalıdır.
- 9) Çözümün hesaplanmasında ağ sisteminin hassasiyeti, fiziksel modelin tamlığı ve sayısal tamlığın derecesi ve gevşetme faktörleri belirlendikten sonra iterasyon yapılır.

10) İterasyon sonunda niceliklere ait grafiklerde yakınsama gözleniyorsa sonuçlar doğru kabul edilir ve kontür çizimleri alınır. [16-17]

4.2.3. Radyan ısıtma sistemi

Radyant ısıtma sistemleri dışarıya verdiği enerjinin yarısından fazlasını enfraruj ışıınım olarak yayan sistemler olarak tanımlanabilir. Bu da yayıcı yüzeyleri 100°C'den fazla olan sistemler anlamına gelmektedir.

Radyant ısıtma sistemleri arasında gaz yakmalı radyant borular ve plakalar, elektrikli kuartz ısıtıcılar ve radyant paneller bulunmaktadır.

Tüm bu radyant ısıtma sistemlerinin ortak noktası, enfraruj ışıınının, ısı kaynağından ısıtılacak yüzeylere hava tarafından en az düzeyde absorbe edilerek doğrudan iletilmesidir. Radyant ısıtma sistemlerinin tümünün ortak noktası doğrudan cisimleri ısıtıp, doğrudan havayı ısıtmamasıdır.

Radyant ısıtma sistemlerinin kullanıldığı bir ortamda ısı ışıınım temel olarak iki şekilde ele alınır :

- Doğrudan ısı kaynağından,
- Dolaylı olarak duvarlar ve tabandan gelen ışıınım etkisiyle.

Radyant sistemlerde prensip, yayıcılığı yüksek bir yüzeyin ısıtılmasından oluşmaktadır. Bunun dışında alevin ışıınımından doğrudan faydalanmak için, çıplak alevin kendisi de ışıınım için kullanılabilir.

Radyant ısıtma uygulamasındaki ısı enerjisinin ortama verilmesi ile ilgili maddeler, düşük yoğunluklu gaz yakmalı radyant borulu bir uygulama için oluşturulmuştur. Radyant boru, gaz yakıtın yanmasıyla açığa çıkan enerjinin kullanılabilir kısmı ile ısıtılır. Yayıcılık olarak bilinen borunun bir malzeme özelliği, radyant enerji olarak boruyu terk eden enerji miktarının belirlenmesini sağlar. Birim alana yayılan ısı, sıcaklığın dördüncü kuvveti ile orantılı olduğundan, radyant ısıtma sistemlerinin tasarımında yayıcı yüzeyin sıcaklığının önemi büyüktür.

Radyant ısıtma sistemlerini yüzey sıcaklıklarına bağlı olarak yüksek ve orta yoğunluklu cihazlar ile düşük yoğunluklu cihazlar olarak ikiye ayırmak mümkündür. Yüzey sıcaklığı 815°C ve üzerindeki cihazlar yüksek yoğunluklu, 815°C'den düşük sıcaklıktaki cihazlar düşük yoğunluklu cihazlardır.

Toplam ısı çıktısının yarısından fazla olan sistemler radyant ısıtma sistemleri olarak tanımlanır. Pratikte ise radyant ısıtma sistemleri yayıcı sıcaklıkları 100°C'yi aşan sistemlerdir. Radyant ısıtma sistemlerini genel olarak sınıflandırılacak olursa;

Tablo 4.1 Genel radyant ısıtma sistemlerinin sınıflandırılması

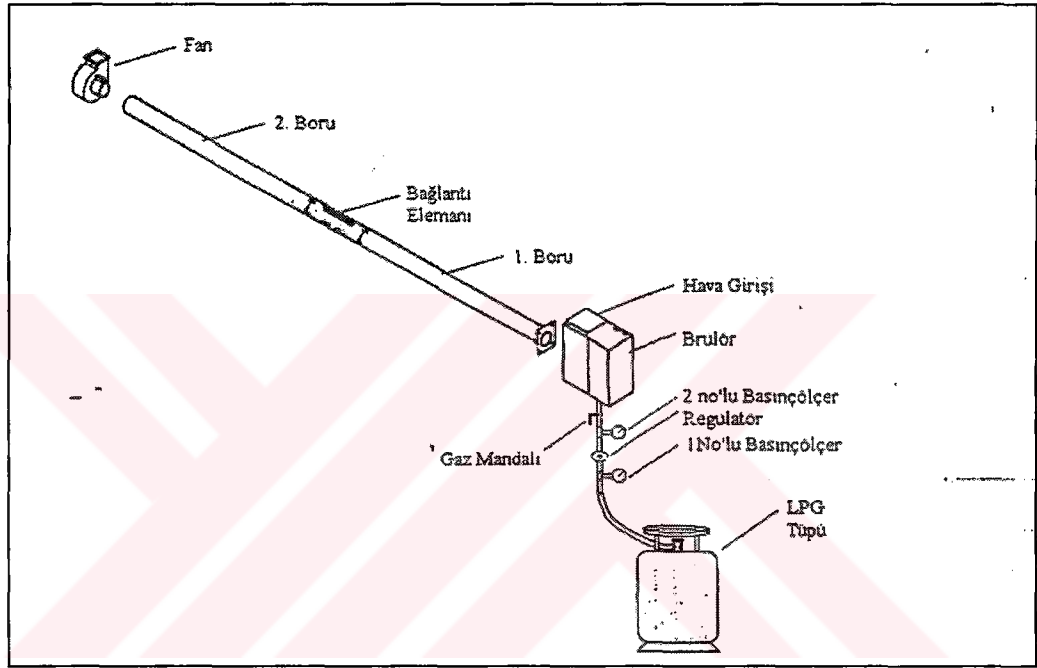
Yakıt	Isı Transferi Akışkanı	Sistem Tipi	Yayıcı
Katı yakıt	Orta veya yüksek sıcaklıkta su	Sıcak su boruları veya panelleri	100-150°C
	Buhar	Buhar boruları ve panelleri	100-180°C
Gaz veya fuel oil	Hava	Hava ısıtmalı radyant boru	100-150°C
Gaz	Sıcak gazlar	Gaz yakmalı radyant boru	200-500°C
	Yok	Plaka ve Koniler	800-900°C
Elektrik	Yok	Rezistans	1000°C
	Yok	Doğrusal kuartz tüp	2000°C

Radyant ısıtma seçenekleri şunlardır : sıcak sulu ve buharlı radyant, hava ısıtmalı radyant borulu, gaz yakmalı radyant borulu ısıtma sistemleri olarak sayılabilir. Son olarak radyant sistemlerin avantajlarına değinmek gerekir ise :

- Yüksek yerlerdeki ısı kaybını önler.
- Radyant ısıtma kullanım alanından çalmaz. Tavana monte edildiklerinde, iyi bir kaplamayla görüntü kirliliği de yaratmazlar. Radyant ısıtıcılar binalarda tavanın içinden dolaştırılabilirler. Bu sayede görünmez bir hal alırlar.
- Yaz aylarında, içinde soğutucu bir akışkan dolaştırarak, bir miktar soğutma da sağlayabilir.

- Diğer ısıtıcılar, binanın içine toz da üfleyebilirken radyant ısıtıcılarda bu mümkün değildir.
- Kurulum masrafları daha küçüktür. [1]

Laboratuarda bulunan deney tesisatı radyant ısıtma sistemi, LPG tüp, tüp brülör arası bağlantı, duvara montaj için gerekli kollar, yanmış gaz tahliye boruları, brülöre takılan bir su manometresi, gaz emisyon analizörü ve termoelemanndan oluşmaktadır.



Şekil 4.8 Deney tesisat

Laboratuardaki radyant sistem “Blackheat” marka olup, kullanımının iki ana nedeni vardır:

- Başka ısıtma sistemlerine oranla daha düşük fiyata ısıtma etkisi yaratmak.
- Diğer ısıtma sistemleri ile ısıtılamayan hacimlerin ısıtılmasını sağlamak.

2.)Radyant sistem dört ana elemandan oluşmaktadır: “Brülör , radyant boru, reflektör ve vakum pompası (fan)”

Brülör vasıtasıyla yakılan gazın, sistemin ucundaki vakum pompası ile emilerek borunun içerisinde dolaşması ve soğuduğu noktadan dışarıya atılması sağlanır. Bu

sırada radyant ısıtıcının içinde dolaşan gaz, ısısını boruya bırakır. Radyant borunun dış yüzeyi kısa sürede 350 ile 450°C sıcaklığa ulaşır. Borudan yayılmaya başlayan ışınlar cisimlere çarptığı anda ısıya dönüşür. Bu ışınlar vasıtasıyla önce cisimlerle temas eden havaya geçer. Ancak ısınma öncelikle cisimlerden başladığı zaman zemindeki sıcaklık her zaman daha fazladır, yukarılara çıkıldıkça ısıнын düştüğü görülür.

Radyant sistemin parçalarına bakacak olursak;

1a.) Brülör = 15kW gücündeki BH15 SI kodlu brülörün teknik özellikleri şunlardır :

Tablo 4.2 Brülörün teknik özellikleri

Model	BH 15 ST
Güç [kW]	15
Toplam boru uzunluğu [m]	6685
Toplam ağırlık [kg]	41
Isıtılan alan [m ²]	20-160
Minimum montaj yüksekliği [mm]	3,5
Gaz yakıt	Doğalgaz veya LPG
Doğalgaz harcaması [Nm ³ /h]	1,56
LPG harcaması [kg/h]	1,15
Giriş basıncı [mBar] - Doğalgaz	min 15; maks 50
Giriş basıncı [mBar] – LPG	min 32,5; maks 50
Gaz bağlantısı	½" Dişli
Elektrik Beslemesi	230V, monofaze, 1 Amper
Ateşleme	Tam otomatik, alev sensörlü

Bir su manometresi ile regülatör içinden çıkış basıncı ölçülmektedir ve ayrıca brülör üzerindeki bir ayar vidası ile basınç ayarlanabilmektedir. Doğalgaz için en verimli çalışma basıncı 8,7 mbar olarak verilmiştir. Brülörün içerisinde değiştirilebilir bir

hava ayar plakası, doğalgaz ve LPG için değiştirilebilir bir gaz jeti, ateşleme elektrotla, hava-yakıt karışım odası ancak radyant borunun içindeki vakum tamamlandıktan sonra ateşlemeye olanak sağlayan bir vakum switch, gaz girişi kesildiğinde ateşlemeyi durduran güvenlik elemanı, brülöre giriş basıncını gerekli değere düşüren ayarlanabilir bir iç regülatör ve elektrik devreleri bulunmaktadır. Sistemin tamamı tam otomatik çalışmaktadır.

1b.) Radyant borular : Radyant borular 100 mm çapında ve 3'er m uzunluğunda iki parçadan oluşmaktadır. Yüksek yayıcılığı olan, ısı işlem görmüş, içi ve dışı alüminize olmuş çelik borulardır.

1c.) Vakum pompası (fan) : Fan, brülöre seri bağlanmıştır. Elektrik girişinde kullanılan kondansatör akım dengesini sağlamaktadır. Fan sisteme elektrik verilmesiyle birlikte çalışarak radyant borular içindeki gazı tahliye edip boru içinde vakum yaratır. Ayrıca sistem yakıtı yakarken de fanın çalışması boru içindeki gazın hareketini sağlayarak sıcaklık geçişini ve yanmış gazların dışarı atılmasına yardımcı olur.

2.) LPG tüpü : 12 kg'lık iPragaz marka ev tipi LPG tüpü kullanılıyor.

3.) Doğalgaz tüpü : Deneydeki doğalgaz tüpü 45 l'dir ve tüp ayrıca 200 ile 300 bar basınca dayanmaktadır.

4.) Tüp – Brülör Bağlantısı : Bağlantı, sağlamlaştırılmış, basınca dayanıklı kauçuk bir boru, iki adet basınç ölçer, bir regülatör ve bunları bir arada tutan bağlama elemanlarından oluşmaktadır. Tüp çıkışına konulan basınçölçer 10 bar basınca dayanır. Regülatör vasıtasıyla basınç ölçere gelen gaz basıncı 50 mbar seviyesindedir. Bu basınç ölçerin maksimum ölçme kapasitesi 250 mbar'dır. Regülatör çıkışında bulunan bir gaz kesme mandalı sistemi daha güvenli hale getirir.

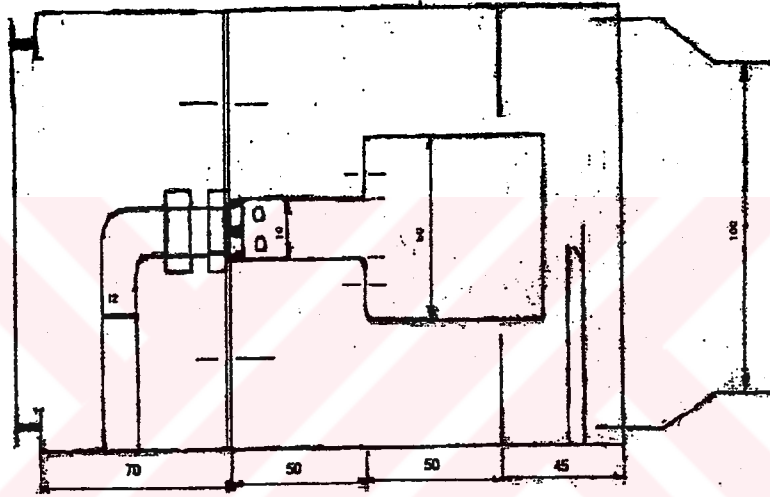
5.) Montaj kolları : Duvara montaj için kullanılmaktadır.

6.) Gaz analizörleri : Emisyon ölçümleri CO₂ ve O₂ emisyonları ile NO_x emisyonu olarak yapılmaktadır. NO_x ölçümleri sadece doğalgaz kullanılan deneylerde yapılmaktadır. Bu "Horiba" marka gaz analizörüdür ve bu cihazın modeli CLA – 220 SD'dir.

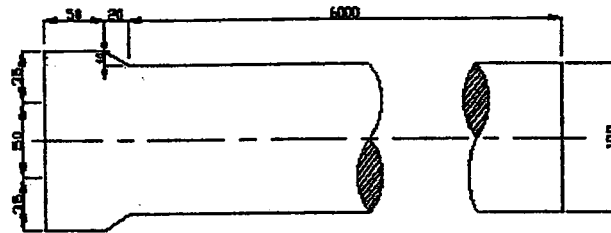
7.) Termoeleman : Deneyde 600°C' ye kadar ölçüm yapabilen düşük hassasiyetli bir termoeleman kullanılmıştır. Bu termoeleman ile belirli bölgelerde boru üzerinde sıcaklıklar ölçülür. [3]

4.2.4. Çalışmada kullanılan geometri ve model :

Çalışmada yanma modellemesinin yapılacağı alan yukarıdaki bölümde anlatılan yaklaşık 6m uzunluğundaki radyant ısıtıcıdır. Şekil 4.9 ve 4.10'da radyant ısıtıcının brülör kesiti ve basitleştirilmiş geometrisi boyutlarıyla verilmiştir.



Şekil 4.9 Brülör kesiti

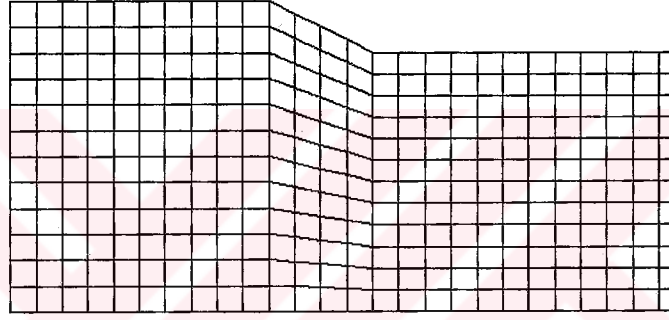


Şekil 4.10 Sistemin geometrisi

Bu geometri radyant ısıtıcının basitleştirilmiş modelidir. Modellenecek alan yakıtın ve havanın ayrı ayrı hızlarda ve ön karışimsız olarak brülöre girdiği yerden başlar ve radyant borunun yaklaşık 6m'lik gövdesini takiben egzoz gazlarının çıkış kesitiyle sonuçlanır. Sayısal alan yani ağ sistemi bölümü de bu geometrinin tamamını içerir.

Problemde ele alınan bu geometri iki boyutlu olarak tasarlanmıştır. Yani bileşenlerin hızları x ve y eksenlerinde değişecektir. Ayrıca model ekstenel simetriktr.

Ağ sistemi ise kareciklerden oluşmaktadır. Boyutların da beşin tamkatları olması ve bilgisayarın hesaplama zamanını azaltmanı açısından ağ sistemi özelliği kare 5 yani kenarı 5 mm olan kare şeklinde düşünölmüştür. Gambit yazılımında iki boyutlu geometri çizilirken boyutlar mm olarak girilmiştir. Problemde ağ sistemi oluşturulurken birim kare yani kare 1 kullanılmamasının bir nedeni de toplam geometride yer alacak karecik sayısını azaltmaktır, böylece Fluent ile sayısal çözüm yapılırken hem fazla zaman harcanmış olur hem de iterasyon sayısı daha az tutulabilir. Şekil 4.11’de ise ısıtıcının giriş kısmının ağ sistemi görölüyor.



Şekil 4.11 Giriş kısmının ağ sistemi

Modelleme sonucunda elde etmek istenilen, doğalgazın (metanın) hava ile ön karışimsız olarak reaksiyona girmesi sonucu, sıcaklık, bileşen, konsantrasyonları ve hız vektörlerini; oluşturan geometri üzerindeki dağılımlarını elde etmektedir. Bu dağılıma bakılarak daha önce aynı düzenek ile gerçekleştirilmiş deneyin sonuçları kıyaslanacak ve sonuçlar sınanacaktır. Burada sadece enerji için 10^{-6} diğer komponentler için 10^{-3} mertebesinde tamlık istenmektedir.

Sonuçlara ulaşmada çabukluk önem arz etmektedir. O yüzden Fluent ile yapılacak çözümün modeli mümkün olduğunca basit tutulmuş (2D) ve ağ sistemi de karmaşık bir yapıda oluşturulmamıştır.

Gambit ile çizilen geometri Fluent’e aktarılarak çözüm için gerekli adımlara başlanır. Akış rejimi sıkıştırılabilir ideal gaz özelliktedir. Fiziksel model ile ilgili bilgileri şöyle özetlenebilir.

- Sürekli akıştır. (Difüzyon alevi modeli seçilmiştir)
- Türbölanslı difüzyon alevi modellenenecektir.

- Türbülans modeli $\kappa - \varepsilon$ standart viskoz modeldir.
- Enerji denklemi kullanılacaktır.
- Ancak radyasyon hesaba katılmamıştır.
- Metan hava karışımı için reaksiyona giren çoklu bileşen modellemesi yapılacaktır. (Ayrıca sistem geometrisi eksenel simetriktir.)

Malzeme özelliklerine gelindiğinde akışkan “ideal gaz” olarak alınmıştır. Termodinamik özellikler örneğin özgül ısı c_p , sıcaklığın bir fonksiyonu değildir yani sabittir. İlerde daha kapsamlı anlatılacağı üzere metanın 1 ve 2 kademeli yanmaları için “eddy disipasyon” metodu reaksiyon modeli olarak seçilmiştir. [6]

4.2.5. Çalışmada kullanılan sınır koşulları

Fiziksel modelin doğru çözüme ulaşabilmesi için sınır koşullarının doğru olması gereklidir.

i) Simetri sınırı : Akış alanı simetrik değil ise, simetri özelliği kullanılmamalıdır. Simetri sınırı problemin çözümünde hesaplamalarda kolaylık sağlar ve bunun için harcanan eforu azaltır. Simetriklik özelliğinin kullanılabilmesi için akış alanı ve geometri simetrik olmak zorundadır

- Dik hız bileşenleri = 0
- Diğer değişkenlerin dik gradyanları = 0 olmalıdır.

ii) Giriş ve çıkış sınırları : Bunlar hız, kütleli debi, toplam basınç, statik basınç, sıfır difüzyon akışı v.s. olabilirler. Ancak giriş ve çıkış sınırları belirlenirken dikkat edilmesi gereken özellikler vardır :

- Akış içeriye mi giriyor, dışarı mı çıkıyor?
- Yüzeye normal (dik) büyük gradyanlar olmamalıdır,
- Ağ sistemi çarpıklığı minimize edilmelidir.

Alan içinde akış süpersonik olabilir. Ancak sınırlarda olamaz. Bunlara dikkat edildikten sonra çalışmaya ilişkin olarak “hız girişlerine” bakılırsa :

Hız girişi bütün çözücülerde mevcuttur. Ancak dikkate alınması gereken :

- Hız büyüklüğü,
- Akış yönü,
- Kartezyen komponentler,
- Sınıra dik olma koşulu,
- Spesifik seçenekler (silindiriklik, teğet olma v.b.),
- Toplam sıcaklık,
- Skalerler (türbülans $\kappa - \varepsilon$, kütle oranları v.b.) vardır.

Çalışmada yakıt ve hava brülöre belli hızlarda giriş yaptıkları için sınır koşulu tanımlamalarında bunlar “hız girişi” olarak adlandırılır. Akış yönü her ikisi içinde aynı olup (brülörden çıkış kesitine doğru) yanmayı sağlayacak uygun hızlar seçilmiştir. Giriş sıcaklıkları oda sıcaklığıdır. (300 K)

Yanma sonrası radyant borunun çıkış kesitinde “basınç çıkışı” koşulu gerçekleşmektedir. Yine olaya ilişkin bir sınır olarak basınç çıkış sınırını incelenecek olursa :

iii) Basınç çıkışı : Akış sabit statik basınç değerinde sayısal alanda gerçekleşir. Ancak belirlenmesi gereken :

- Statik basınç,
- Geri dönüş akışı,
- Sıcaklık,
- Türbülans kinetik enerjisi (κ),
- Türbülans kinetik enerji disipasyonu (ε),

- Kütle oranları v.b.

Geri akımın olduğu yerlerde statik basınç değeri kullanılır. Süpersonik akışlarda statik basınç ihmal edilir.

Çalışmada ısıtıcının çıkış kesitinde tam yanma olduğu varsayımıyla bileşenlerin kütle oranları sıfır alınmıştır. Çıkış kesiti “basınç çıkışı” olarak adlandırılıp, yanma sonu gazlarının çıkış yeri olarak değerlendirilir.

iv) Duvar sınırları : Duvarın rijit olduğu varsayımı ve dik hız bileşeninin sıfır olması gerekmektedir.

Belirlenmesi gerekenler :

- Duvar teğetsel hızı (hareketli duvarlarda),
- Duvar pürüzlülüğü (türbülanslı çıkışlarda yaklaşık 0.5),
- Isıl sınır koşulları (ısı transferi için),
- Kimyasal reaksiyonlar (yüzey reaksiyonları için),

Duvar sınır koşulu konmasındaki amaç, akışın hareketini yönlendirmek ve sınırlandırmak ve momentum, enerji $\kappa - \varepsilon$ türbülans, kütle oranları gibi değerlerin sayısal alanda olan akılarını belirlemektir.

Duvar sınır katmanında duvar yakınındaki hız gradyanı bilinmelidir. Laminar kayma gerilmesi :

$$\tau_w = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial n} \right)_{duvar} \quad (4.44a)$$

şeklinde ifade edilir. Laminar akımlar için kullanılan aşağıdaki yaklaşım türbülanslı akımlar için de geçerlidir :

$$\tau_w = \mu \frac{\Delta v}{\Delta n} \quad (4.44b)$$

Δn = “Duvar-Hücre orta noktası” dır.

Çalışmada brülör ve radyant ısıtıcının üst tarafı duvar olarak adlandırılmış ve sınır koşulu ısıl sınır koşullarından ısı akısı olarak seçilerek belirlenmiştir. [16]



5. DOĞALGAZ YANMASININ FLUENT YAZILIMINDA MODELLENMESİ VE YORUMLAR

5.1. Problemin Tanımı :

Çalışmada Fluent ile simülasyonu yapılacak olan sistem daha önce de bahsedilen yaklaşık 6 m uzunluğundaki radyant ısıtıcıda doğalgaz yanmasıdır. Gaz yakıt olarak metanın silindirik bir yakıcıda “sonlu hız kimyası” kullanılarak Fluent / UNS da yanması incelenmiştir. Bu bölümde şimdiye kadar anlatılan teorik bilgiler ışığında şu konular üzerinde durulacaktır :

- Fiziksel modeli oluşturma, malzeme özelliklerini seçme, kimyasal bileşen karıştırılması ve reaksiyon durumunda oluşan türbülanslı akışın sınır koşullarını belirleme,
- Yanma simülasyonunun başlatılması ve çözülmesi,
- Reaksiyon akışının sonuçlarını grafik yardımıyla sınaama,
- Tepkime sonucunda sıcaklık, hız, bileşen konsantrasyonları , $\kappa - \varepsilon$ değişimlerini sınaama ve yorumlama.

Öncelikle Gambit programında CAD çizimi yapılarak ağ oluşturulan ve kenarları adlandırılan radyant ısıtıcı çizimi Fluent 5/6 aktarılarak, tanınması sağlanır. Sonra çalışmanın fiziksel boyutuna geçilir.

5.2. Ağ Sistemi Oluşturulması ve Özellikleri :

Daha önce verilen ağ sistemi örneği yüzey kare boyutunun 5 mm alınması suretiyle toplamda 14568 kare içermektedir.

CAD çizimi yapılan silindirik cismin Fluent aktarılmadan önce kenarlarına verilen adlar anlatılmaktadır. Bunlar :

- yakıt girişi,
- hava girişi
- duvar 3,
- duvar 4,
- duvar 5,
- eksen,
- egzoz gazı çıkışı; olarak verilir.

Sınır tiplerinin belirlenmesi aşamasında bu adlar sınır koşulu olarak anlam ifade edecek adlarla tekrar isimlendirilir. Böylece;

- yakıt girişi ⇒ hız girişi 1
- hava girişi ⇒ hız girişi 2
- duvar 3,4,5 ⇒ duvar 3,5,5
- eksen ⇒ simetri
- egzoz gaz çıkışı ⇒ basınç çıkışı sınır adlarına sahip olurlar.

Bu tanımlamadan sonra çizim Fluent 5/6 ya aktarılır.

Geometri basit ve iki boyutlu olduğu için ağ sisteminin kare şeklinde olması daha iyi sonuç verecektir. Daha karmaşık geometrilerde altıgen tipi ağ sistemi sayısal avantaj sağlamaz ancak üçgen / tetra ağ sistemi kullanılmasıyla zamandan tasarruf sağlanır.

File ⇒ Read ⇒ Case ile ağ sistemi okunur.

Ağ sistemi ⇒ Check ile ağ sistemi kontrol edilir. Minimum ve maksimum x ve y değerleri ve ağ sistemi özellikleri kontrol edilir. Eksenel simetrik bir örnek olduğundan hücreler negatif yerde yer almazlar.

Grid ⇒ Scale komutuyla m olarak verilen boyutlar mm'ye çevrilir. Böylece $x_{max} = 6,07$ m, $y_{max} = 0,06$ m olarak gözüktür. Diğer hiçbir birimi çevirmeye lüzum yoktur.

Display ⇒ Grid ile de çizim görüntülenir. [18]

5.3. Modelin Tanımlanması :

Define $\Rightarrow$ Models $\Rightarrow$ Solver ile çalışmanın eksenel simetrik olduğu tanımlanır.

Define $\Rightarrow$ Models $\Rightarrow$ Multiphase ile çok fazlı olan model kapatılarak devre dışı bırakılır.

Define $\Rightarrow$ Models $\Rightarrow$ Viscous komutuyla çalışmanın esasını oluşturan $\kappa - \varepsilon$ türbülans modeli seçilir. Burada Reynolds gerilmelerini de modelleyen “standart $\kappa - \varepsilon$ modeli” seçilir. Standart duvar fonksiyonuyla beraber “ C ” sabitleri de verilmiştir. Daha önce de anlatılan Boussinesq hipotezine göre Reynolds gerilmeleri ortalama hız gradyeniyle orantılıdır. Moleküler viskozite μ_t şu bağıntıyla ifade edilir :

$$\mu_t \propto \rho g \ell \quad (5.1a)$$

g = türbülans hız ölçeği

ℓ = türbülans uzunluk ölçeği

Hatırlanacağı üzere $\kappa - \varepsilon$ modelinde $g = \sqrt{\kappa}$ ve $\ell = \frac{\kappa^{3/2}}{\varepsilon}$ bağıntıları mevcuttur.

Buradan :

$$\kappa = \frac{1}{2} \overline{u_i'^2} \quad (5.1b)$$

$$\varepsilon = \zeta \cdot \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} \quad (5.1c)$$

olur. Prandtl Kolmogorov bağıntısıyla :

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (5.1d)$$

olur. Burada $C_\mu = 0,09$ μ_t türbülans viskozitesidir. $\kappa - \varepsilon$ transportunda yer alan diğer sabitler ise : $Pr_\kappa = 1,0$; $Pr_\varepsilon = 1,3$; $C_1 = 1,44$; $C_2 = 1,92$.

Viskozite gradyanların büyük olduğu yerlerde türbülans oluşumu da büyüktür.

Çalışmada kullanılan standart $\kappa - \varepsilon$ modeline yorum getirmek gerekir ise, kuvvetli tarafları :

- Model sağlamdır,
- Kullanılması maliyet açısından uygundur.

Güçsüz tarafları :

- Empirik olarak; sabitler sürekli yüksek Reynolds sayısı akışkanlarından alınmıştır.
- Model düşük Reynolds sayısı ($Re < 5.10^4$) akışlarına adapte edilemez.
- İsootropik eddy viskozitesi açısından μ_t skalerdir. Model sadece bir uzunluk ölçeğini (ve bir hız ölçeğini) bütün yönler için uygun kabul eder. Bu da Reynolds gerilmelerinin hepsinin 1. dereceden olması anlamına gelir.

Duvar yakınında “standart duvar fonksiyonu” olduğu söylenebilir. Duvar fonksiyonları ortalama hızın ve sıcaklığın duvar sınır katmanındaki empirik tanımı ile ve yakın duvar türbülans büyüklüklerini ($\kappa - \varepsilon$) içerir.

Kolmogorov Prandtl sayısı “ ζ ” şöyle ifade edilir :

$$\zeta = \ell_\mu \sqrt{\kappa} \quad (5.2a)$$

$$y^+ = \frac{u_\tau y}{\zeta} \quad (5.2b)$$

Duvar fonksiyonlarını düzenleyen Launder - Spalding’e göre :

$$\kappa = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad (5.2c)$$

$$\varepsilon = \frac{u_\tau^3}{\kappa \cdot y} \quad (5.2d)$$

olarak $\mu_t = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$ ifadesinden türetilir. Buradan yola çıkarak üniversal hız ve sıcaklık:

$$u^+ = \frac{1}{K} \ln(\bar{E} \cdot y^+) = \frac{u C_\mu^{\frac{1}{4}} \sqrt{\kappa}}{\left(\frac{\tau_w}{\rho}\right)} \quad (5.3a)$$

$$T^+ = \text{Pr}_t(u^+ + P) = \frac{(T - T_w) \rho c_p C_\mu^{\frac{1}{4}} \sqrt{\kappa}}{\dot{q}_w} \quad (5.3b)$$

bulunur.

Duvar yakınındaki hız ve sıcaklık dağılımına yorum getirmek gerekir ise hız $u = f(\rho, \mu, y, \tau_w)$ 'dır. Yani hız yoğunluğun, viskozitenin, uzaklığın ve sabit duvar kayma gerilmesinin bir fonksiyonudur. Hız ve sıcaklık ortalama değerleri bu değerlere bağlı fonksiyonlar olarak ifade edilirler. Ayrıca modelleme açısından şu yorumlar da katılabilir :

- Duvar fonksiyonları, ekonomik, sağlam ve nedeni olan bir şekilde doğrudur.
- Yakın duvar yaklaşımıyla (çidar yakınındaki türbülans) türbülans modeli duvar yakınında geçerli olmaktadır.
- Duvar yakınında düşük Reynolds sayılı akım, duvardan sızdırma (emme, üfleme v.b.) varsa, yüksek ağırlık uygulanıyorsa ve akış duvar yakınında bir hayli üç boyut özelliği alıyorsa, bu yaklaşım geçerli ve tam olmaz. [16]

Çalışmada $\kappa - \varepsilon$ türbülans modeli kullanıldığından enerji dağılımı gözlenecektir. O yüzden;

Define $\Rightarrow$ Models $\Rightarrow$ Energy aktif duruma getirilir.

Define $\Rightarrow$ Models $\Rightarrow$ Radiation komutuyla ısı ışıınımı yani radyasyon devre dışı bırakılır, çünkü bunun etkisi incelenmeyecektir.

Define $\Rightarrow$ Models $\Rightarrow$ Species Transport ile yanmayı sağlayacak olan bileşenlerin seçimi aşamasına gelinir. Karışım oluşturan materyal “metan ve hava” dır. Böylece bütün reaksiyon mekanizmasının ön tanımlanması yapılır. Bu seçimde kimyasal bileşenlerin fiziksel ve termodinamik değerleri de otomatik olarak seçilmiş olur.

Reaksiyon mekanizması olarak “hacimsel” mekanizma seçilir. Türbülans kimya arası etkileşim “eddy disipasyon” metoduyla yapılacaktır. Seçenek olarak “difüzyon-enerji kaynağı” işaretlenir.

Burada “eddy disipasyon” seçilmesindeki amaç 1 ve 2 adımlı metan yanmasında Arrhenius sabitlerini hız denkleminde çıkarmaktır. Burada ayrıca reaksiyonda yer alacak toplam bileşen sayısı da görülmektedir.

Enerji kaynağı olarak “difüzyon enerji kaynağı” seçili bırakılır, çünkü oluşacak alev türbülanslı difüzyon alevi olacaktır. [16]

5.4. Malzemenin Tanımlanması

Materyal seçimi daha önce belirlenen “metan hava” karışımına göre yapılır. Buradaki panel değerlerine bakılacak olursa :

- Reaksiyon Modeli = Eddy disipasyondur. Burada reaksiyonda yer alan bileşenlerin katsayıları ve hız üsleri de yer almaktadır.
- Yoğunluk (kg/m^3) = ideal gazdır.
- Özgül ısı c_p (J/kg.K) = 1000’dir ve sabittir, sıcaklıkla değişmez.
- Isıl iletkenlik katsayısı (W/mK) = 0,0454 (sabit),
- Viskozite (kg/ms) = $1,72 \cdot 10^{-5}$ (sabit),

- Kütleli difüzyon (m^2/s) = $2,88 \cdot 10^{-5}$ (sabit),
- Karışımda yer alan bileşenler = $CH_4, O_2, CO_2, H_2O, N_2$.

Burada karışım materyali sabit özellikleri kullanacaktır. Yani verilen değerler üzerinde herhangi bir değişiklik yapılmaz. 1 ve 2 adımlı reaksiyon modellerinde “eddy disipasyon” seçildiği için Arrhenius hız formülünde yer alan sabitler girilmeyecektir. Reaktant sayısı 3 (CH_4, O_2, N_2), stökiyometrik katsayıları da 1 ve 2’ dir. Ürün sayısı da iki (CO_2, H_2O), stökiyometrik katsayıları yine 1 ve 2 dir.

Eddy disipasyon (Magnussen) modeli reaksiyon hızını, reaktantların türbülanslı dalgalanmalar tarafından karıştırıldığı hıza kıyasla “hızlı kimyasal kinetik” olduğu varsayımıyla hesaplar. O yüzden bu model kimyasal kinetiği (Arrhenius hızını) göz ardı eder ve sadece “karıştırma hızı parametrelerini” kullanır.

Bu bölümde yoğunluk dışındaki her türlü nicelik sabit kabul edilmiştir. Bunların sabit alınabilmesinin nedeni akışın tamamıyla türbülanslı oluşundandır. Moleküler transport özellikleri türbülanslı transporta göre çok küçük bir rol oynarlar. Ancak özgül ısı (c_p) sabit kabul edilmesinin yanma çözümlemesi üzerinde çok büyük etkisi vardır. [18]

5.5. Sınır Koşullarının Tanımlanması :

Burada önce çizimde tanımlanan kenarların sınır koşulu tipine dönüştürülmesi gerekmektedir.

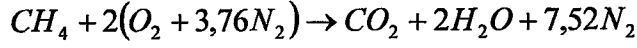
Define $\Rightarrow$ Boundry Condition komutuyla bu düzeltmelere başlanır.

1. “Simetri $\rightarrow$ Eksen” dönüşümü yapılır. Aksi taktirde yarıçapın sıfır olduğu yerde hesaplama güçlüğü yaşanır.
2. “Hız Girişi 1 $\rightarrow$ Hız Girişi” dönüşümü yapılırken bazı sayısal değerleri kullanıcı tarafından girilmesi de gerekmektedir.

Hız Girişi 1, yakıt girişini temsil etmekteydi, öyleyse ona ait hesaplama sonuçları panele yazılacaktır. Bunlar, yakıtın giriş hızı, sıcaklığı, türbülans kinetik enerjisi ve disipasyonu, bileşen kütle oranlarıdır. Ø10 mm çapındaki nozülde %100 yakıt

girdiğine göre yakıt (CH_4) kütle oranı 1,0 diğer bileşenlerin sıfırdır. Yakıt oda sıcaklığında (~ 300 K) girmektedir. Metanın giriş hızını bulmak için ısıtıcının gücünden yola çıkılarak basit bir hesaplama yapılabilir :

$$\lambda = 1,0 \quad \dot{Q} = 15 \text{ kW} \quad H_{\bar{U}}(DG) = 37,41 \text{ MJ} / m^3$$



$$M_{CH_4} = 16 \quad M_{O_2} = 32 \quad M_{N_2} = 28 \text{ alınırsa,}$$

$$AF_m = \frac{2 \cdot 32 + 2 \cdot 3,76 \cdot 28}{1 \cdot 16} = \frac{274,56}{16} = 17,16 \frac{\text{kg hava}}{\text{kg yak.}}$$

$$\dot{Q} = \dot{V}_y \cdot H_{\bar{U}}(DG) \quad (5.4a)$$

$$15 \frac{\text{kJ}}{\text{s}} = \dot{V}_y \cdot (37,41 \cdot 1000) \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3} \Rightarrow \dot{V}_y = 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 / \text{s}$$

$$\rho_y = \frac{P}{\Re T}; \quad P = 10^5 \text{ Pa}; \quad \Re = 8315 \text{ J} / \text{kmolK} \quad (5.4b)$$

$$\rho_y = \frac{10^5}{\frac{8315}{16} \cdot 300} = 0,64 \text{ kg} / \text{m}^3$$

$$\dot{m}_y = \rho_y \cdot \dot{V}_y \quad (5.4c)$$

$$\dot{m}_y = (0,64 \text{ kg} / \text{m}^3) \cdot (4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 / \text{s}) = 2,56 \cdot 10^{-4} \text{ kg} / \text{s}$$

$$\dot{m}_h = 17,16 \cdot \dot{m}_y = 17,16 \cdot 2,56 \cdot 10^{-4} = 4,41 \cdot 10^{-3} \text{ kg} / \text{s}$$

$$A_y = \pi r_y^2 = \pi (5 \cdot 10^{-3})^2 = 7,85 \cdot 10^{-5} m^2$$

$$A_h = \pi (R^2 - r_y^2) = \pi [(0,06)^2 - (0,005)^2] = 0,0112 m^2$$

$$v_y = \frac{\dot{V}_y}{A_y} = \frac{4 \cdot 10^{-4} m^3 / s}{7,85 \cdot 10^{-5} m^2} = 5,09 m / s$$

$$\dot{V}_h = \frac{\dot{m}_h}{\rho_h} = \frac{4,41 \cdot 10^{-3} kg / s}{1,162 kg / m^3} = 3,7 \cdot 10^{-3} m^3 / s$$

$$v_h = \frac{\dot{V}_h}{A_h} = \frac{3,7 \cdot 10^{-3} m^3 / s}{0,0112 m^2} = 0,34 m / s$$

Hesaplama sonucu yakıtın giriş hızı 5,09 m/s olarak bulunur.

Aynı şekilde Hız Giriş 2 → Hız Giriş” dönüşümü yapılır ve değerler girilir. Havanın da akış yönü yakıt ile aynı olduğu için boru içersinde karışım sonrası türbülanslı difüzyon alevi oluşması söz konusudur. Optimum karışımı sağlamak için hesaplanan hava giriş hızı ise 0,34 m/s dir. Kütle oranı dışındaki bütün değerler hava içinde aynı girilir. Ancak havanın yaklaşık %23’ü kütleli olarak O₂ den oluştuğu için oksijen bileşen kütle oranı 0,23 diğer bileşenler için ön karışimsız olduğu için sıfırdır.

Sınır koşullarının girilişinde $\kappa - \varepsilon$ hesaplamalı yoldan da hidrolik çap metoduyla bulunabilir. Özellikle boru içi akışlar için geçerli olan bu yöntemde $\kappa - \varepsilon$ türbülans şiddeti I ve hidrolik çap D_{hid} ile hesaplanır.

Türbülans şiddeti hız dalgalanmasının ortalama hıza oranıdır :

$$I = \frac{u'}{u} \quad (5.5a)$$

Şiddetten κ ’nın giriş değeri şöyle bulunur :

$$\kappa = \frac{3}{2} \left(\overline{Iu} \right)^2 \quad (5.5b)$$

Hidrolik çap D_{hid} ile de türbülans uzunluğu bulunur :

$$\ell = 0,07 \cdot D_{hid} \quad (5.5c)$$

Son olarak ε (disipasyon) ise :

$$\varepsilon = C_\mu^{\frac{3}{4}} \cdot \frac{\kappa^{\frac{3}{2}}}{\ell}; \quad (C_\mu = 0,09) \quad (5.5d)$$

ile elde edilir.

Çalışmada ortalama hız $\bar{u}$ 'dür. $I = \%10$ ise u' bu yüzdeye bağlıdır.

$$D_{hid} = 4 \cdot \left(\frac{\text{Akık Alanı}}{\text{Islak Çevre}} \right) \quad (5.5e)$$

$$D_{hid,y} = 4 \cdot \frac{\pi(0,005)^2}{2\pi \cdot 0,005} = 0,01 \text{ m}$$

$$D_{hid,h} = 4 \cdot \frac{\pi[(0,06)^2 - (0,005)^2]}{2\pi \cdot (0,06 + 0,005)} = 0,11 \text{ m}$$

3. Borunun çıkış kesiti için ise “Basınç Çıkışı → Basınç Çıkışı” dönüşümü yapılır. Gösterge basıncı atmosfere açık bir çıkış olduğu sıfırdır. Toplam sıcaklık da 300 K dir. κ ve ε için uygun olan küçük değerler girilir. Yanmanın tam verimle gerçekleştiği ve yanma sonu bütün bileşenlerin harcadığı varsayımıyla bileşen kütle oranları sıfırdır. Çıkış kesitinde geri akış olmaması istenmektedir. Böylelikle çıkışta girdap veya anormal bir sıcaklık, hız kontürü oluşmayacak ve istenen sonuçlara ulaşılabacaktır.

4. Duvarlar için ise “Duvar → Duvar” dönüşümü yapılarak ısı sınır koşulu olarak Standart duvar fonksiyonu ile de uyum gösteren bir seçim olan ısı akısı sınır koşulu seçilir.

Bütün bunlara yorum getirmek gerekir ise modelde kullanılan sınır koşulları en uygun ve gerçeğe yakın sonuçları vermek üzere mantıklı olarak seçilmiştir. Bu değerler kullanılarak yapılan simülasyonda yakınsama istendiği gibi gerçekleşmiş ve bütün değerler 10^{-3} ve enerji 10^{-6} nın altına düşmüştür.

Duvarlarda (boru cidarlarında) ısı akışı sınır koşulunun kullanılması durumunda q_w ısı akışının W / m^2 olarak hesaplanması gerekecektir.

$$\dot{q}_w = \rho c_p C_\mu^{\frac{1}{4}} \sqrt{\kappa} \frac{(T_p - T_w)}{T^+} \quad [W / m^2] \quad (5.6a)$$

ρ = İdeal gazlar için yoğunluk $[kg/m^3] = 1,162 \text{ kg/m}^3$ (1 atm, 25°C),

c_p = Özgül ısı = 1000 J / kgK,

$C_\mu = 0,09$,

κ_p = (P noktasındaki kinetik enerji) = $0,109 m^2/s^2$,

T_p = (P noktasındaki sıcaklık),

T_w = Cidar sıcaklığı,

T^+ = Cidar yakınında sıcaklık dağılımı (üniversal sıcaklık),

u^+ = Üniversal hız (m/s),

K = von Karman sayısı = 0,4187 ,

$\bar{E}$ = Cidar pürüzlülüğüne bağlı sabite = 9,793 ,

y_p^+ = 30 ile 500 arası koordinatlar,

μ = Kinematik viskozite = $1,72 \cdot 10^{-5} \text{ kg / ms}$,

$Pr_{T,t}$ = Türbülans akımı Prandtl sayısı = 0,9 ,

$Pr_{T,l}$ = Laminar akımı Prandtl sayısı,

P = Pee fonksiyonu,

$$T^+ = Pr_{T,t} \cdot (u^+ + P) \quad (5.6b)$$

$$\left. \begin{array}{l} u^+(y_p^+ = 30) = 13,57 \\ u^+(y_p^+ = 500) = 20,29 \end{array} \right\} u^+(Ort.) = 16,93$$

$$P = 9,24 \left[\left(\frac{Pr_{T,l}}{Pr_{T,t}} \right)^{0,75} - 1 \right] \cdot \left\{ 1 + 0,28 \cdot \exp \left[-0,007 \left(\frac{Pr_{T,l}}{Pr_{T,t}} \right) \right] \right\} \quad (5.6c)$$

$$Pr_{T,l} = \mu \frac{c_p}{k} \quad (5.6d)$$

$$Pr_{T,l} = \mu \frac{c_p}{k} = 1,72 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{1000}{0,0454} = 0,379; \quad Pr_{T,t} = 0,9 \Rightarrow \left(\frac{Pr_{T,l}}{Pr_{T,t}} \right) = 0,421 \Rightarrow P = -5,64$$

$$T^+ = 0,9 \cdot (16,93 - 5,64) = 10,16$$

$$\dot{q}_w (du \text{ var } 1,2,3) = 1,162 \cdot 1000 \cdot 0,09^{\frac{1}{4}} \cdot \sqrt{0,109} \cdot \frac{\Delta T}{10,16} \quad (W / m^2)$$

5.6. Sabit Özgül Isı İle Çözüm Başlangıcı

Sınır koşullarının belirlenmesinden sonra çözüm başlangıcına geçilir. Solve $\Rightarrow$ Initialize $\Rightarrow$ Initialize komutuyla açılan panelde CH₄ kütle oranı ve sıcaklık değiştirilir. $\kappa - \varepsilon$ ve hızlar için başlangıç değerleri girilir. CH₄ kütle oranı 0,10 ve 0,20 arası, sıcaklık 2000-3000 K arası değerlerde olmalıdır. Girişte sıfır yakıt olmaması ve yüksek sıcaklık bulundurulması yanmanın başlaması için gereklidir. Bu başlangıç koşulu metan ile hava karışımını kıvılcım etkisiyle ateşleyecektir. Bu başlangıç değerleri sonlu hız kinetiği kullanıldığı özellikle önem arz eder.

Solve $\Rightarrow$ Controls $\Rightarrow$ Solution $\Rightarrow$ Underrelaxation komutuyla Fluent / UNS da hata gevşetme parametreleri yüksek değerlere getirilir. Yanma modeli için gevşetme sayılarını azaltma çözümü stabil kılma açısından önemlidir. Burada deneme-yanılma yöntemiyle optimal gevşetme uygulanabilir. Eğer çözümde iterasyon yapılırken artıklar monoton artıyor veya çok az dalgalanma yapıyorsa, gevşetme faktörü artırılabilir. Ancak gevşetme faktörlerini artırma stabiliteyi yok edip, iraksamaya götürebilir. Çalışmada bütün kimyasal bileşen gevşetme faktörleri 0,9 alınmıştır. Ancak optimal çözüm de basınç için bu faktör 0,20 ile 0,25 ; κ için 0,65 ile 0,70; ε için 0,65 ile 0,70 alınmıştır. Böylelikle yakınsama sağlanması kolaylaştırılmıştır.

Solve $\Rightarrow$ Monitors $\Rightarrow$ Residuals komutuyla bileşenler, enerji, κ , ε , x , y gibi değerlerin yakınsaması istenir. Eğer ayrıklaştırılmış bütün korunum denklemleri bütün hücrelerde spesifik bir toleransa uyuyorsa, çözüm yakınsamıştır. Yakınsama da ise çözüm daha fazla iterasyonla değişmemektedir ve kütle ısı dengesi kabul edilebilir mertebedir. Artıklar kullanıcı için rehber niteliğindedir. Artıklar, korunum denklemlerindeki dengesizliği ölçerler. Bir ayrıklaştırma denklemi ϕ_p ele alırsa,

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (5.7a)$$

P noktasındaki artık şöyle ifade bulur :

$$R_p = a_p \phi_p - \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} - b \quad (5.7b)$$

Alandaki toplam artık ölçümü ise :

$$R = \sum_p |R_p| \quad (5.7c)$$

şeklinde yazılır.

Artık R alandaki hücre sayısına bağlıdır. Bu aynı zamanda ϕ 'nin büyüklüğü ile de değişir. Bu iki niceliğe bağlı artık $\bar{R}$ ise :

$$\bar{R} = \frac{R}{\sum_P |a_P \phi_P|} \quad (5.7d)$$

şeklinde yazılır. $\bar{R}_M$ M iterasyonundaki değeri anlatmak kaydıyla, iterasyon esnasında kaç tane büyüklük derecesinin artık tarafından düşürüldüğü görülür.

$$\hat{R} = \frac{\bar{R}}{\bar{R}_M} \quad (5.7e)$$

Süreklilik artışı ise alandaki kütle dengesizliğini temsil eder. Tanımı şöyledir :

$$R = \sum_P |hücredeki kütle dengesizliği| \quad (5.7f)$$

$$\bar{R} = \frac{R}{R_M} \quad (5.7g)$$

R_M burada M iterasyonundaki kütle dengesizliğini simgeler. Fluent için bu $M = 2$ dir. R_M ilk beş iterasyonda kütle dengesizliğinin en yüksek değeridir.

Genellikle kalitatif yakınsama 10^{-3} ile gerçekleşir. Entalpi artışı için bu değer 10^{-6} dır. Kimyasal bileşenlerde genellikle 10^{-5} 'in atına düşerler. Unutmamak gerekir ki yakınsamamış sonuçlar “yanıltıcı” olabilir. Yakınsama aşağıdaki metotlarla ivmelendirilebilir :

- İyi başlangıç değerleri girilmesiyle,
- Gevşetme faktörlerinin tam ve doğru seçimiyle,
- Çoklu ağ sisteminin kontrol ve Gauss Seidel çözücüsü koyulmasıyla.

Buradaki son aşama iterasyon sayısının girilmesiyle yakınsama yapılmasının beklenmesidir. Yanma modellemesinde iterasyon sayısı 500 seçilirse bütün nicelikler yakınsamaktadır.

Yakınsama bittikten sonra niceliklerin kontür olarak geometrideki dağılımını görmek için Display $\Rightarrow$ Contours komutu verilerek bunlar çizdirilir. [16]

5.7. Çözüm

Kullanılan yazılım olan Fluent'in sayısal algoritması ve çözüm prosedürüne göz atılırsa yazılımın matematiksel mantığı da daha iyi anlaşılır. Yöneten denklemler kütle, momentum ve enerji için yazılmaktadır. Yöneten denklemlerin standart formu şöyledir :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \right] + S_\phi \quad (5.8)$$

ϕ = Transport edilen skaler (enerji yada kütle oranları),

Γ = Difüzyon katsayısı,

S_ϕ = ϕ 'nin kaynağı.

Alan hücrelere ayrıklaştırılır. Fluent'de ağ sistemi yapısı oluşturulmalıdır. Oluşan ağ sisteminde noktalar, hücre merkezi ve yüzeyi bulunur. Bütün değişkenler (basınç, hız, skaler, özellikler) hücre merkezinde oluşturulur. Hız komponentleri kartezyen olup, iki boyutlu simetrik geometriler, silindirik hız bileşenleri kullanılır. Bir boyutlu ϕ skaleri korunum denklemi :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] + S_\phi \quad (5.9a)$$

şeklinde yazılır. Skaler denklemini P hücresi üzerinden entegre ettiğimizde ıraksama teoremi oluşur. Bu konveksiyon sonlu hacim formülasyonu için şöyle yazılır :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) dV = \int_A \rho u \phi dA \quad (5.9b)$$

Bir boyutlu alanda A yüzeyi doğu ve batı yüzeylerini bulundundur :

$$\int_A \rho u \phi dA = (\rho u \phi A)_e - (\rho u \phi A)_w \quad (5.9c)$$

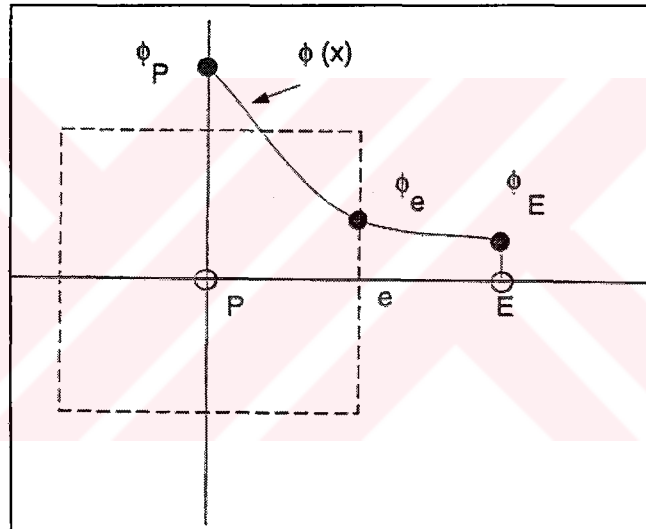
Difüzyon terimi olarak :

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_w \quad (5.9d)$$

ve kaynak terimi olarak :

$$S_\phi \Delta V \quad (5.9e)$$

elde edilir. İlerleyebilmek için yüzey değerleri ϕ_E , ϕ_W , P , E , W noktasındaki ϕ değerleri şeklinde yazılır. Doğu, batı (e, w) yüzündeki gradyenlerini ϕ 'nin hücre değerleri şeklinde yazmak gerekir.



Şekil 5.1 Hücre modeli

Farklı şemalar tasarlanabilir ; birinci derece şema, kuvvet kanunu şeması, ikinci dereceden şemadır. Birinci derece ve kuvvet kanunu şemaları çözüm tamlığı açısından kullanılır. Bunlar stabil olup, tamlık ikinci derece şema kullanılarak sınanabilir. Çözüm tamlığı aynı zamanda yüksek gradyen olan ağ sistemi kısımlarının temizlenmesiyle de sağlanır. ϕ değişkeninin korunumu için şu adımlar atılmalıdır :

- Her hücrede korunum denkleminin entegrasyonu,
- Yüzey değerlerinin hücre merkezi değerleri olarak hesaplanması,

○ Bu terimlerin toplanması, sonuç ayırıklaştırma denklemi böylece :

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (5.10)$$

halini alır, buradan nb P hücresinin komşu hücrelerini temsil etmektedir.

İki boyutlu ağ sistemlerinde P 'nin dört komşusu (E, W, N, S) bulunur. Komşu hücre sayısı hücre şekline ve ağ sistemi topolojisine bağlıdır. Bu sonuç denklemi her transport edilecek değişken için (hız, sıcaklık, türbülans vb...) yazılır. Doğrusal olmayan problemlerde a_p ve a_{nb} çözülecek ϕ değişkenine bağlıdır. Bunlar ayrıca sıcaklık, kütle oranı gibi diğer transport değişkenlerine de bağlıdır. Bu durumda yöneten denklemler iterativ yolla çözülür. ϕ 'deki değişimi gözlemek bu proseste yakınsama olup olmadığını anlamak açısından önemlidir. Bu şöyle yapılır :

$$\phi^N = \phi^{N-1} + f_\phi \cdot (\phi^{Hesaplanan} - \phi^{N-1}) \quad (5.11)$$

Burada f_ϕ gevşetme faktörüdür. ($0 < f_\phi < 1$) N ve $N-1$ mevcut ve bir önceki iterasyonlardır. Örneğin $f_\phi = 0,2$ olması bir önceki iterasyona göre ϕ 'de %20 değişim yaratır.

Navier-Stokes denklemleri basıncı açık bir şekilde sağlamaz. Fluent bu nedenle Simple algoritması kullanılır. Momentum denklemi hız denklemi olarak görülür. Basınç denklemi ise süreklilik denkleminin türetilir. Aktüel prosedür; momentum ve süreklilik denklemlerinin ayırıklaştırılmış formlarını, ayırıklaştırılmış basınç düzeltme denklemi olarak manipule eder. Bu denklem, basınç güncelleyerek ve kütleli debiyi düzelterek kütle dengesini sağlamış olur.

İterativ çözüm prosedüründe ise Navier-Stokes denklemlerinin doğrusal olmamasından dolayı her korunum denklemi ardarda ayrı ayrı çözülürler. Sırası şöyledir:

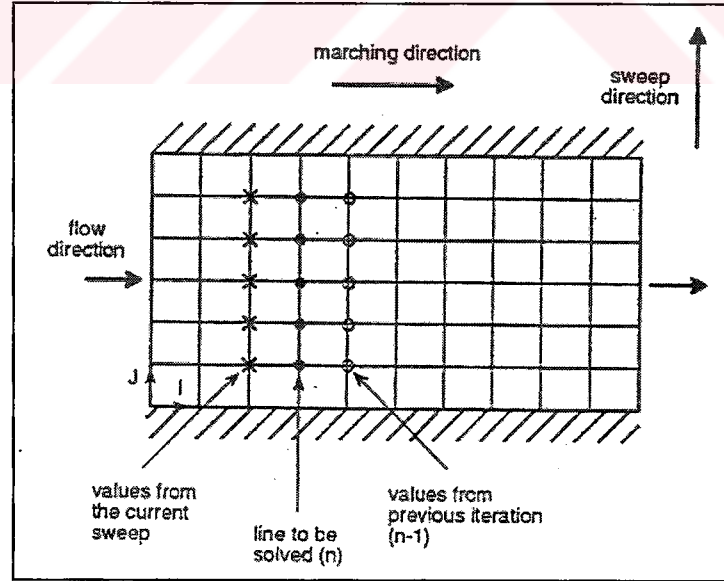
1. u, v, w hızları için momentum denklemleri çözülür :

2. Basınç düzeltme denklemleri çözülür.

▪ Basınç güncellenir,

- Yüzey kütleli debi hızı güncellenir.
- 3. Enerji denklemleri çözülür.
- 4. Bileşen denklemleri çözülür.
- 5. Türbülans denklemleri çözülür.
- 6. Diğer skaler denklemleri çözülür.
- 7. Özellikler (ρ, μ_{eff}, c_p) güncellenir.
- 8. Yakınsama kontrol edilir.
- 9. Gerekliyorsa tekrar edilir.

Ayrıklaştırılmış denklemler için çözümde verilen denklemlerle gerçekleşir. İterativ tekniklerin kullanılmasındaki neden daha az bellek gereksinimi olması ve doğrusal olmayan problem çözümünde daha verimli olmalarıdır. Bunlar, Line Gauss Seidel (LGS) ve Point Gauss Seidel (PGS) metodlarıdır. Fluent (LGS) metodunu uygular. Birinci adımı süpürme yönü (dikey eksen) boyunca bir satır veya sütundaki denklemleri çözmektir. İkinci adım ise alandaki bütün hücreleri görmek açısından marş yönü (yatay eksen) boyunca bir satır veya sütuna gitmektir.



Şekil 5.2 LGS metodu

Her hat boyunca şu denklem yazılır :

$$a_P \phi_P^N = A_N \phi_N^n + A_S \phi_S^n + [A_E \phi_E^{n-1} + A_W \phi_W^{n-1} + b] \quad (5.12)$$

n , $n-1$ mevcut ve bir önceki iterasyondur. P , N , S tridiagonal matriksin terimidir.

Bir hat boyunca ϕ elde etmek için tridiagonal matriks algoritması kullanılır.

Fluent / UNS ise Point Gauss Seidel (Nokta GS) metodunu kullanır. P noktasındaki ϕ değeri

$$\phi_P^N = \frac{\left(\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} \right)^{n-1} + b}{a_p} \quad (5.13)$$

ile ifade edilir. Bu metotta komşu hücre sayısı hakkında bir kabul yapılmaz.

Çoklu ağ sistemi çözücü ise LGS ve PGS metotlarının uzak nokta ve sınırların etkilerini dönüştürmede daha az verimli olmalarından dolayı kullanılan bir metottur.

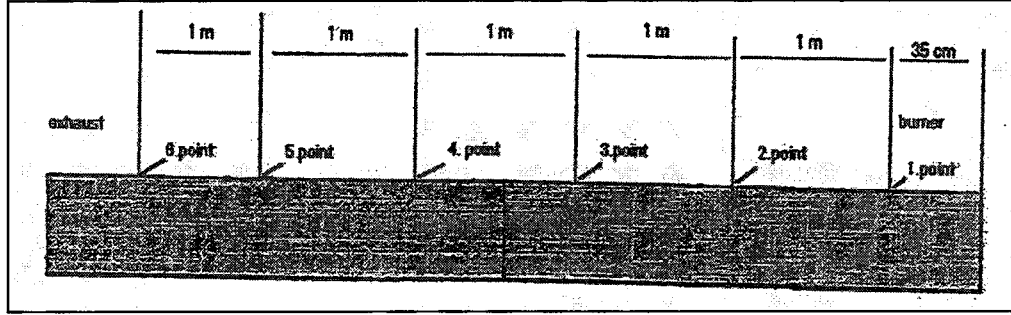
- Çok sayıda hücre var ise,
- Hücre boyutunda $\Delta x / \Delta y > 20$ gibi bir oran varsa,
- Isı iletkenliğinde büyük farklar var ise,

Çoklu ağ sistemi çözücü tercih edilir. Bu metod ayrıca Gauss Seidel çözücünün yakınsamasını da hızlandırır. [16]

6. SONUÇLAR

6.1. Test Sonuçları

Doğalgaz ile yanma test sonuçları radyant ısıtıcı boyunca belli giriş basınçlarında 6 noktada kıvılcımdan 15 dakika sonra ölçülen sıcaklıklardan ibarettir. Aralıklar 1m verilmiş olup Şekil 6.1’de görülmektedir.



Şekil 6.1 Boru yüzeyindeki ölçüm noktaları

Test ölçüm sonuçları Tablo 6.1’de görülmektedir.

Tablo 6.1 Test ölçüm sonuçları

Test	Pressure Inlet (mBar)	%vol O ₂	%vol CO ₂	1.point [°C]	2.point [°C]	3.point [°C]	4.point [°C]	5.point [°C]	6.point [°C]	λ
1(LPG)	2.5	18.6	1.54	255	240	215	195	180	175	9.08
2(NG)	24	18.9	0.068	200	180	165	150	140	135	10.45
3(NG)	20	19.0	0.66	200	185	170	150	145	145	11.00

6.2. Çalışmaya İlişkin Sonuçlar

Metanın yanma modellemesinde elde edilen sonuçlar ile deney sonuçları karşılaştırılmasını yapmadan önce Fluent 6.0’da yapılan simülasyonun çalışmada yarattığı güçlükler şunlardır

- Geometride çap ve uzunluk çok oransız olduğu için ideal yanma ve ideal test sonuçlarını elde etmek imkansızdır.
- Çalışmada cidarlardaki sıcaklıklar karşılaştırılacağından sınır koşulu olarak “ısı akısı” verilmiştir. Ancak bu koşul sıcaklığın girişten çıkışa doğru artmasına neden olamaktadır.
- Bu sıcaklık artışının önüne geçmek mümkün gözükmesede sıcaklığın artışının şiddetini kırmak için bir dizi kabul yapılarak önlemler alınabilir.

Çalışmada gerçeğe yakın sonuç almada en etkili büyüklük yakıt ve havanın sınır koşullarında verilen giriş hızlarıdır. Daha önce bu hızlar 15 kW’lık bir brülör için yakıtın ısıl değerinden yararlanılarak bulunmuştur. Elde edilen bu hızlar ile yakıt ve hava girişte birbirine nüfus etmektedir. Ancak, yanma sonu ürünlerinin sıcaklığı çıkışta beklenenden çok yüksek çıkmaktadır.

Bu durumun telafisi iki şekilde mümkündür :

a) Brülör kapasitesini (~gücünü) arttırmak,

b) Hava fazlalık katsayısını yükseltmek,

Bu seçenekler ayrı ayrı uygulanabileceği gibi, her ikisi birden de uygulanabilir.

Bu yöntemlerle de sıcaklık artışının önüne tam geçilmesede çıkış kesitindeki sıcaklık hiçbir önlem alınmadan elde edilen sonuçlara kıyasla düşüktür.

Hava fazlalık katsayısı (λ)’ın artırılmasıyla brülöre giren hava miktarı debi olarak artmakta ve bu da beraberinde havanın hızının artışını sağlamaktadır. Hızlı giren hava yakıtla daha iyi karışır ve üniform bir sıcaklığa yaklaşılır.

Brülör gücünün artırılmasıyla da yakıtın ve havanın giriş hızı artar. Her ikisi birarada kullanılırsa örneğin 90 kW güç ve $\lambda = 2,0$ elde edilen sonuçlar daha tatmin edici olmaktadır.

Brülör gücü sabit tutulup hava fazlalık katsayısı arttırılırsa yakıt hızı aynı kalır ancak hava hızı artar. Bu bağlamda tek adımlı yanmada :

a. $\lambda = 1,0$ $Q = 15 \text{ kW}$ (normal durum)

b. $\lambda = 1,6$ $Q = 45 \text{ kW}$

c. $\lambda = 2,0$ $Q = 90 \text{ kW}$

d. $\lambda = 1,0$ $Q = 45 \text{ kW}$

e. $\lambda = 3,0$ $Q = 15 \text{ kW}$

durumları denenmiştir.

İki adımlı yanmada ise :

a. $\lambda = 1,0$ $Q = 15 \text{ kW}$

durumu denenmiştir.

Elde edilen sonuçlar basınç, sıcaklık, $\kappa - \varepsilon$ türbülans değerleri, yakıt ve oksidant konsantrasyonları olmaktadır. Sıcaklıklar cidar boyunca ve eksen hattında uzunluğa bağlı olarak grafik halinde gösterilmiştir.

Deneyde ölçülen değerler Al borunun üst yüzeyinden alınan değerlerdir. Ancak simülasyondaki sıcaklık kontürleri boru içindeki değerler olup Al'un ısıl geçirgenliği sonucu dış ceperde ölçülebilen değerler değildir. Ayrıca deney sonuçları farklı λ 'lara göre elde edilmiştir. Cidarların verilen ısı akısı sınır koşulu her cidar için aynı olup ΔT sıcaklık farkı yardımıyla bulunabilir.

Yanma olayını belirleyen faktörlerin başında yakıtın kendisi yanma sistemi ve yakıt-hava karışımı gelmektedir. Bu bağlamda yanma sisteminin iyileştirilmesi radyant boru içindeki egzoz gazlarının hareketi ile ilgilidir. Yanmış gazların radyant boru içinde daha uzun süre kalmaları radyant yüzeye olan ısı geçişini daha da arttıracak ve sistemin verimi de artacaktır.

Sıcaklığın cidar boyunca sabit tutulması yani sıcaklığın 300 K olarak sınır koşulu verilmesi ile deney sonuçları ile mukayeseye izin vermez. Ancak sıcaklık çıkış kesitinde azalmaya başlayacak ve gazlar boruyu 300 K'de terkedecektir.

Orijinal durumda (15 kW ve $\lambda = 1,0$) sıcaklık profili çok farklı olabilir ama gerçeğe yakın olduğu söylenemez.

Metan yanması teorik olarak incelenirken, yanma ürünlerinin sağlıklı tesbiti ve doğru büyüklükler bulabilmek için seçilen reaksiyon mekanizma sayısının olabildiğince çok olması gerekir. Ancak bilgisayarla hesaplanma zamanı oransal olarak oldukça arttıran bu sayının en aza indirgenmesi önemlidir. O yüzden çalışmada 1 ve 2 adımlı mekanizmalarla yetinilmiştir.

Çalışmada brülör gücü 100 kW'ın üzerine çıkarılmıştır. Böylece buna bağlı hızlar da belli değerlerin altında kalmaktadır. Hava fazlalık katsayısıda 3'ü geçmemektedir.

Bunun nedeni çok arttırılmış veriler ile de çözümde yakınsama problemi yaşanmakta ayrıca istenen sonuçlara ulaşılmamaktadır.

Sonuç olarak çalışmada deney sonuçlarına ulaşılammış olursa da brülör gücünü ve hava fazlalık katsayısını arttırma yoluna giderek cidarın altında kalan ve cidardaki sıcaklıkları giriş kısmında düşürme başarılıdır.

Tablo 6.2 Çalışmanın özeti

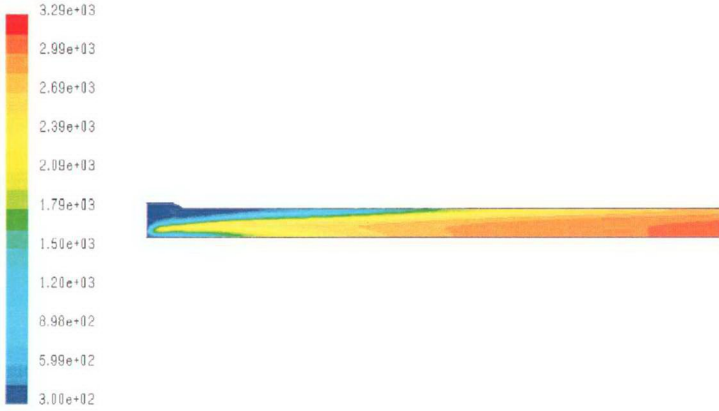
Adım Sayısı	$\lambda, \dot{Q}$ (kW)	AF_m	v_y (m/s)	v_h (m/s)	Sınır koşulu
1	$\lambda = 1$ $\dot{Q} = 15$	17,16	5,09	0,34	Isı akısı
1	$\lambda = 1$ $\dot{Q} = 45$	17,16	15,3	1,01	Isı akısı
1	$\lambda = 1,6$ $\dot{Q} = 45$	27,46	15,0	1,62	Isı akısı
1	$\lambda = 2,0$ $\dot{Q} = 90$	34,32	30,06	4,06	Isı akısı
1	$\lambda = 3,0$ $\dot{Q} = 15$	51,48	5,09	1,01	Isı akısı
1	$\lambda = 1$ $\dot{Q} = 15$	17,16	5,09	0,34	Sıcaklık
2	$\lambda = 1,0$ $\dot{Q} = 15$	17,16	5,09	0,34	Isı akısı

KAYNAKLAR

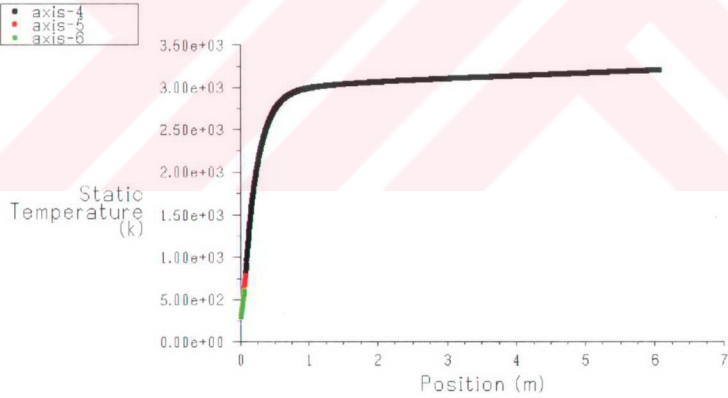
- [1] **Gürsel, S.**, 2001. Doğalgaz yanma sistemlerinin incelenmesi, Bitirme çalışması, İTÜ Makine Fakültesi, İstanbul.
- [2] **TMMOB**, 1998. Sanayi Kazanları ve Ek Donatım İşletme El Kitabı, Yayın No.110, Ankara.
- [3] **Ayçiçek, E.**, 2001. Doğalgaz yanma sistemlerinde geometrik özelliklerin emisyonlara etkisi, Bitirme Çalışması, İTÜ Makine Fakültesi.
- [4] **Kuo. K.K.Y.**, 1986. Principles of Combustion.
- [5] **Özdemir, T.**, 1999. Laminer metan hava difüzyon alevinin modellenmesi, Yüksek Lisans Tezi, İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.
- [6] **Kurtili, O.**, 2003. Simulation of radiant heating system using CFD, Yüksek Lisans Tezi, İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.
- [7] **Bradley, J.N.**, 1974. (Çeviren Borat, O.) Alev ve yanma, İTÜ, İstanbul.
- [8] **Chomiak, J.**, 1990. Combustion, a study in teori, fact and application, Abacus Press, New York.
- [9] **Civaoğlu, İ.**, 1963. Alev ve Yanma Kinetiği, İstanbul.
- [10] **Seebass, R.**, Numerical Approaches to Combustion Modelling.
- [11] **Soruşbay, C.**, 2002. Combustion ders notları, İTÜ, İstanbul.
- [12] **Jaberi, F.A. and James, S.**, 2000. Large Scale Simulation of Two Dimentional Nonpremixed Methane Jet Flame, Combustion and Flame, **12**, 470.
- [13] **Malalasekera, W. and Versteeg, H.K.**, 1995. An Introduction to CFD. Longman Press, Essex.
- [14] **Fluent/UNS & Rampant 4.2**, 1997. User's Guide, Vol : 2.
- [15] **Patankar, S. V.**, 1980. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Mc Graw Hill, New York.
- [16] **Fluent Software Training**, 1996. CFD Step by Step, An Overview of the CFD Solution Process. Fluent Inc.
- [17] **www.fluent.com**
- [18] **Fluent Tutorial 7**, 1997. Fluent Inc

EKLER

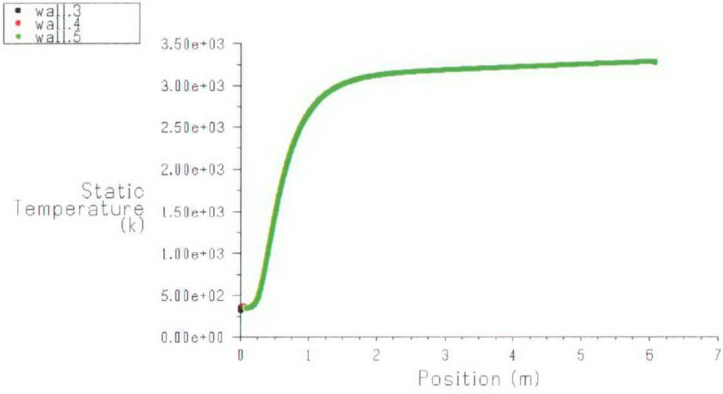
EK I	Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW, Sabit Isı Akısı)
EK II	Eksen Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) (Sabit Isı Akısı)
EK III	Cidar Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) (Sabit Isı Akısı)
EK IV	Türbülans Kinetik Enerjisi (m^2 / s^2)
EK V	Türbülans Kinetik Enerjisi Disipasyonu (m^2 / s^3)
EK VI	Çıkış Kesitindeki Türbülans Kinetik Enerjisi Disipasyonu (m^2 / s^3)
EK VII	Hız Kontürleri (m/s) (Hava Hızı = 0,34 m/s , Yakıt Hızı = 5,09 m/s)
EK VIII	Çıkış Kesitindeki Hız Kontürleri (m/s) (Hava Hızı = 0,34 m/s , Yakıt Hızı = 5,09 m/s)
EK IX	Giriş Kesitindeki Basınç Değerleri (Pa)
EK X	Çıkış Kesitindeki Basınç Değerleri (Pa)
EK XI	Metan Gazı Konsantrasyonu Değişimi [] ($\lambda = 1$)
EK XII	Oksijen Gazı Konsantrasyonu Değişimi [] ($\lambda = 1$)
EK XIII	Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 45$ kW, Sabit Isı Akısı)
EK XIV	Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1,6$, $\dot{Q} = 45$ kW, Sabit Isı Akısı)
EK XV	Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 2$, $\dot{Q} = 90$ kW , Sabit Isı Akısı)
EK XVI	Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 3$, $\dot{Q} = 15$ kW , Sabit Isı Akısı)
EK XVII	Eksen Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) ($\lambda = 3$, $\dot{Q} = 15$ kW, Sabit Isı Akısı)
EK XVIII	Cidar Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) ($\lambda = 3$, $\dot{Q} = 15$ kW, Sabit Isı Akısı)
EK XIX	Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW , Sabit Sıcaklık)
EK XX	Eksen Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW , Sabit Sıcaklık)
EK XXI	Cidar Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW, Sabit Sıcaklık)
EK XXII	İki Adımlı Yanmada Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW , Sabit Isı Akısı)



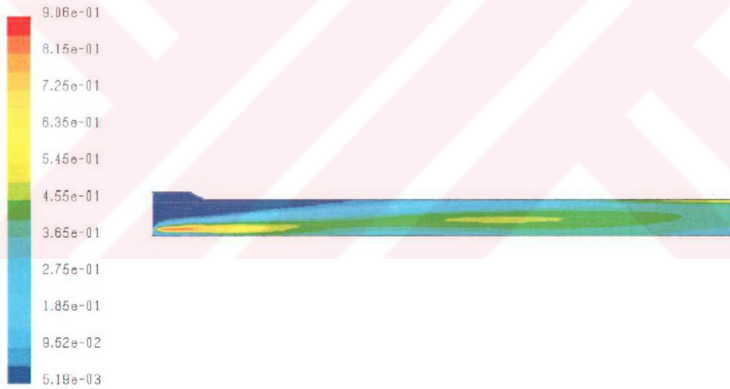
EK I – Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW, Sabit Isı Akısı)



EK II – Eksen Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) (Sabit Isı Akısı)



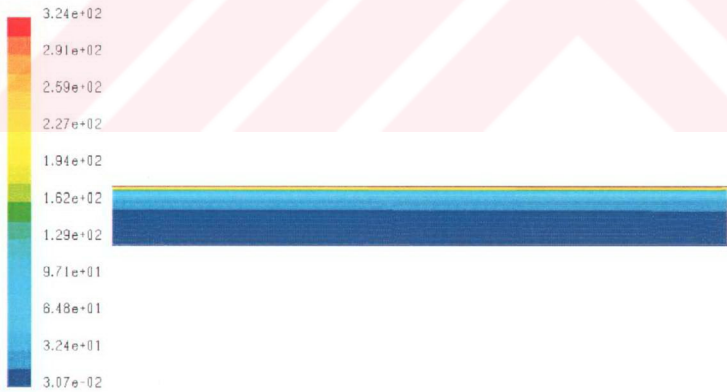
EK III – Cidar Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) (Sabit Isı Akısı)



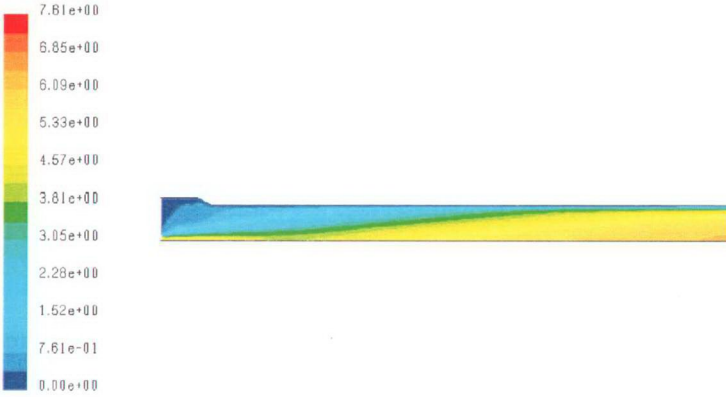
EK IV –Türbülans Kinetik Enerjisi (m^2 / s^2)



EK V – Türbülans Kinetik Enerjisi Disipasyonu (m^2 / s^3)



EK VI – Çıkış Kesitindeki Türbülans Kinetik Enerjisi Disipasyonu (m^2 / s^3)

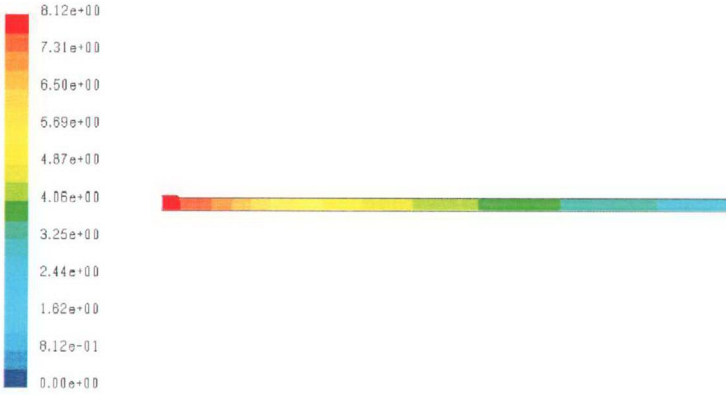


EK VII – Hız Kontürleri (m/s) (Hava Hızı = 0,34 m/s , Yakıt Hızı = 5,09 m/s)



EK VIII – Çıkış Kesitindeki Hız Kontürleri (m/s)

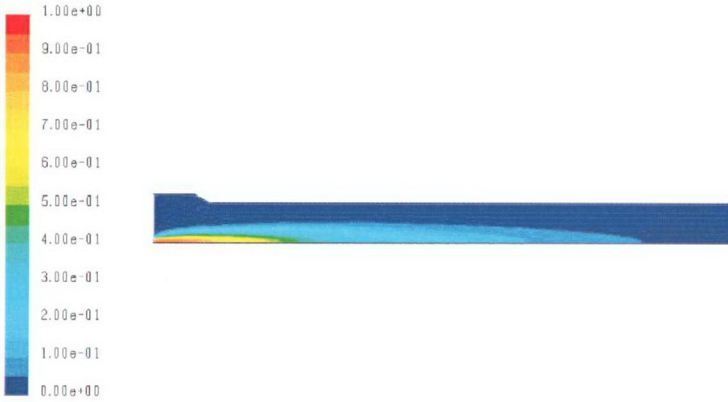
(Hava Hızı = 0,34 m/s , Yakıt Hızı = 5,09 m/s)



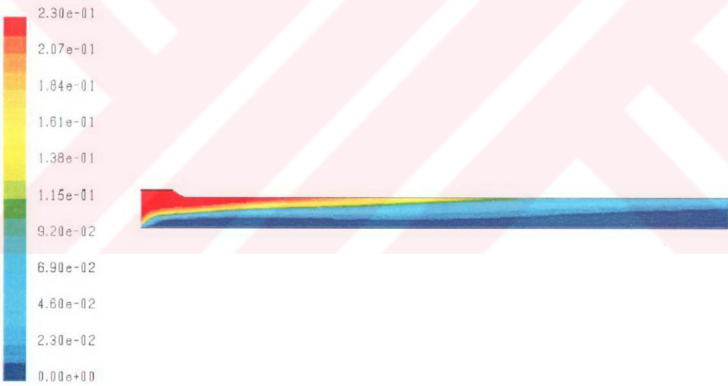
EK IX – Giriş Kesitindeki Basınç Değerleri (Pa)



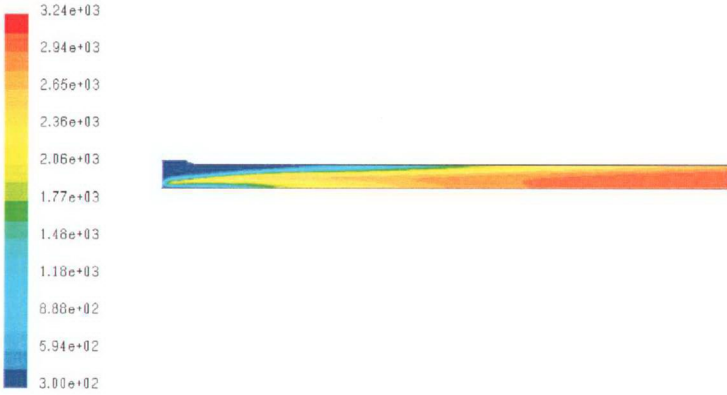
EK X – Çıkış Kesitindeki Basınç Değerleri (Pa)



EK XI – Metan Gazı Konsantrasyonu Değişimi [] ($\lambda = 1$)



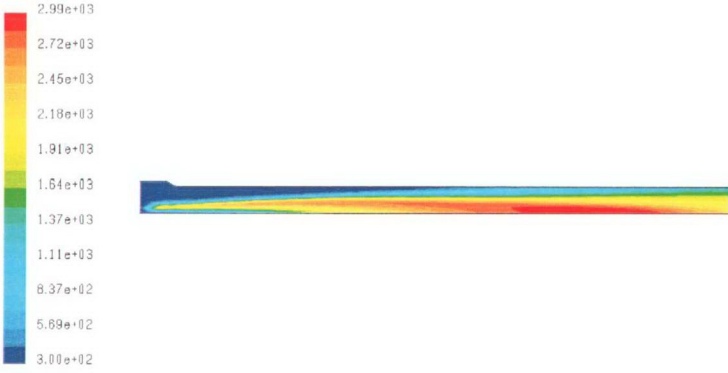
EK XII – Oksijen Gazı Konsantrasyonu Değişimi [] ($\lambda = 1$)



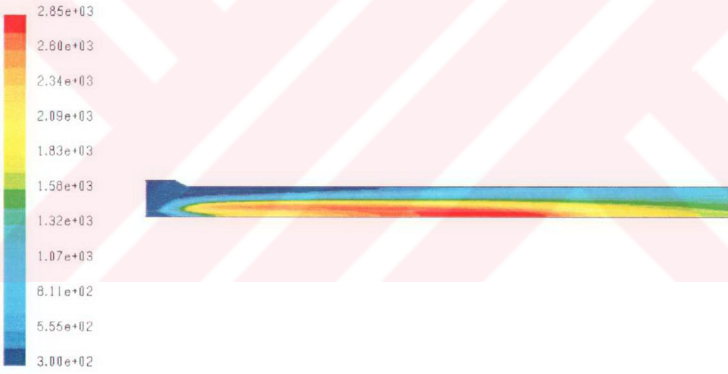
EK XIII – Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 45$ kW, Sabit Isı Akısı)



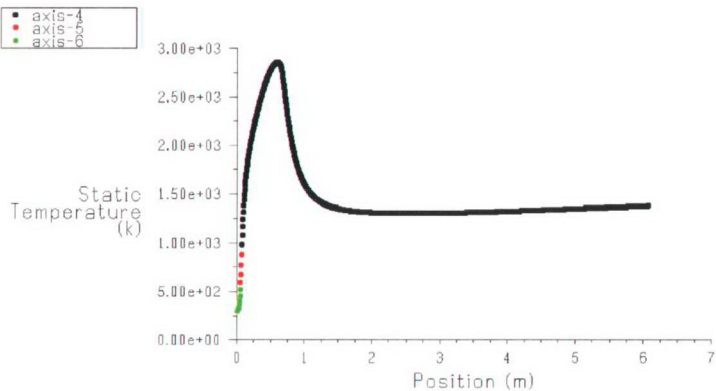
EK XIV – Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1,6$, $\dot{Q} = 45$ kW, Sabit Isı Akısı)



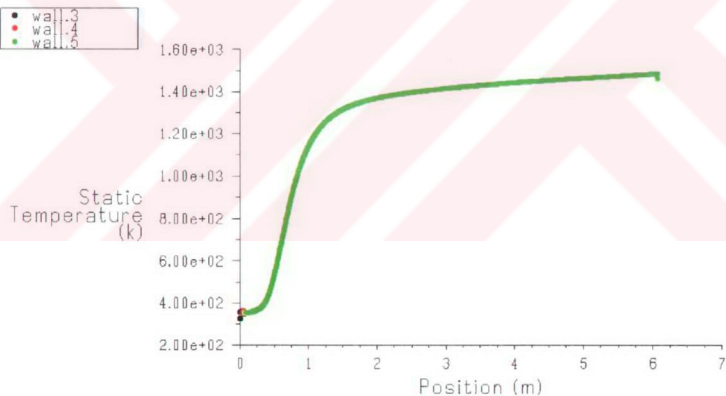
EK XV – Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 2$, $\dot{Q} = 90$ kW , Sabit Isı Akısı)



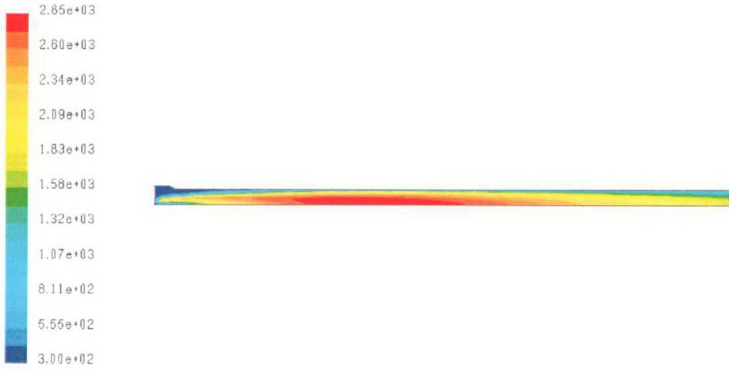
EK XVI - Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 3$, $\dot{Q} = 15$ kW , Sabit Isı Akısı)



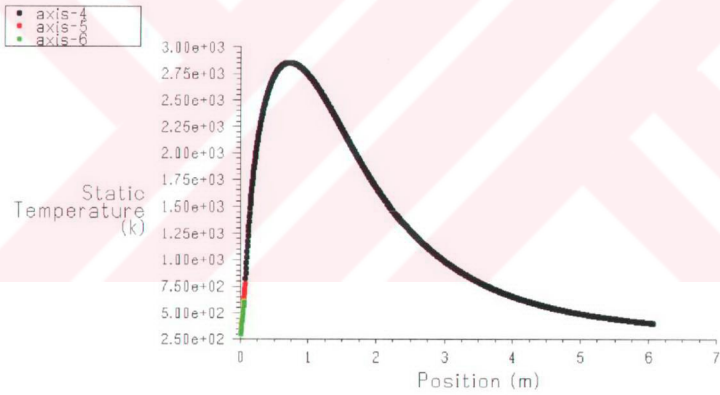
EK XVII – Eksen Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) ($\lambda = 3$, $\dot{Q} = 15$ kW, Sabit Isı Akısı)



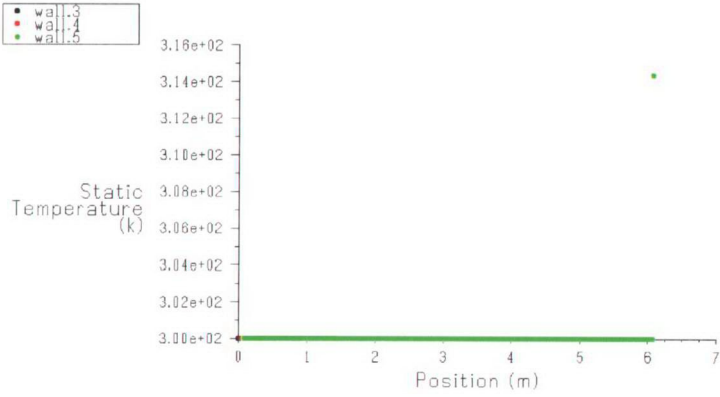
EK XVIII – Cıdar Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) ($\lambda = 3$, $\dot{Q} = 15$ kW, Sabit Isı Akısı)



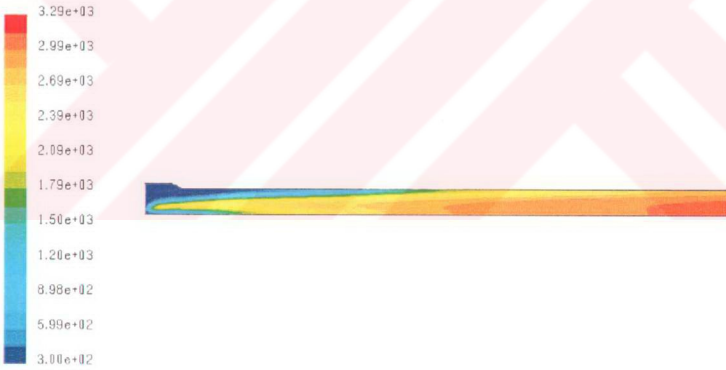
EK XIX –Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW , Sabit Sıcaklık)



EK XX – Eksen Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW , Sabit Sıcaklık)



EK XXI – Cidar Boyunca Sıcaklık Değerleri (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW, Sabit Sıcaklık)



EK XXII – İki Adımlı Yanmada Sıcaklık Dağılımı (K) ($\lambda = 1$, $\dot{Q} = 15$ kW , Sabit Isı Akısı)

ÖZGEÇMİŞ

Sertaç Çadırcı, 27/06/1978 tarihinde İstanbul'da dünyaya geldi. 1984 yılında İstanbul'un Göztepe semtindeki İlhami Ahmed Örnekal İlkokulu'nda eğitim öğretim hayatına başladı. Ortaokulu ve liseyi St. Georg Avusturya Lisesi'nde tamamladı. 1997 yılında üniversite giriş sınavında Yıldız Teknik Üniversitesi Makine Mühendisliği Bölümünü kazandı. 2001 yılında mezun oldu ve aynı sene İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nün Otomotiv programına kabul edildi. Yüksek lisans eğitiminde mühendislikte simülasyon konusuna ilgi duydu ve bu alanda bir tez çalışmasıyla 2004 yılında yüksek lisansını tamamladı.