

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**LABORATUVAR ÖLÇEKLİ YERALTINDA KÖMÜR GAZLAŞTIRMA
REAKTÖRÜNÜN HESAPLAMALI AKIŞKANLAR
DİNAMİĞİ İLE YAPAY GAZ ÜRETİMİNİN ANALİZİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Engin Deniz CANBAZ

Makina Mühendisliği Anabilim Dalı

Isı-Akışkan Programı

HAZİRAN 2018

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**LABORATUVAR ÖLÇEKLİ YERALTINDA KÖMÜR GAZLAŞTIRMA
REAKTÖRÜNÜN HESAPLAMALI AKIŞKANLAR
DİNAMİĞİ İLE YAPAY GAZ ÜRETİMİNİN ANALİZİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Engin Deniz CANBAZ

(503161114)

Makina Mühendisliği Anabilim Dalı

Isı-Akışkan Programı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Mesut GÜR

HAZİRAN 2018

İTÜ, Fen Bilimleri Enstitüsü'nün 503161114 numaralı Yüksek Lisans Öğrencisi Engin Deniz CANBAZ, ilgili yönetmeliklerin belirlediği gerekli tüm şartları yerine getirdikten sonra hazırladığı “LABORATUVAR ÖLÇEKLİ YERALTINDA KÖMÜR GAZLAŞTIRMA REAKTÖRÜNÜN HESAPLAMALI AKIŞKANLAR DİNAMİĞİ İLE YAPAY GAZ ÜRETİMİNİN ANALİZİ” başlıklı tezini aşağıda imzaları olan jüri önünde başarı ile sunmuştur.

Tez Danışmanı : **Prof. Dr. Mesut GÜR**
İstanbul Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri : **Prof. Dr. Nurdil ESKİN**
İstanbul Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Hasan Rıza GÜVEN
İstanbul Üniversitesi

Teslim Tarihi : **2 Mayıs 2018**

Savunma Tarihi : **7 Haziran 2018**





Sevgili Dedem Sermet IŞIK'a,



ÖNSÖZ

Bu yüksek lisans tez çalışması, TÜBİTAK tarafından desteklenen “Ülkemiz kömürleri için yeraltında kömür gazlaştırma teknolojisinin geliştirilmesi” başlıklı proje dahilinde hazırlanan çalışmalar ve edinilen deneyimler üzerine geliştirilmiştir (Proje No: 113M0380).

Öncelikle bu önemli projede çalışmama ve değerli mühendislik tecrübeleri edinmeme imkan veren, bana duyduğu güven ile çalışmamın her aşamasında destek olan değerli hocam ve danışmanım Sayın Prof. Dr. Mesut Gür’e teşekkürlerimi sunarım. Proje ve tez çalışması süresince değerli bilgi, görüş ve önerilerini benden esirgemeyen ve her daim yol gösteren Sayın Prof. Dr. Nurdil Eskin’e teşekkürlerimi borç bilirim.

Bu çalışmanın temellerini atan, çalışma azmi ve mesleki yaklaşımlarıyla bana örnek olan değerli ekip arkadaşlarım ve dostlarım Mak. Yük. Müh. Oğuz Büyüksirin’e, Mak. Yük. Müh. Ünal Altıntaş’a, Mak. Yük. Müh. Ahmet Yıldız’a ve Mak. Yük. Müh. Olgu Yıldırım’a teşekkür ederim.

Son olarak, her an yanımda olarak bana güç ve umut veren sevgili Cansu Batır’a ve bugünlere gelmemi sağlamak için her türlü fedakarlığı gösteren kıymetli aileme en derin duygularıyla teşekkür eder ve şükranlarımı sunarım.

Haziran 2018

Engin Deniz CANBAZ
(Makina Mühendisi)



İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖNSÖZ	vii
İÇİNDEKİLER	ix
KISALTMALAR	xi
SEMBOLLER	xiii
ÇİZELGE LİSTESİ	xv
ŞEKİL LİSTESİ	xvii
ÖZET	xix
SUMMARY	xxi
1. GİRİŞ	1
1.1 Tezin Amacı	3
1.2 Yeraltında Kömür Gazlaştırma Tekniği	4
1.2.1 YKG teknolojisinin tarihi	4
1.2.2 İşlem detayları ve kimyası	5
1.2.3 Uygun yatak seçimi	7
1.2.4 Kuyular arası bağlantı yöntemleri	9
1.3 Literatür Araştırması	12
1.3.1 Deneysel çalışmalar	12
1.3.1.1 Pilot ölçekli saha çalışmaları	12
1.3.1.2 Laboratuvar ölçekli çalışmalar	14
1.3.2 Matematiksel modelleme çalışmaları	17
1.3.2.1 Kinetik modeller	19
1.3.2.2 Denge modelleri	24
1.3.2.3 Hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) analizleri	25
2. YKG KİNETİK MATEMATİK MODELİ	27
2.1 Modelin Tanıtımı ve Yapılan Kabuller	27
2.2 Korunum Denklemleri ve Yardımcı Denklemler	28
2.2.1 Toplam kütle korunumu	28
2.2.2 Momentum korunumu	29
2.2.3 Türbülans modeli	30
2.2.4 Enerji korunumu	31
2.2.5 Bileşenlerin kütle korunumu	33
2.2.5.1 Gaz fazındaki bileşenlerin kütle korunumu	33
2.2.5.2 Katı fazındaki bileşenlerin kütle korunumu	36
2.2.6 Kimyasal reaksiyonlar	37
2.2.6.1 Kuruma	40
2.2.6.2 Piroliz	40
2.2.6.3 Heterojen reaksiyonlar	41
2.2.6.4 Homojen reaksiyonlar	41
2.2.7 Yardımcı denklemler	42
2.2.7.1 Gözeneklilik	42
2.2.7.2 Geçirgenlik	43

2.2.7.3 Mükemmel gaz yasası	43
2.2 ANSYS Fluent Paket Programı ile Çözüm Metodu	43
3. NUMERİK SONUÇLAR, NUMERİK SONUÇLARIN DOĞRULANMASI VE	
TARTIŞMA	47
3.1 Laboratuvar Ölçekli Yeraltında Kömür Gazlaştırma Deneyi.....	47
3.1.1 YKG deney düzeneği	47
3.1.2 Deneysel çalışma.....	51
3.2 Analiz Geometrisi.....	53
3.3 Çözüm Açısından Bağımsızlık Testi	53
3.4 Numerik Sonuçlar.....	55
3.4.1 Deneysel çalışma sonuçlarıyla karşılaştırma.....	56
3.4.2 Katı bileşenlerin değişimi ve kavite büyümesi	57
3.4.3 Sıcaklık dağılımı	60
3.4.4 Kimyasal reaksiyon bölgeleri ve hızları.....	61
3.4.5 Gaz bileşenlerin dağılımı	66
4. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	71
KAYNAKLAR.....	73
EKLER	79
ÖZGEÇMİŞ.....	97

KISALTMALAR

CRIP	: Kontrollü Tepkime Besleme Noktası
HAD	: Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği
IGCC	: Entegre Gazlaştırma Kombine Çevrimi
LVW	: Bağlantılı Düşey Kuyular
SDS	: Yüksek Eğimli Kömür Damarı
YKG	: Yeraltında Kömür Gazlaştırma
UDF	: Kullanıcı Tanımlı Fonksiyon
UDS	: Kullanıcı Tanımlı Değişken
UDM	: Kullanıcı Tanımlı Kayıt



SEMBOLLER

α	: Gerçirgenlik
γ	: Gözeneklilik
ε	: Türbülans enerji dissipasyonu
μ	: Dinamik viskozite
ν	: Kinematik viskozite
ρ	: Yoğunluk
A	: Arrhenius ifadesi sabiti
D	: Difüzyon katsayısı
E	: Toplam enerji, Aktivasyon enerjisi
g	: Yerçekimi ivmesi
h	: Entalpi
H	: Reaksiyon enerjisi
J	: Bileşen difüzyon akısı
k	: Türbülans kinetik enerjisi, Isı iletim katsayısı, Reaksiyon hız katsayısı
K	: Reaksiyon denge sabiti
M	: Kimyasal bileşenin mol kütlesi
p	: Basınç
R	: Reaksiyon hızı
S	: Korunum denklemi kaynak terimi
T	: Sıcaklık
u	: Gaz fazı hız bileşeni
v	: Stokiyometrik katsayı
Y	: Kimyasal bileşenin kütle oranı
x	: Piroliz reaksiyon katsayısı



ÇİZELGE LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Çizelge 1.1 : Kömür tipinin yapay gaz üzerine etkisi [11].	9
Çizelge 1.2 : Chinchilla YKG saha denemesinde hava beslemesi ve oksijen beslemesinin yapay gaz içeriğine ve sistem performansına etkisi [21].	13
Çizelge 1.3 : Yeraltında kömür gazlaştırmanın matematiksel modellenmesinde kullanılan yöntemlerin karşılaştırılması [29].	18
Çizelge 2.1 : YKG matematik modelinde yer alan kimyasal reaksiyonlar ve reaksiyonların ısı değerleri	37
Çizelge 2.2 : YKG matematik modelinde yer alan reaksiyonların Arrhenius reaksiyon hızı denklemi için sabitleri.	38
Çizelge 3.1 : Numerik sonuçları verilen analiz için belirlenen sınır şartları.	55
Çizelge 3.2 : Numerik sonuçları verilen analiz için belirlenen başlangıç koşulları.	55



ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1 :	Yeraltında kömür gazlaştırmanın şematik görünümü. Besleme kuyusu, ürün gaz kuyusu ve reaksiyonların gerçekleştiği kavite görülmektedir [1].	1
Şekil 1.2 :	Yeraltında kömür gazlaştırma işleminde görülen çatı çökmesi durumunun şematik gösterimi. Sağda ve solda koyu renk ile gösterilen yerler kömürü temsil etmektedir [3].	3
Şekil 1.3 :	Yeraltında kömür gazlaştırma sırasında görülen reaksiyon bölgeleri ve bölgelerdeki baskın reaksiyonlar.	5
Şekil 1.4 :	YKG saha uygulamalarının kömür damar kalınlığı ve derinliği açısından karşılaştırması [1].	8
Şekil 1.5 :	Bağlantılı düşey kuyular (LVW) tekniği için geri yanma ve ileri yanma yönteminin şematik gösterimi. a) Geri yanma. b) İleri yanma [13].	10
Şekil 1.6 :	CRIP yönteminin şematik anlatımı [15].	11
Şekil 1.7 :	SDS yönteminin şematik gösterimi [1].	11
Şekil 1.8 :	Reaktör içerisine yerleştirilen kömür örneğinin a) deneyden önce, b) deneyden sonra görünümü. c) Kömür bloğu içerisinde oluşan kavitenin(oyuk) görünümü [27].	15
Şekil 1.9 :	Daggupati v.d. (2010) tarafından belirtilen kavite boyutları [28].	15
Şekil 1.10:	Sabit yatak modelinde kullanılan kömür reaksiyon modelleri [31]. ...	20
Şekil 1.11:	Gazlaştırma sırasında geometri üzerinde zamana bağlı yanma önünün ilerleyişi [32].	21
Şekil 1.12:	Gazlaştırma kanalı modelinin şematik gösterimi [7].	21
Şekil 1.13:	Gazlaştırma kanalı modeli için duvar ve gaz fazı sıcaklık değerleri ve gaz kompozisyonu değişimi [3].	22
Şekil 1.14:	Kalın ve ince kömür yatakları için doğal taşınımın etkili olması durumunda akış çevrinti yapıları [33].	23
Şekil 1.15:	Zorlanmış taşınım ve doğal taşınım için kavite büyümesinin karşılaştırması [33].	23
Şekil 1.16:	Kömür levha modelinin şematik gösterimi [36].	24
Şekil 1.17:	Farklı başlangıç geçirgenlik değerleri için kavite şekli. (a) 1 mD, (b) 100 mD, (c) 10 D [38].	26
Şekil 2.1 :	YKG işleminin matematik modeli için akış şeması.	27
Şekil 2.2 :	Su-gaz değişim reaksiyonun denge sabitinin sıcaklığa bağlı değişimi	42
Şekil 3.1 :	Laboratuvar ölçekli YKG deney düzeneğine ait besleme düzeneği. Hareketli olarak tasarlanmış ünite üzerinde hava beslemesi için üfleç ve su buharı beslemesi için buhar kazanı görülmektedir.	48
Şekil 3.2 :	Laboratuvar ölçekli YKG deneyinde kullanılan reaktör tasarımı ve sıcaklık ölçüm noktaları.	49
Şekil 3.3 :	YKG deney düzeneğinin şematik görünümü.	52

Şekil 3.4 :	YKG deneyi süresince gazlaştırma ajanları ve yapay gazın debilerinin değişimi	53
Şekil 3.5 :	YKG-HAD analizi için kullanılan geometri.....	53
Şekil 3.6 :	Çözüm ağından bağımsızlık testi için farklı boyutlara sahip çözüm ağlarından alınan gazlaştırma kanalının çıkış kesitindeki kütle debisi değerlerinin karşılaştırması.....	54
Şekil 3.7 :	Çözüm ağından bağımsızlık testi için farklı boyutlara sahip çözüm ağlarından alınan gözenekli kömür ortamının ortalama gözeneklilik değerlerinin karşılaştırması.....	54
Şekil 3.8 :	Oksijen ile gazlaştırma fazı için deneysel ve numerik sonuçların (HAD) karşılaştırması.....	56
Şekil 3.9 :	Su buharı ile gazlaştırma fazı için deneysel ve numerik sonuçların (HAD) karşılaştırması.....	57
Şekil 3.10:	Kömürün nem içeriğinin zamana bağlı değişimi. Kırmızı bölgelerde nem içeriği tamamen tükenmiş durumdadır. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	58
Şekil 3.11:	Kömürün sabit karbon içeriğinin zamana bağlı değişimi. Kırmızı bölgelerde nem içeriği tamamen tükenmiş durumdadır. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.....	59
Şekil 3.12:	Kömürün gözeneklilik değerinin zamana bağlı değişimi. Kırmızı bölgeler en yüksek gözeneklilik değerini göstermektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.....	60
Şekil 3.13:	Zamana bağlı sıcaklık dağılımı. Kırmızı bölgelerde görülen sıcaklıklar 1500 K civarındadır. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.....	61
Şekil 3.14:	Kömür içerisinde kuruma reaksiyon bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	62
Şekil 3.15:	Hidrojen homojen yanma reaksiyonu bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	63
Şekil 3.16:	Sabit karbon heterojen yanma reaksiyonu bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	64
Şekil 3.17:	Heterojen karbondioksit gazlaşma reaksiyonu bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	65
Şekil 3.18:	Heterojen su buharı gazlaşma reaksiyonu bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	66
Şekil 3.19:	Oksijen bileşeninin molar oranının geometri içinde dağılımı. Kırmızı ile yüksek oran gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	67
Şekil 3.20:	Karbondioksit bileşeninin molar oranının geometri içinde dağılımı. Kırmızı ile yüksek oran gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	68
Şekil 3.21:	Karbonmonoksit bileşeninin molar oranının geometri içinde dağılımı. Kırmızı ile yüksek oran gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	69
Şekil 3.22:	Hidrojen bileşeninin molar oranının geometri içinde dağılımı. Kırmızı ile yüksek oran gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.	70

LABORATUVAR ÖLÇEKLİ YERALTINDA KÖMÜR GAZLAŞTIRMA REAKTÖRÜNÜN HESAPLAMALI AKIŞKANLAR DİNAMİĞİ İLE YAPAY GAZ ÜRETİMİNİN ANALİZİ

ÖZET

Yeraltında kömür gazlaştırma işlemi, kömür cevherinden, geleneksel madencilik yöntemlerinden farklı bir şekilde, yanıcı gaz elde edilerek faydalanılmasını sağlayan bir teknolojidir. Bu yöntemde, yeraltındaki kömür damarına sondaj yapılarak, sırasıyla, besleme kuyusu ve üretim kuyusu olarak isimlendirilen iki adet kuyu açılmaktadır. Besleme kuyusundan gazlaştırma ajanı olarak adlandırılan hava, saf oksijen, su buharı, karbondioksit veya bunların karışımından olan gazlar gönderilmektedir. Beslenen gazlar yeraltındaki kömür ile yanma ve gazlaşma tepkimelerine girerek kömürden ikincil bir yakıt elde edilmesini sağlamaktadır. Yapay gaz olarak adlandırılan bu ikincil yakıt ise üretim kuyusundan toplanarak yüzeye çıkartılır. Üretilen yapay gazın içeriğinde büyük oranda CO_2 , CO , H_2 ve CH_4 görülmektedir ve bu içerik sayesinde enerji ve hammadde kaynağı olarak çeşitli endüstriyel işlemlerde kullanılmaktadır.

Yeraltında kömür gazlaştırma işlemi özellikle madenciliği ekonomik olmayan kömür yatakları için gelecek vaat etmektedir. Ancak YKG işlemi kontrolü zor ve çıktıları zamana bağlı olarak değişen bir süreçtir. Ayrıca işlem çıktıları kömür ve kömür yatağının özelliklerine göre büyük oranda değişmektedir. YKG işlemindeki bu değişkenliğin, çıktıların tahminini zorlaştırdığı açıktır. Süreç tahminini kolaylaştırmak için pilot denemeler ve saha deneyleri yapılmaktadır. Ancak bu deneme çalışmaları pilot ölçekli tesis kurulumu gerektirdiği için oldukça maliyetlidir. Saha deneyleri yerine son yıllarda laboratuvar ölçekli YKG deney tesisatları kurularak düşük maliyetlerle çeşitli kömürlerin YKG işlemine ve işlem parametrelerine etkisi ölçülebilmektedir.

Tüm bu deneysel çalışmaların yanında YKG işlemi için matematiksel model geliştirme çalışmaları da yürütülmektedir. Matematik modeller sayesinde deneysel çalışmalarla da elde edilmesi mümkün olmayan veriler elde edilebilmektedir. Bunun yanında farklı işletme parametreleri de daha hızlı ve az maliyetle test edilebilmektedir. Bu tez kapsamında yeraltında kömür gazlaştırma işlemi için süreç sırasında görülen kinetik reaksiyonları kullanan 2 boyutlu, zamana bağlı matematik model geliştirilmiş ve hesaplamalı akışkanlar dinamiği ile matematik modelin çözümü elde edilmiştir.

YKG işleminin gerçekleştiği kömür bloğu gözenekli olarak modellenmiş ve kömür içerisinde gerçekleşen kuruma, piroliz, homojen ve heterojen reaksiyonlar model içerisinde yer almıştır. Kömürün gözeneklilik değeri, kömürün nem, kül, uçucu ve sabit karbon içeriğine bağlı olarak değişken ele alınmıştır. Böylece, reaksiyonlar neticesinde gerçekleşen kömür tükenimi modellenmiştir. Bu kömür tükenimi sırasında aynı zamanda kömür içindeki oyuk (kavite) oluşumu da modellenmiştir. Kömür bloğunun yanında gazlaştırma ajanları ve yapay gaz akışının gerçekleştiği gazlaştırma kanalı modele dahil edilmiştir. Gözenekli ortam olarak kabul edilen kömür bloğunda

ve gazlaştırma kanalında momentum, kütle korunumu ve enerji korunumu denklemleri yardımıyla momentum, ısı ve kütle transferi hesaplanmıştır. Gazlaştırma kanalı ve kömür bloğu içinde gerçekleşen türbülanslı akış etkileri ise k- ϵ modeli ile hesaplanmıştır.

Hesaplamalı akışkanlar dinamiği yöntemini kullanan ANSYS Fluent paket programı kullanılarak modelin sayısal çözümü sağlanmıştır. Sayısal çözüm çalışması için kullanılan geometri olarak, İTÜ Makina Fakültesinde, TÜBİTAK projesi kapsamında kurulan laboratuvar ölçekli YKG tesisatının reaktörü kullanılmıştır. Matematik model çözümünün doğrulanması, yine aynı deney tesisatında gerçekleştirilen bir deneysel çalışma ile yapılmıştır. Bu deneysel çalışmada Malkara-Pirinççeşme/Tekirdağ bölgesi linyit örneği ile oksijen ve su buharı kullanarak gazlaştırma işlemi yapılmıştır. Numerik sonuçların deneysel çalışmalar ile doğrulanmasında sonra YKG işleminde görülen oyuk (kavite) gelişimi, sıcaklık, kimyasal bileşen dağılımı sonuçları verilmiştir.



COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS ANALYSIS OF SYNGAS PRODUCTION FROM AN EX-SITU UNDERGROUND COAL GASIFICATION REACTOR

SUMMARY

Underground coal gasification is an emerging technology that utilizes coal reserves in a different way compared to conventional mining techniques. In this technique, a secondary fuel, syngas is produced from the coal via combustion and gasification processes. Two wells are drilled into underground coal seam and named as supply well and production well. The supply well is used to supply oxygen, air, steam, carbon dioxide or their mixture, which are also named as gasification agents, into the coal seam. The objective of the production well is to collect the product gas, syngas. The product gas is composition of, mainly, CO_2 , CO , H_2 ve CH_4 and utilized in many industrial processes and power generation.

UCG is a promising technology, especially, for economically unfeasible coal reserves. However, UCG is a very complex process, includes multiphysics and it is not an easy task to predict its outcomes. UCG pilot trials have been done in many coal sites around the World in order to monitor and measure how a specific coal reserve reacts to UCG technology. In recent years, laboratory scale ex-situ gasification experiments have been conducted to avoid the high costs of the site tests. In the lab. scale experiments coal blocks are used as the coal samples and gasification reactors are used to simulate underground conditions. Thanks to the UCG experimental setups, the effects of coal content and process parameters on syngas production and optimal process parameters can be identified without the site tests.

Also mathematical models for UCG are developed to understand the physical and chemical phenomena of UCG. Detailed information about UCG, which can not be obtained experimental studies, can be obtained with the help of mathematical models. In addition, different UCG process parameters can be experimented and simulated using mathematical models at almost no cost.

In this study, a mathematical model, that is two-dimensional, time-dependent and based on kinetic reaction rates, is developed and computational fluid dynamics technique is used to obtain numerical results for UCG. The model includes six different chemical species (O_2 , CO_2 , CO , H_2O , H_2 and N_2), three homogeneous reactions (carbon monoxide combustion, hydrogen combustion and water-gas shift reaction), three heterogeneous reactions (fixed carbon combustion, water gasification, carbon dioxide gasification) and two important coal process, drying and pyrolysis. Methane component (CH_4) is neglected because the methane percentage in the produced syngas is at relatively low levels (less than 5%) when UCG is operated at atmospheric pressure condition.

Gasified coal block is modelled as porous medium which is assumed in thermal equilibrium and, as a result, heat transfer in gas and solid phases are governed by one conservation equation. Momentum conservation equation that includes porous media

resistance is used to obtain velocity field inside the coal block. Momentum resistance created by the porous media is modelled with Darcy equation which assumes pressure drop due to porous media is linearly related with velocity. Mass conservation equations for chemical species are also used to predict mass transfer of each specie.

Essential coal process such as drying, pyrolysis, homogeneous and heterogeneous reactions, which are occurring in the coal block, are included via kinetic reaction rate expressions. For homogeneous reactions, laminar finite rate/eddy dissipation reaction model is used. This model uses the laminar finite rate and Arrhenius expression to calculate the reaction rate to start the reaction. After the reaction starts, it is assumed that turbulence controls the reaction rate due to turbulent mixing effect. Eddy dissipation model is used to calculate the turbulence controlled reaction rate. Eddy dissipation model uses turbulent kinetic energy and turbulent energy dissipation rate quantities to predict turbulent mixing effect. The heterogeneous reactions are modelled with first order finite-rate reaction rates using related Arrhenius expressions and constants. Drying and pyrolysis processes are assumed as chemical reactions and single step reaction equations are used with appropriate Arrhenius constants.

Heterogeneous reaction and drying & pyrolysis processes are assumed to occur in porous region and change the physical properties of the region. In reality, moisture, volatiles, fixed carbon and ash are the content of the porous-coal region and they change over time as reactions and processes progress. In the model, porosity value of the porous region is taken into account as variable as the moisture, volatile and fixed carbon content of the coal-porous region. As a result, coal consumption due to the reactions is modelled and because of the variation of porosity, cavity formation inside the coal block is simulated.

Turbulence is an important phenomenon for underground coal gasification. Because of large density and temperature gradients, turbulent double diffusive natural occurs inside the void zone (cavity). Turbulent double diffusive natural convection, which is dominant mechanism in the UCG, can be described as combined buoyancy forces that acts on the flow field. It dominates the flow when Grashof number is larger than 10^{10} , Reynolds number is larger than 10^4 and Gr/Re^2 is much larger than 1. Turbulent flow in cavity is modelled with $k-\epsilon$ turbulence model which is based on gradient transport assumption and turbulent kinetic energy (k) and turbulent energy dissipation rate (ϵ) quantities are used to calculate turbulent mixing properties such as diffusion coefficients and turbulent controlled reaction rates.

Two-dimensional geometry is based on an ex-situ UCG reactor which is part of a laboratory scale UCG experimental setup. The experimental setup was built in faculty of mechanical engineering of Istanbul Technical University with the support of TÜBİTAK (The Scientific and Technological Research Council of Turkey). The setup has the capacity to measure the temperature levels inside the coal block and specify the syngas composition. The syngas flow rate and composition is measured after raw-syngas (which contains water, solid particles and tar) is cleaned and cooled. After the specification of composition, the produced syngas is burned using a flare to reduce the environmental risks. The UCG reactor of the experimental setup has inner dimensions of $70 \times 40 \times 180$ cm and outer dimensions of $65 \times 101 \times 207$ cm. The reactor has inlet and outlet sections at the bottom part of the place where the coal block is positioned. Similarly, the geometry used for numerical analysis has dimensions of 35×180 cm for coal block and gasification channel beneath the coal which has thickness of 5 cm.

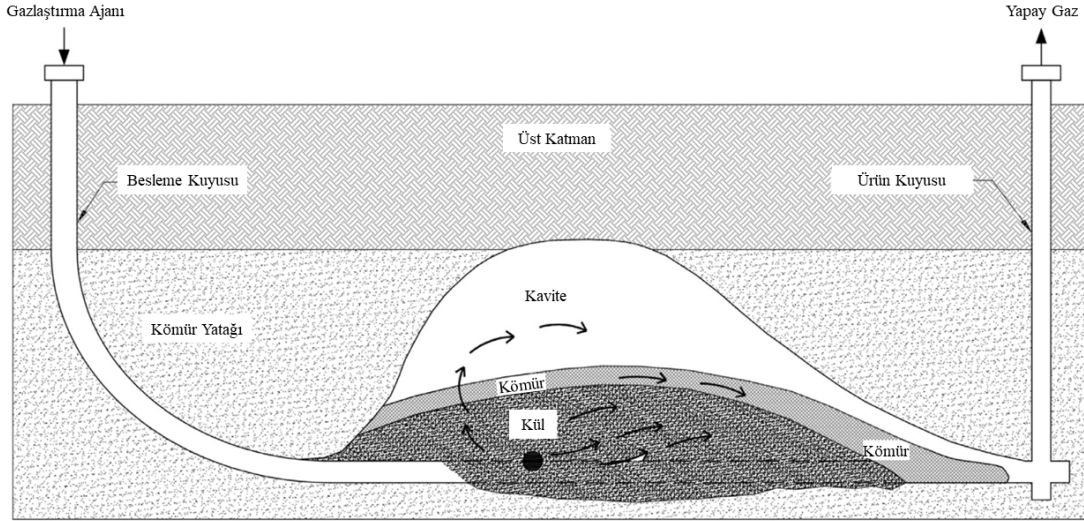
Also, results obtained from the mathematical model compared and validated with the results of an experimental study that is conducted on the same UCG experimental setup. In the experimental study, lignite sample from the mining site in Malkara-Pirinççesme/Tekirdağ is gasified with the supply of oxygen and steam. Thermophysical properties and coal approximate analysis results of the Malkara-Pirinççesme/Tekirdağ lignite are used in the mathematical model.

ANSYS Fluent, which is based on CFD methods, is used to solve the mathematical model. SIMPLE algorithm is used to couple pressure and velocity field and second order discretization method is used to discretize convective terms in the governing equations. Numerical results show great agreement with the produced syngas composition that is measured at the end of the experimental UCG setup. Especially, hydrogen content of the syngas is predicted very well for both oxygen gasification and water gasification stages. After the validation of the numerical results, the other results that are showing the predicted cavity formation, temperature field, distribution of species inside the geometry are given. These results show great agreement with the UCG process described in the literature and validates some assumptions made for UCG process. Temperature and species' distribution show different reaction zones within the coal block as expected. Oxygen fed into the block is consumed mostly at the inlet due to homogeneous combustion reactions and hydrogen and carbonmonoxide content of syngas is mainly produced via heterogeneous gasification reactions.



1. GİRİŞ

Yeraltında kömür gazlaştırma teknolojisi kömür rezervlerinin yeryüzüne çıkarılmadan işlenmesini sağlayan bir işlemdir. Kömür, uçucu madde ve sabit karbon içeriği ile yüksek miktarda kimyasal enerjiyi bünyesinde barındıran bir yakıt tipidir. Günümüz madencilik yöntemleriyle yeryüzüne çıkarılan kömür madeninin, yakılarak veya gazlaştırılarak, kimyasal enerjisinden faydalanılmaktadır. Yeraltında kömür gazlaştırma işlemi ise yanma ve gazlaşma reaksiyonlarının yeraltında, kömürün yatağında gerçekleşmesini öngören bir teknolojidir. Bu işlem için, Şekil 1.1’de de görüldüğü gibi, kömür yatağına iki adet kuyu açılır. Bu kuyulardan biri hava, oksijen, su buharı gibi gazlaştırma ajanları göndermek için kullanılmaktadır. Diğer kuyu ise çoğunlukla hidrojen, karbonmonoksit, karbondioksit, su buharı ve metandan oluşan ürün gazı toplamak için kullanılır. Ürün gaz daha sonra işlenerek yapay gaza (sentez gaz) dönüştürülmektedir.



Şekil 1.1: Yeraltında kömür gazlaştırmanın şematik görünümü. Besleme kuyusu, ürün gaz kuyusu ve reaksiyonların gerçekleştiği kavite görülmektedir [1].

Kömürden üretilen yapay gaz birçok endüstriyel uygulamada kullanılabilir. Perkins yapay gazın başlıca uygulama alanlarını şöyle sıralamıştır [1]:

- Elektrik üretimi için Entegre Gazlaştırma Kombine Çevrimi’nde (IGCC) yakıt olarak kullanılması,

- Fischer-Tropsch işlemi ile yapay gazdan sıvı yakıt elde edilmesi,
- Metanol üretimi,
- Yakıt pillerinde kullanmak amacıyla yapay gazın hidrojen içeriğinden amonyak ve üre üretimi,
- Metanlaşma reaksiyonu yardımıyla yapay gazdan sentetik doğal gaz üretimi.

Bu kullanım alanlarının yanında yeraltında kömür gazlaştırma işleminin birçok avantajı bulunmaktadır. Bu avantajları şöyle sıralayabiliriz:

- Geleneksel kömür madenciliğine gerek duyulmadığı için maden kazası riski en aza indirilmektedir.
- Kömür yatağında işlendiği için taşıma ve depolama gibi maliyetler ortadan kalkmaktadır.
- Kömürün yeryüzünde işlenmesi gerekmediği için toz ve ses kirliliği gibi olumsuzluklar ortadan kalkmaktadır.
- Kömürün yeraltı işlenmesinin bir diğer yanı ise külün yeraltında kalmasıdır.
- Gazlaştırma reaksiyonları yanma reaksiyonlarına göre daha düşük sıcaklıklarda gerçekleştiği için SO₂ ve NO_x emisyonları düşük seviyede kalmaktadır.
- İşlem sonunda tükenen kömür yatağı, karbon depolama (carbon capture) amacıyla karbondioksit depolaması için kullanılabilir.

Yeraltında kömür gazlaştırma işleminin sıralanan avantajlarının yanında bazı dezavantajları da bulunmaktadır. En önemlileri yarattığı çevresel risklerdir. Yeraltında kömür gazlaştırma işleminde yatağın çevresindeki yeraltı sularının kirlenme riski bulunmaktadır. Bu risk, yatak seçiminde su kaynaklarına dikkat edilmesini gerektirmektedir. Diğer bir risk proses gazlarının yeryüzüne sızma riskidir. Bunun önüne geçmek için yeryüzüne yakın olmayan derin kuyular seçilmektedir.

Çevre kirliliği risklerinin yanında bir de işlem sırasında kömür damarı üstündeki tabakanın, çatının çökme riski bulunmaktadır. Çökmenin şematik gösterimi Şekil 1.2’de verilmiştir. YKG işlemi ilerledikçe kömür tükenmekte ve kömür içerisinde kavite diye adlandırılan bir oyuk oluşmaktadır. Kavite oluşumu işlemin sağlıklı ilerlemesi açısından olumlu bir özellik olsa da çok veya kontrolsüz büyümesi üst

yapının yıkılma tehlikesine yol açmaktadır. Yıkılma durumunda, yeryüzünde etki görülmemesi için yine derin yataklar tercih edilmektedir. Bu önlemin yanında kömür yatağının mekanik davranışlarının da modellenmesi üzerine çalışmalar yapılmaktadır [2].



Şekil 1.2: Yeraltında kömür gazlaştırma işleminde görülen çatı çökmesi durumunun şematik gösterimi. Sağda ve solda koyu renk ile gösterilen yerler kömürü temsil etmektedir [3].

1.1 Tezin Amacı

Yeraltında kömür gazlaştırma teknolojisi, yeraltındaki kömür bloğu üzerine, damar içerisine açılan kuyular vasıtasıyla, oksitleyici (oksijen-hava) ve/veya indirgeyici (su buharı-karbondioksit) gazların beslenmesiyle kömürün yapısındaki kimyasal değişimlerin tetiklenmesini ve sonuç olarak da kömürden ikincil bir yakıt (yapay gaz) üretilmesini sağlayan bir işlemdir. Bu işlemin başarı kistası ve aynı zamanda amacı istenilen niteliğe ve niceliğe sahip yapay gaz üretimidir. Başarılı yapay gaz üretiminde önemli noktalar sadece doğru kömür yatağının ve gazlaştırma ajanlarının seçimi değildir. Kömür miktarına bağlı olarak haftalarca sürebilecek bu gazlaştırma işleminin ilk andan itibaren doğru bir şekilde izlenmesi ve yönetilmesi de ürün gaz kalitesini etkilemektedir. Bu sürekli gözlem ihtiyacının en önemli sebebi ise yeraltında kömür gazlaştırma işleminin zamana bağlı bir işlem olmasıdır. Yerüstü gazlaştırma işlemlerinden farklı olarak, YKG işleminde kömür tükendikçe reaktör geometrisi de zamana bağlı olarak değişmektedir. Zamanla gerçekleşen geometri değişiminin yanında yatak boyunca kömür yatağının özelliklerinin homojen olmaması da işlemi değişken kılmaktadır. Bu sebeplerle, YKG işlemi zamandan bağımsız bir işlem haline gelememektedir Yeraltında kömür gazlaştırmanın doğası gereği, süreç hakkında yapılan ölçüm ve gözlemler ise sınırlı kalmaktadır. Bir YKG saha uygulamasında, neredeyse sadece giriş ve çıkış kuyularındaki gaz hakkında doğrudan ölçüm yapılabilmektedir. Ancak işlem performansını doğrudan etkileyen ve işlem süresince

değişkenlik gösteren kömür bloğu içerisindeki sıcaklık dağılımı, akışkan hızları ve kimyasal bileşenlerin dağılımı bilgilerine ulaşmak mümkün olmamaktadır. Bu imkânsızlık ve işlemin homojen ve daimi olmayan yapısından dolayı, YKG işlemi için matematiksel modelleme çalışmaları hala güncel bir şekilde sürdürülmektedir. Matematiksel modelleme çalışmaları sayesinde kömür içeriğine ve gazlaştırma ajanlarına bağlı olarak yapay gaz içeriğinin tahmini gibi temel çıktılar hesaplanabilmekte ve geometri içerisindeki momentum, ısı ve kütle transferi mekanizmaları da anlaşılabilir.

Tezin birincil amacı, kömür içerisinde gerçekleşen anlık momentum, ısı, kütle transferi ve kimyasal reaksiyonların yanında kömürün tükenmesine bağlı olarak gerçekleşen geometri değişimini de hesaplayabilecek kapasitede yer altında kömür gazlaştırma matematik modeli oluşturmaktadır. YKG işleminin çok değişkenli ve karmaşık fiziksel yapısını matematiksel olarak anlatan bu modelin zamana bağlı çözümü, ANSYS Fluent paket programı yardımıyla elde edilerek modelin uygulanabilirliği kolaylaştırılması, paket programın modeli uygulamada eksik kaldığı noktalarda da Fluent için harici kod geliştirilerek YKG için oldukça önemli olan değişken, özellik ve reaksiyonların çözüme dâhil edilmesi amaçlanmaktadır. Böylece, deneysel bir çalışmaya gerek kalmadan, farklı senaryolar için yeraltında kömür gazlaştırma performansının ölçülebilmesi, matematik model sayesinde mümkün olabilecektir.

1.2 Yeraltında Kömür Gazlaştırma Tekniği

1.2.1 YKG teknolojisinin tarihi

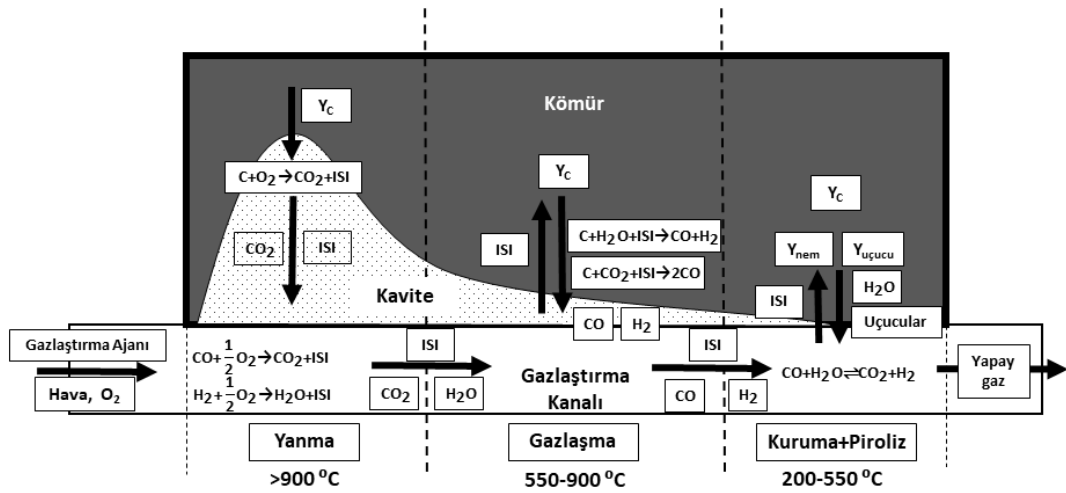
Yeraltında kömür gazlaştırma fikri Sir Willam Siemens'e atfedilmektedir. Sir William Siemens 1868 yılında kömürün yatağında kontrollü bir şekilde yakılmasını öngören bir işlem önermiştir [4]. Rus kimyacı Dmitri I. Mendeleev de yine 19. Yüzyılda, Sir William Siemens'ten bağımsız olarak yeraltında kömür gazlaştırma fikrini ileri sürmüştür [5]. Yeraltında kömür gazlaştırma işleminin teknik altyapısını hazırlayan olarak ise yeraltında kömür gazlaştırma hakkında 1909-1910 yıllarında aldığı üç adet patent nedeniyle A. G. Betts olarak kabul edilmektedir [5,6]. 1912 yılında İngiliz kimyacı Sir William Ramsay, Betts'in fikirlerini geliştirerek yeraltında kömür gazlaştırmanın hava kirliliğine ve kömür madenciliğine çözüm olacağını öne sürmüştür. Sir William Ramsay sayesinde ilk yeraltında kömür gazlaştırma denemesi yine 1912 yılında İngiltere'de gerçekleştirilmiştir [5,7]. 1. Dünya Savaşı nedeniyle

denemeler kesintiye uğramış ancak 1930 yılından sonra, özellikle Eski Sovyetler Birliği'nde, Avrupa, ABD ve Çin'de pilot ölçekli saha çalışmaları yeniden başlamıştır. Bu süreçte 50'nin üzerinde pilot ölçekli saha çalışması yapıldığı görülmektedir [7]. Eski Sovyetler Birliğinde yapılan saha çalışmaları ilk başarılı işletmeler olmasına rağmen bu çalışmalara ait detaylar ancak 1960 yılından sonra dünya literatüründe yer bulabilmiş ve bu zamana dek yeraltında kömür gazlaştırma işlemi diğer ülkelerin başarısız denemeleri sebebiyle uygulanamaz olarak kabul edilmiştir [8].

1.2.2 İşlem detayları ve kimyası

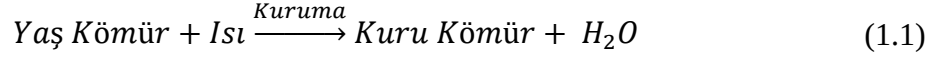
Yapay gaz içeriğinin genel olarak karbondioksit, karbonmonoksit, hidrojen ve az miktarda metandan oluştuğu bilinmektedir. Bu gazların üretimine baktığımızda, karbondioksitin kömürün kısmi yanmasından, karbonmonoksitin karbondioksitin indirgenmesinden, hidrojenin ise su-gaz değişim reaksiyonu ve piroliz işleminden üretildiği düşünülmektedir [4]. Ancak gerçekte kömür yatağı içerisinde gerçekleşen reaksiyon mekanizması çok daha karmaşıktır.

Karmaşık reaksiyon mekanizmasını basitleştirmek amacıyla yeraltında kömür gazlaştırma işleminin kömür yatağı içerisinde 3 farklı bölgeye ayrıldığı düşünülmektedir. Bu bölgelerin dağılışı Şekil 1.3'te verilmiştir.

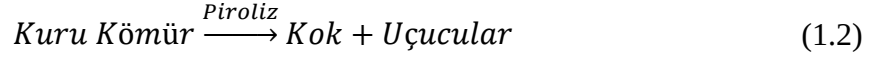


Şekil 1.3: Yeraltında kömür gazlaştırma sırasında görülen reaksiyon bölgeleri ve bölgelerdeki baskın reaksiyonlar.

Kuruma bölgesinde kömür içeriğindeki nem buharlaşmaktadır. Kömürün içeriğindeki nemin bir kısmı serbest halde olup suyun buharlaşma sıcaklığında buharlaşıp gaz içerisine karışmaktadır. Nemin belli bir kısmı ise zayıf veya kimyasal bağlı olup daha 200-400 °C gibi yüksek sıcaklıklarda gaz ortamına salınmaktadır [9].



Kurumanın gerçekleştiği sıcaklıklarda, oksijensiz ortamda kömür pirolize uğramaktadır. Başka bir deyişle, kömür içeriğindeki uçucular ayrılmaktadır. Piroliz ile su buharı, hidrojen, karbonmonoksit, karbondioksit, metan ve az miktarda karmaşık hidrokarbonlar ortama salınmaktadır.



Yeraltı kömür gazlaştırma işlemi sırasında gerçekleşen belli başlı tepkimeler ise şunlardır:

Tam Yanma:



Eksik Yanma:



Boudouard Tepkimesi:



Su Buharı ile Gazlaşma:



Metan Oluşumu:



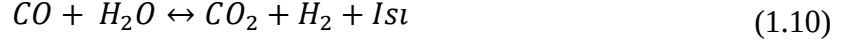
Karbonmonoksit Yanması:



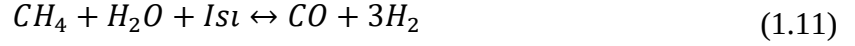
Hidrojen Yanması:



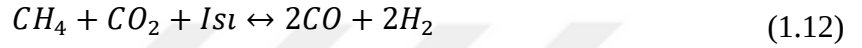
Su-Gaz Değişimi:



Metanlaşma Tepkimesi:



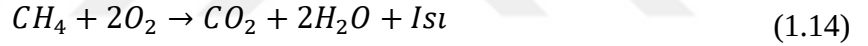
Metanın Karbondioksit ile Reformu:



Metan Kısmi Oksitlenme Tepkimesi:



Metan Yanması:



Bu reaksiyonlardan matematik modelde yer alanların yaklaşık olarak gerçekte hangi bölgede etkili olduğu Şekil 1.3'te verilmiştir.

1.2.3 Uygun yatak seçimi

Şekil 1.4'te de görüldüğü gibi, şu ana kadar gerçekleştirilen çoğu YKG uygulamasında kömür damarı kalınlıkları 10 metreyi geçmemektedir. Damar derinliği olarak bakıldığında ise eski Sovyetler Birliğinde gerçekleştirilen uygulamalarının en fazla 200 metrede olduğu görülmektedir. Avrupa coğrafyasında uygulanan projelerde ise daha derindeki kömür damarları gazlaştırılmıştır.

Bu tecrübelerin ışığında, günümüzde gazlaştırma yapılacak kömür damarı kalınlığının en az 6 metre olması gerektiği düşünülmektedir. Bunun nedeni ise kalınlık değeri azaldıkça reaksiyon bölgesinden çevreye ısı kaybının artışıdır. Isı kaybı endotermik yapıdaki gazlaştırma reaksiyonlarını olumsuz etkilemekte ve bu durum da üretilen yapay gazın kalitesini düşürmektedir. Bir başka neden ise kalın yataklarda açılan kuyu

durulmuş ve bu çalışmalardan başarılı sonuçlar elde edilmiştir. Kömür içeriğinde ise düşük kükürt oranı, ürün gazın (yapay gazın) daha temiz olması açısından tercih edilen bir diğer unsurdur [1].

Çizelge 1.1: Kömür tipinin yapay gaz üzerine etkisi [11].

	Birim	Linyit	Alt-Bitümlü Kömür	Taş Kömürü
Gaz Kompozisyonu				
H ₂	%mol	36-45	33-42	35-45
CO	%mol	20-30	25-35	25-35
CO ₂	%mol	25-35	20-25	25-30
CH ₄	%mol	1-5	4-10	2-8
N ₂	%mol	1-3	2-3	1-3
Isıl Değer	%mol	8,5-9,5	9,6-11	9,5-10
Çıkış Debisi	m ³ /kg	1,2-1,4	1,8-2,3	1,9-2,5

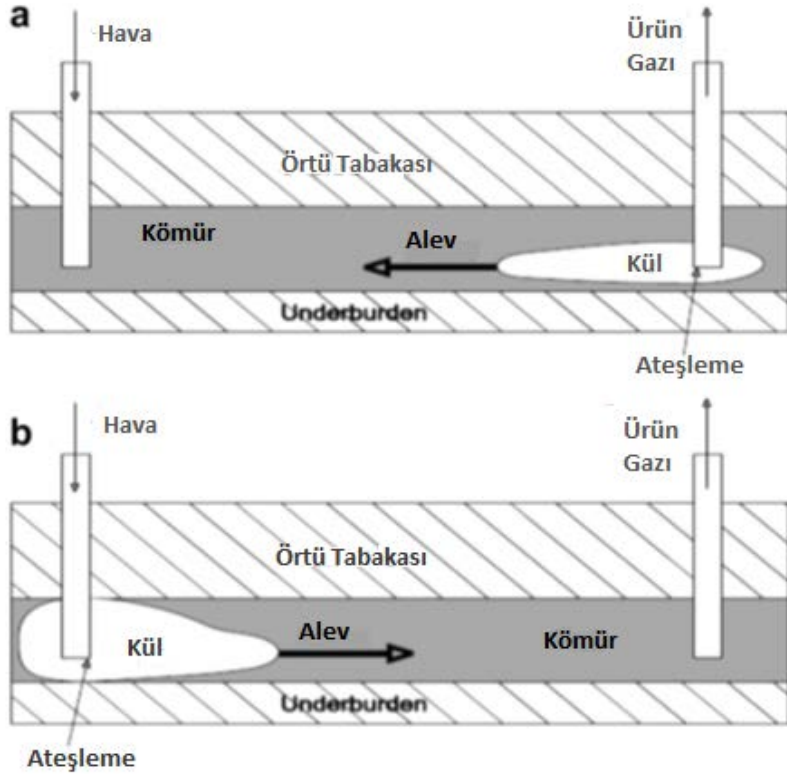
Uygun yatak seçimi açısından diğer özelliklere baktığımız zaman, kömürün geçirgenliğinin düşük olması, kömür yatağının üstündeki toprak katmanının kalın olması, yatağın yakınlarındaki yeraltı suyunun kalitesiz olması gibi şatlar da dikkate alınmaktadır.

1.2.4 Kuyular arası bağlantı yöntemleri

Yeraltında kömür gazlaştırma işleminde besleme kuyusu ve ürün gaz kuyusu arasında bağlantı kurma teknikleri çeşitlilik göstermektedir. Bu yöntemlerin amacı kuyular arasında geçirgenliği artırılmış bir bölge oluşturularak bağlantı sağlamaktır. Geçirgenliği artırılmış kömür yatağı içindeki bu bölgeye gazlaştırma kanalı denilmektedir. Kömür yatağına bağlı olarak uygulanan birkaç önemli teknik aşağıda verilmiştir.

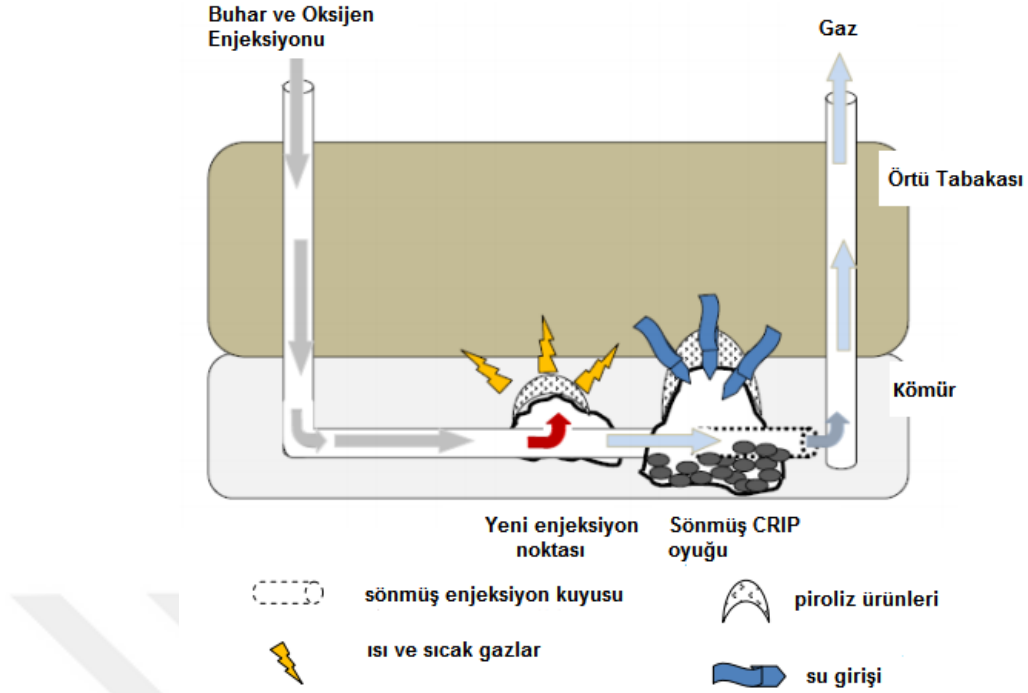
Bağlantılı Düşey Kuyular (LVW) yöntemi, kuyular arası bağlantı yöntemleri arasında en önemlilerden birisidir. Bu yöntemde, yatağa açılan iki kuyu arasındaki bağlantı birden fazla yolla sağlanabilir. Hidrolik parçalama, elektriksel bağlantı, geri yanma ve yönlü delme işlemleri uygulanan teknikler arasındadır [12]. Geri yanma tekniği düşük kalite kömürler için güvenilir bir teknik olarak ön plana çıkmaktadır [1]. Bu teknikte, ilk başta gazlaştırma kanalı oluşturmak için, kömür ürün gaz kuyusundan yakılmakta

ve alev besleme kuyusuna ilerletilmektedir. Gazlaştırma kanalı oluşturulduktan sonra ileri yanma uygulanarak gazlaştırma işlemi başlatılmaktadır. Şekil 1.5'te bu yöntemin şematik gösterimi verilmiştir.



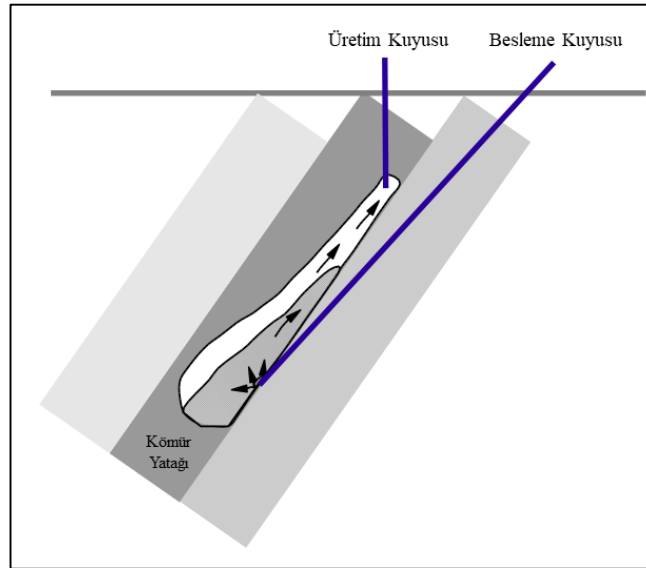
Şekil 1.5: Bağlantılı düşey kuyular (LVW) tekniği için geri yanma ve ileri yanma yönteminin şematik gösterimi. a) Geri yanma. b) İleri yanma [13].

Kuyular arası bağlantı için uygulanan bir diğer teknik ise Kontrollü Tepkime Besleme Noktası (CRIP) yöntemidir. LVW tekniğine alternatif olarak geliştirilen bu yöntem sondaj başına daha fazla kömürün gazlaştırılmasını amaçlamaktadır. Yöntem bir adet düşey, bir adet yatay sondajdan oluşmaktadır. Yatay sondaj kuyusunda bulunan hareketli ateşleyici/besleyici aparat sayesinde gazlaşma bölgesi yatak boyunca kontrollü bir şekilde değiştirilebilmektedir. İlk başta ürün gaz kuyusuna yakın olarak belirlenen besleme noktası o bölgedeki kömürün tükenmesiyle geri çekilmekte ve yeni bir ateşlemeyle yeni bir gazlaştırma bölgesi oluşturulmaktadır. Böylece kömür yatağına yeni bir sondaj yapılmasına gerek kalmadan gazlaştırma işlemi devam ettirilmektedir. Şekil 1.6'da bu yöntemin şematik anlatımı verilmiştir. CRIP yöntemi ilk olarak Centralia/ABD saha testinde denenmiştir [14].



Şekil 1.6: CRIP yönteminin şematik anlatımı [15].

Bir diğer bağlantı yöntemi ise Yüksek Eğimli Kömür Damarı (SDS) yöntemidir. Adından da anlaşılacağı gibi yüksek eğime sahip kömür yatakları için tercih edilmektedir. İşlemden önce, yüksek eğimli kömür damarının dibinde ateşleme yapıldıktan sonra gazlaştırma ajanı beslenmekte, reaksiyonlar sonucu ortaya çıkan gazlar damar boyunca yükselirken gazlaşma devam etmekte ve kömür damarının üstünden ise ürün gaz toplanmaktadır. Bu yöntemin şematik gösterimi ise Şekil 1.7’de verilmiştir.



Şekil 1.7: SDS yönteminin şematik gösterimi [1].

1.3 Literatür Araştırması

Yeraltında kömür gazlaştırma hakkında yapılan çalışmaları üç grupta inceleyebiliriz. İlki, pilot ölçekli olarak yapılan saha çalışmalarıdır. Bu çalışmalarda, belirlenen kömür yatağında yeraltında kömür gazlaştırma uygulaması gerçekleştirilmektedir. Bu saha denemelerinin amacı, YKG işleminin belirli kömür yatağına tipine uygunluğunun araştırılması olacağı gibi çevresel etkiler gibi yan çıktılar da araştırma konusu olabilmektedir. İkinci çalışma türü, laboratuvar ölçekli yeraltında kömür gazlaştırma çalışmalarıdır. Bu çalışmalarda, laboratuvar ortamında kömürün yatak şartlarını modelleyebilecek bir reaktör içerisinde blok halindeki kömür blokları gazlaştırılmaktadır. Deneysel çalışmaların yanında yeraltında kömür gazlaştırma için matematiksel modelleme çalışmaları yapılmaktadır. Modelleme çalışmaları ile işlemin girdileri ve değişkenleri belirlenerek yapay gaz kompozisyonu gibi işlem çıktıları sayısal olarak hesaplanmaktadır.

1.3.1 Deneysel çalışmalar

1.3.1.1 Pilot ölçekli saha çalışmaları

1930'lı yıllardan beri gerçekleştirilen pilot ölçekli saha çalışmalarının önemi bölümü Eski Sovyetler Birliği'nde, Amerika Birleşik Devletleri'nde, Çin, ve Avustralya'dadır. Bunun dışında Avrupa'nın çeşitli ülkelerinde de saha denemeleri gerçekleştirilmiştir.

1935-1961 yılları arasında Eski Sovyetler Birliği'nde toplam 5 adet YKG saha çalışması gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmaların üçünde linyit yatağı gazlaştırma için kullanılmıştır. Genel olarak LVW metodunun kullanıldığı çalışmaların tümünde hava gazlaştırma ajanı olarak kullanılmış ve ortalama olarak, 3,2-4.1 MJ/m³ arasında ısı değere sahip yapay gaz elde edilmiştir [16,17]. Kömürlerin geçirgenliğinin düşük olmasından dolayı gazlaştırma performansı istenilen düzeye çıkamamıştır [1].

Amerika Birleşik Devletleri'nde ise saha çalışmaları 1973 yılında başlamış ve bu tarihten itibaren toplam 15 adet pilot ölçekli YKG tesisi işletilmiştir. Bu denemelerin çoğunda LVW metodu kuyu bağlantısı olarak kullanılmıştır [18-20]. CRIP metodu ise ilk olarak ABD'deki saha çalışmalarından biri olan Centralia pilot ölçekli YKG tesisinde denenmiştir [14]. Gazlaştırma ajanı olarak havanın yanında, oksijen ve su buharının da kullanılması bu çalışmalarla başlamıştır. Centralia'daki pilot tesiste

Centralia A denemesinde oksijen-su buharı karışımı gazlaştırma ajanı olarak kullanılmış ve ortalama $9,7 \text{ MJ/m}^3$ ısı değere sahip yapay gaz elde edilmiştir [20].

Avustralya'daki çalışmalar, Chinchilla ve Bloodwood alt bitümlü kömür yataklarında gerçekleştirilmiştir. Toplamda 6 adet YKG denemesi gerçekleştirilmiştir [1,21]. Chinchilla bölgesindeki kömür alt bitümlü olup ısı değeri ortalama 19 MJ/kg olarak belirlenmiştir. Gazlaştırma için CRIP metodu kullanılmıştır. Gazlaştırma sonunda ısı değeri $4-11 \text{ MJ/m}^3$ arasında değişen yapay gaz elde edilmiştir. Toplam 30 aylık deneme süresince, kömür yatağının %95'ine denk gelen 35.000 ton kömür gazlaştırılmıştır [22]. Avustralya, Chinchilla'da gerçekleştirilen saha denemelerinden birinde hava ve oksijen beslemesi durumunda yapay gaz içeriğinin değişimi de incelenmiştir ve sonuçlar Çizelge 1.2'de verilmiştir. Azot içeriğinin düşmesiyle beraber yapay gazın ısı değerinin arttığı görülmektedir. Bunun yanında oksijenin etkin kullanım miktarı da saf oksijen beslemesi durumunda artmıştır.

Çizelge 1.2: Chinchilla YKG saha denemesinde hava beslemesi ve oksijen beslemesinin yapay gaz içeriğine ve sistem performansına etkisi [21].

Parametre	Birim	Hava beslemesi	Oksijen beslemesi
Yapay Gaz İçeriği			
H ₂	%mol	18-20	40-45
CO	%mol	8-10	5-10
CO ₂	%mol	15-20	30-35
CH ₄	%mol	5-10	10-13
N ₂	%mol	40-45	0-3
Kuru halde ısı değeri (Alt ısı değeri)	MJ/Nm ³	5-6	10-11
Etkin oksijen kullanımı	MJ/kmol	900-1000	1100-1300
İşletme basıncı	bara	7	7

2013-2015 yılları arasında, Polonya'da Merkez Madencilik Enstitüsü tarafından terkedilmiş veya işletilen kömür madenlerinde YKG uygulanması üzerine çalışılmıştır. 2013 Ağustos'ta gerçekleştirilen 6 günlük YKG denemesinde 5,3 ton kömür %70 gaz verimiyle gazlaştırılmıştır. Bu deneme sırasında ortalama $10,3 \text{ MJ/m}^3$ ısı değere sahip yapay gaz üretilmiştir [23]. 2015 yılında ise Wieczorek taş kömürü madeninde pilot ölçekli YKG denemesi gerçekleştirilmiştir. 60 günlük deneme süresince toplam 230 ton kömür gazlaştırılmış ve ortalama $3,4 \text{ MJ/Nm}^3$ alt ısı değere sahip yapay gaz üretilmiştir [24].

1.3.1.2 Laboratuvar ölçekli çalışmalar

Laboratuvar ölçekli çalışmalar saha çalışmalarına daha küçük ölçekli olmasına rağmen YKG performansını ölçmede başarılı sonuçlar vermektedir. Ayrıca saha denemelerine göre daha düşük maliyetler ile bu ölçümler yapılabilmektedir. Bunun yanında, laboratuvar ortamında daha fazla gözlem imkânı ile YKG işlemi kontrollü bir şekilde gerçekleştirilmektedir. Laboratuvar ölçekli çalışmalarda kömür damarını modellemek için kullanılan reaktörler ile kömür içerisinde gerçekleşen birçok fiziksel olayın doğrudan gözlemlenmesi mümkün olmaktadır.

Stanczyk ve diğerleri tarafından yapılan laboratuvar ölçekli çalışmada taş kömürü ve linyit örneklerinin gazlaştırılması hava ve oksijen ile gazlaştırılması üzerinde durulmuştur [25]. Gazlaştırma ajanı olarak sadece hava kullanılmasının kömür içi sıcaklığı düşürdüğü ve sonuç olarak yapay gaz kalitesini düşürdüğü belirtilmiştir. Kaliteli yapay gaz üretimi için oksijen/hava karışımı kullanılması tavsiye edilmiştir. Linyit için gazlaştırma ajanı içindeki hacimsel hava/oksijen oranı 2/1 olarak belirlenmiştir. Bu oran ile besleme yapıldığında $4,18 \text{ MJ/m}^3$ ısı değere sahip yapay gaz elde edilmiştir. Taş kömürü gazlaştırılması durumunda ise en uygun hava/oksijen oranının 2/3 olduğu belirlenmiş ve bu durumda $5,74 \text{ MJ/m}^3$ ısı değere sahip yapay gaz elde edilmiştir [25].

Laciak ve diğerleri, laboratuvar ölçekli YKG deney düzeneklerinde toplam 214 kg kömürü 63 saat içinde gazlaştırmışlardır. Birincil gazlaştırma ajanı hava kullanan araştırmacılar, oksijen beslemesinin kısa bir aralık için uygulamışlardır. %22,25 nem içeriğine sahip kömür örneğinden hava ile gazlaştırma sırasında $3,27 \text{ MJ/Nm}^3$, oksijen ile gazlaştırma sırasında $4,13 \text{ MJ/Nm}^3$ ısı değere sahip yapay gaz elde edilmiştir [26].

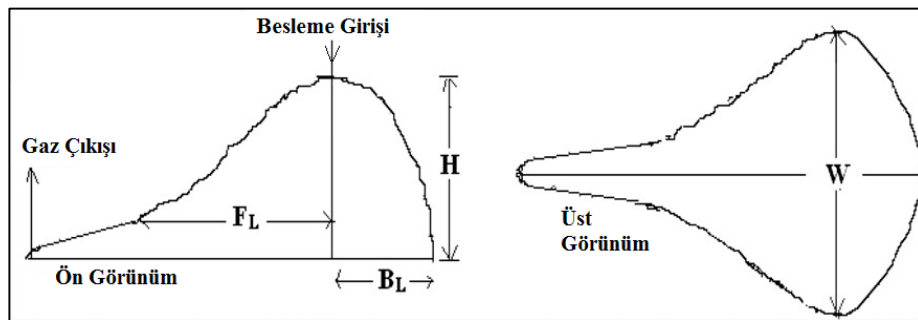
Gür ve diğerleri, yaptıkları çalışmada Türk linyitlerinin YKG performansını laboratuvar ölçekli reaktör kullanarak incelemiştir [27]. $0,65 \times 1,01 \times 2,07$ metre dış boyutlara sahip dikdörtgen prizma şeklindeki reaktöre içerisine yerleştirilen blok halindeki linyit örneği hava, oksijen ve su buharı beslemesiyle gazlaştırılmıştır. Reaktöre ve deneye ait fotoğraflar Şekil 1.8’de verilmiştir.



Şekil 1.8: Reaktör içersine yerleştirilen kömür örneğinin a) deneyden önce, b) deneyden sonra görünümü. c) Kömür bloğu içerisinde oluşan kavitenin(oyuk) görünümü [27].

Kullanılan linyit örneğinin yüksek kül, uçucu ve düşük nem içeriği üzerinden duran araştırmacılar gazlaştırma işlemini 4 farklı bölüme ayırmışlardır. İlk bölümde sadece oksijen beslemesi yapılırken, ikinci bölümde oksijence zenginleştirilmiş hava kullanmışlardır. Üçüncü bölümde oksijen-buhar karışımı kullanan araştırmacılar, son bölümde hava-oksijen-su buharı karışımı kullanmışlardır. Böylece farklı besleme senaryolarında linyit örneğinin YKG performansının ölçülmesi sağlanmıştır. Yapay gaz için en yüksek ısı değer oksijen beslemesi sırasında elde edilmiştir ($6-9 \text{ MJ/Nm}^3$). Oksijen beslemesi sırasında yapay gaz içerisindeki karbonmonoksit oranı hacimsel olarak %23-33, hidrojen oranı %20-30 olarak ölçülmüştür. Ayrıca, linyit için en uygun hava/oksijen besleme oranını 2/1 olarak belirten araştırmacılar, belirtilen besleme durumunda yapay gazın ısı değerinin $4,6 \text{ MJ/Nm}^3$ olarak kaydetmişlerdir [27].

Daggupati ve diğerleri tarafından gerçekleştirilen çalışmada işletme değişkenlerinin kavite büyümesine etkisi incelenmiştir. Besleme ve ürün kanalları arası mesafe, besleme debisi ve işletme süresi gibi değişkenlerin kavite oluşumuna etkisi üzerinden durulmuştur. Boşluk hacmi ve Şekil 1.9’da verilen boyutlar için deneysel ifadeler elde edilmiştir [28].



Şekil 1.9: Daggupati v.d. (2010) tarafından belirtilen kavite boyutları [28].

Linyit blokları üzerinde yapılan deneylerde besleme kuyusu bölgesinde boşluğun neredeyse simetrik olduğu gözlenmiştir. Ayrıca taşınım teriminin sonucu olarak akış yönündeki boşluk oluşumunun (F_L) dik yöndeki oluşumdan (H) daha fazla olduğu da gözlenmiştir. Besleme debisinin artışı ile boşluk hacmi ve tüm yönlerdeki büyümede artış saptanmıştır. İşlem süresinin arttırılması da kavite oluşumu üzerinde aynı etkiyi yaratmıştır. Kuyular arası mesafe değişiminde ise farklı sonuçlar elde edilmiştir. Mesafe artışında boşluk hacmi, ileri ve geri yönlü uzunluklarda (F_L ve B_L) düşüş, yükseklik ve genişlikte (H ve W) ise artış gözlenmiştir. Bu duruma sebep olarak kuyular arası mesafe artışı sonucu basınç kayıplarındaki artış verilmiştir. Çalışmadan elde edilen verilere göre ortaya çıkarılan boşluk değişimine ait ampirik ifadeler Denklem 1.15-1.19'da verilmiştir. Bu ifadelerin tek tip kömüre ait olduğu ve kömür içeriğinin bu ifadeleri etkileyebileceği ayrıca ifade edilmiştir [28].

İleri Uzunluk:

$$F_L = 0.02 \times D_W^{-0.25} \times Q^{0.52} \times t^{0.58} \quad (1.15)$$

Geri Uzunluk:

$$B_L = 0.28 \times D_W^{-0.32} \times Q^{0.22} \times t^{0.35} \quad (1.16)$$

Genişlik:

$$W = 0.19 \times D_W^{0.24} \times Q^{0.29} \times t^{0.22} \quad (1.17)$$

Yükseklik:

$$H = 0.01 \times D_W^{0.32} \times Q^{0.40} \times t^{0.49} \quad (1.18)$$

Boşluk Hacmi:

$$CV = 0.0 \times D_W^{-0.57} \times Q^{0.8} \times t^{1.09} \quad (1.19)$$

Yine aynı çalışmada deneylerin ilk 1 saatlik bölümünde ise düşük CO_2 değerlerine karşın %60-65 oranında O_2 çıkışı gözlenmiştir. Zamanla yüzey reaksiyonları için gerekli olan alan artışı ile CO_2 değerinde de artış gözlenmiştir. Ayrıca deneysel

sonuçları desteklemesi amacıyla, sayısal akışkanlar dinamiği ile modelleme yapılarak kavite içerisinde akış incelenmiştir [28].

1.3.2 Matematiksel modelleme çalışmaları

Yeraltında kömür gazlaştırma işlemi, anlık olarak momentum, ısı ve kütle transferi içeren, homojen ve heterojen kimyasal reaksiyonların yer aldığı karmaşık bir işlemdir. YKG işleminin içerisinde yer alan mekanizmaların daha iyi anlaşılması için matematiksel modelleme çalışmaları ve bu modellerin çıktıları oldukça büyük öneme sahiptir. YKG hakkında oluşturulan matematik modellerin çoğu yapay gaz kompozisyonunun hesabı gibi birincil amaçlara sahipken, kavite büyümesi, çatı çökmesi gibi olayların da hesaplanması modelleme amacı olarak görülmektedir. Khan ve diğerleri başarılı bir YKG modelinin şartlarını şöyle belirlemişlerdir [7]:

- Kömür içerisindeki zamana bağlı sıcaklık dağılımlarını belirlemeli,
- Yapay gaz üretim ve kömür tüketim miktarını belirlemeli,
- Kömür yapısının değişiminin YKG performansına etkisini hesaplamalı,
- Kömür yatağı içindeki gaz hızlarını ve basınç değerlerini hesaplamalı,
- Yanma bölgesinin ilerleyişini hesaplamalı,
- Kavite oluşumunu ve büyümesini doğru bir şekilde belirlemeli,
- İşletme basıncı, gazlaştırma ajanı besleme sıcaklığı, gazlaştırma ajanı besleme debisi, gazlaştırma ajanı içeriği, kuyular arası uzaklık, kuyuların yerleşimi gibi parametrelerin yapay gazın üretim miktarına, içeriğine ve ısı değerine olan etkisini belirlemeli,
- Kömür yatağı kalınlığı, kül oranı, nem oranı değişkenlerinin yapay gaz üretimine ve kavite oluşumuna etkisini belirlemelidir.

Matematiksel olarak bakıldığında, literatürde yer alan yeraltında kömür gazlaştırma modellerinin üç gruba ayrıldığı görülmektedir. Bunlardan ilki, termodinamik-kimyasal denge prensibine dayanan ve özellikle yapay gaz içeriğinin tahmini için kullanılan denge modelleridir. İkincisi, gaz bileşenleri arasındaki değişimi zamana bağlı değişimini hesaplamak için kinetik reaksiyon modellerini kullanan kinetik modellerdir. Üçüncüsü, yeraltında kömür gazlaştırma geometrisini oluşturan gazlaştırma kanalı, kavite ve kömür bloğunun içerisindeki momentum, ısı ve kütle

transferini ele alan ve aynı zamanda kinetik reaksiyon modellerini kullanarak konuma bağlı hız, sıcaklık ve bileşenlerin oransal dağılımını hesaplayan Hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) analizleridir. Çizelge 1.3'te yukarıda belirtilen matematik model çeşitlerinin karşılaştırılması verilmiştir.

Çizelge 1.3: Yeraltında kömür gazlaştırmanın matematiksel modellenmesinde kullanılan yöntemlerin karşılaştırılması [29].

	Denge Modeli	Kinetik Model	HAD Analizi
Denge hali	+	-	-
Zamana bağlılık	Daimi	Zamana Bağlı	Daimi veya Zamana Bağlı
Homojenlik	Homojen	Heterojen	Heterojen
Reaksiyonlar hakkında bilgi	Stokiyometrik yöntem – Gerekli, Stokiyometrik olmayan yöntem – Gerekli değil	Gerekli	Gerekli
Reaktör geometrisi	-	-	+
Parametrelerin zamana bağlı değişimi	-	+	+
Denklem takımı	Non-lineer denklem takımı	Adi diferansiyel denklem takımı	Kısmi diferansiyel denklem takımı
Sayısal yöntem	Newton yöntemi	Runge-Kutta yöntemi	Sonlu aralık, eleman, hacim yöntemleri
Gereken işlem gücü	Düşük	Düşük	Yüksek
Çözücü program	Gerekli değil	Gerekli değil	Gerekli
İşlem süresi	Kısa	Kısa	Uzun
Gereken girdiler	Sıcaklık, yoğunluk, bileşenlerin başlangıç kompozisyonu	Sıcaklık, bileşenlerin başlangıç kompozisyonu	Birçok girdi: Sıcaklık, yoğunluk, bileşenlerin başlangıç kompozisyonu, bileşenlerin ısı ve fiziksel özellikleri, türbülans girdileri
Gereken sabitler	Denge sabitleri, termodinamik özellikler, evrensel gaz sabiti	Kinetik reaksiyon sabitleri, evrensel gaz sabiti, tersinir reaksiyonlar için denge sabitleri	Termodinamik özellikler, kinetik reaksiyon sabitleri, karakteristik sayı bilgileri, türbülans sabitleri
Dâhil olan fiziksel olay	-	Kinetik ifadeye diffüzyon veya taşınım etkisini katmak gerekebilir.	Türbülans, ısı transferi, çok fazlı akış
Yakıt karakteristiği	Yakıt içeriği bilgisi gerekebilir.	Yakıt içeriği, gözeneklilik, gözenek büyüklükleri	Geçirgenlik, gözeneklilik, ısı özellikler, kimyasal içerik
Sonuç	Yapay gazın denge halindeki kompozisyonu	Yapay gaz kompozisyonun zamana bağlı değişimi	Reaktör içerisinde konuma bağlı sıcaklık, basınç, bileşenlerin dağılımı
Dezavantajlar/Sorunlar	Denge hali varsayımı	Kinetik reaksiyon sabitlerinin belirlenmesi	Gereken işlem gücü yüksek, kompleks yapı sorunlar çıkarabilir.

1.3.2.1 Kinetik modeller

Kinetik modeller, sistemin ve kimyasal reaksiyonların zamana bağılı olarak değişimini ele alan modellerdir. Kinetik modellerde sabit sıcaklık veya sabit basınç gibi varsayımlar yapılabilmektedir. Bu varsayımlar kinetik modelleri HAD analizlerinden ayırmaktadır [29]. Bu modelleri 3 gruba ayırabiliriz; i) sabit yatak modeli, ii) gazlaştırma kanalı modeli, iii) kömür levha modeli.

Sabit yatak modeli

Sabit yatak modelleri 1 boyutlu modeller olup, yeraltında kömür gazlaştırmanın yüksek geçirgenlikli gözenekli sabit yatakta gerçekleştiğini kabul eder. Yüksek geçirgenlikli gözenekli ortama sahip kömür yatakları için geçerlidir [7]. Gözenekli ortamın yarattığı akış için Darcy yasası kullanılmaktadır. Türbülanslı akış ihmal edilir. Ürün gaz kompozisyonu hesaplamada iyi sonuç vermektedir. 1 boyutlu olduğu için kavite boyutlarının değişimini hesaplayamazlar.

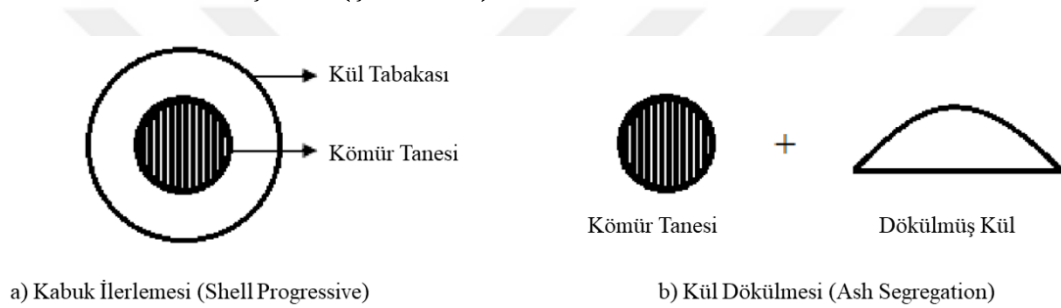
YKG hakkında oluşturulan ilk matematik modeller bu tiptedir. Amerika Birleşik Devletleri'nde yer alan Lawrence Livermore Ulusal Laboratuvarının YKG hakkındaki programı sonucu ortaya çıkan birkaç adet sabit yatak modeli bulunmaktadır. Zamana bağılı, 1 boyutlu sonlu farklar yöntemine dayanan bu modeller temelde farklılık göstermemektedir [7]. Bu modellerde ısı transferi mekanizması olarak iletim ve taşınım dikkate alınmakta, kütle transferinin ise difüzyon ile gerçekleştiği kabul edilmektedir.

Khadse ve diğerleri, yaptıkları 1 boyutlu sabit yatak modelleme çalışmasında akış alanını neredeyse daimi olarak ele almışlardır [30]. Kurulan model ile işletme parametrelerinin ve model sabitlerinin sıcaklık ve gaz kompozisyonuna etkisini incelemişlerdir.

Buhar/Oksijen karışımı beslemesi sırasında gazlaştırma ajanı içerisindeki oksijen oranı artışının (buhar debisi sabit kalmaktadır) kömür bloğu içerisindeki reaksiyon bölgesinin ilerleyiş hızını ve kömür içerisindeki sıcaklık seviyesini arttırdığını belirlemişlerdir. Gazlaştırma ajanı içeriğindeki buhar oranının arttırılması durumunda ise yine reaksiyon bölgesi ilerleme hızı artış göstermiş ancak sıcaklık seviyesi düşmüştür. Ayrıca, buhar/oksijen karışımı beslemesi durumunda en iyi yapay gaz değerlerinin buhar/oksijen oranının 1,5 olduğunda elde edildiğini belirtmişlerdir [30].

Gazlaştırma ajanının etkisi yanında işletme basıncının da sistem üzerinden etkisini inceleyen araştırmacılar farklı işletme basınçlarında üretilen yapay gazın kalorifik değerini hesaplamışlardır. Hesaplama sonucunda işletme basıncının yapay gazın kalorifik değerine etkisi olmadığı görülmüştür [30].

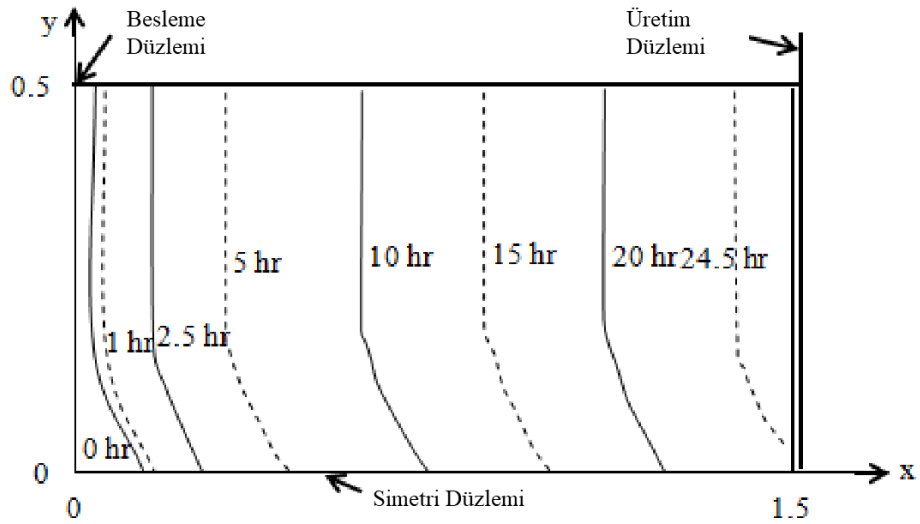
Thorness ve Kang, 1985 yılında 2 boyutlu sabit yatak modeli geliştirmişlerdir [31]. Yatak içerisindeki reaktif akışı ele aldıkları modelde gaz ve katı fazın yerel sıcaklıklarının aynı olduğunu kabul ederek her iki faz için ortak enerji denklemini sıcaklık alanını hesaplamak için kullanmışlardır. Geliştirdikleri modelde diffüzyon etkisini, sınır tabakadan kütle transferi ve heterojen kömür reaksiyon etkisini de içeren kabuk ilerlemesi (Shell Progressive) ve kül dökülmesi (Ash Segregation) reaksiyon modellerini kullanmışlardır (Şekil 1.10).



Şekil 1.10: Sabit yatak modelinde kullanılan kömür reaksiyon modelleri [31].

Kabuk ilerlemesi reaksiyon modelinde reaksiyona girmemiş kömür tanesinin kül tabakası ile kaplı olduğu düşünülmektedir. Reaktif gaz, bu kül tabakası içerisinde diffüze olarak kömür tanesi ile reaksiyona girmektedir. Kül dökülmesi modelinde ise bu kül tabakasının kömür tanesinden ayrılarak döküldüğü kabul edilmektedir. Dökülme sonucu reaksiyona girmemiş kömür tanesi sürekli reaktif gaz ile temas halinde kalmaktadır [31].

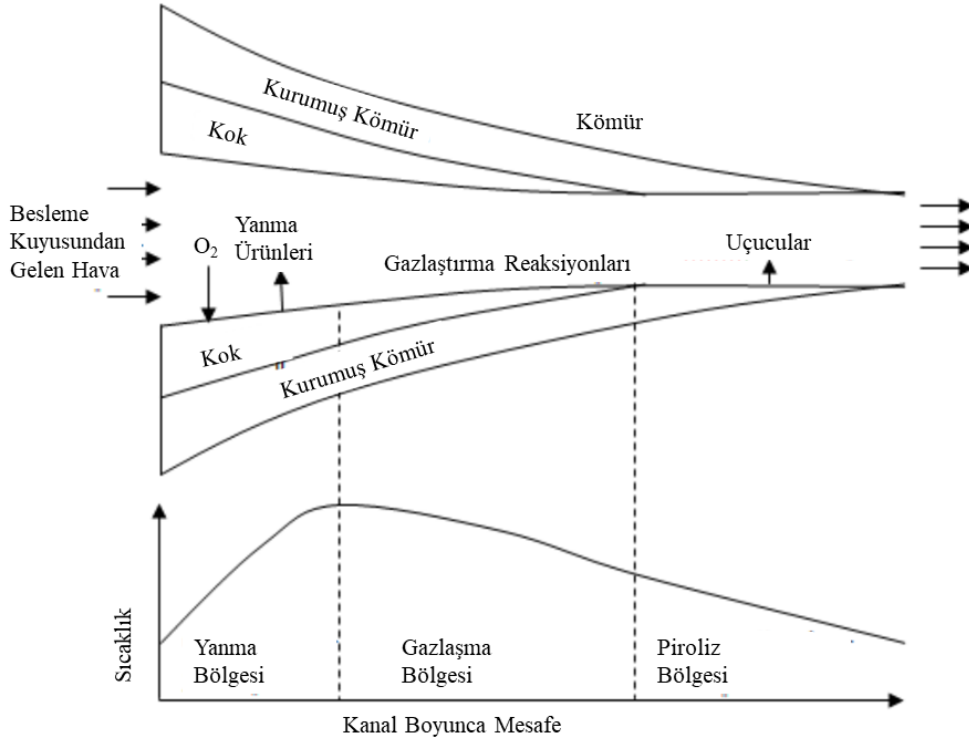
Abdel-Hadi and Hsu (1987) kendilerinden önceki 2 boyutlu sabit yatak modelleri üzerinde geliştirme yapıp eksenel yöndeki yanma önü ilerleyişini hesaplamaya amaçlamışlardır [32]. 1×1,5 m boyutlarında dikdörtgen geometri üzerinde kömür tükenimi inceleyen araştırmacıların belirledikleri saate bağlı olarak yanma önünün ilerleyişi Şekil 1.11’de verilmiştir.



Şekil 1.11: Gazlaştırma sırasında geometri üzerinde zamana bağlı yanma önünün ilerleyişi [32].

Gazlaştırma kanalı modeli

Bu tipteki modeller, kömürün tamamen geçirgen olan ve zamanla genişleyen gazlaştırma kanalı etrafında gazlaştığını varsaymaktadır [8]. Bu modelin şematik gösterimi Şekil 1.12’de verilmiştir.

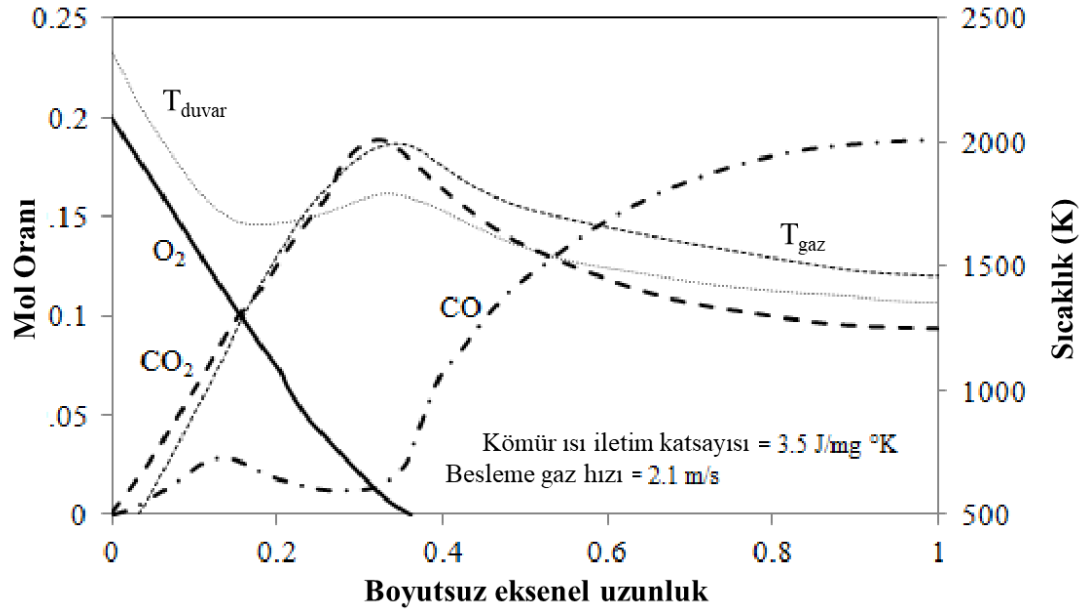


Şekil 1.12: Gazlaştırma kanalı modelinin şematik gösterimi [7].

Gazlaştırma kanalı modeline göre hava veya oksijen kanal boyunca türbülanslı akış ile taşınır. Oksijen sınır tabaka boyunca kömür yüzeyine difüzyon ile taşınır ve reaksiyona

girer. Ürün gazlar sınır tabaka içerisinde tekrar difüzyon ile kanala taşınır. Çoğu gazlaştırma kanalı modeli, kuruma ve piroliz işlemlerini ihmal etmektedir. Buna karşın kavite (oyuk) yapısını tayin etmek için gazlaştırma kanalı modelleri kullanılmaktadır. Bu modeller iki veya üç boyutlu olabilir ve kavite değişimini hesaplayabilmektedirler.

Dinsmoor ve diğerleri, zamandan bağımsız, bir boyutlu olarak geliştirdikleri gazlaştırma kanalı modelinde kanalın silindirik şeklini koruyarak genişlediğini kabul etmişlerdir [3]. Modelde yer alan heterojen reaksiyonların duvarda gerçekleştiği kabul edilen modelde piroliz reaksiyonları yer almamaktadır. Sadece katı fazındaki ısı transferinin dikkate alındığı modelde, gaz fazındaki aksel yönde ısı transferi ise ihmal edilmiştir. Temel kütle transferi mekanizması olarak kanal boyunca gerçekleşen zorlanmış taşınım kabul edilmiş ve buna uygun kütle transferi korelasyonları hesaplamada kullanılmıştır. Hesaplama sonucu elde edilen sonuçlar Şekil 1.13'te verilmiştir.

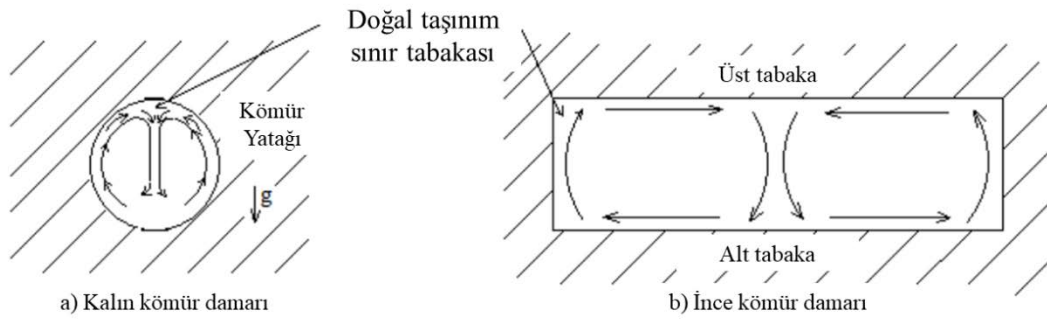


Şekil 1.13: Gazlaştırma kanalı modeli için duvar ve gaz fazı sıcaklık değerleri ve gaz kompozisyonu değişimi [3].

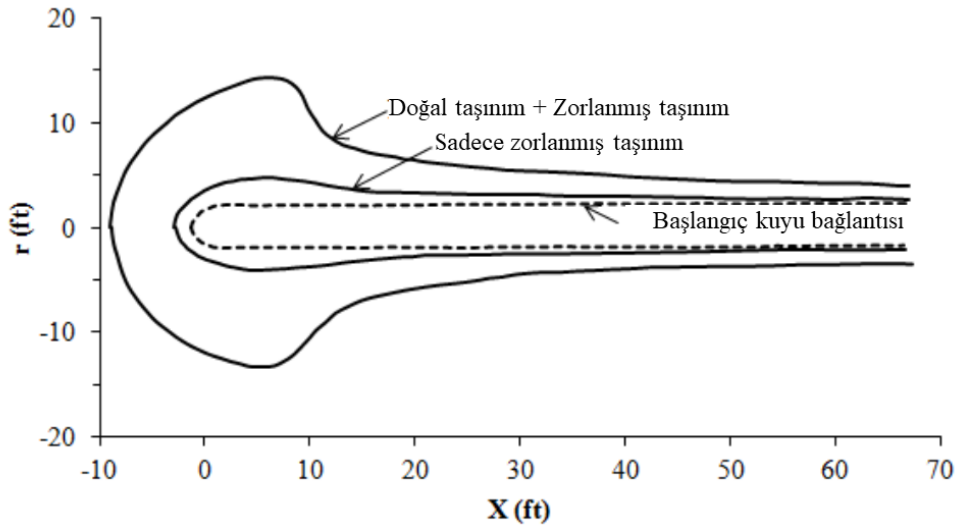
Model çıktısı olarak, özellikle giriş bölgesinde, oldukça yüksek sıcaklık değerleri görüldüğünü belirten araştırmacılar, bu durumun nedeni olarak ise ihmal edilen ısı kayıplarının olabileceğini belirtmişlerdir. Ayrıca, kanal içerisindeki yanma bölgesi sabit yatak modellerine göre 10 kat daha uzun hesaplanmıştır. Bunun nedeni ise, muhtemelen, belirtilen modelde transfer mekanizması olarak sadece zorlanmış taşınımın ele alınması ve doğal taşınımın ihmal edilmesidir.

Schwartz ve diğerleri ise kanal içerisindeki kütle transferinin doğal taşınım kontrollü olduğunun kabul edilmesi halinde kütle transferi miktarının oldukça arttığını belirtmişlerdir [33]. Gazlaştırma kanalına beslenen gazın sınır tabaka içerisine karışmasının Grashof sayısına (Denklem 1.20) bağlı olduğuna belirtmişlerdir. Grashof sayısı 10^8 değerini geçtiğinde karışma etkisinin başladığını, 10^{10} değerine ulaştığında ise yoğunlaştığını belirtmişlerdir [34]. Araştırmacılar, farklı kömür kalınlıkları için doğal taşınımlı akış çizgilerini Şekil 1.14'te vermiştir. Doğal taşınım kavite (oyuk) büyümesine etkisi şematik olarak Şekil 1.15'te verilmiştir.

$$Gr = \frac{gl^3\Delta\rho}{\nu^2\rho} \quad (1.20)$$



Şekil 1.14: Kalın ve ince kömür yatakları için doğal taşınımın etkili olması durumunda akış çevrinti yapıları [33].

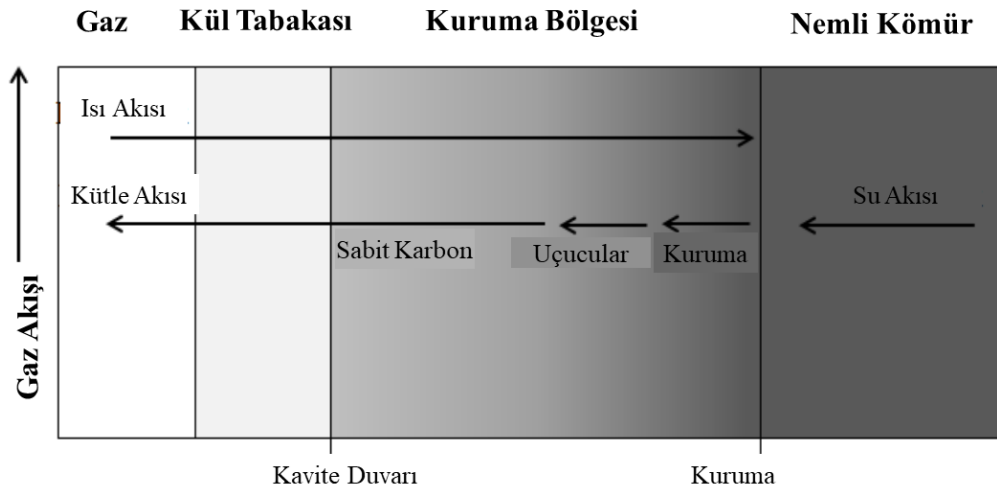


Şekil 1.15: Zorlanmış taşınım ve doğal taşınım için kavite büyümesinin karşılaştırması [33].

Kömür levha modeli

Bu modeller, kömür yatağını yarı sonsuz bir kömür levhası olarak ele almakta ve bu levha içerisinde belirlenen akışkan film tabakası, kül tabakası, kok tabakası, kurumuş kömür tabakası ve işlenmemiş kömür tabakası gibi tabakaların gaz akışına dik yöndeki ilerleyişini hesaplamaktadır (Şekil 1.16). Yarı-sonsuz geometrisinden dolayı kalın kömür damarları için uygun olduğu varsayılmaktadır. 1 boyutlu olduklarından dolayı, kömür levha modelleri ile kavite büyüme şekli hesaplanamamaktadır.

Perkins ve Sahajwalla, 1 boyutlu ve zamana bağlı olan kömür levha modellerinde çok fazlı difüzyon katsayısı hesabını ve değişken gözenekliliği dikkate almışlardır [35,36]. Kavite büyümesinin sadece gazlaştırma reaksiyonları ile gerçekleştiğini kabul eden araştırmacılar, buna uygun olarak sadece heterojen gazlaştırma reaksiyonlarını hesaba dâhil etmişlerdir. Reaksiyonlar için gereken ısı ise kavite duvarına tanımlanan sabit sıcaklık değeri ile sağlanmıştır. Oluşturdukları model ile ayrıca kavite büyüme üzerine parametrik çalışma yürütmüşlerdir. Kavite duvar sıcaklığının, kuruma bölgesinden gelen su akışının ve kömür içeriğinin kavite büyümesine en çok etki eden faktörler olarak belirlemişlerdir.



Şekil 1.16: Kömür levha modelinin şematik gösterimi [36].

1.3.2.2 Denge modelleri

Termokimyasal denge modelleri özellikle gazlaştırma reaksiyonlarının gaz fazı üzerinde etkisini inceleyen ve yapay gaz içerik tahmini için kullanılan modellerdir. Termokimyasal denge modellerinde non-lineer denklem takımı çözüldüğü için çözüm maliyeti kinetik modellere ve HAD analizlerine göre daha düşüktür. Çözüm maliyeti

düşük olmasına karşın özellikle yapay gaz içeriği hakkında önemli tahminler verebilmektedirler. Denge modelleri stokiyometrik denge modelleri ve stokiyometrik olmayan denge modelleri olarak ikiye ayrılmaktadır. Stokiyometrik denge modellerinde kütle dengesinin yanında termodinamik dengeyi sağlamak için gazlaştırma işleminde etkin olduğu düşünülen belli başlı reaksiyonların denge sabitleri kullanılmaktadır. Stokiyometrik olmayan modellerde ise, termodinamik dengeyi sağlamak için, sistemi oluşturan bileşenlerin Gibbs serbest enerjisinin en az olduğu kompozisyon değeri hesaplanmaktadır. Gibbs serbest enerjisinin hesabından dolayı stokiyometrik olmayan modeller stokiyometrik modellere göre daha uzun sürede sonuç vermektedir. Yeraltı kömür gazlaştırma işlemi için geliştirilen denge modellerine ait detaylar Zogala tarafından verilmiştir [37].

1.3.2.3 Hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) analizleri

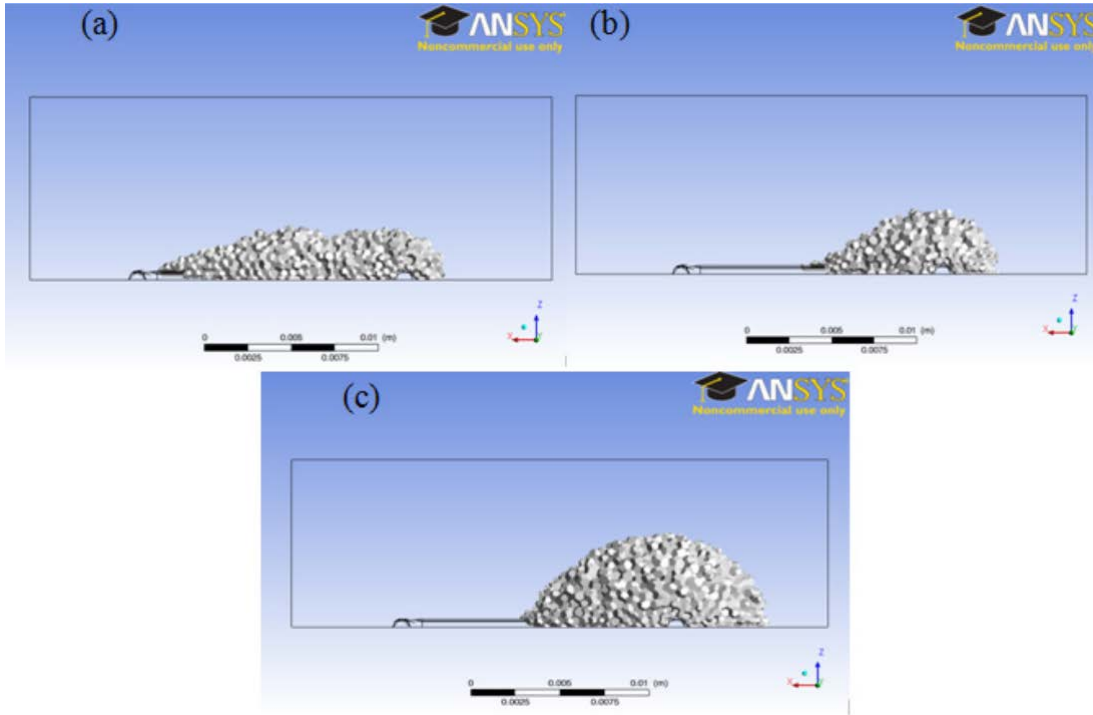
Hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) analizleri, kinetik modellerden farklı olarak paket programlar kullanılarak oluşturulan ve çözüm elde edilen analizlerdir. Paket programlarının modelleme ve çözüm konusunda sağladığı kolaylıklar sebebiyle genellikle YKG işlemi HAD analizlerinde 3 boyutlu olarak modellenmektedir. ANSYS Fluent, CMG Stars, Star CCM+, Comsol Multiphysics ve ABAQUS yeraltı kömür gazlaştırma işlemi için şu ana kadar kullanılmış belli başlı paket programlardır. Paket programların kullanımındaki tek eksi özellik ise programların, yeraltı kömür gazlaştırma için gereken tüm matematik modelleri yapısında bulundurmamasıdır. Araştırmacılar bu durumu aşmak için programların kullanıcı tanımlı harici fonksiyon ekleme özelliklerini kullanarak YKG için çözüm elde edebilmektedirler.

HAD analizi yaklaşımı ile gerçekleştirilen modelleme çalışmalarından en önemlilerinden bir tanesi Shirazi ve diğerleri tarafından gerçekleştirilmiştir [38,39]. YKG işlemi uygulanan kömür bloğu ölçeklendirilerek $3 \times 1,5 \times 2$ cm boyutlarında 3 boyutlu geometri üzerinde model çözümü sağlanmıştır.

Kömür bloğu gözenekli ortama olarak ele alınmış ve gözenekli ortamın akış üzerinde yarattığı direnç ise momentum korunum denklemine eklenen kaynak terimle sağlanmıştır. Ayrıca gözenekli ortamda katı ve gaz fazların ısı denge halinde olduğu varsayılarak tek enerji korunum denklemi kullanılmıştır. ANSYS Fluent programı içerisinde gözenekli ortamda heterojen reaksiyonlar yer almadığı için heterojen

reaksiyonlar kullanıcı tanımlı harici fonksiyonlar ile hesaba katılmıştır. Bu reaksiyonlar ile zaman içerisinde bölgesel olarak tükenen kömür bileşenlerinin değişimi kullanıcı tanımlı harici değişkenler kullanılarak hesaba katılmıştır.

Geliştirilen modelde kavite büyümesi ise kömür bileşenlerinin sistem içerisinde gerçekleşen reaksiyonlara bağlı olarak tükenmesi sonucu gerçekleşmektedir. Gözenekli ortam için geçirgenlik değerinin de tanımlandığı modelde başlangıç geçirgenlik değerinin kavite büyüme şekline etkisi hesaplanmıştır. Sonuçlar, Şekil 1.17’de verilmiştir.



Şekil 1.17: Farklı başlangıç geçirgenlik değerleri için kavite şekli. (a) 1 mD, (b) 100 mD, (c) 10 D [38].

Bu çalışmada, kavite büyümesi için elde edilen model çıktıları deneysel sonuçlarla karşılaştırılarak geçerlilik sağlanmıştır.

- Kuruma ve piroliz düşük sıcaklıklarda gerçekleşen tek kademeli, hacimsel reaksiyon olarak kabul edilmiştir.
- Gözenekli ortamda gaz ve katının ısı denge içerisinde olduğu varsayılmıştır.
- Gözenekli ortamın gözeneklilik ve geçirgenlik değerlerinin kömür içeriğindeki nem, uçucu ve sabit karbon içeriğinin dönüşümüne bağlı olarak değiştiği kabul edilmiştir.
- Gaz fazı akışının türbülanslı olduğu kabul edilmiştir.
- Gaz-gaz reaksiyonların türbülans kontrollü olduğu kabul edilmiştir.

2.2 Korunum Denklemleri ve Yardımcı Denklemler

2.2.1 Toplam kütle korunumu

Korunum denklemlerinin ilki toplam kütle korunumudur (Denklem 2.1). Aşağıda belirtilen denklem gözenekli ortam için yazılmıştır. γ_g ifadesiyle gözenekli ortamın gözeneklilik miktarı belirtilmektedir. Kömür bölgesi için bu değer değişken olmakla birlikte gazlaştırma kanalı için 1'e eşittir. Bu durum diğer transport-korunum denklemleri için de geçerlidir.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\gamma_g \rho_g) + \nabla \cdot (\gamma_g \rho_g \vec{u}_g) = \gamma_g \Sigma \dot{S}_g \quad (2.1)$$

Yukarıda belirtilen toplam kütle korunum denkleminin bir diğer önemli noktası ise eşitliğin sağ tarafında yer alan kaynak terimlerdir. Bu kaynak terimler, kuruma, piroliz, homojen reaksiyonlar ve heterojen reaksiyonlar sonucu akışkan ortamına giren veya ortamda değişen kütlenin hesaba katılmasını sağlamaktadır. Kaynak terimin açık hali aşağıda (Denklem 2.2-2.6) verilmiştir.

$$\Sigma \dot{S}_g = \dot{S}_{kuruma} + \dot{S}_{piroliz} + \dot{S}_{homojen\ reaksiyonlar} + \dot{S}_{heterojen\ reaksiyonlar} \quad (2.2)$$

$$\dot{S}_{homojen\ reaksiyonlar} = \dot{S}_{CO\ yanma} + \dot{S}_{H_2\ yanma} + \dot{S}_{Su-Gaz\ de\u0131i\u015fimi} \quad (2.3)$$

$$\dot{S}_{heterojen\ reaksiyonlar} = \dot{S}_C\ yanma + \dot{S}_{CO_2\ gazla\u015fma} + \dot{S}_{H_2O\ gazla\u015fma} \quad (2.4)$$

$$\dot{S}_{kuruma} = R_{H_2O, kuruma} \quad (2.5)$$

$$\dot{S}_{piroliz} = R_{H_2O,piroliz} + R_{H_2,piroliz} + R_{CO_2,piroliz} + R_{CO,piroliz} \quad (2.6)$$

3 adet homojen reaksiyon 3 adet de heterojen reaksiyon model içerisinde yer almaktadır. Bu reaksiyonların kaynak terimlerinin açık hali de Denklem 2.7-2.12’de verilmiştir.

$$\dot{S}_{CO \text{ yanma}} = R_{CO,CO \text{ yanma}} + R_{O_2,CO \text{ yanma}} + R_{CO_2,CO \text{ yanma}} \quad (2.7)$$

$$\dot{S}_{H_2 \text{ yanma}} = R_{H_2,H_2 \text{ yanma}} + R_{O_2,H_2 \text{ yanma}} + R_{H_2O,H_2 \text{ yanma}} \quad (2.8)$$

$$\dot{S}_{Su-Gaz \text{ deęiřimi}} = R_{CO,S-G} + R_{H_2O,S-G} + R_{CO_2,S-G} + R_{H_2,S-G} \quad (2.9)$$

$$\dot{S}_C \text{ yanma} = R_{O_2,C \text{ yanma}} + R_{CO_2,C \text{ yanma}} \quad (2.10)$$

$$\dot{S}_{CO_2 \text{ gazlařma}} = R_{CO_2,CO_2 \text{ gazlařma}} + R_{CO,CO_2 \text{ gazlařma}} \quad (2.11)$$

$$\dot{S}_{H_2O \text{ gazlařma}} = R_{H_2O,H_2O \text{ gazlařma}} + R_{CO_2,H_2O \text{ gazlařma}} + R_{H_2,H_2O \text{ gazlařma}} \quad (2.12)$$

Bu ifadelerde alt indislerden ilki ilgili bileřeni, ikincisi kaynak terimi ortaya ıkaran reaksiyonu ifade etmektedir. Modelde yer alan reaksiyonlar ileriki blmlerde aıklanacaktır. Bu reaksiyonlardan biri olan ve yine alt indis olarak belirtilen $S - G$ ise su-gaz deęiřimi reaksiyonu kaynaklı ktle deęiřimidir. Yukarıda verilen kaynak terimleri modelde yer alan kimyasal bileřenler (molekller) cinsinden de yazmak mmkndr (Denklem 2.13).

$$\Sigma \dot{S}_g = \Sigma R_{O_2} + \Sigma R_{CO_2} + \Sigma R_{CO} + \Sigma R_{H_2O} + \Sigma R_{H_2} \quad (2.13)$$

2.2.2 Momentum korunumu

Aynı zamanda kmr blgesi olan gzenekli ortam iin momentumun korunumu denklemi Denklem 2.14’te verilmiřtir. Eřitlięin saę tarafındaki son terim gzenekli ortamın yarattıęı momentum direncini temsil etmektedir. Darcy yasası olarak da bilinen bu ifadeye gre gzenekli ortamın yarattıęı basın kaybı hızla orantılıdır [40].

$$\nabla p = -\frac{\mu}{\alpha} \vec{u}_g \quad (2.14)$$

Hızla orantıyı belirten α simgesi ile gösterilen geçirgenlik katsayısıdır. Bu katsayı, kuruma, piroliz ve yanma sonucu kömürün yapısı, gözenekliliği değiştikçe değişime uğramaktadır [7,38]. Matematik modelde de bu durum dikkate alınmış kömür yapısına göre geçirgenlik değerinin değişimi sağlanmıştır. Bu direnç terimi gazlaştırma kanalında sıfıra eşittir.

Denklem 2.15'in sol tarafındaki terimlerle çarpım halinde bulunan gözeneklilik ifadesi ise, önceden de belirtildiği gibi, gazlaştırma kanalında 1'e eşittir.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\gamma_g \rho_g \vec{u}_g) + \nabla \cdot (\gamma_g \rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\nabla P_g + \nabla^2 \vec{u}_g + \rho_g \vec{g} - \frac{\mu}{\alpha} \vec{u}_g \quad (2.15)$$

2.2.3 Türbülans modeli

YKG işlemi sırasında, gazlaştırma kanalı veya kavite içerisindeki akış incelendiği zaman türbülanslı bir akış yapısının olması beklenmektedir. Kuyper ve diğerlerinin çalışması göstermektedir ki kavite içerisinde iki difüzyon etkili türbülanslı doğal taşınım mekanizması momentum transferi açısından etkindir [41]. İki difüzyon etkisi geometri boyunca görülen sıcaklık ve derişiklik farkları kaynaklıdır. İki difüzyon etkili türbülanslı doğal taşınımın etkin olması için Grashoff sayısı 10^{10} 'dan, Reynolds sayısı 10^4 'ten büyük, Gr/Re^2 oranından 1'den çok daha büyük olması gerekmektedir. Bu şartlar sağlandığı takdirde, kavite içerisinde zorlanmış taşınım ve doğal taşınımın birlikte etkin olduğu dönümlü bir akış beklenmektedir [7].

Kavite içerisindeki türbülanslı akışı modellemek için iki denklemlili k- ϵ türbülans modeli kullanılmıştır. Aşağıda belirtilen türbülans kinetik enerji ve dissipasyon denklemlerin (Denklem 2.16,2.17) çözümüyle türbülanslı akış için karakteristik uzunluk ve zaman değerleri belirlenmektedir [42].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g k) + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}_g k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_g + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + G_k + G_b - \rho_g \epsilon \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \epsilon) + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}_g \epsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_g + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} G_k - C_{2\epsilon} \rho_g \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.17)$$

Türbülans kinetik enerji ve dissipasyon değerine göre türbülans (eddy) viskozite değeri Denklem 2.18'e göre hesaplanmaktadır.

$$\mu_t = \frac{\rho_g C_\mu k^2}{\varepsilon} \quad (2.18)$$

Bu denklemlerin içindeki G_k ortalama hız gradyenlerinden kaynaklı türbülans üretimini, G_b kaldırma kuvvetleri kaynaklı türbülans üretimini belirtmektedir. $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ ve C_μ model için kullanılan sabitler olup σ_k ve σ_ε türbülans Prandtl sayılarıdır. Bu ifadelerin karşılıkları aşağıda (Denklem 2.19-2.23) verilmiştir.

$$C_{1\varepsilon} = 1,44 \quad (2.19)$$

$$C_{2\varepsilon} = 1,92 \quad (2.20)$$

$$C_\mu = 0,09 \quad (2.21)$$

$$\sigma_k = 1,0 \quad (2.22)$$

$$\sigma_\varepsilon = 1,3 \quad (2.23)$$

2.2.4 Enerji korunumu

Gözenekli ortamda enerji korunumu (Denklem 2.24) için katı ve gaz fazlarının ısıl denge içerisinde olduğu varsayımı yapılmıştır. Bu varsayım sayesinde hesaplama maliyetinin düşürülmesi amaçlanmıştır.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\gamma_g \rho_g E_g + (1 - \gamma_g) \rho_s E_s) + \nabla \cdot (\vec{u}_g (\rho_g E_g + p)) \\ = \Sigma \nabla \cdot \left[k_e \nabla T - \left(\sum_i h_i J_i \right) \right] + \Sigma S_h \end{aligned} \quad (2.24)$$

Yukarıda verilen gözenekli ortam için ısıl denge varsayımına dayanan enerji denkleminde kapalı halde verilen terimlerin açık halleri aşağıda, Denklem 2.25-2.28'de verilmiştir.

$$E_g = h_g - \frac{p}{\rho_g} + \frac{u^2}{2} \quad (2.25)$$

$$h_g = \sum_i Y_i h_i \quad (2.26)$$

$$E_s = h = \int_{T_{ref}}^T c_p dT \quad (2.27)$$

$$k_e = \gamma_g k_g + (1 - \gamma_g) k_s \quad (2.28)$$

Denklemin sağ tarafındaki ikinci terim olan, $\sum_i h_i J_i$ terimi ise gaz bileşenlerin difüzyonundan kaynaklı enerji transferini hesaba katmaktadır. Denklem 2.29'daki boyutsuz Lewis sayısı üzerinden difüzyon kaynaklı ısı transferinin etkisi belirlenebilir.

$$Le_i = \frac{k}{\rho c_p D_{i,m}} \quad (2.29)$$

Denklemin sağ tarafındaki son terim ise reaksiyonlardan kaynaklı ısı üretim terimidir ve açık hali aşağıda, Denklem 2.30-2.34'te verilmiştir.

$$\begin{aligned} \Sigma S_h = & - \sum_i \frac{h_i^0}{M_i} R_i + S_{kuruma}^h + S_{C\text{ yanma}}^h + S_{CO_2\text{ gazlaşma}}^h \\ & + S_{H_2O\text{ gazlaşma}}^h ; i \in \{O_2, CO_2, CO, H_2O, H_2\} \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$S_{kuruma}^h = -k_{kuruma} (Y_{nem,limit} - Y_{nem}) \rho_{kömür} \frac{H_{kuruma}^r}{M_{H_2O}} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} S_{C\text{ yanma}}^h = & k_{C,yanma} (Y_{C,limit} \\ & - Y_C) \left(\frac{P + P_{atm}}{P_{atm}} \right) Y_{M,O_2} \rho_{kömür} \frac{H_{C\text{ yanma}}^r}{M_C} \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$S_{CO_2\text{ gazlaşma}}^h = k_{CO_2,gazlaşma} (Y_{C,limit} - Y_C) \rho_{kömür} \frac{H_{CO_2\text{ gazlaşma}}^r}{M_C} \quad (2.33)$$

$$S_{H_2O}^h = k_{H_2O,gazlaşma} (Y_{C,limit} - Y_C) \rho_{kömür} \frac{H_{H_2O\text{ gazlaşma}}^r}{M_C} \quad (2.34)$$

Yukarıda ifadelerde H^r ile reaksiyonun ısı değeri belirtilmiştir. k ile de ilgili reaksiyonun hızı temsil edilmektedir. Kaynak terimlerinden sabit karbonun yanma reaksiyonu için verilen ifadede yer alan Y_{M,O_2} terimiyle oksijenin ortamdaki molar

derişimi ifade edilmekte olup oksijen kısmi basıncının atm birimi üzerinden hesabı için kullanılmaktadır.

2.2.5 Bileşenlerin kütle korunumu

Modelde yer alan gaz bileşenler olarak, üretilen yapay gazın büyük çoğunluğunu oluşturan karbondioksit, karbonmonoksit, hidrojen, su buharı, oksijen ve azot seçilmiştir. Her bir gaz bileşenin reaktör geometrisi içindeki dağılımını belirlemek için kütle korunumu prensibi kullanılarak kütle oranlarının değişimi ifade eden kısmi diferansiyel denklemler kullanılmıştır.

Katı bileşenler ise kömür içeriğinde yer alan ve reaksiyonlar ilerledikçe miktarı değişen nem, uçucu ve sabit karbon içeriğidir. Bu bileşenlerin her biri için zamana göre değişimini veren adi diferansiyel denklemler kullanılmıştır.

2.2.5.1 Gaz fazındaki bileşenlerin kütle korunumu

Gaz fazındaki bileşenlerin sistem boyunca ve işletme süresince taşınımını ve difüzyonunu hesaplamak için her birinin yerel kütle oranının değişimini veren kısmi diferansiyel denklemler kullanılmıştır. Gözenekli ortam için Denklem 2.35'teki ilgili terimler gözeneklilik değeri ile çarpılmıştır. Bu denklem sadece oksijen, karbondioksit, karbonmonoksit, su ve hidrojen için çözülmüştür. Azotun kütle oranı ise sürekliliği sağlamak için diğer bileşenlerin kütle oranlarının toplamını 1 yapacak şekilde belirlenmiştir [40]. Yüksek sıcaklıklarda azot gazının oksijen ile reaksiyona girdiği bilirse de hesaplama kolaylığı için sistem içerisinde azotun inert gaz olarak davrandığı kabul edilmiştir ve tamamlayıcı bileşen olarak seçilmeye uygun görülmüştür.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\gamma_g \rho_g Y_{i,g}) + \nabla \cdot (\gamma_g \rho_g \vec{u}_g Y_{i,g}) = -\nabla \cdot (\gamma_g \vec{J}_i) + \gamma_g R_g \quad (2.35)$$

$$i \in \{O_2, CO_2, CO, H_2O, H_2\}$$

Denklemin sağ tarafında yer alan difüzyon teriminin açık hali Denklem 2.36'da verilmiştir. Difüzyon terimi içerisinde yer alan türbülans difüzyon katsayısı türbülans Schmidt sayısı (Denklem 2.37) ile hesaplanmıştır. Türbülans Schmidt sayısı 0,7 olarak alınmıştır [43].

$$\vec{J}_i = -\left(\rho_g D_e + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_{i,g} \quad (2.36)$$

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho D_t} \quad (2.37)$$

Gaz bileşenleri için kütle korunumu denkleminin sağ tarafındaki son terim reaksiyon kaynak terimidir. Sistemde yer alan homojen ve heterojen reaksiyonlar ve reaksiyon olarak modellenen kuruma ve piroliz işlemlerinden kaynaklı terimin açık hali her bir bileşen için aşağıda verilmiştir.

Oksijen için kütle korunumu denklemi (Denklem 2.38) yazıldığında yer alan kaynak terimler karbonmonoksitin, hidrojenin ve sabit karbonun yanma reaksiyonundan gelmektedir.

$$\begin{aligned} \Sigma R_{O_2} = M_{O_2} & \left(-\frac{1}{2} k_{f,CO \text{ yanma}} [CO] [O_2]^{0,25} - \frac{1}{2} k_{f,H_2 \text{ yanma}} [H_2] [O_2] \right) \\ & - k_{C, \text{yanma}} (Y_{C, \text{limit}} - Y_C) \left(\frac{P + P_{atm}}{P_{atm}} \right) Y_{M, O_2} \rho_{kömür} \frac{M_{O_2}}{M_C} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Karbondioksit için kaynak terimler (Denklem 2.39) piroliz, karbonmonoksit ve sabit karbon yanması, karbondioksit gazlaşma reaksiyonu ve su-gaz değişimi reaksiyonundan gelmektedir.

$$\begin{aligned} \Sigma R_{CO_2} = M_{CO_2} & (k_{f,CO \text{ yanma}} [CO] [O_2]^{0,25} + k_{f,S-G} [CO] [H_2O] \\ & - k_{b,S-G} [CO_2] [H_2]) \\ & + k_{C, \text{yanma}} (Y_{C, \text{limit}} - Y_C) \left(\frac{P + P_{atm}}{P_{atm}} \right) Y_{M, O_2} \rho_{kömür} \frac{M_{CO_2}}{M_C} \\ & - k_{CO_2, \text{gazlaşma}} (Y_{C, \text{limit}} - Y_C) \rho_{kömür} \frac{M_{CO_2}}{M_C} \\ & + x_{CO_2} k_{piroliz} (Y_{uçucu, \text{limit}} - Y_{uçucu}) \rho_{kömür} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Karbonmonoksit bileşeni için kaynak terimler (Denklem 2.40) piroliz, karbonmonoksit yanması, karbondioksit gazlaşma, su gazlaşma ve su-gaz değişimi reaksiyonu kaynaklıdır.

$$\begin{aligned}
\Sigma R_{CO} = & M_{CO}(-k_{f,CO \text{ yanma}}[CO][O_2]^{0,25} - k_{f,S-G}[CO][H_2O] \\
& + k_{b,S-G}[CO_2][H_2]) \\
& + 2k_{CO_2,gazlaşma}(Y_{C,limit} - Y_C)\rho_{kömür} \frac{M_{CO}}{M_C} \\
& + k_{H_2O,gazlaşma}(Y_{C,limit} - Y_C)\rho_{kömür} \frac{M_{CO}}{M_C} \\
& + x_{CO}k_{piroliz}(Y_{uçucu,limit} - Y_{uçucu})\rho_{kömür}
\end{aligned} \tag{2.40}$$

Su buharını üretimi veya tüketimi kuruma, piroliz, hidrojen yanması, su gazlaşma ve su-gaz değişim reaksiyonu kaynaklıdır (Denklem 2.41).

$$\begin{aligned}
\Sigma R_{H_2O} = & M_{H_2O}(k_{f,H_2 \text{ yanma}}[H_2][O_2] - k_{f,S-G}[CO][H_2O] \\
& + k_{b,S-G}[CO_2][H_2]) \\
& - k_{H_2O,gazlaşma}(Y_{C,limit} - Y_C)\rho_{kömür} \frac{M_{H_2O}}{M_C} \\
& + k_{kuruma}(Y_{nem,limit} - Y_{nem})\rho_{kömür} \\
& + x_{H_2O}k_{piroliz}(Y_{uçucu,limit} - Y_{uçucu})\rho_{kömür}
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Hidrojen için kaynak terimleri ise piroliz, hidrojen yanma reaksiyonu, su gazlaşma ve su-gaz değişimi reaksiyonundan gelmektedir (Denklem 2.42).

$$\begin{aligned}
\Sigma R_{H_2} = & M_{H_2}(-k_{f,H_2 \text{ yanma}}[H_2][O_2] + k_{f,S-G}[CO][H_2O] \\
& - k_{b,S-G}[CO_2][H_2]) \\
& + k_{H_2O,gazlaşma}(Y_{C,limit} - Y_C)\rho_{kömür} \frac{M_{H_2}}{M_C} \\
& + x_{H_2}k_{piroliz}(Y_{uçucu,limit} - Y_{uçucu})\rho_{kömür}
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Yukarıda yazılı eşitliklerdeki, k reaksiyon hızını, Y_{M,O_2} oksijenin molar derişikliğini, M_i mol kütlesini belirtmektedir. Alt indislerden f ileri yönlü reaksiyonu, b geri yönlü reaksiyonu belirtmektedir.

Uçucu kaynak terimlerinde yer alan x_i , reaksiyon olarak modellen uçucuların ayrışması (piroliz) işleminin reaksiyon denklemindeki her bir bileşenin stokiometrik katsayısıdır. Uçucuların ayrışması için reaksiyon denklemi ileride verilmiştir.

Yine bileşenlerin kaynak terimlerinde yer alan $Y_{j,limit}$ ise kömürün kısa analiz sonucunda yer alan sabit karbon, uçucu ve nem oranlarıdır. Kömürün kısa analiz sonucundaki bu değerler katı bileşenlerin hesaplama sonucu alabileceği sınır değerler olduğu gibi ilgili reaksiyonların kaynak terimlerini doğrudan etkilemektedir.

2.2.5.2 Katı fazındaki bileşenlerin kütle korunumu

Katı bileşenler olarak kömürün içeriğindeki nem, uçucular ve sabit karbon belirlenmiştir. Gazlaşma veya yanma işleminde, genel olarak, kömürün içeriğindeki bu bileşenler hal değiştirerek veya çeşitli reaksiyonlara girerek zaman içinde tükenmektedir. Bu bileşenlerin tükenmesiyle kömür de tükenmekte ve geriye sadece kömürün kül içeriği kalmaktadır. İlgili bileşenlerin tükenimini belirlemek için her biri ayrı bir değişken olarak ele alınmış ve reaksiyon kaynak terimleri ile bölgesel olarak zamana bağlı değişimleri sağlanmıştır.

Sabit karbon içeriğinin zamana bağlı değişimini veren diferansiyel denklem ve kaynak terimlerin açık hali aşağıda, Denklem 2.43-2.47’de verilmiştir. Bu ifadelerdeki bazı sembollerin açıklamaları önceki bölümlerde verilmiştir.

$$\frac{d\rho_g Y_C}{dt} = \Sigma R_C \quad (2.43)$$

$$\Sigma R_C = R_{C \text{ yanma}} + R_{CO_2 \text{ gazlaşma}} + R_{H_2O \text{ gazlaşma}} \quad (2.44)$$

$$R_{C \text{ yanma}} = -k_{C \text{ yanma}}(Y_{C,limit} - Y_C) \left(\frac{P + P_{atm}}{P_{atm}} \right) Y_{M,O_2} \rho_g \quad (2.45)$$

$$R_{CO_2 \text{ gazlaşma}} = -k_{CO_2, \text{gazlaşma}}(Y_{C,limit} - Y_C) \rho_g \quad (2.46)$$

$$R_{H_2O \text{ gazlaşma}} = k_{H_2O \text{ gazlaşma}}(Y_{C,limit} - Y_C) \rho_g \quad (2.47)$$

Uçucu içeriğinin zamana bağlı değişimini veren ifade ve ifadedeki kaynak terimin açık hali aşağıda (Denklem 2.48,2.49) verilmiştir.

$$\frac{d\rho_g Y_{uçucu}}{dt} = R_{uçucu} \quad (2.48)$$

$$R_{uçucu} = -\sum_i x_i k_{piroliz}(Y_{uçucu,limit} - Y_{uçucu}) \rho_g \quad i \in \{CO_2, CO, H_2O, H_2\} \quad (2.49)$$

Kömürün nem içeriğinin değişimini gösteren denklik ise aşağıdadır (Denklem 2.50,2.51).

$$\frac{d\rho_g Y_{nem}}{dt} = R_{nem} \quad (2.50)$$

$$R_{nem} = -k_{kuruma}(Y_{nem,limit} - Y_{nem})\rho_g \quad (2.51)$$

2.2.6 Kimyasal reaksiyonlar

Yanma ve gazlaşma işlemlerini gerçekleştiren homojen ve heterojen reaksiyonların yanında kömür içerisinde yüksek sıcaklıkta gerçekleşen kuruma ve piroliz işlemleri de reaksiyon modelleri kullanılarak matematik model içerisinde yer almıştır (Çizelge 2.1).

Çizelge 2.1: YKG matematik modelinde yer alan kimyasal reaksiyonlar ve reaksiyonların ısı değerleri

	Reaksiyonlar	ΔH (kJ/mol)
Kuruma	$Kömür \rightarrow Kurumuş Kömür + H_2O$	+40
Piroliz	$Uçucular \rightarrow CO_2 + CO + H_2O + H_2$	0
Homojen Reaksiyonlar	Karbonmonoksit Yanması $CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	-111
	Hidrojen Yanması $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$	-242
	Su-Gaz Değişim Reaksiyonu $CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$	-41
	Sabit Karbon Yanması $C + O_2 \rightarrow CO_2$	-393
Heterojen Reaksiyonlar	Karbondioksit Gazlaştırma $C + CO_2 \rightarrow 2CO$	+172
	Su Buharı Gazlaştırma $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	+131

Kuruma, piroliz ve heterojen reaksiyonlar için hacimsel reaksiyon varsayımı ile aşağıda verilen Arrhenius ifadesi kullanılmıştır. Bu ifadedeki sırasıyla A_r reaksiyon katsayısı, n basınç üsteli ve E_r reaksiyonun aktivasyon enerjisidir. Bu sabitler ilgili

reaksiyona göre değişmektedir ve Çizelge 2.2’de bu sabitler verilmiştir. Arrhenius ifadesinin (Denklem 2.52) hesabından sonra reaksiyon hızı hesaplanır (Denklem 2.53). Her bir reaksiyon için kinetik hız ifadesinin açık hali bileşenlerin kütle korunumu bölümündeki kaynak terim ifadelerinde verilmiştir.

$$k_r = A_r P_r^n \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right) \quad (2.52)$$

$$R_{kimyasal} = (v_i'' - v_i') \left(k_r \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{j,r} + \eta''_{j,r}} \right) \quad (2.53)$$

Homojen reaksiyonlar ise hacimsel reaksiyon/eddy dissipasyon modeli kullanılarak çözümlenmiştir. Bu modele göre reaksiyon hızı hacimsel reaksiyona göre ve eddy dissipasyon modeline göre hesaplanmıştır.

Çizelge 2.2: YKG matematik modelinde yer alan reaksiyonların Arrhenius reaksiyon hızı denklemi için sabitleri.

	Reaksiyonlar	A (1/atm ⁿ s)	E (kJ/kmol)	n	Ref.
Homojen Reaksiyonlar	Kuruma	$5,10 \times 10^4$	78240	-	[44]
	Piroliz	$5,10 \times 10^4$	78240	-	[44]
	Karbonmonoksit Yanması	$2,24 \times 10^{12}$	107000	-	[40]
	Hidrojen Yanması	$9,87 \times 10^8$	31000	-	[40]
	Su-Gaz Değişim Reaksiyonu	$2,78 \times 10^6$	12500	-	[45]
Heterojen Reaksiyonlar	Sabit Karbon Yanması	$3,07 \times 10^5$	100400	1	[46]
	Karbondioksit Gazlaştırma	22,11	91000	0	[47]
	Su Buharı Gazlaştırma	$4,35 \times 10^3$	131000	0	[47]

Eddy dissipasyon modeline göre reaksiyon türbülans kaynaklı karışım kontrollüdür. Yapılan çalışmalar, türbülans kontrollü reaksiyon modelleri kullanıldığında yanma bölgesi içerisindeki sıcaklık ve bileşen kompozisyonun daha doğru hesapladığını

göstermektedir [48,49]. İki modelin bir arada kullanılmasının nedeni ise reaksiyonların başlaması için kinetik modele ihtiyaç duyulmasıdır [43]. Reaksiyon, başladıktan sonra, türbülans kontrollü bir şekilde ilerlemektedir.

Kinetik reaksiyon hızlarının ihmal edildiği Eddy dissipasyon modelinde türbülans kinetik enerjisi (k) ve eddy dissipasyonuna (ε) bağlı olarak reaksiyon hızı belirlenmektedir. Reaksiyon hızını belirlemek için aşağıda verilmiş olan iki bağıntı da çözülmekte ve değer olarak küçük olan sonuç reaksiyon hızı olarak kullanılmaktadır (Denklem 2.53-2.56).

$$R_{i,r,türbülans} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho_g \frac{\varepsilon}{k} \min \mathcal{R} \left(\frac{Y_{\mathcal{R}}}{v'_{\mathcal{R},r} M_{w,\mathcal{R}}} \right) \quad (2.53)$$

$$R_{i,r,t} = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho_g \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_p Y_p}{\sum_j^N v''_{j,r} M_{w,j}} \quad (2.54)$$

$$A = 4,0 ; \text{ ampirik sabit} \quad (2.55)$$

$$B = 0,5 ; \text{ ampirik sabit} \quad (2.56)$$

Alt indislerden $\mathcal{R}$ reaksiyona giren bileşenleri, P ise reaksiyonun ürün bileşeneni temsil etmektedir.

Modelde yer alan homojen reaksiyonlara ait türbülans reaksiyon hızları formülleri aşağıda verilmiştir.

Karbonmonoksit yanma reaksiyonu için:

$$R_t = A \rho_g \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_{CO}}{M_{CO}}, \frac{Y_{O_2}}{\frac{1}{2} M_{O_2}}, B \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} \right) \quad (2.57)$$

Hidrojen yanma reaksiyonu için:

$$R_t = A \rho_g \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_{H_2}}{M_{H_2}}, \frac{Y_{O_2}}{\frac{1}{2} M_{O_2}}, B \frac{Y_{H_2O}}{M_{H_2O}} \right) \quad (2.58)$$

İleri yönlü su-gaz değişim reaksiyonu için:

$$R_t = A\rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_{CO}}{M_{CO}}, \frac{Y_{H_2O}}{M_{H_2O}}, B \frac{Y_{CO_2} + Y_{H_2}}{M_{CO_2} + M_{H_2}} \right) \quad (2.59)$$

Geri yöndeki su-gaz değişim reaksiyonu için:

$$R_t = A\rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}}, \frac{Y_{H_2}}{M_{H_2}}, B \frac{Y_{CO} + Y_{H_2O}}{M_{CO} + M_{H_2O}} \right) \quad (2.60)$$

Yukarıda hesaplanan türbülans reaksiyon hızları aynı zamanda hacimsel reaksiyon modeline göre reaksiyon hızı ile karşılaştırılmakta ve bu değerlerden yine küçük olan değer (sınırlayıcı değer olduğu için) genel hesaba katılmaktadır (Denklem 2.61).

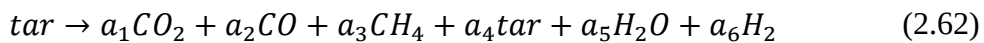
$$R_{genel} = \min(R_{türbülans}, R_{kinetik}) \quad (2.61)$$

2.2.6.1 Kuruma

Kuruma işlemi genel olarak kömürün nem içeriğinin yüksek sıcaklıkta kömürden ayrılarak gaz fazına geçmesidir. Kuruma sonucu kömürden geriye uçucular, sabit karbon ve kül içeren yapı kalır. Nem kömür içerisinde serbest halde, zayıf bağlı ve kimyasal bağlı olarak bulunmaktadır. Kuruma için kullanılan modellerde ise nemin serbest halde olduğu ve suyun buharlaşma sıcaklığına yakın sıcaklıklarda kömürden buhar şeklinde ayrıldığı kabul edilmektedir [7]. Oluşturulan modelde de, belirtilen varsayım kullanılarak, gözenekli ortam içinde anlık enerji ve nem transferi ile kuruma işlemi 1. dereceden Arrhenius ifadesi ile gerçekleştirilmiştir.

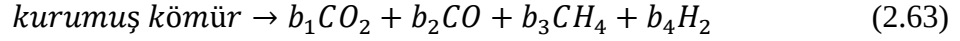
2.2.6.2 Piroliz

Kömür içeriğindeki diğer bir grup ise uçuculardır. Göreceli olarak yüksek sıcaklıklarda kurumanın ardından piroliz denilen işlemle kömür içeriğindeki kimyasal bağlı uçucular kömürden ayrılmaktadır. Genel olarak bakıldığında, piroliz sırasında kömürden su buharı, karbondioksit, karbonmonoksit, metan, hidrojen ve tar denilen karmaşık hidrokarbonların ayrıldı görülmektedir. Piroliz tek kademeli reaksiyon olarak Denklem 2.62'deki gibi belirtilebilir [38].



Yapılan çalışmalar göstermektedir ki yeraltında kömür gazlaştırma işleminde, yerüstü gazlaştırma işlemlerinden farklı olarak, partiküller reaktör içerisinde daha uzun zaman

geçirmekte ve, yüksek basıncın da etkisiyle, piroliz sonucu ortaya çıkan tar ikincil bir reaksiyona girerek yapısı değişmektedir. Sonuç olarak yeraltında kömür gazlaştırma işlemi sonucu çıkan ürün gaz içinde yerüstü gazlaştırıcılardan çıkan ürüne göre daha az tar görülmektedir [35]. Tar bileşenin geçirdiği ikincil reaksiyon Denklem 2.63'teki gibi belirtilmiştir [38,50].



Kurulan modelde ise piroliz sonucu açığa çıkan tar bileşenin hemen ayrıştığı varsayılmış ve metan içeriği de ihmal edilmiştir. Sonuç olarak, piroliz bölüm başında belirtilmiş olan tek kademeli reaksiyon olarak modellenmiştir.

2.2.6.3 Heterojen reaksiyonlar

Kuruma ve pirolizden sonra kömür içeriğinde kalan sabit karbon ortamda bulunan gaz fazı ile heterojen reaksiyonlara girmektedir. Matematik modelde yer alan heterojen reaksiyonlar Çizelge 2.1'de verilmiştir. Bu reaksiyonlardan ilki sabit karbonun oksijen ile reaksiyona girdiği yanma reaksiyonudur. Bu reaksiyon özellikle YKG işleminden önce kömürün tutuşturulması evresinde etkin olmaktadır. İkinci ve üçüncü reaksiyon ise sabit karbonun, sırasıyla, karbondioksit ve su buharı ile reaksiyona girdiği gazlaşma reaksiyonlarıdır. Özellikle oksijensiz ortamdan gerçekleşen ve endotermik olan gazlaşma reaksiyonları ile yapay gaz içeriğindeki karbonmonoksit ve hidrojenin üretimi sağlanmaktadır.

2.2.6.4 Homojen reaksiyonlar

Matematik modelde yer alan homojen reaksiyonlar Çizelge 2.1'de verilmiştir. Homojen reaksiyonlardan ilk ikisi yanma reaksiyonları olup işlem sırasında büyük oranda oksijenin tükenmesini sağlamaktadırlar [51].

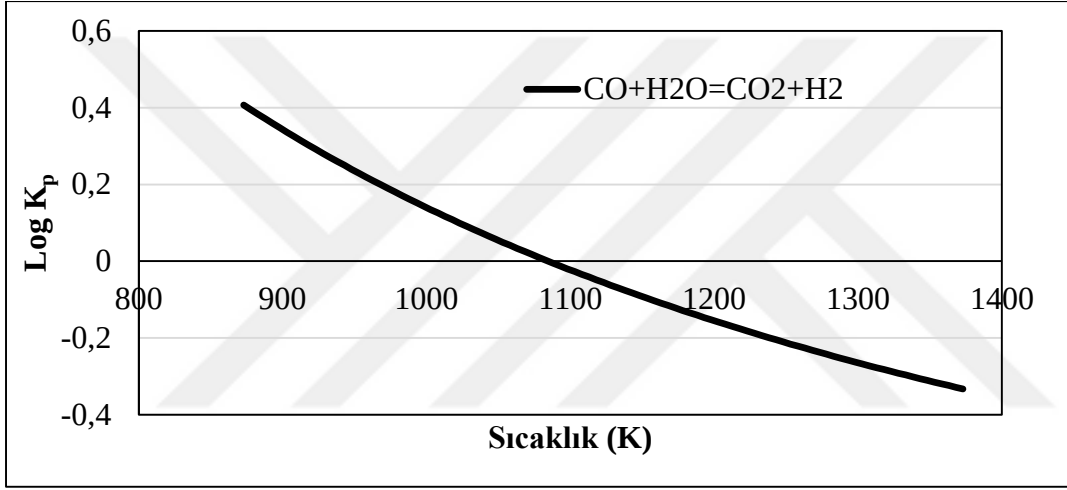
Üçüncü reaksiyon su-gaz değişim reaksiyonu olup yapay gaz içerisindeki karbonmonoksit/hidrojen oranının belirlenmesinde önemli bir rol oynamaktadır. Su-gaz değişim reaksiyonu çift yönlü olarak ele alınmıştır. Bunun nedeni, Şekil 2.2'de de görüldüğü gibi, su-gaz değişim reaksiyon denge sabitinin belli bir sıcaklıktan sonra girenler lehine ağırlık kazanmasıdır. Geri yönlü su-gaz değişim reaksiyonun hızı ise Denklem 2.64 ile hesaplanabilmektedir.

$$k_{geri} = \frac{K_p}{k_{ileri}} \quad (2.64)$$

Sıcaklığa bağlı denge sabiti ise Denklem 2.65 ile hesaplanmıştır [52].

$$\log(K_p) = \frac{5693,5}{T} + 1,077 \ln(T) + 5,44 \times 10^{-4}T - 1,125 \times 10^{-7}T^2 - \left(\frac{49170}{T^2}\right) - 13,148 \quad (2.65)$$

Denge sabiti kullanılarak geri yönlü reaksiyonun Arrhenius sabitleri bulunabilmektedir. Bulunan sabitler ile geri yönlü reaksiyon da sisteme eklenmiştir.



Şekil 2.2: Su-gaz değişim reaksiyonun denge sabitinin sıcaklığa bağlı değişimi

2.2.7 Yardımcı denklemler

2.2.7.1 Gözeneklilik

Gözenekli ortam olarak modellen kömürün gözeneklilik değeri kömür içeriğine bağlı olarak zamana bağlı değişken haline getirilmiştir. Reaksiyonlar ilerledikçe zaman içerisinde değişen kömürün nem, uçucu ve sabit karbon değerlerine göre gözeneklilik değişmektedir. Gözenekliliğin değişimini veren ifade aşağıda, Denklem 2.66'da belirtilmiştir.

$$\gamma_g = \gamma_{başlangıç} + \left[Y_{nem} + Y_{uçucu} + \left(\frac{Y_{C,limit} + Y_{kül}}{Y_{C,limit}} \right) Y_C \right] \quad (2.66)$$

Bu denklemdeki $\gamma_{başlangıç}$ ve $Y_{kül}$ değerleri sabit olup, sırasıyla, kömürün başlangıç gözeneklilik değerini ve kömürün kül içeriğini belirtmektedirler.

2.2.7.2 Geçirgenlik

Kömürün bir özelliği olan ve gözenekli ortamın akış üzerinde yarattığı direnci hesaplamada kullanılan geçirgenlik değeri gözenekliliğe bağlı olarak değişken hale getirilmiştir. Gözenekliliğin değişimi aşağıdaki Denklem 2.67 ile ifade edilmiştir.

$$\alpha = \begin{cases} \gamma_g > (1 - \gamma_{başlangıç}), & 0 \\ \gamma_g < (1 - \gamma_{başlangıç}), & \alpha_{başlangıç} \times \exp[\sigma \times (\gamma_g - \gamma_{başlangıç})] \end{cases} \quad (2.67)$$

Denklemdeki, σ sabit olup literatürde 12 değeri karşılık olarak verilmektedir [39,53]. $\alpha_{başlangıç}$ değeri de sabit olup kömürün başlangıçtaki geçirgenlik değerini temsil etmektedir.

2.2.7.3 Mükemmel gaz yasası

Korunum denklemlerinde kullanılan yoğunluk teriminin hesabı için aşağıdaki mükemmel gaz yasası (Denklem 2.68) kullanılmıştır.

$$\rho = \frac{pM}{RT} \quad (2.68)$$

Eşitlikteki, M mol kütesini, R evrensel gaz sabitini belirtmektedir.

2.2 ANSYS Fluent Paket Programı ile Çözüm Metodu

Geliştirilen matematik modelden bir sonraki bölümde detayları verilmiş olan laboratuvar ölçekli deney düzeneğine göre belirlenen 2 boyutlu geometri kullanılarak çözüm elde edilmiştir. 2 boyutlu geometri içerisinde gazlaştırma kanalı ve kömür bloğu olan gözenekli ortam yer almaktadır.

ANSYS Fluent paket programı içerisine aktarılan geometri ve çözüm ağı üzerinde korunum denklemleri, homojen reaksiyonlar ve akışkanların ısı ve fiziksel özellikleri tanımlanmıştır. Ancak, ANSYS Fluent programı gözenekli gaz-katı reaksiyonların hesabını içeren modele sahip değildir. Bu sebeple, kuruma, piroliz ve heterojen reaksiyonların hesaba katılması için kullanıcı tanımlı fonksiyonlar kullanılmıştır (UDF – User Defined Functions). Bu fonksiyonlar her çözüm adımında ve her sonlu hacim için ilgili reaksiyonların üretim terimlerini hesaplamaktadır. Ayrıca, bu kaynak terimlerin takibi için kullanıcı tanımlı kayıtlar (UDM - User Defined Memory) kullanılmıştır. Üretim terimleri daha sonra paket program tarafından ayrıştırılıp

korunum denklemlerine katılmaktadır. Bu terimler, ayrıca, kömürün nem, uçucu ve sabit karbon tüketimini de etkilemektedirler. Belirtilen kömür içerikleri, katı fazındaki bileşenler olup, her birinin değişiminin takibi için kullanıcı tanımlı değişkenler kullanılmıştır (UDS – User Defined Scalars). Tüm bu harici kodlamalar Ek A’da verilmiştir.

Kömürün gözeneklilik ve geçirgenlik değerlerinin kömür içeriğini modellemek için kullanılan katı bileşenler bağlı olduğu belirtilmiştir. Gözenekli ortam özelliği olan gözeneklilik ve geçirgenlik değerlerinin de hesabı ve takibi UDF ile gerçekleştirilmiştir.

ANSYS Fluent, korunum denklemlerini sonlu hacimler yöntemiyle ayrıklaştırarak sayısal sonuç elde etmektedir. Her korunum denklemini ayrıklaştırılıp, ilgili denklemler integral formuna getirilmekte ve her bir sonlu hacim için iteratif olarak çözülmektedir. Genel bir korunum denkleminin ayrıklaştırılıp herhangi bir sonlu hacim elemanı için yazılmış hali aşağıda, Denklem 2.69’da verilmiştir.

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} V + \sum_f^N \rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^N \Gamma_\phi \nabla \phi_f \cdot \vec{A}_f + S_\phi V \quad (2.69)$$

Bu denklemde belirtilen, N hücrenin yüzey sayısı, ϕ_f değişkenin yüzeydeki değeri, $\vec{A}_f$ yüzey alanı, V eleman hacmi, Γ_ϕ ise difüzyon katsayısıdır.

Yukarıda verilmiş olan genel korunum denkleminin soldan ikinci terimi taşınım terimidir ve bu terimin hesabı için ilgili değişkenin hacim yüzeyindeki değerlerinin bilinmesi gerekmektedir. Bu yüzey değeri ilgili hacmin ve komşu hacimlerin merkez değerlerinden tahmin edilebilmektedir. ANSYS Fluent, tahmini değeri, hacim merkezi üzerinde çok boyutlu Taylor serisi açılımı yaparak ikinci dereceden ayrıklaştırma ile bulmaktadır.

Sıkıştırılamaz akış durumunda hız bileşenleri (2 boyutlu model için 2 adet) ve basınç değeri bilinmeyenlerdir. Hız bileşenlerinin tahmini için momentum korunum denklemleri kullanılmaktadır. Ancak basınç için ayrı bir korunum denklemini yoktur. Basınç alanını belirlemek için çeşitli algoritmalar kullanılmaktadır. SIMPLE olarak adlandırılan yöntem (algoritma), basınç-hız ilişkisini sağlamak için basınç düzeltme denklemini kullanmaktadır. Bu yöntem matematik modelin çözümünde tercih

edilmiştir. Kullanım alanı oldukça yaygın olan bu basit ve etkili algoritma ile güvenilir sonuçlar elde edilebilmektedir.

Ayrıca, korunum denklemlerinin doğrusal olmayan yapısından kaynaklı iteratif çözümler arası değişimleri sınırlamak için rahatlatma katsayıları kullanılmaktadır. Çözümün başarılı olduğu ise yakınsama kriterleri ile belirlenmiştir. Her bir bağımlı değişkenin iterasyonlar arası değişimi, yakınsama kriteri değerinin altındaysa çözüm başarılı sayılıp bir sonraki zaman adımına geçilmekte veya çözüm tamamlanmış sayılmaktadır. Yakınsama kriter değerleri olarak ANSYS Fluent programının tavsiye ettiği değerler kullanılmıştır [40].





3. NUMERİK SONUÇLAR, NUMERİK SONUÇLARIN DOĞRULANMASI VE TARTIŞMA

3.1 Laboratuvar Ölçekli Yeraltında Kömür Gazlaştırma Deneyi

3.1.1 YKG deney düzeneği

Model çıktılarının karşılaştırılması için kullanılan sonuçların elde edildiği deney düzeneği İTÜ Makine Fakültesi'nde Yanma Laboratuvarı'nda 113M038 numaralı TÜBİTAK projesi kapsamında kurulmuştur. Bu deney düzeneği ile yeraltındaki çevre koşulları laboratuvar ortamında yaratılmaktadır. Blok halindeki kömür örneklerine yeraltı ortamının simüle edildiği reaktör içerisinde YKG işlemi uygulanabilmektedir. Deney düzeneği içerisinde yer alan ölçüm ekipmanları ile YKG işlemine ait çok yönlü çıktılar elde edilmektedir. Deney düzeneği, gaz besleme düzeneği, YKG reaktörü ve yapay gaz temizleme ve ölçüm ünitesi olmak üzere 3 kısma ayrılabilir.

Gaz besleme ünitesi, YKG işleminde kullanılan başlıca gazlaştırma ajanları olan hava, oksijen ve su buharını reaktöre beslemek için kullanılmaktadır. Laboratuvar ölçekli YKG işletmesine ihtiyaçlarına cevap verebilecek kapasitede besleme ünitesi tasarlanmıştır. Her bir gazlaştırma ajanı için kontrol valfi ile debi düzenlemesi yapılmakta, gazlar kolektör yardımıyla tek bir noktadan reaktöre beslenmektedir. Kolektör rekorlu bağlantı ile reaktöre bağlanmaktadır. Ayrıca ateşleme ve besleme noktasının reaktör üzerinde değiştirilmesine olanak sağlayacak şekilde, ayaklı platform kullanılmaktadır. Platforma ait görsel ve besleme ekipmanları ile Şekil 3.1'de verilmiştir. Her bir gazlaştırma ajanının debi ölçümü ve kontrolü hat üzerinde, kolektörden önce yerleştirilen orifislerle, fark basınç yöntemiyle gerçekleştirilmektedir.

Hava beslemesi için santrifüj üfleyici cihazı üniteye yer almaktadır. Üfleyici ortamdan aldığı havayı 20 m³/saat debi ile reaktöre besleyebilmektedir. Kolektörden önce bulunan bir vana ile de debi ayarı sağlanmaktadır.

Buhar ise platform üzerinde bulunan buhar üretici ile sağlanmaktadır. Çıkışında 160 °C'de 2 bar'da buhar çıkışı sağlayan cihaz, 5 kg/saat debi ile besleme yapabilmektedir.

Debi ayarı ise hat üzerinde bulunan vana ile sağlanmaktadır. Ayrıca üreteç üzerinde, kontrol dışında buhar basıncının aşırı yükselmesi durumunda yaşanabilecek olumsuzlukları engellemek için emniyet ventili konuşlandırılmıştır. Bunun yanında, buharın besleme hattı üzerinde ısı kaybederek yoğunlaşması beklenmektedir. Önlem olarak, reaktöre su girişini önlemek için, buhar üreticinden reaktöre giden hat üzerine vorteks seperatör yerleştirilmiştir.



Şekil 3.1: Laboratuvar ölçekli YKG deney düzeneğine ait besleme düzeneği. Hareketli olarak tasarlanmış ünite üzerinde hava beslemesi için üfleç ve su buharı beslemesi için buhar kazanı görülmektedir.

Oksijen beslemesi ise oksijen tüpleri ile sağlanmaktadır. Oksijen debisi kontrolü oksijen tüpü çıkışında ilk olarak regülatör ile sağlanmaktadır. Ancak yapılan denemelerde regülatörün yeterli düzenlemeyi yapamadığı, debinin değişkenlik gösterdiği fark edilmiştir. Bunun üzerine oksijen besleme hattı üzerine iğne vana yerleştirilmiştir.

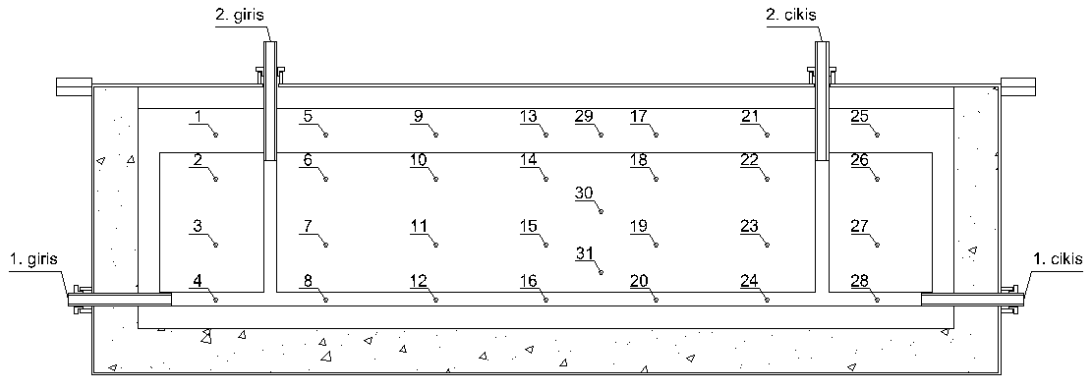
Deney sırasında, tutuşturma işlemi ise propan-bütan tüpüyle ve reaktöre vakum uygulanarak taze hava girişinin sağlanması ile yapılmaktadır. Daha sonra bahsedilecek olan vakum pompası ile gazlaştırma hattına vakum uygulanmakta, bu da reaktörün açık olan besleme ağzından reaktöre taze hava girişini sağlamaktadır. Bu sırada reaktör girişinde propan-bütan gazı yakılmakta ve yanma sonu sıcak gazların reaktör içerisine

yayılması sağlanmaktadır. Böylece kömür sıcaklığı gazlaştırma için gerekli noktaya getirilmektedir.

Ayrıca, acil durumlarda gazlaştırmayı durdurmak için besleme düzeneğinde azot tüpü de bulunmaktadır. Gerektiğinde, kolektöre bağlantısı yapılarak, reaktöre beslenebilmektedir.

YKG reaktörü, gazlaştırma ajanlarının besleneceği, kömür içerisinde gazlaşma reaksiyonların gerçekleşip yapay gazın üretileceği ünitelerdir.

Literatürdeki bilgilere dayanarak, TÜBİTAK projesi kapsamında, biri küçük biri büyük olmak üzere iki adet reaktör tasarımı yapılmıştır. İki tasarımda da düşey ve yatay besleme ve çıkış kanalı imkânı bulunmaktadır. Matematik model ile ilgili deney ise, büyük ölçekli reaktör kullanılarak gerçekleştirilmiştir (Şekil 3.2).



Şekil 3.2: Laboratuvar ölçekli YKG deneyinde kullanılan reaktör tasarımı ve sıcaklık ölçüm noktaları.

Büyük reaktör tasarımında dış boyutlar 0,65×1,01×2,07 m, kömürün yerleştirilebileceği iç boyutlar ise 0,70×0,50×1,80 m olarak belirlenmiştir. Reaktör, 5 mm'lik St37 sacdan imal edilmiştir. Ayrıca, reaktör üzerinde, gazlaştırma kanalından ve kömürden sıcaklık ölçümü amacıyla 34 adet ısı çift noktası belirlenmiştir. Kanal içerisinde 7 adet, kömür üzerinde 27 adet sıcaklık ölçüm noktası vardır. Sıcaklık ölçümü ile gazlaştırma ve kavite ile ilgili bilgiler alınabilmektedir. Sıcaklık ölçümleri K tipi ısı çiftleri ile yapılmaktadır.

Yeraltındaki adyabatik ortamı modellemek için ise reaktörlerin iç duvarı yalıtımla kaplanmıştır. Yalıtım malzemesi olarak 105 mm kalınlığında refrakter beton (Kiltaş Hycast 85 Refrakter Betonu) kullanılmıştır.

YKG reaktöründe üretilen yapay gazın temizlenmesi ve içeriğinin ölçüldüğü bölüm olan son bölümde ilk parça siklondur. Döngülü toz tutucu da denilen siklon, ilk aşama

temizlik ünitesi olarak katı parçacıkların yapay gazdan ayrılmasını sağlamaktadır. Kullanılan siklon, teğetsel girişli, tek silindirik, tek konili ve eksenel çıkışlı tiptedir. Siklona giren akışkan döngülü akış halini alır. Ataleti yüksek olan akışa ait parçacıklar döngülü akışa dâhil olamayıp siklonun duvarlarına çarparak akıştan ayrılmaktadırlar.

Siklondan sonraki ünite ise reaktörden çıkan ve katı parçacıklardan arınmış yapay gazın soğutulması için soğutucu (ısı değiştiricisi) bulunmaktadır. Bu ünite, bir kısmı siklon tarafından temizlenmiş olan, yapay gazdaki tar içeriğinin yoğunlaştırılması ve ayrıca yapay gazdaki su içeriğinin yoğunlaştırulup temizlenmesi ve ölçüm öncesi yapay gazın sıcaklığının düşürülmesi sağlanmaktadır.

Hat üzerinde, soğutucudan sonra yıkama kolonu bulunmaktadır. Gazlaştırma işlemi uygulanan kömür örneklerinin kükürt içeriği çevre ve insan sağlığı açısından sorun yaratabilmektedir. Bu nedenle, analiz öncesi, yapay gaz içeriğinden kükürdün de ayrıştırılması gerekmektedir. Yıkama kolonu içerisinde bu işlem, alkali metallerle kükürt giderme yöntemine dayanır ve kolon, 30 Nm³/h debilere kadar bu işlemi gerçekleştirebilecek şekilde tasarlanmıştır. Kostik (NaOH) çözeltisiyle, gazlaştırma sonucu ortaya çıkan asidik yapıdaki H₂S giderilmektedir.

Yıkama kolonu içerisinde bulunan püskürtücüler ile yapay gaz, kostik ile yıkanmaktadır. Püskürtücüler ile sıvı-gaz reaksiyonunu arttıracak şekilde sıvının yüzey alanı arttırılmaktadır. Ayrıca yüzey alanını daha da arttırmak için kolon içerisinde Raschig halkaları bulunmaktadır. Silindirik geometrideki halkalar, akışa önemli bir direnç oluşturmadan reaksiyon yüzey alanını arttırmaktadırlar.

Yapay gaz hattı boyunca basınç kayıplarını karşılamak için, sisteme, yıkama kolonundan sonra bir adet vakum pompası yerleştirilmiştir. Böylece, hat üzerinde düzenli akış sağlanabilmekte, atmosfere açık olarak gerçekleştirilen tutuşturma evresinde de reaktöre taze hava girişi sağlanabilmektedir. 0,25 kW güç ile 30 Nm³/saat debi için 100 mbar basınç farkı oluşturabilmektedir.

Vakum pompasından sonra yapay gaz ile ilgili ölçümler yapılmaktadır. Orifis düzeneği ile önce yapay gazın debisi ölçülmektedir. Sonrasında yapay gaz örneklenerek içerik belirlenmektedir. Yapay gaz kompozisyon ölçümü için gaz kromatografi cihazı ve MRU yapay gaz analizörü kullanılmaktadır.

Gaz kromatografi cihazı olarak, yapay gaz içeriğinde bulunabilecek bileşenlere özel kolon yapısına sahip Agilent 7890B cihazı kullanılmaktadır. Gerekliğinde kolon, farklı

gaz analizleri için deęiřtirilebilmektedir. Yapay gazın yakıcıya gittięi hat üzerinde bulunan örnekleme hattı cihaza yönelmekte ve cihaza pnömatik bir sistemle girdikten sonra, kolon içerisinde bileřenlerine göre, yapay gaz, moleküler düzeyde ayrılmaktadır. Ölçüm sırasında, ölçümü yapılan gazın bileřenleri fiziksel/kimyasal etkiler ile kolonda farklı hızda ilerlemekte ve birbirlerinden ayrılmaktadır. Kolon çıkışında bulunan sensör ise ayrıřan bileřenlerin her birine farklı tepki verecek řekilde elektrik sinyali üretmektedir. Farklı hızlardan dolayı oluřan zaman farkı ile oluřan sinyaller arasında çakışma olmamaktadır.

MRU VARIOplus gaz analizör cihazı ikincil içerik ölçüm cihazı olarak kullanılmaktadır. Bu cihaz ile yapay gazın anlık olarak bileřen yüzdeleri gözlenmektedir. Ayrıca içerisinde bulunan kompresör sayesinde örneklenecek gazın basınçlandırılması gerekmemektedir. Ölçüm yapabildięi bileřen içerięinin O₂, CO, CH₄, CO₂ ve H₂ ile sınırlı olması ve oksijen maksimum ölçüm deęerinin %21 olması cihazın dezavantajıdır. Ancak anlık ölçümler sayesinde gazlařtırma prosesine hızlı müdahale řansı doęmaktadır. Gaz ölçüm teknięi olarak elektrokimyasal yöntem ve non-dispersif kızılötesi sensör kullanılmaktadır.

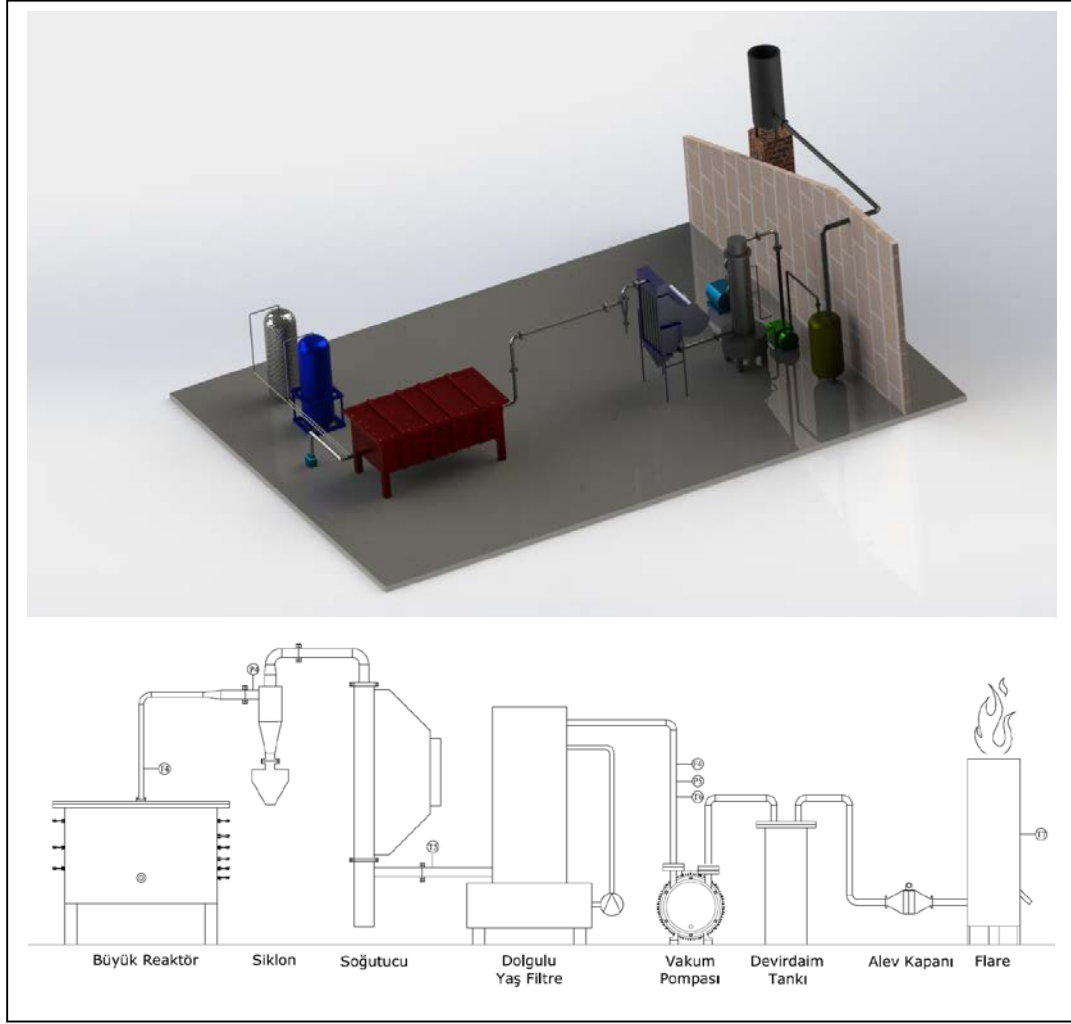
Yapay gaz ile ilgili ölçümler tamamlandıktan sonra yapay gaz, hat sonunda yakılmaktadır. Böylece içerięindeki karbonmonoksit gibi insan saęlığına zararlı gazların yayılması engellenmektedir.

Deney düzeneęinin řematik görünümü řekil 3.3'te verilmiřtir.

3.1.2 Deneyisel çalışma

YKG deneyi, yaklaşık 2,5 saatlik bir ateřleme sürecinin ardından 3 m³/saat debiye sahip oksijen beslemesiyle bařlatılmıřtır. Deneyin ilerleyen bölümlerinde oksijen besleme debisi 5 m³/saat'e çıkarılmıřtır. Oksijen beslemesinden sonra su buharı gazlařtırma denemesi için su buharı beslemesi yapılmıřtır. Su buharı beslendięi sırada reaktör içi sıcaklıklar düřtüęü için gazlařtırma sıcaklıklarını korumak amacıyla aynı zamanda su buharı beslemesiyle deęiřmeli olarak oksijen beslemesi de yapılmıřtır. Gazlařtırma sırasındaki debi deęiřimleri ile ilgili detaylar řekil 3.4'te verilmiřtir. Deney, azot verilmek suretiyle reaksiyonların durdurulması ve reaktörün soęutulmasıyla sonlandırılmıřtır. Böylelikle, ateřleme dâhil, 29 saatlik bir süreci kapsayan YKG deneyi, ateřleme çıkarılırsa yaklaşık 26,5 saatlik bir gazlařtırmaya tekabül etmektedir. Gazlařtırma ajanlarının debileri daha önceden belirtilen orifisler

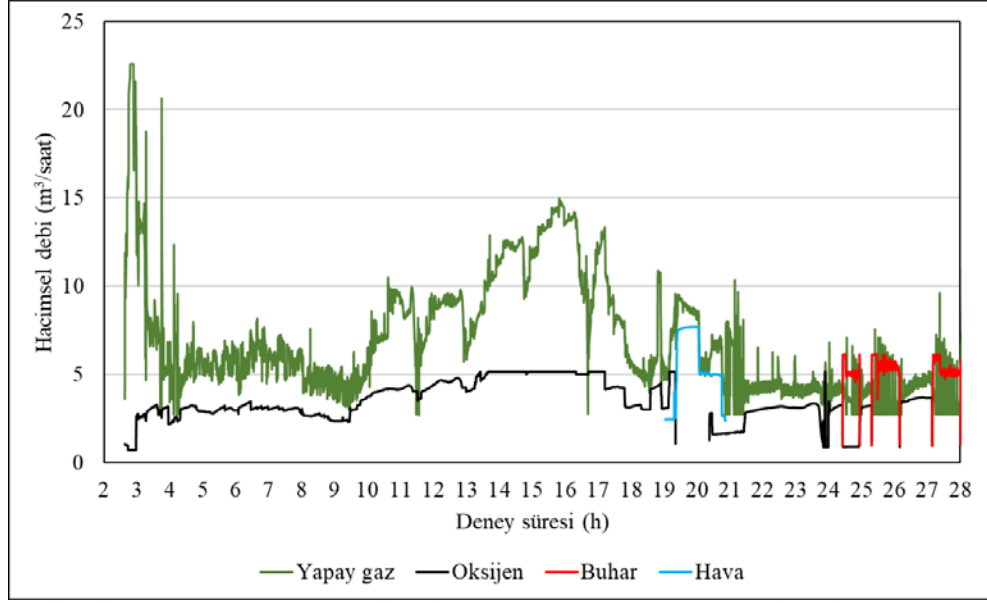
vasıtasıyla ölçülürken, üretilen yanıcı gazın içeriği de MRU Syngas analizör ile anlık olarak gerçekleştirilen gaz analizlerine göre saptanmıştır.



Şekil 3.3: YKG deney düzeneğinin şematik görünümü.

Kömür örneği olarak, Tekirdağ Malkara/Pirinççeşme açık linyit madeninden, 40x70x1,7 metre boyutlarında ve 522 kilogram kütleinde bir blok kömür seçilerek YKG deneyinde kullanılmıştır.

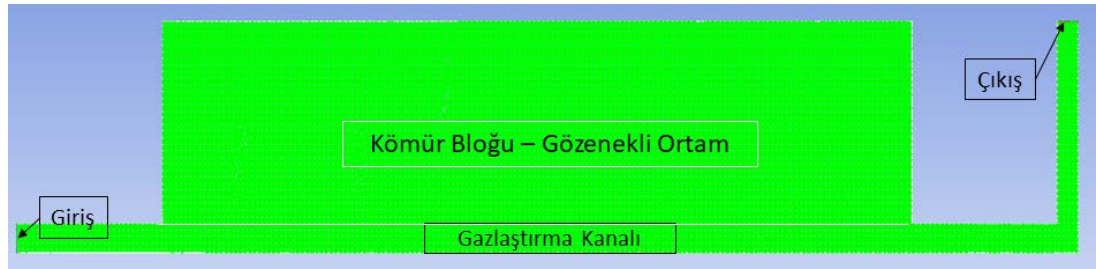
Proseste gazlaştırma kanalı olarak 80x45 mm iç ölçülerdeki NPU80 U profil kullanılmıştır. 522 kilogramlık büyük kömür bloğu yerleştirildikten sonra boşluklar küçük kömür parçaları ve toz halinde kömürler ile doldurulmuş en üste de kil konarak reaktör deneye hazır hale getirilmiştir. Toplam kütle yaklaşık 750 kilogram olarak ölçülmüştür. Killerin üzerine yalıtım amaçlı kullanılan taş yünü serilerek reaktör kapatılmıştır. Kullanılan kil ile kömürün yataktaki çevre şartları yaratılmıştır. Yalıtım malzemesi reaktörün adyabatik hale gelmesini sağlamıştır.



Şekil 3.4: YKG deneyi süresince gazlaştırma ajanları ve yapay gazın debilerinin değişimi

3.2 Analiz Geometrisi

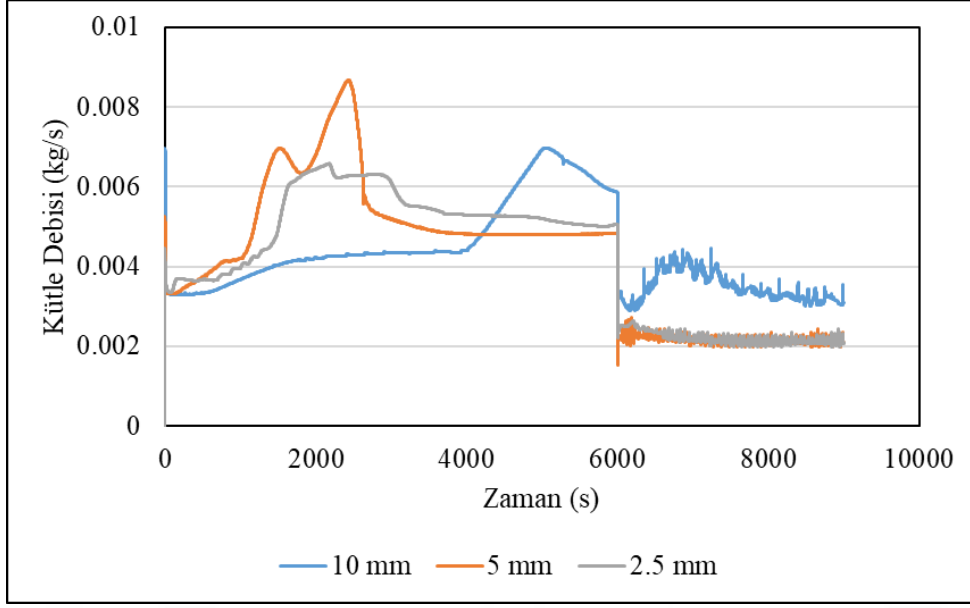
Laboratuvar ölçekli YKG reaktörü 2 boyutlu analiz için kullanılmıştır. Kullanılan geometride gazlaştırma kanalı çapı 5 cm'dir, uzunluğu ise 230 cm'dir. Kömür bloğu belirtilen gözenekli ortam, 35×180 cm boyutlarına sahip dikdörtgen alandır. Analiz geometrisi Şekil 3.5'te verilmiştir.



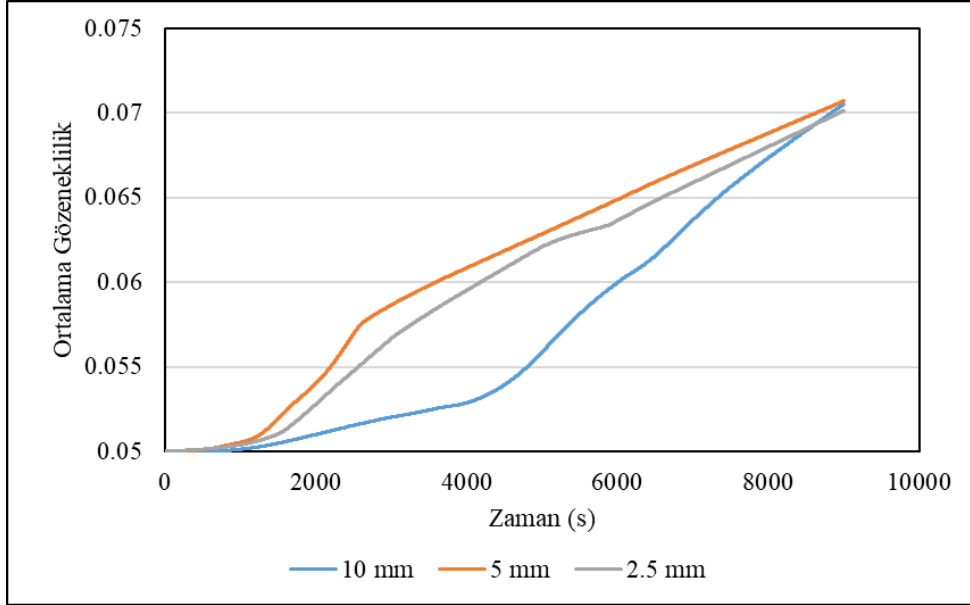
Şekil 3.5: YKG-HAD analizi için kullanılan geometri.

3.3 Çözüm Ağından Bağımsızlık Testi

YKG matematik modeli için elde edilen sayısal çözümün, çözüm ağından bağımsız olduğunu belirlemek için her biri aynı model koşullarına göre çözülen ancak farklı boyutlu sonlu hacimlere sahip çözüm ağları üzerinde çözümler yapılmış ve sonuçlar karşılaştırılmıştır. Çözüm sonucu olarak, her bir çözüm ağından elde edilen gazlaştırma kanalından çıkan kütle debisi ve kömürün ortalama gözeneklilik değerleri karşılaştırılmıştır. Bu sonuçlar Şekil 3.6 ve Şekil 3.7'da verilmiştir.



Şekil 3.6: Çözüm ağından bağımsızlık testi için farklı boyutlara sahip çözüm ağlarından alınan gazlaştırma kanalının çıkış kesitindeki kütle debisi değerlerinin karşılaştırması.



Şekil 3.7: Çözüm ağından bağımsızlık testi için farklı boyutlara sahip çözüm ağlarından alınan gözenekli kömür ortamının ortalama gözeneklilik değerlerinin karşılaştırması.

Bağımsızlık testinin başlangıç boyutu olarak sonlu hacim elemanının kenar boyutu 10 mm olarak belirlenmiştir. 10 mm kenar boyutunda elde edilen sonlu hacim eleman sayısı 8.000'dir. Sonrasında kenar boyutu sürekli olarak iki kat azaltılarak 30.000 ve 122.000 elemana sahip çözüm ağları üzerinde çözümler elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlara bakıldığı zaman 5 mm kenar boyutuna sahip 30.000 elemanlı çözüm ağının kabul edilebilir bir hata ile 122.000 elemanlı, 2,5 mm'lik çözüm ağıyla benzer sonuçlar

verdiği görülmüştür. Bu sebeple 30.000 elemana sahip çözüm ağı analizler için tercih edilmiştir.

3.4 Numerik Sonuçlar

Sonuçları verilen analiz için sınır şartları Çizelge 3.1’de verilmiştir. Ateşleme için 1000 K sıcaklıkta, 10 m³/saat debiye sahip hava, giriş sınır şartı olarak tanımlanmıştır. Oksijen ile gazlaştırma işleminde, yukarıda belirtilen laboratuvar ölçekli YKG deneysel çalışmasına benzetim için 3 m³/saat ile oksijen beslenmiştir. Bu durum, su buharı ile gazlaştırma için de geçerlidir. Su buharı, deneyde de olduğu gibi, oksijen ile değişmeli olarak olarak sınır şartı olarak tanımlanmıştır.

Çizelge 3.1: Numerik sonuçları verilen analiz için belirlenen sınır şartları.

Sınır Koşulları		
Giriş	Ateşleme	1000 K, 10 m ³ /saat, Hava
	Oksijen ile gazlaştırma	300 K, 3 m ³ /saat, Saf Oksijen
	Su Buharı ile gazlaştırma	300 K, 5 m ³ /saat, Saf su buharı
Çıkış		1 atm
Duvar		Adyabatik

Ayrıca analizin başlangıç koşulları Çizelge 3.2’de verilmiştir. Kömürün için verilen içerik değerleri önceki bölümlerde belirtilen limit değerlerdir.

Çizelge 3.2: Numerik sonuçları verilen analiz için belirlenen başlangıç koşulları.

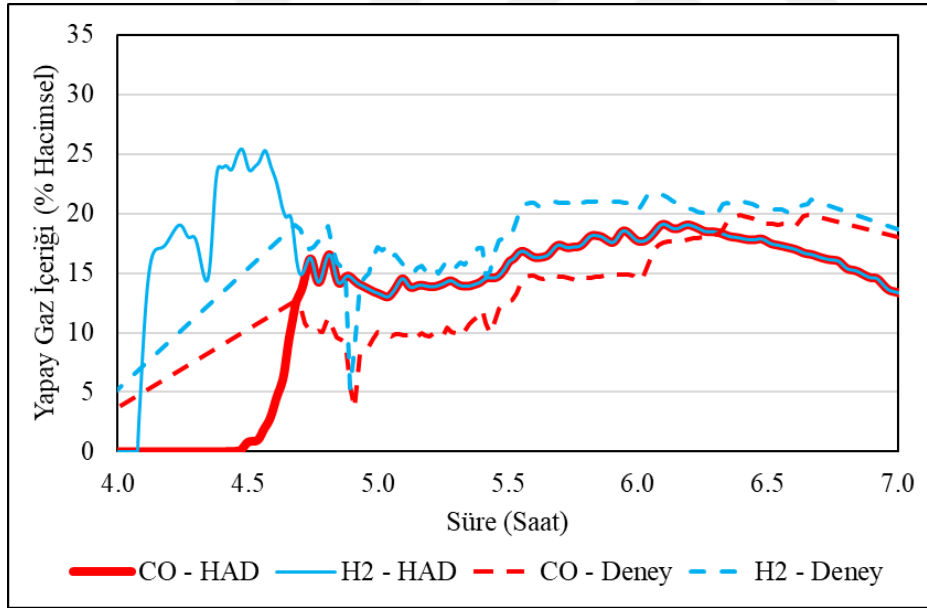
Başlangıç Koşulları	
Sıcaklık	300 K
Gözeneklilik	0.05 (% 5)
Geçirgenlik	10 ⁻¹⁵ m ² (1 mD)
Kömürün Nem İçeriği	% 10,01
Kömürün Kül İçeriği	% 18,27
Kömürün Uçucu İçeriği	% 33,70
Kömürün Sabit Karbon İçeriği	%38,02

Zamana bağlı bu problemin çözümü için zaman adımı 0,5 saniye olarak belirlenmiştir. Bu zaman adımı belirlenirken Samndani ve diğerlerinin çalışmasından yararlanılmıştır [54]. Belirtilen çalışmada bir hacim elemanı için gaz akış süresi 0,5 saniye, kömür tükenim süresi 150 s olarak verilmiştir. Bu süreler, eleman hacminin 2×10⁻⁴ m³, gaz besleme debisinin 4×10⁻⁴ m³/s (1,44 m³/saat) olduğu durum için verilmiştir. YKG

kinetik matematik modelinde de yakın gaz besleme debileri uygulanmıştır. 5 mm'lik sonlu hacim kenar boyutuna sahip, 30.000 adet sonlu hacim elemanına sahip çözüm ağına ise ortalama bir elemanın hacmi ise 10^{-6} m^3 'tür. Bu değerler literatürdeki değerler ile oranlandığında ise karakteristik kömür tükenim süresi 0,75 s olarak belirlenmiştir. Bu değer referans alınarak ve bu süre içerisinde neredeyse daimi akış koşullarının olduğu kabul edilerek zaman adımı 0,5 saniye olarak belirlenmiştir.

3.4.1 Deneysel çalışma sonuçlarıyla karşılaştırma

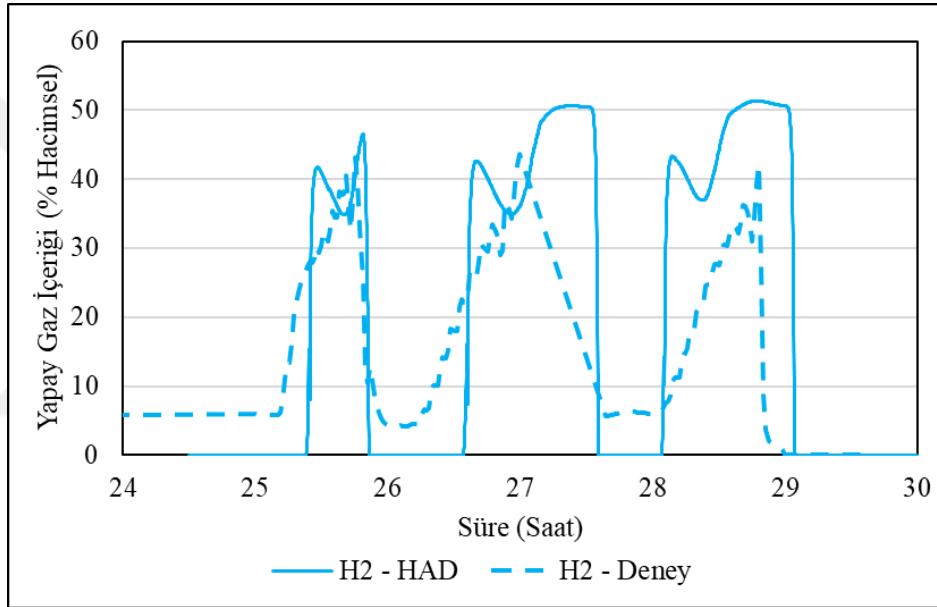
Matematik modelin belirlenen şartlar ile elde edilen numerik sonuçlar deneysel çalışma sonuçları ile karşılaştırılarak modelin geçerliliği sağlanmıştır. Bunun için deneyde elde edilen yapay gaz içeriği, analiz sonucunda geometrideki çıkış yüzeyindeki gaz içeriği karşılaştırılmıştır. Bu karşılaştırma için analiz sonuçlarındaki su buharı miktarı toplam miktardan çıkarılmış ve bileşenlerin hacimsel oranı tekrar hesaplanmıştır. Deneyde su buharı içeriği ölçüm öncesi yoğunlaştırıldığı için böyle bir yöntem izlenmiştir. Karşılaştırma sonuçları Şekil 3.8 ve Şekil 3.9'da verilmiştir.



Şekil 3.8: Oksijen ile gazlaştırma fazı için deneysel ve numerik sonuçların (HAD) karşılaştırması.

Numerik sonuçlar açısından bakıldığında, oksijen ile gazlaştırma işlemi sırasında karbonmonoksit içeriğinin gecikmeli olarak yükseldiği görülmektedir. Yükselmeden sonra ise hidrojen ve karbonmonoksit değerlerinin aynı olduğu görülmektedir. Bunun nedeni olarak su-gaz değişim reaksiyonunun denge halinde olması verilebilir. Hidrojen ve karbonmonoksit içeriği deneysel sonuçlar ile yakın değerlerde olmasına

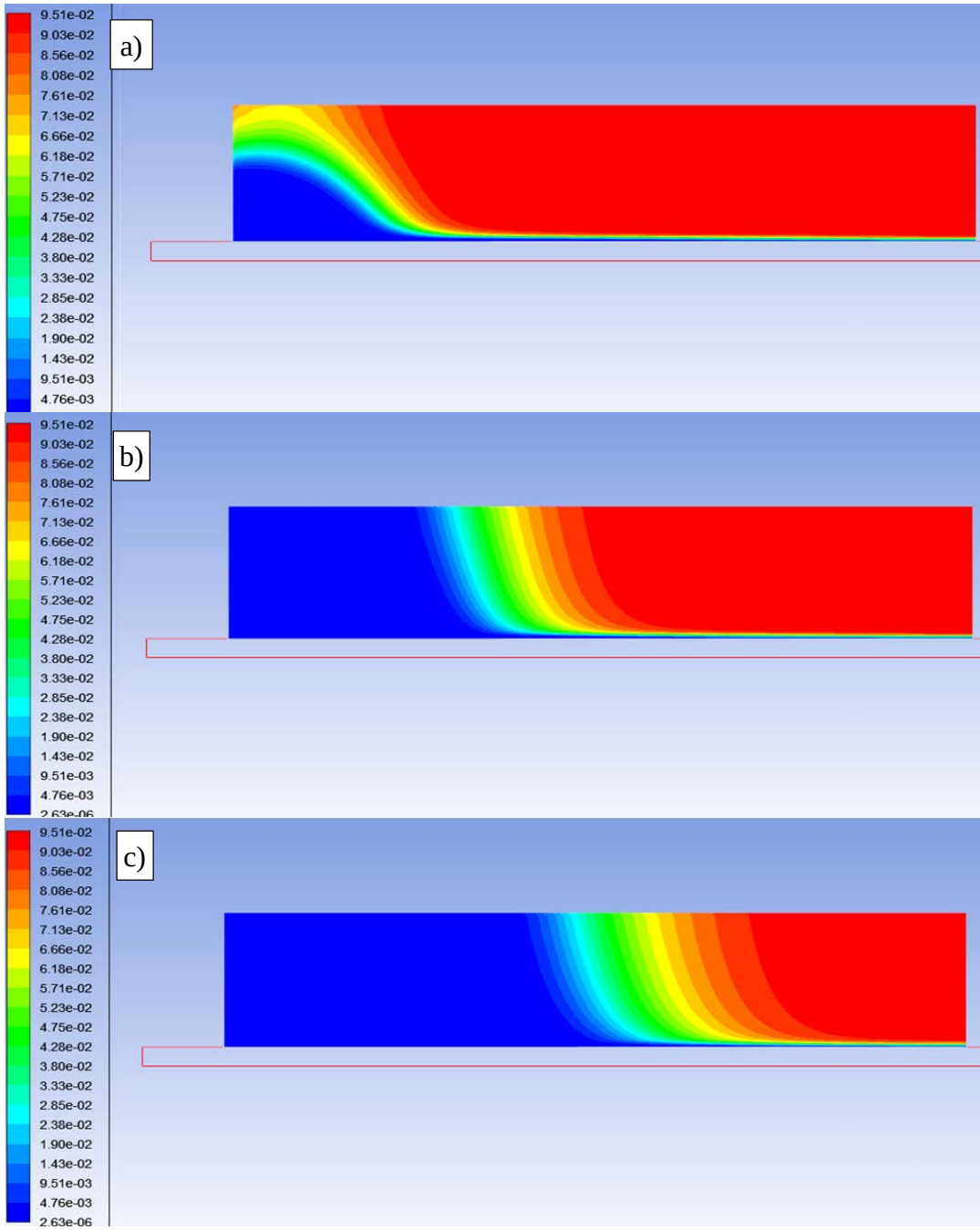
rağmen, bir süre sonra, daha keskin bir inişle azalmakta ve deneysel veriden uzaklaşmaktadır. Bunun nedeni ise piroliz reaksiyon modeli için belirlenen sabitlerin deneysel çalışmada kullanılan kömür örneği için gerçekçi olmayışı olabilir. Su buharı ile gazlaştırma fazında yapılan karşılaştırmada ise hidrojen değerinin su buharı beslemesi sırasında doğru tahmin edildiği görülmektedir. Ancak, oksijen beslemesi durumunda hidrojen oranı değerleri doğru bir şekilde yakalanmamıştır. Bunun nedeni ise kömürün nem ve uçucu tükeniminden kaynaklı gazlaşma reaksiyonlarının etkisinin azalması ve sadece yanma reaksiyonlarının etkin olmasıdır. Ayrıca, nem içeriğinin tükenmesi su-gaz değişim denge reaksiyonunu girenler yönünde gerçekleşmesine neden olmakta, bu durumda yapay gazın karbondioksit içeriğini arttırmaktadır.



Şekil 3.9: Su buharı ile gazlaştırma fazı için deneysel ve numerik sonuçların (HAD) karşılaştırması.

3.4.2 Katı bileşenlerin değişimi ve kavite büyümesi

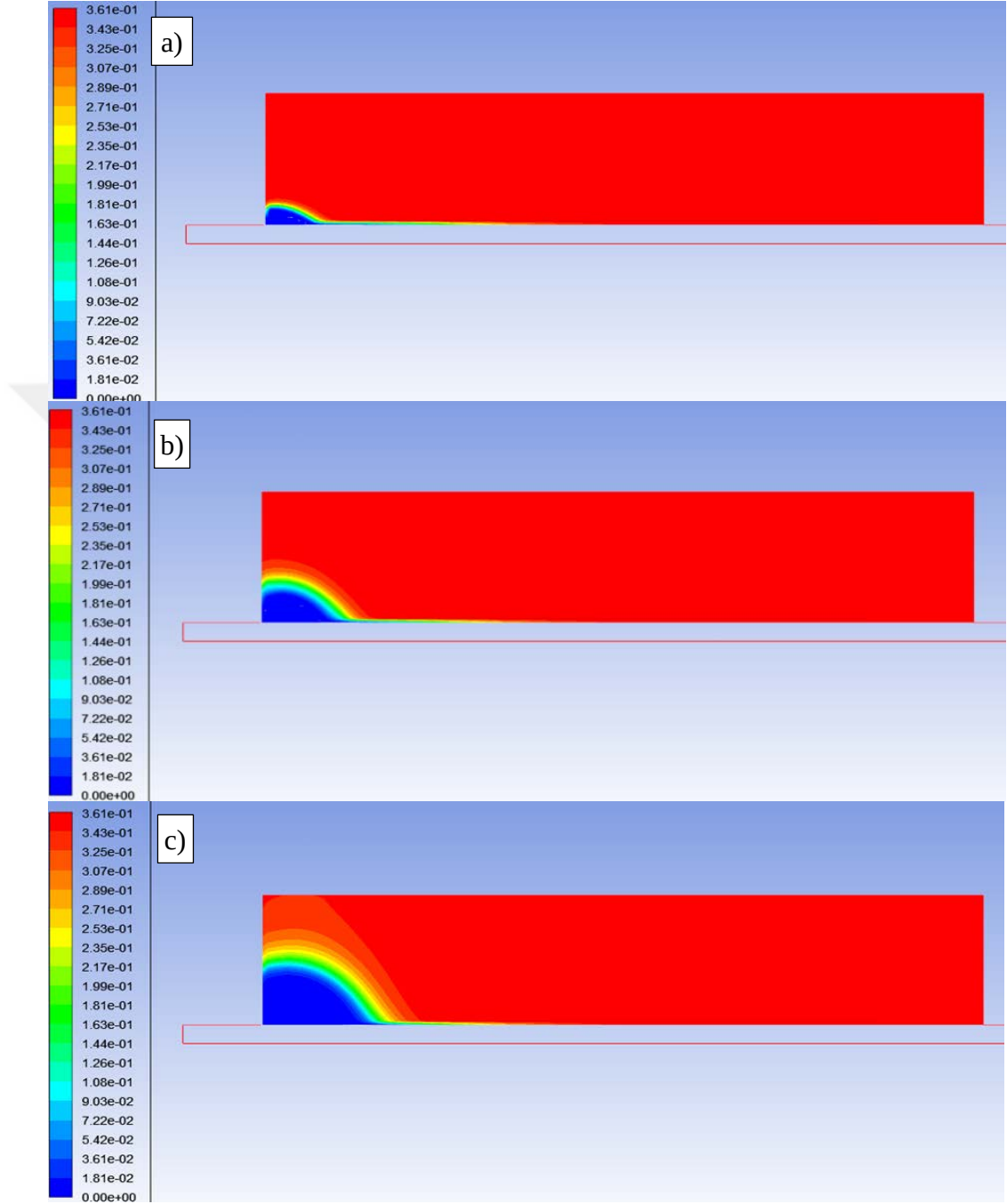
Kömür içeriğini oluşturan nem, uçucu ve sabit karbon, kuruma, piroliz ve heterojen reaksiyonların etkisiyle tükenmektedir. Tükenme sonucu kömürden geriye sadece kül içeriği kalmakta, kül de kömür yüzeyinde tutunamayarak dökülmektedir. Sonuç olarak kömür içerisinde kavite (oyuk) gelişimi gerçekleşmektedir. Matematik modelde de bu işlem ve reaksiyonlar yer almaktadır. Kömür içeriği de değişken olarak ele alınmakta ve gözeneklilik hesabı üzerinden kavite gelişimi tahmin edilmektedir. Şekil 3.10'da, matematik model ile hesaplanmış kömürün nem içeriğinin bölgesel ve zamana göre değişimi verilmiştir.



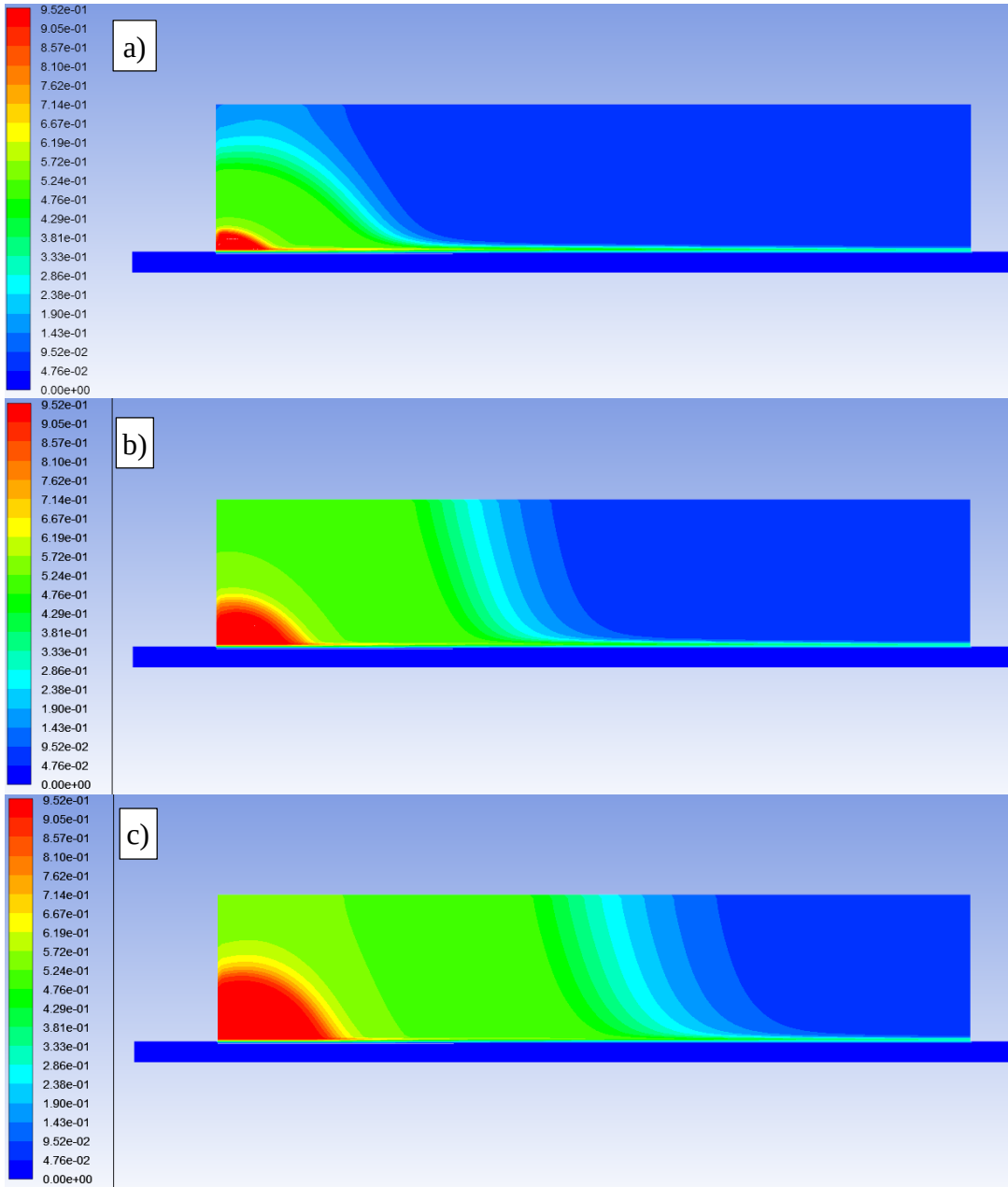
Şekil 3.10: Kömürün nem içeriğinin zamana bağlı değişimi. Kırmızı bölgelerde nem içeriği tamamen tükenmiş durumdadır. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.

Kurumanın sıcaklığa bağlı birinci dereceden fonksiyonla ifade edildiği belirtilmişti. Sıcaklık dağılımı ile bağlantılı olarak kömürün nem içeriğinin tükendiği görülmektedir. YKG işleminde doğal taşınımın etkin olduğu belirtilmişti. Nem içeriğinin tükenmesi hesabında da bu etki görülmektedir. Kuruma yerçekiminin tersi yönde ilerlemektedir.

Şekil 3.11’de kömürün sabit karbon içeriğinin bölgesel ve zamana bağlı değişimi verilmiştir. Yine doğal taşınımın etkisiyle tükenimin yukarı yönlü ilerlediği görülmektedir.



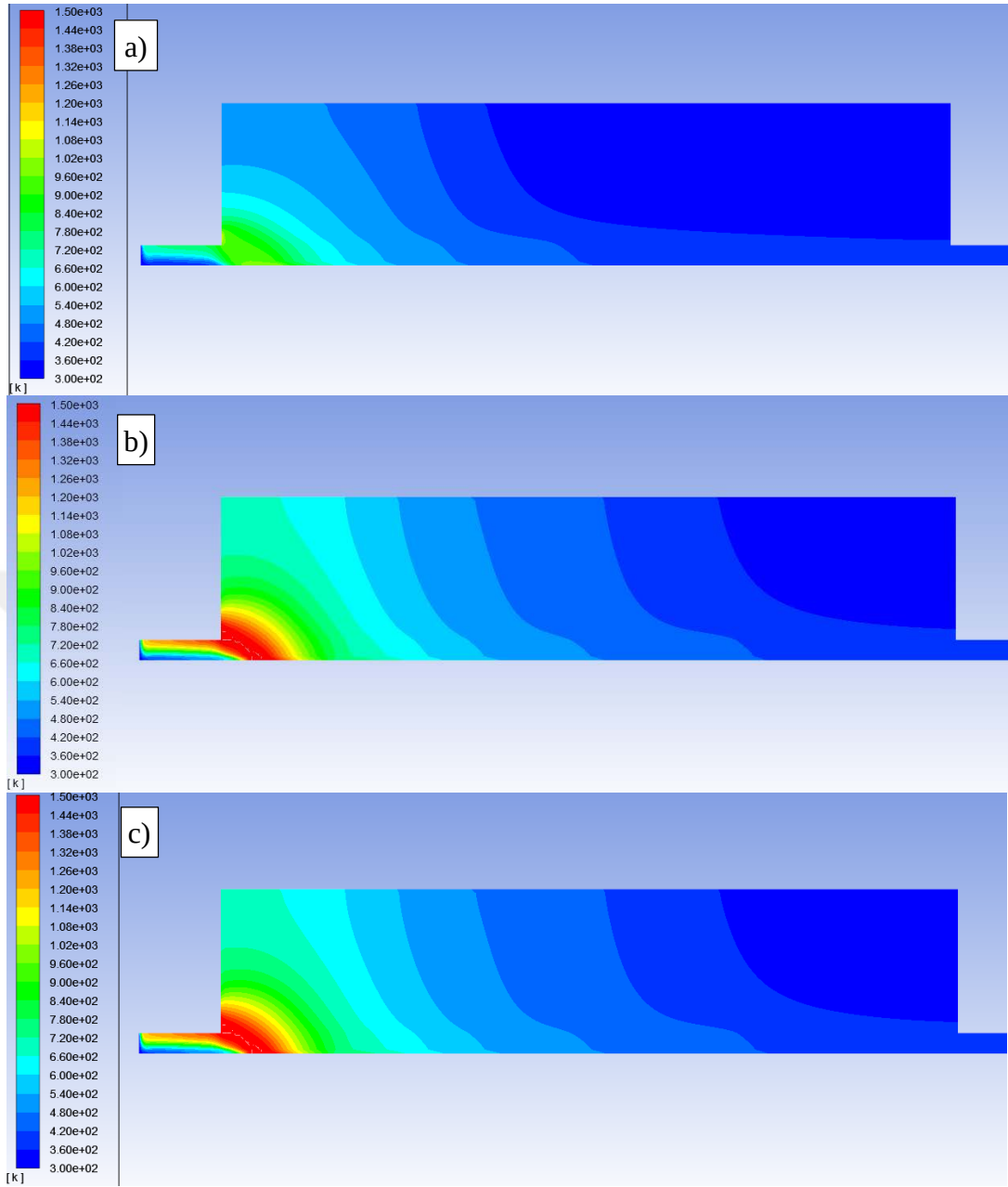
Şekil 3.11: Kömürün sabit karbon içeriğinin zamana bağlı değişimi. Kırmızı bölgelerde nem içeriği tamamen tükenmiş durumdadır. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat. Kavite oluşumunu modellemek için her sonlu hacim için nem, uçucu ve sabit karbon değerlerini kullanılarak gözeneklilik hesabı yapılmıştır. Bu hesaba göre gözenekliliğin kömür içinde değişimi Şekil 3.12’de verilmiştir.



Şekil 3.12: Kömürün gözeneklilik değerinin zamana bağlı değişimi. Kırmızı bölgeler en yüksek gözeneklilik değerini göstermektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.

3.4.3 Sıcaklık dağılımı

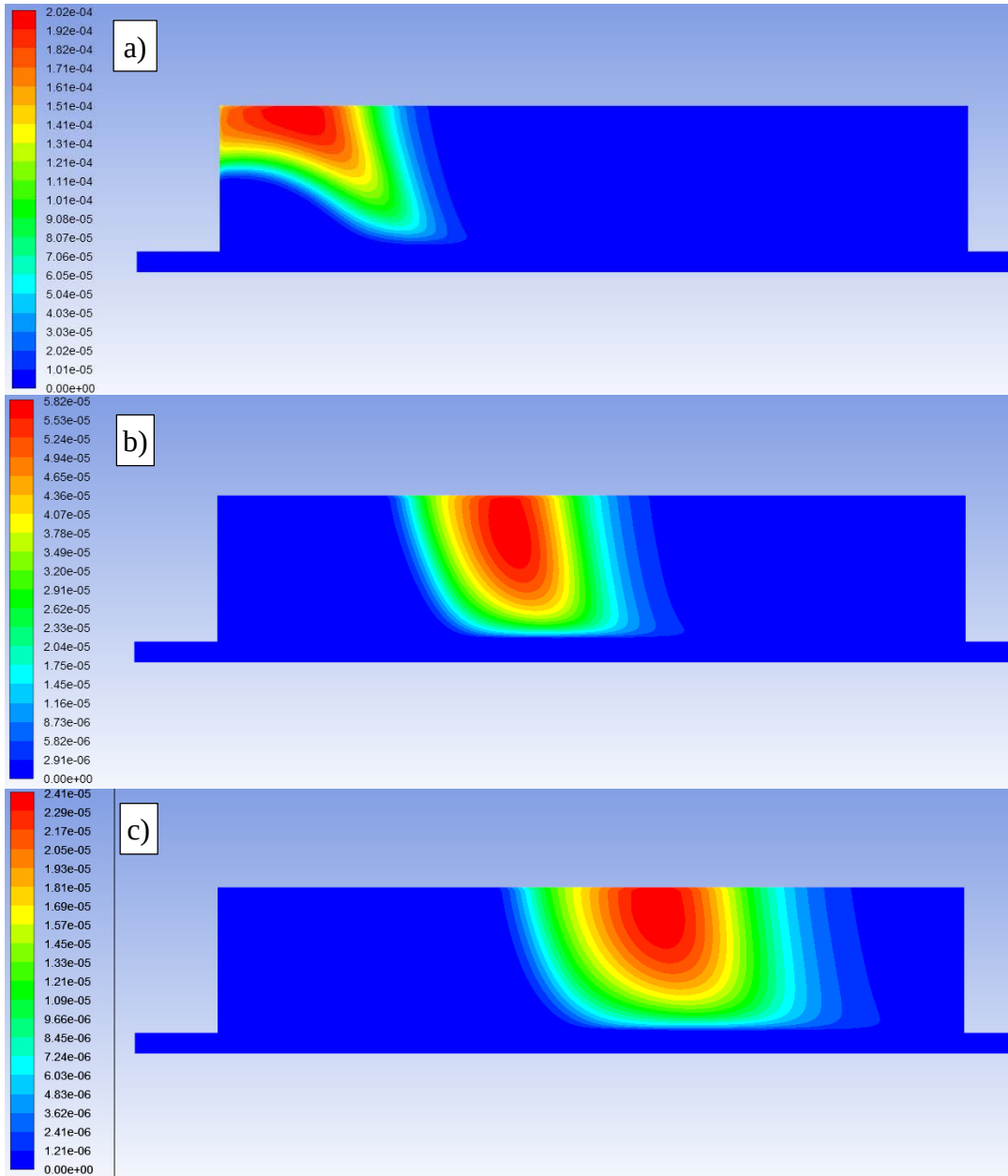
Geometri içerisinde hesaplanan sıcaklık dağılımının zaman bağılı değişimi Şekil 3.13'te verilmiştir. Beklendiği gibi, geometri içerisinde gazlaştırma kanalına paralel olarak sıcaklık değişimi görülmektedir. Yanma bölgesinden gazlaşma bölgesine, sonrasında kuruma bölgesine doğru sıcaklıklar azalmaktadır.



Şekil 3.13: Zamana bağlı sıcaklık dağılımı. Kırmızı bölgelerde görülen sıcaklıklar 1500 K civarındadır. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.

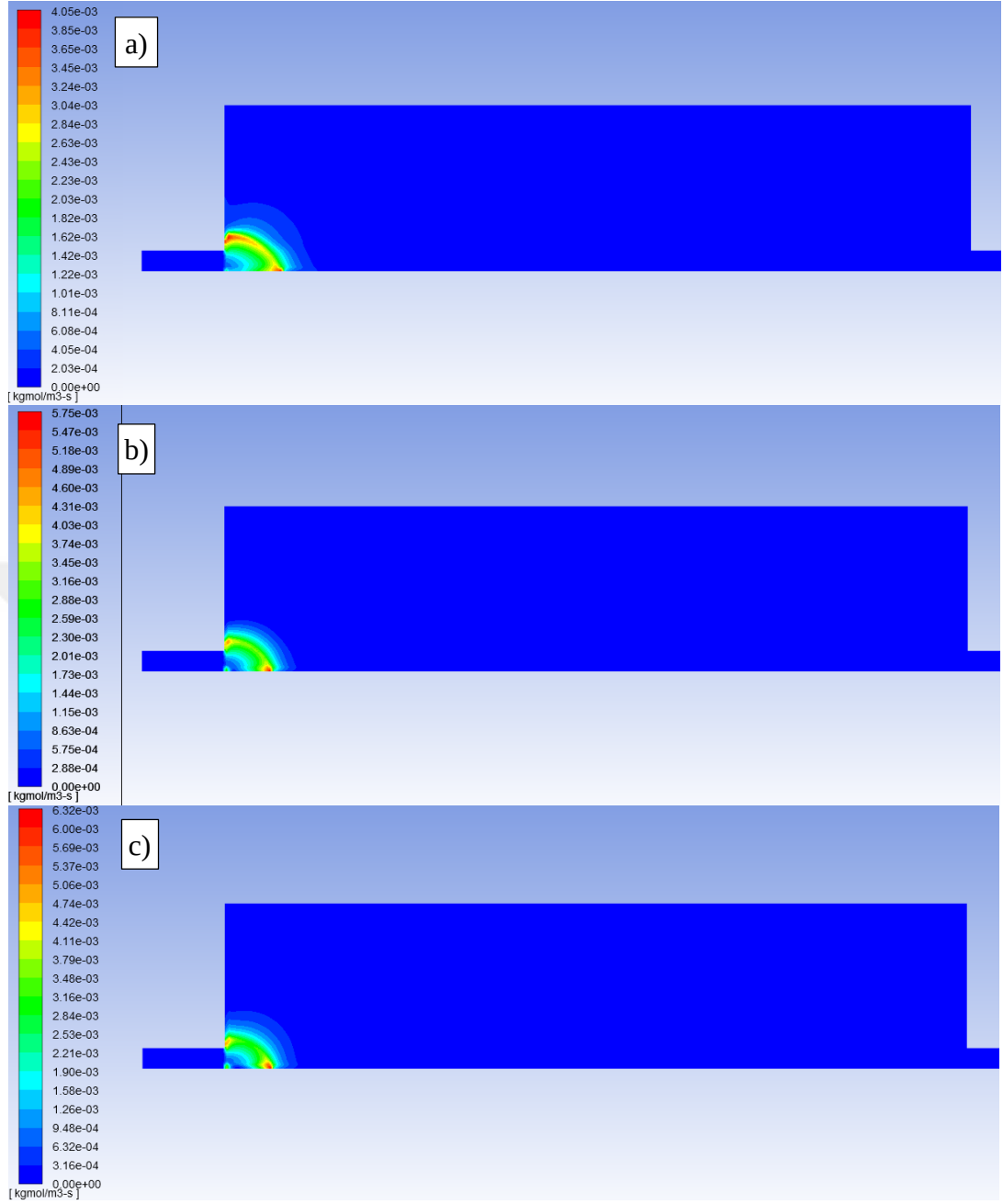
3.4.4 Kimyasal reaksiyon bölgeleri ve hızları

Şekil 3.14'te kuruma hızının bölgesel ve zamana bağlı değişimi verilmiştir. Kömürün nem içeriğine ve sıcaklık dağılımına göre kuruma bölgesi değişmektedir.



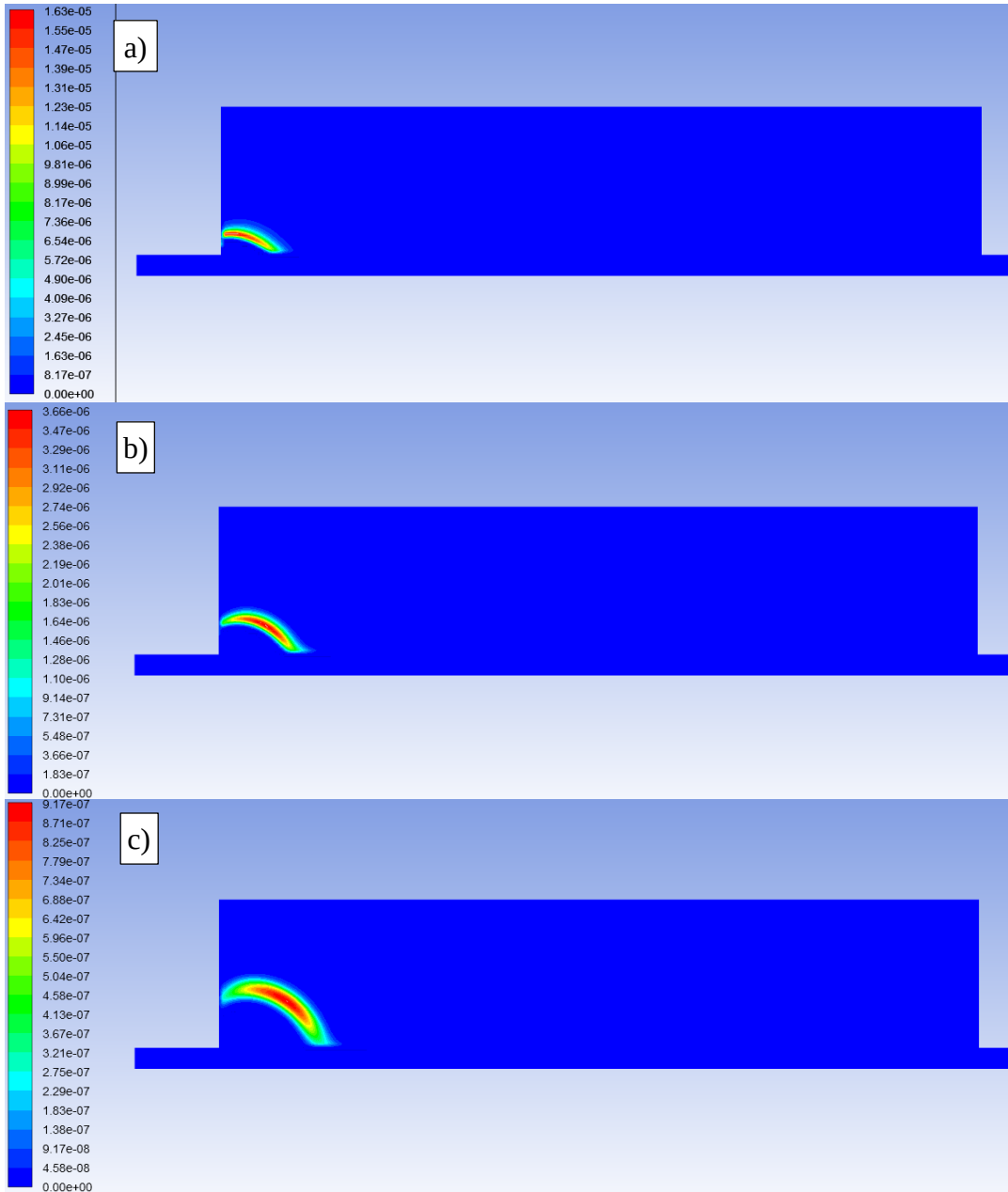
Şekil 3.14: Kömür içerisinde kuruma reaksiyon bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.

Sıcaklık değerinin en yüksek olduğu bölgede yanma reaksiyonlarının gerçekleştiği belirtilmiştir. Şekil 3.15'te hidrojen yanma reaksiyonun geometri içinde gerçekleştiği bölgeler verilmiştir. Giriş kısmına yakın bölgede oksijenin geometri içerisine girmesinden itibaren yanma reaksiyonları gerçekleşmektedir.



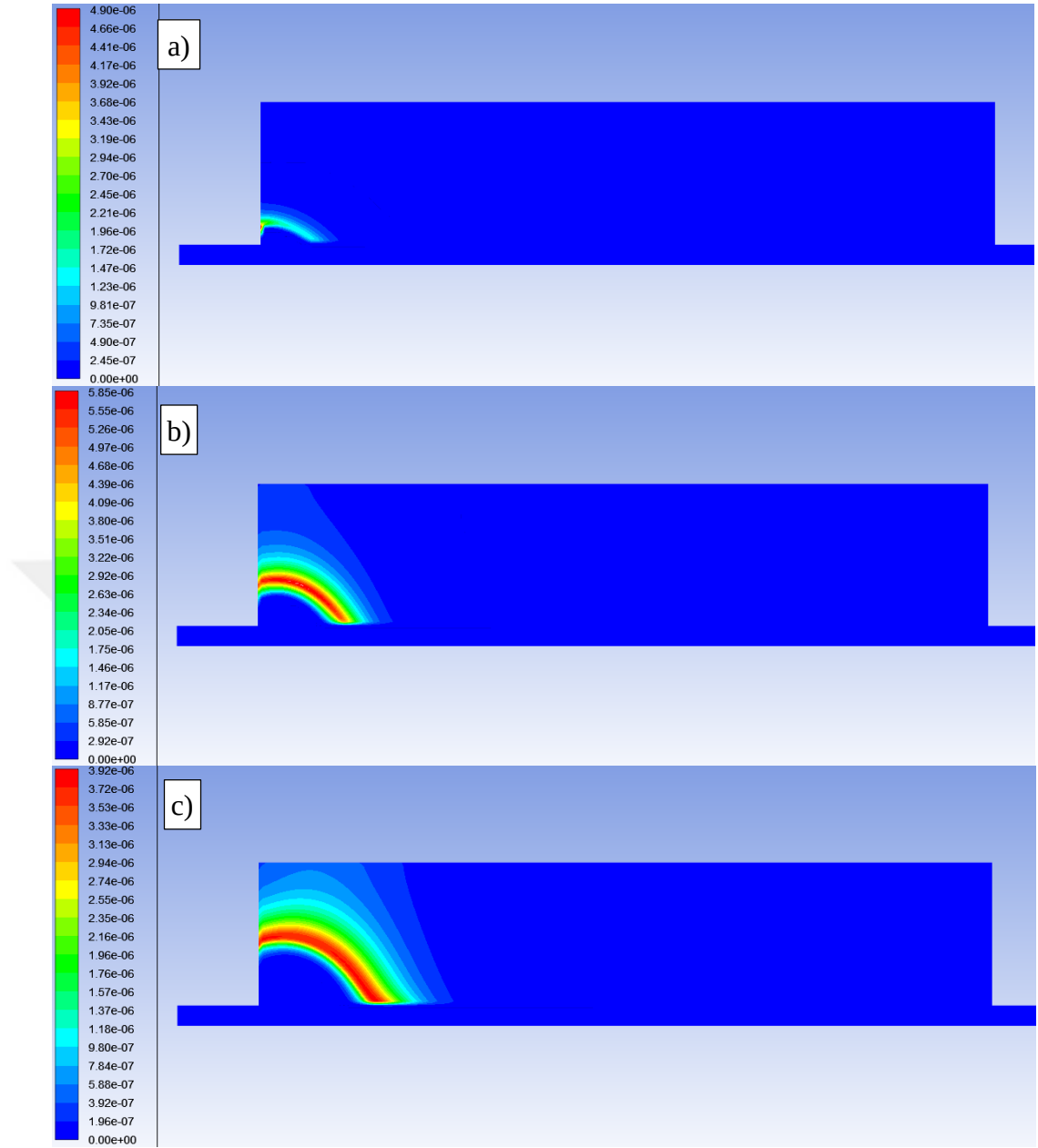
Şekil 3.15: Hidrojen homojen yanma reaksiyonu bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.

Şekil 3.16'da ise sabit karbonun yanma reaksiyon bölgeleri verilmiştir. Sabit karbon içeriğin tükenmesiyle ilişkili olarak karbon yanma bölgesi ilerlemektedir.

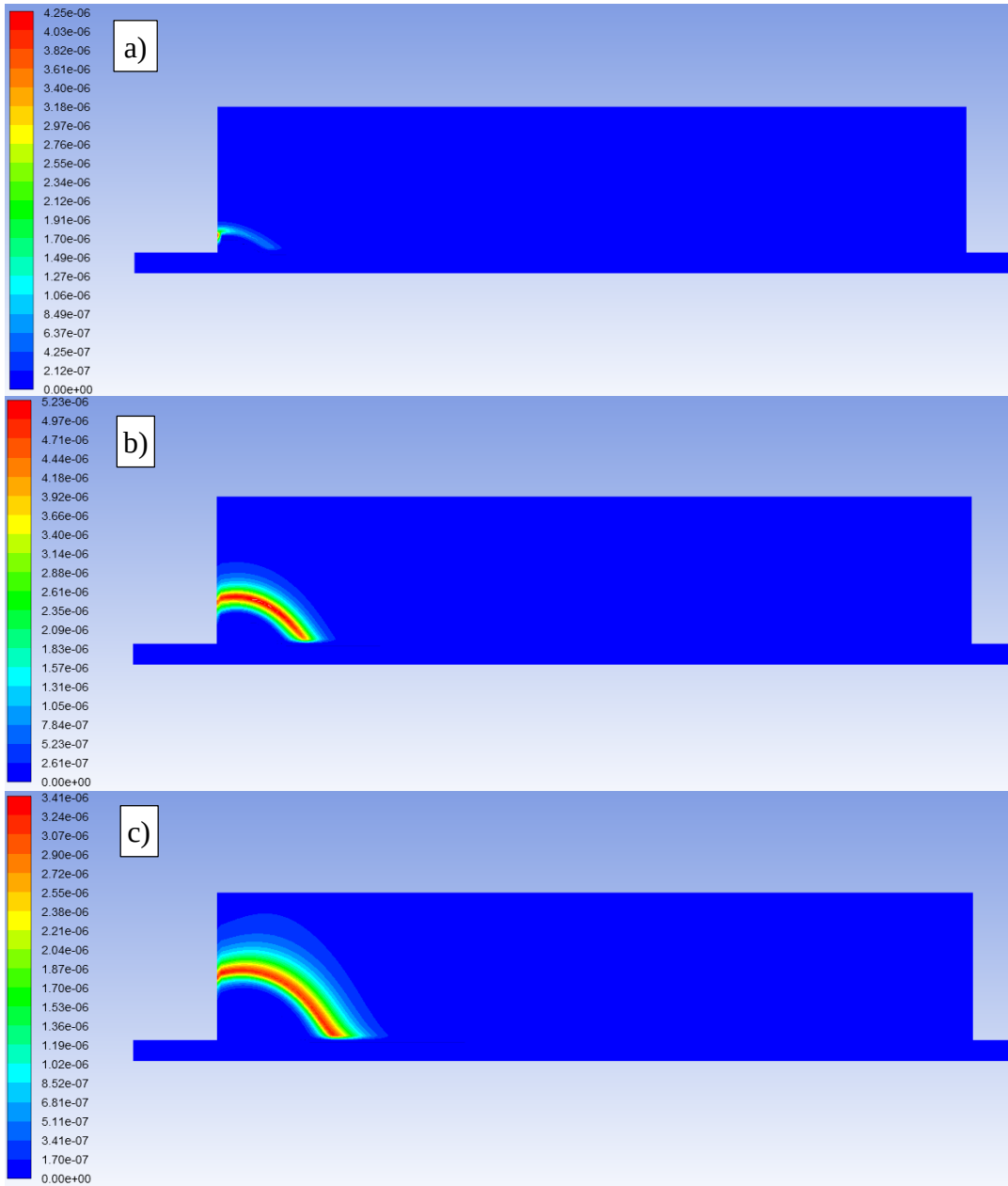


Şekil 3.16: Sabit karbon heterojen yanma reaksiyonu bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.

Şekil 3.17 ve Şekil 3.18’de karbonun, karbondioksit ve su buharı ile gazlaşma reaksiyonun gerçekleştiği bölgeler verilmiştir. Özellikle bu reaksiyonlar sebebiyle kömürün karbon içeriği tükenmektedir.



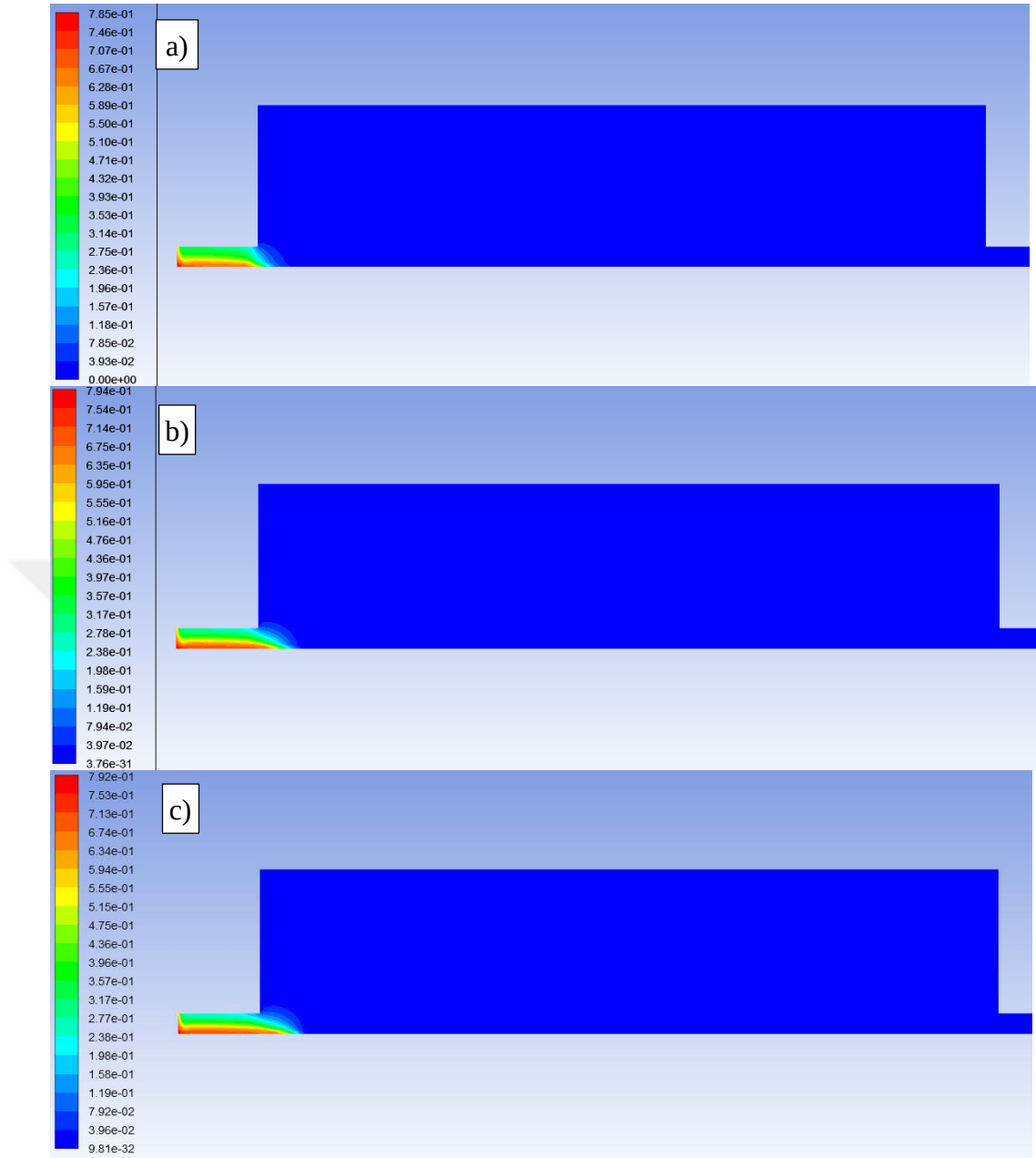
Şekil 3.17: Heterojen karbondioksit gazlaşma reaksiyonu bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.



Şekil 3.18: Heterojen su buharı gazlaşma reaksiyonu bölgeleri. Kırmızı ile en yüksek reaksiyon hızı gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.

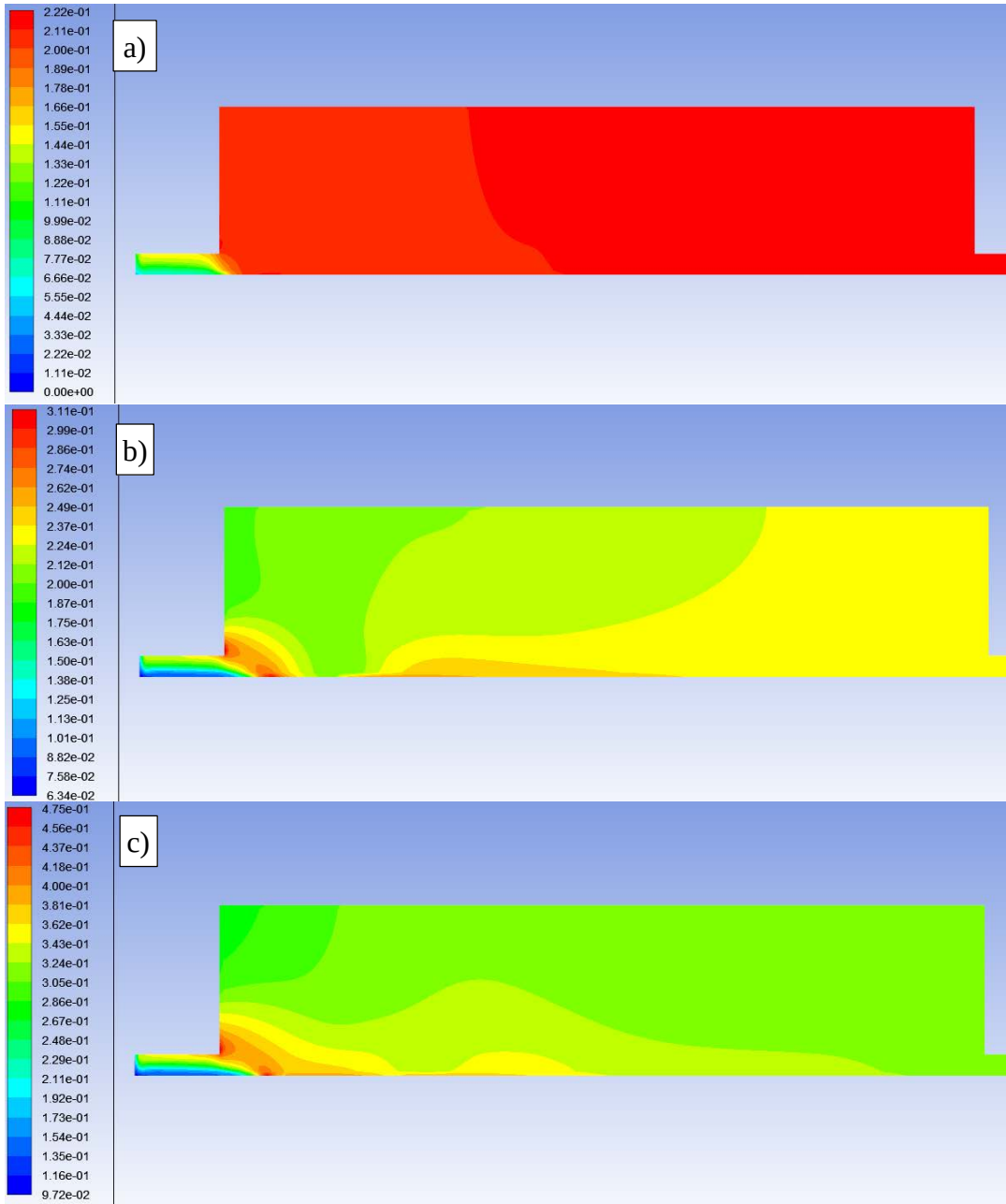
3.4.5 Gaz bileşenlerin dağılımı

Şekil 3.19’da oksijen bileşeninin geometri içinde bölgesel dağılımı verilmiştir. Şekil incelendiği zaman oksijenin kömür içerisine yayılmadan, giriş bölgesinde tükenmektedir. Bu sonuca göre homojen yanma reaksiyonlarının oksijeni büyük oranda tükettiği görülmektedir.

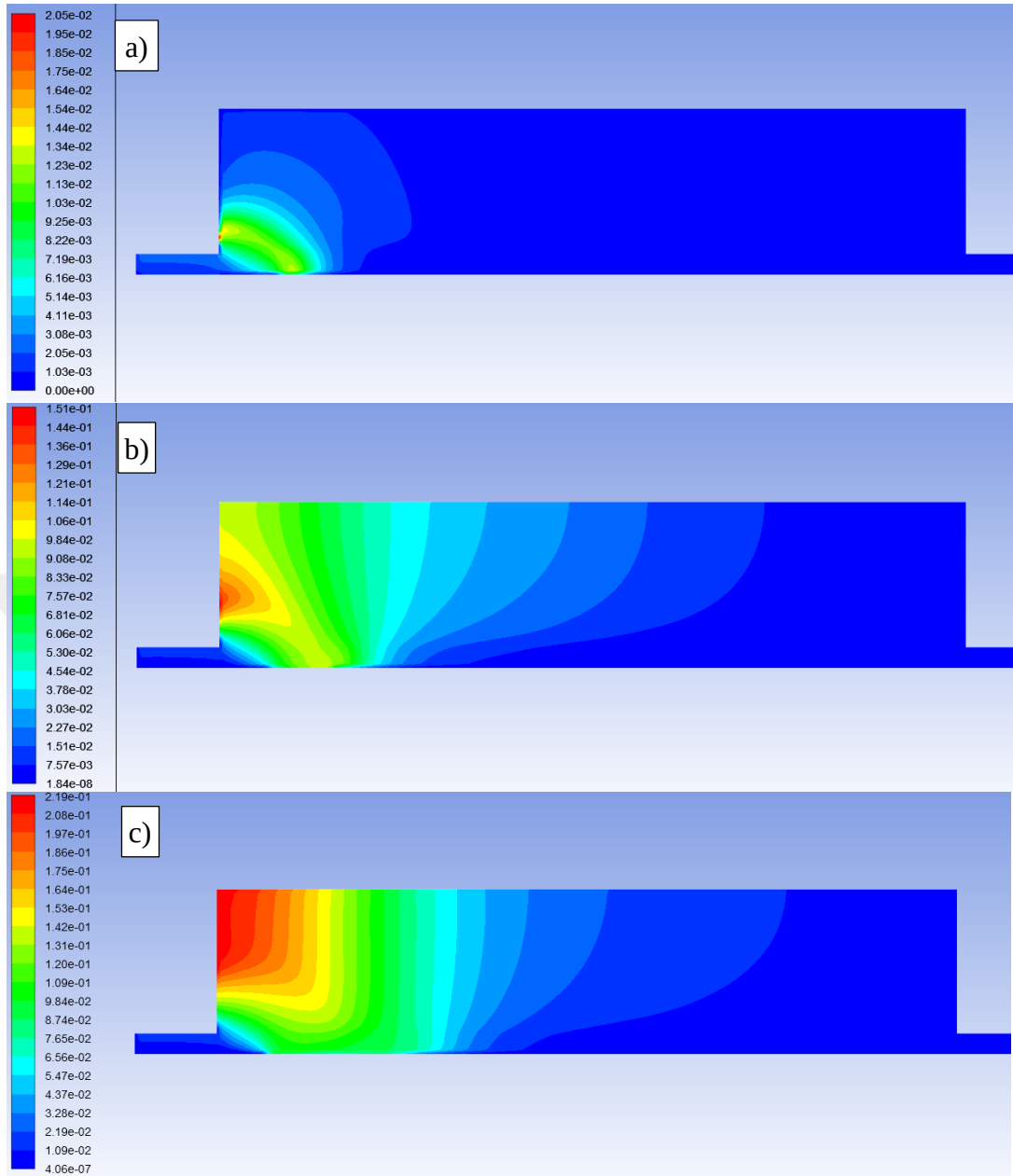


Şekil 3.19: Oksijen bileşeninin molar oranının geometri içinde dağılımı. Kırmızı ile yüksek oran gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.

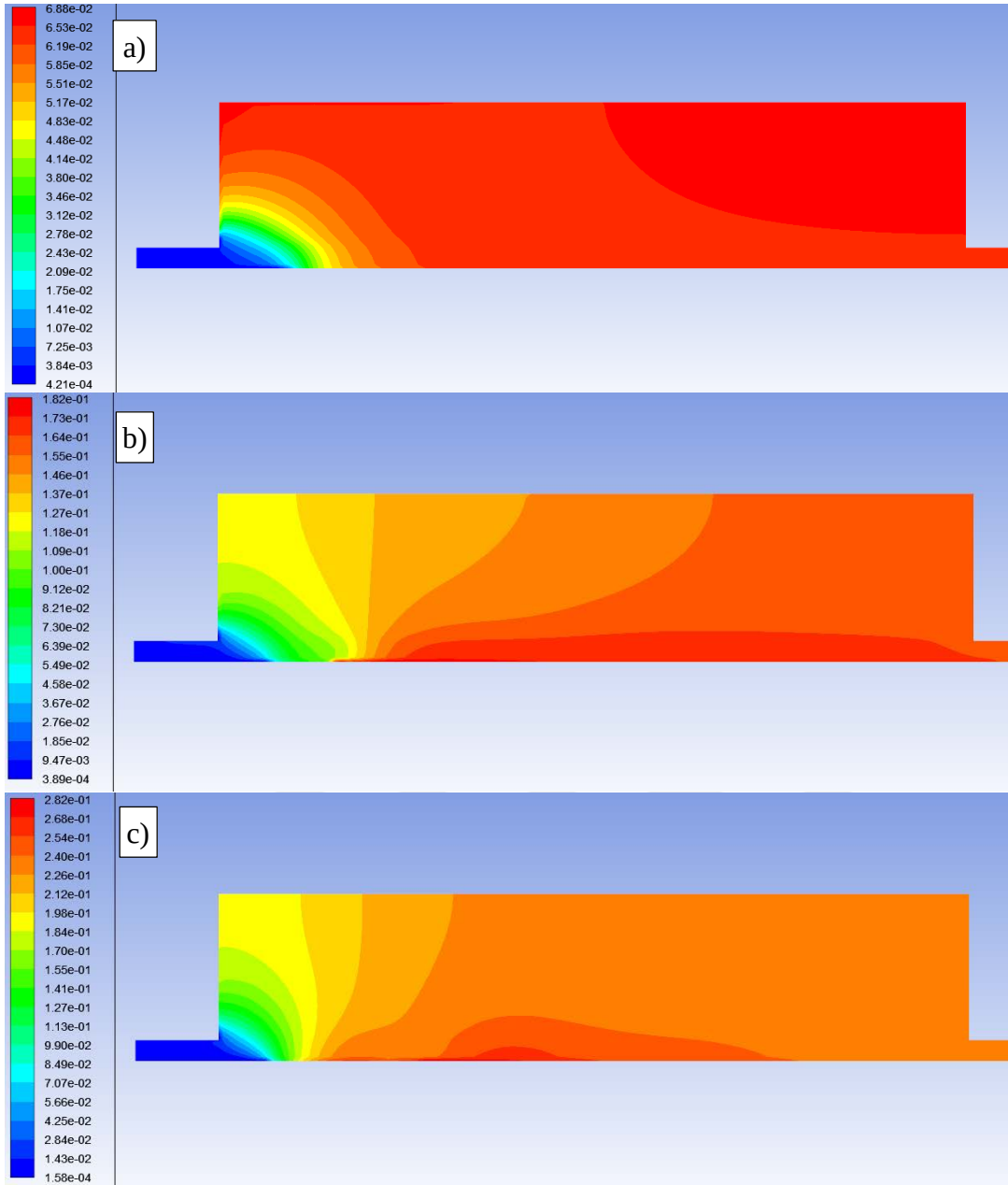
Şekil 3.20, Şekil 3.21 ve Şekil 3.22’de diğer önemli kimyasal bileşenler olan karbondioksit, karbonmonoksit ve hidrojen içeriğinin bölgesel ve zamana bağlı değişimi verilmiştir.



Şekil 3.20: Karbondioksit bileşeninin molar oranının geometri içinde dağılımı. Kırmızı ile yüksek oran gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.



Şekil 3.21: Karbonmonoksit bileşeninin molar oranının geometri içinde dağılımı. Kırmızı ile yüksek oran gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.



Şekil 3.22: Hidrojen bileşeninin molar oranının geometri içinde dağılımı. Kırmızı ile yüksek oran gösterilmektedir. a) 2 saat, b) 5 saat, c) 10 saat.

4. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu yüksek lisans tez çalışması kapsamında yeraltında kömür gazlaştırma işleminin matematiksel modeli ortaya konmuştur. Kurulan model, YKG sırasında görülen anlık momentum, ısı ve kütle transferini, homojen ve heterojen reaksiyonları ve geometri değişimini ele almaktadır. Model içerisinde birden fazla fiziksel olayın matematik modelleri bir araya getirilmiş ve birbirleriyle etkileşimi sağlanmıştır. Modelde, kömür gözeneklilik ve geçirgenlik değerleri zamana bağlı değişen gözenekli ortam olarak ele alınmıştır. Böylece kavite gelişimi ve buna bağlı olarak akış şartlarının değişimine neden olan geometri değişimi hesaba katılmıştır. Kuruma, piroliz ve heterojen reaksiyonlar birinci dereceden reaksiyon modelleri ile, homojen reaksiyonları ise türbülans etkili reaksiyon modelleri ile hesaba katılmıştır. Gözenekli ortamda katı ve gaz fazın ısıl denge içerisinde olduğu kabul edilmiştir. Kütle transferi ise modelde yer alan her bir kimyasal bileşen için yazılan kütle korunum denklemleriyle hesaba dahil edilmiştir. Kurulan zamana bağlı, kinetik reaksiyon ifadelerini kullanan matematik model ANSYS Fluent programı kullanılarak sayısal yöntemle çözümlenmiştir. ANSYS Fluent programının modeli oluşturmada yetersiz kaldığı noktalar UDF kullanılarak çözüme entegre edilmiştir. Çözüm için İTÜ Makine Fakültesinde kurulu olan yeraltında kömür gazlaştırma deney düzeneğinin gazlaştırma reaktörü iki boyuta indirgerenerek kullanılmıştır. Belirlenen geometri üzerinde farklı boyutlarda çözüm ağları oluşturulmuş ve belirli şartlar için farklı çözüm ağlarından elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır. Karşılaştırmaya göre çözüm ağının etkisinin olmadığı çözümü verebilecek çözüm ağı boyutları belirlenmiş ve ileriki hesaplarda belirlenen çözüm ağı kullanılmıştır. ANSYS Fluent kullanılarak elde edilen çözümlemede, yine aynı deney düzeneği kullanılarak yapılan bir YKG deneyinin şartları kullanılmış ve sonuçların doğrulanması için deney sonuçları ile karşılaştırmaya gidilmiştir.

Elde edilen sonuçlara göre:

- Matematiksel model sonuçları deneysel sonuçlar ile karşılaştırıldığında zaman gazlaştırma ajanı içeriğine göre yapay gaz içerik değişimin yakalandığı görülmüştür.

- Yapay gaz içeriğini tahmin eden sayısal değerlere bakıldığı zaman deneysel sonuçlara göre farklılık gösterdiği görülmektedir. Bunun nedeni ise modelde kullanılan reaksiyon sabitlerinin ve piroliz reaksiyon ifadesindeki bileşen katsayılarının, deneyde kullanılan Malkara-Pirinççeşme/Tekirdağ linyitine ait olmayışdır. Belirtilen değerler kömür tipine göre değişkenlik gösteren değerler olup doğru değerler ile doğru sonuçların yakalanması daha olasıdır [7,29].
- Geometri değişimini modellemek için kullanılan gözeneklilik değeri değişimine bakıldığı zaman doğal taşınım etkisi açıkça görülmektedir. YKG işleminde önemli bir fiziksel olay olan ve kavite (oyuk) gelişimini belirleyen çift difüzyon etkili türbülanslı doğal taşınım mekanizması sonucu kavite büyümesi yerçekiminin aksi yönünde daha hızlı gerçekleşmiştir.
- 3 boyutlu yapılacak modelleme çalışmalarıyla kavitenin tam hacminin belirlenmesi mümkün olacaktır.
- Geometri içerisindeki sıcaklık dağılımları, literatürde verilen, YKG işlemi sırasında kömür bloğu boyunca oluşan ve reaksiyon bölgelerine bağlı olan sıcaklık dağılımlarına (Şekil 1.3) benzerlik göstermektedir.
- Oksijen bileşenin mol oranının geometri içerisinde dağılımına bakıldığı zaman homojen yanma reaksiyonları neticesinde büyük oranda tükendiği görülmektedir. Bu durum literatürde yapılan varsayımlarla da uyusmaktadır.
- Kuruma, piroliz ve heterojen reaksiyon bölgelerinin çözüm geometrisi içerisinde zamanla değişimi göstermektedir ki YKG işleminde görülen bantsı yapılar model çözümünde de elde edilmiştir. Kömür içerisinde, kavite sınırından başlayarak, yanma reaksiyon bölgeleri, gazlaşma reaksiyon bölgeleri ve kuruma-piroliz bölgeleri birbiri ardına sıralanarak bantsı yapı oluşmuştur.

Bu sonuçlara göre, geliştirilen model YKG işlemi için tatmin edici düzeyde tahminler yapabilmekte ve YKG işlemine ait özgün geometri değişimi, sıcaklık ve reaksiyon bölgeleri dağılımı doğru tahmin edilebilmektedir. Çözümlerin geliştirilmesi için, kömüre özgü parametrelerin kullanılmasının gerektiği ise açıktır.

KAYNAKLAR

- [1] **Perkins, G.** (2018). Underground coal gasification – Part I: Field demonstrations and process performance. *Progress in Energy and Combustion Science*. Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2018.02.004>
- [2] **Jegbefume, & E.U.** (1981, Ocak 1). Use of the finite element method to predict roof collapse and subsidence resulting from the underground gasification of coal. Univ. of Texas, Austin, TX. Retrieved from <https://www.osti.gov/biblio/5454373>
- [3] **Dinsmoor, B., Galland, J. M., & Edgar, T. F.** (1978). The Modeling of Cavity Formation During Underground Coal Gasification. *Journal of Petroleum Technology*, 30(05), 695–704. <https://doi.org/10.2118/6185-PA>
- [4] **Magnani, C. F., & Ali, S. M. F.** (1975). Mathematical Modeling of the Stream Method of Underground Coal Gasification. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 15(05), 425–436. <https://doi.org/10.2118/4996-PA>
- [5] **Klimenko, A., & Y., A.** (2009). Early Ideas in Underground Coal Gasification and Their Evolution. *Energies*, 2(2), 456–476. <https://doi.org/10.3390/en20200456>
- [6] **Kumar Rn, H., Udayakumar, D. L., Stojcevski, A., Maung, A., & Oo, T.** (2014). Underground Coal Gasification: an alternate, Economical, and Viable Solution for future Sustainability. *International Journal of Engineering Science Invention ISSN (Online)*, 3(1), 2319–6734. Retrieved from https://s3.amazonaws.com/academia.edu.documents/33035713/I03101057068.pdf?AWSAccessKeyId=AKIAIWOWYYGZ2Y53UL3A&Expires=1525037279&Signature=okmCsBtUUafKYFkD%2BXdrYhvhZkk%3D&response-content-disposition=inline%3Bfilename%3DUnderground_Coal_Gasification_an_
- [7] **Khan, M., Mmbaga, J., Shirazi, A., Trivedi, J., Liu, Q., & Gupta, R.** (2015). Modelling Underground Coal Gasification—A Review. *Energies*, 8(11), 12603–12668. <https://doi.org/10.3390/en81112331>
- [8] **Gregg, D. W., & Edgar, T. F.** (1978). Underground coal gasification. *AIChE Journal*, 24(5), 753–781. <https://doi.org/10.1002/aic.690240502>
- [9] **Lyczkowski, R. W., & Chao, Y.-T.** (1984). Comparison of Stefan model with two- phase model of coal drying. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 27(8), 1157–1169. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(84\)90043-7](https://doi.org/10.1016/0017-9310(84)90043-7)
- [10] **Mallett, C.** (2018). Environmental controls for underground coal gasification. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A:*

Journal of Power and Energy, 232(1), 47–55.
<https://doi.org/10.1177/0957650917723733>

- [11] **Li, Y., Liang, X., & Liang, J.** (2007). An Overview of the Chinese UCG Program. *Data Science Journal*, 6, S460–S466.
<https://doi.org/10.2481/dsj.6.S460>
- [12] **Dossey, & J.L.** (1976, Temmuz 1). Underground coal gasification technology in the USSR. [76 references]. Retrieved from <https://www.osti.gov/biblio/7258365>
- [13] **Shafirovich, E., & Varma, A.** (2009). Underground coal gasification: A brief review of current status. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 48(17), 7865–7875. <https://doi.org/10.1021/ie801569r>
- [14] **Cena, R. J., Britten, J. A., & Thorsness, C. B.** (1987, Ağustos 14). Excavation of the Partial Seam CRIP underground coal gasification test site. Retrieved from <https://www.osti.gov/biblio/6156186>
- [15] **Zamzow, K. L.** (2010). Underground coal gasification: history, environmental issues, and the proposed project at beluga. *Center for Science in Public Participation*.
- [16] **Gregg, D. W., Hill, R. W., & Olness, D. U.** (1976). An overview of the Soviet effort in underground coal gasification. *Lawrence Livermore Laboratory, Rept. UCRL-52004*.
- [17] **Olness, D. U.** (1981). Shatskaya underground coal-gasification station. *Lawrence Livermore National Lab., CA (USA)*.
- [18] **Cena, R. J., & Thorsness, C. B.** (1981). *Lawrence Livermore National Laboratory underground coal gasification data base. [US DOE-supported field tests; data]*. Livermore, CA (United States).
<https://doi.org/10.2172/5385426>
- [19] **Boysen, J. E., Covell, J. R., Schmidt, C. R., & Canfield, M. T.** (1998). Detailed Evaluation of Process and Environmental Data from the Rocky Mountain 1 Underground Coal Gasification Field Test. *University of North Dakota, Energy & Environmental Research Center*.
- [20] **Oliver, R. L., Mason, G. M., & Spackman, L. K.** (1989). FIELD AND LABORATORY RESULTS FROM THE TONO I (CRIP) UCG CAVITY EXCAVATION PROJECT, WIDCO MINE SITE, CENTRALIA, WASHINGTON. *Fuel Science and Technology International*, 7(8), 1059–1120.
<https://doi.org/10.1080/08843758908962281>
- [21] **Perkins, G., du Toit, E., Cochrane, G., & Bollaert, G.** (2016). Overview of underground coal gasification operations at Chinchilla, Australia. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 38(24), 3639–3646.
<https://doi.org/10.1080/15567036.2016.1188184>
- [22] **Blinderman, M. S., & Jones, R. M.** (2002). The Chinchilla IGCC project to date: Underground coal gasification and environment. In *Gasification Technologies Conference*. San Francisco, USA.

- [23] **Wiatowski, M., Kapusta, K., Świądrowski, J., Cybulski, K., Ludwik-Pardala, M., Grabowski, J., & Stańczyk, K.** (2015). Technological aspects of underground coal gasification in the Experimental “Barbara” Mine. *Fuel*, 159, 454–462. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2015.07.001>
- [24] **Mocek, P., Pieszczyk, M., Świądrowski, J., Kapusta, K., Wiatowski, M., & Stańczyk, K.** (2016). Pilot-scale underground coal gasification (UCG) experiment in an operating Mine “Wieczorek” in Poland. *Energy*, 111, 313–321. <https://doi.org/10.1016/J.ENERGY.2016.05.087>
- [25] **Stańczyk, K., Howaniec, N., Smoliński, A., Świądrowski, J., Kapusta, K., Wiatowski, M., ... Rogut, J.** (2011). Gasification of lignite and hard coal with air and oxygen enriched air in a pilot scale ex situ reactor for underground gasification. *Fuel*, 90(5), 1953–1962. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2010.12.007>
- [26] **Laciak, M., Kostúr, K., Durdán, M., Kačur, J., & Flegner, P.** (2016). The analysis of the underground coal gasification in experimental equipment. *Energy*, 114, 332–343. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.08.004>
- [27] **Gur, M., Eskin, N., Okutan, H., Arisoy, A., Böke, E., Altıntaş, Ü., Canbaz, E. D., Yıldırım, O.** (2017). Experimental results of underground coal gasification of Turkish lignite in an ex-situ reactor. *Fuel*, 203, 997–1006. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.03.008>
- [28] **Daggupati, S., Mandapati, R. N., Mahajani, S. M., Ganesh, A., Mathur, D. K., Sharma, R. K., & Aghalayam, P.** (2010). Laboratory studies on combustion cavity growth in lignite coal blocks in the context of underground coal gasification. *Energy*, 35(6), 2374–2386. <https://doi.org/10.1016/J.ENERGY.2010.02.015>
- [29] **Żogała, A.** (2014b). Critical Analysis of Underground Coal Gasification Models. Part II: Kinetic and Computational Fluid Dynamics Models. *Journal of Sustainable Mining*, 13(1), 29–37. <https://doi.org/10.7424/jsm140106>
- [30] **Khadse, A. N., Qayyumi, M., Mahajani, S. M., & Aghalayam, P.** (2006). Reactor Model for the Underground Coal Gasification (UCG) Channel. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 4(1). <https://doi.org/10.2202/1542-6580.1351>
- [31] **Thorsness, C. B., & Kang, S. W.** (1985, August 1). Further development of a general-purpose, packed-bed model for analysis of underground coal gasification processes. Retrieved from <https://www.osti.gov/biblio/5212559>
- [32] **Abdel-Hadi, E. A. A., & Hsu, T. R.** (1987). Computer Modeling of Fixed Bed Underground Coal Gasification Using the Permeation Method. *Journal of Energy Resources Technology*, 109(1), 11. <https://doi.org/10.1115/1.3231316>
- [33] **Schwartz, S. H., Eddy, T. L., Mehta, K. H., Lutz, S. A., & Binaie-Kondoloyj, M.** (1978). Cavity Growth Mechanisms In UCG With Side Wall Burn

- Gasification. In *SPE Annual Fall Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers. <https://doi.org/10.2118/7525-MS>
- [34] **Daney, D. E.** (1976). Turbulent natural convection of liquid deuterium, hydrogen and nitrogen within enclosed vessels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 19(4), 431–441. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(76\)90099-5](https://doi.org/10.1016/0017-9310(76)90099-5)
- [35] **Perkins, G., & Sahajwalla, V.** (2005). A Mathematical Model for the Chemical Reaction of a Semi-infinite Block of Coal in Underground Coal Gasification. *Energy & Fuels*, 19(4), 1679–1692. <https://doi.org/10.1021/ef0496808>
- [36] **Perkins, G., & Sahajwalla, V.** (2006). A numerical study of the effects of operating conditions and coal properties on cavity growth in underground coal gasification. *Energy and Fuels*, 20(2), 596–608. <https://doi.org/10.1021/ef050242q>
- [37] **Żogała, A.** (2014a). Critical Analysis of Underground Coal Gasification Models. Part I: Equilibrium Models – Literary Studies. *Journal of Sustainable Mining*, 13(1), 22–28. <https://doi.org/10.7424/jsm140105>
- [38] **Sarrafi Shirazi, A., Karimipour, S., & Gupta, R.** (2013). Numerical simulation and evaluation of cavity growth in in situ coal gasification. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 52(33), 11712–11722. <https://doi.org/10.1021/ie302866c>
- [39] **Sarrafi Shirazi, A.** (2012). CFD Simulation of Underground Coal Gasification. <https://doi.org/10.7939/R3B13F>
- [40] **ANSYS.** (2013). *ANSYS FLUENT User's Guide*. ANSYS FLUENT User's Guide (Vol. 15317). <https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004>
- [41] **Kuyper, R. A., Van Der Meer, T. H., & Hoogendoorn, C. J.** (1994). Turbulent natural convection flow due to combined buoyancy forces during underground gasification of thin coal layers. *Chemical Engineering Science*, 49(6), 851–861. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(94\)80022-7](https://doi.org/10.1016/0009-2509(94)80022-7)
- [42] **Launder, B. E., & Sharma, B. I.** (1974). Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1(2), 131–137. [https://doi.org/10.1016/0094-4548\(74\)90150-7](https://doi.org/10.1016/0094-4548(74)90150-7)
- [43] **Incorporated, A.** (2013). *ANSYS Fluent Theory Guide* (Vol. 15317). [https://doi.org/10.1016/0140-3664\(87\)90311-2](https://doi.org/10.1016/0140-3664(87)90311-2)
- [44] **Syamlal, M., & Bissett, L. A.** (1992). *METC Gasifier Advanced Simulation (MGAS) model*. Morgantown, WV. <https://doi.org/10.2172/10127635>
- [45] **Macak, J., & Malecha, J.** (1978). Mathematical Model for the Gasification of Coal under Pressure. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 17(1), 92–98. <https://doi.org/10.1021/i260065a017>
- [46] **Di Blasi, C., Buonanno, F., & Branca, C.** (1999). Reactivities of some biomass chars in air. *Carbon*, 37(8), 1227–1238. [https://doi.org/10.1016/S0008-6223\(98\)00319-4](https://doi.org/10.1016/S0008-6223(98)00319-4)

- [47] **Ye, D. P., Agnew, J. B., & Zhang, D. K.** (1998). Gasification of a South Australian low-rank coal with carbon dioxide and steam: kinetics and reactivity studies. *Fuel*, 77(11), 1209–1219. [https://doi.org/10.1016/S0016-2361\(98\)00014-3](https://doi.org/10.1016/S0016-2361(98)00014-3)
- [48] **Spalding, D. B.** (1971). Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. *Symposium (International) on Combustion*, 13(1), 649–657. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(71\)80067-X](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(71)80067-X)
- [49] **Magnussen, B. F., & Hjertager, B. H.** (1977). On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1), 719–729. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(77\)80366-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(77)80366-4)
- [50] **Boroson, M. L., Howard, J. B., Longwell, J. P., & Peters, W. A.** (1989). Product yields and kinetics from the vapor phase cracking of wood pyrolysis tars. *AIChE Journal*, 35(1), 120–128. <https://doi.org/10.1002/aic.690350113>
- [51] **Batenburg, D., Bruining, J., & Biezen, E.** (1993). Heat and mass transfer during underground gasification of thin deep coal seams.
- [52] **V, E. S. P. B., Chinchin, G. C., Denny, P. J., Jennings, J. R., Waugh, K. C., & Group, P.** (1988). Review - Synthesis of Methanol. *Applied Catalysis*, 36, 1–65.
- [53] **Winslow, & A.M.** (1976, September 1). Numerical model of coal gasification in a packed bed. Retrieved from <https://www.osti.gov/biblio/7335066>
- [54] **Samdani, G., Aghalayam, P., Ganesh, A., Sapru, R. K., Lohar, B. L., & Mahajani, S.** (2016). A process model for underground coal gasification - Part-I: Cavity growth. *Fuel*, 181, 690–703. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.05.020>



EKLER

EK A: ANSYS Fluent için kullanılmış UDF

Ahad Sarraf Shirazi'nin, 2012 yılındaki tez çalışmasından faydalanılmıştır.

```

/*****
Kullanici tanimli kayitlar (UDM)
C_UDMI(c,t,0): Kuruma
C_UDMI(c,t,1): Piroliz
C_UDMI(c,t,2): Sabit Karbon Yanma
C_UDMI(c,t,3): CO2 GaazlaÄyma
C_UDMI(c,t,4): H2O GazlaÄyma
C_UDMI(c,t,5): GÄ¶zeneklilik
C_UDMI(c,t,6): GeÄ¶irgenlik
*****/

#include "udf.h"
/* reaksiyon hizi sicaklik siniri*/
#define TLIMIT 1000.0
/* atmosfer basinci (pa) */
#define PATM 101325
/* baslangic gÄ¶zeneklilik */
#define IN_POR 0.05
/* baslangic gecirgenlik */
#define IN_RES 1e+15
/* komur yogunlugu */
#define SOL_DEN 1200
/* baslangic nem icerigi */
#define MOIS_INF 0.1001
/* baslangic ucucu icerigi */
#define VOL_INF 0.3370
/* baslangic sabit karbon icerigi */
#define C_INF 0.3802
/* kul icerigi */
#define ASH 0.1827
/* kuruma arrhenius parametreleri E:aktivasyon enerjisi
(J/mol), A:hiz katsayisi */
#define DRYE 78240
#define DRYA 51000
/* kuruma reaksiyon isisi */
#define DRY_HEAT 40000
/* piroliz arrhenius parametreleri E:aktivasyon enerjisi ,
A:hiz katsayisi */
#define VOLE 78240
#define VOLA 51000
/* piroliz reaksiyon katsayilari */
#define VOL_H2O 0.48
#define VOL_H2 0.01
#define VOL_CO 0.22
#define VOL_CO2 0.29

```

```

#define VOL_TOT 1.0
/* C+ O2 ==> CO2 arrhenius parametreleri E:aktivasyon enerjisi
, A:hiz katsayisi */
#define C1E 100400
#define C1A 3.07e+5
/* C+ O2 ==> CO2 reaksiyon isisi */
#define C1_HEAT 393000
/* C+ CO2 ==> 2CO arrhenius parametreleri E:aktivasyon
enerjisi , A:hiz katsayisi */
#define C2E 91000
#define C2A 22.11
/* C+ CO2 ==> 2CO dH= 172 KJ/mol reaksiyon isisi */
#define C2_HEAT 172000
/* C+ H2O ==>CO+H2 E:aktivasyon enerjisi , A:hiz katsayisi */
#define C3E 131000
#define C3A 4350
/* C+ H2O ==>CO+H2 reaksiyon isisi */
#define C3_HEAT 131000

```

```

DEFINE_ADJUST(UDSLimit,d)
{
    Thread *t;
    cell_t c;

    thread_loop_c(t,d)
    {
        begin_c_loop(c,t)
            if(C_UDSI(c,t,0)>MOIS_INF*(1-IN_POR))
            {
                C_UDSI(c,t,0)=MOIS_INF*(1-IN_POR);
            }
            if(C_UDSI(c,t,1)>VOL_INF*(1-IN_POR))
            {
                C_UDSI(c,t,1)=VOL_INF*(1-IN_POR);
            }
            if(C_UDSI(c,t,2)>C_INF*(1-IN_POR))
            {
                C_UDSI(c,t,2)=C_INF*(1-IN_POR);
            }
        end_c_loop(c,t)
    }
}

```

```

DEFINE_UDS_UNSTEADY(my_uds_unsteady,c,t,i,apu,su)
{
    real physical_dt, vol, rho, phi_old;
    physical_dt = RP_Get_Real("physical-time-step");
    vol = C_VOLUME(c,t);
    rho = C_R_M1(c,t);
    *apu = -rho*vol / physical_dt; /*implicit part*/
    phi_old = C_STORAGE_R(c,t,SV_UDSI_M1(i));
    *su = rho*vol*phi_old/physical_dt; /*explicit part*/
}

```

```

DEFINE_PROFILE(porosity_UDS, t, nv)
{

```

```

        cell_t c;
        begin_c_loop(c,t)
        {
            C_PROFILE(c,t,nv) = IN_POR+(1-
IN_POR)*(C_UDSI(c,t,0)+C_UDSI(c,t,1)+((C_INF+ASH)/C_INF)*C_UDS
I(c,t,2)) ;
            C_UDMI(c,t,5)= IN_POR+(1-
IN_POR)*(C_UDSI(c,t,0)+C_UDSI(c,t,1)+((C_INF+ASH)/C_INF)*C_UDS
I(c,t,2)) ;
        }
        end_c_loop(c,t)
    }

DEFINE_PROFILE(resistance, t, nv)
{
    cell_t c;
    real porosity;
    real rstnc;
    begin_c_loop(c,t)
    {
        porosity= IN_POR+(1-
IN_POR)*(C_UDSI(c,t,0)+C_UDSI(c,t,1)+((C_INF+ASH)/C_INF)*C_UDS
I(c,t,2)) ;
        if (porosity>(1-IN_POR))
        {
            rstnc=0.0;
        }
        else
        {
            rstnc=IN_RES/exp(12*(porosity-IN_POR));
        }
        C_PROFILE(c,t,nv) = rstnc;
        C_UDMI(c,t,6)= rstnc;
    }
    end_c_loop(c,t)
}

DEFINE_PROPERTY(coal_conductivity,c,t)
{
    real cond;
    real porosity, ym;
    porosity= IN_POR+(C_UDSI(c,t,0)+C_UDSI(c,t,1)+C_UDSI(c,t,2)) ;
    ym=(MOIS_INF-C_UDSI(c,t,0))/(1-porosity);
    cond = 0.6*ym+(1-ym)*pow((1230/4511),3.5)*pow(C_T(c,t),0.5);
    return cond;
}

/*****
*****
Kuruma kaynak terimleri
C_UDSI(c,t,0): Zamana bagli komur nem icerigi
*****/
DEFINE_SOURCE(solid_h2op_source,c,t,dS,eqn)
{
    real source;

```

```

real tem;
real dum = C_T(c,t);
real k;
if (dum>TLIMIT)
{
    tem=TLIMIT;
}
else
{
    tem = dum;
}
if (C_UDSI(c,t,0)>= MOIS_INF*(1-IN_POR))
{
    k = 0.;
}
else
{
    k = DRYA*exp((-DRYE)/(8.3*tem));
}
source=k*(MOIS_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,0))*C_R(c,t);
C_UDMI(c,t,0)=k*(MOIS_INF*(1-IN_POR)-
C_UDSI(c,t,0))*C_R(c,t);
return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_h2o,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    if (C_UDSI(c,t,0)>= MOIS_INF*(1-IN_POR))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = DRYA*exp((-DRYE)/(8.3*tem));
    }
    source=k*(MOIS_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,0))*SOL_DEN;
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(heat_source_drying,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    if (dum>TLIMIT)

```

```

        {
            tem=TLIMIT;
        }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    if (C_UDSI(c,t,0)>= MOIS_INF*(1-IN_POR))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = DRYA*exp((-DRYE)/(8.3*tem));
    }
    source=(-k)*(MOIS_INF*(1-IN_POR)-
C_UDSI(c,t,0))*SOL_DEN*(DRY_HEAT/0.018);
    return source;
}

/*****
*****
Ucucu kaynak terimleri
C_UDSI(c,t,1): Zamana bagli komur ucucu icerigi
*****/
DEFINE_SOURCE(solid_vm_release,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    if (C_UDSI(c,t,1)>= VOL_INF*(1-IN_POR))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = VOLA*exp(-VOLE/(8.3*tem));
    }
    C_UDMI(c,t,1)=k*(VOL_INF*(1-IN_POR)-
C_UDSI(c,t,1))*C_R(c,t);
    source=k*(VOL_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,1))*C_R(c,t);
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_vm_pyrolysis,c,t,dS,eqn)
{
    real source;

```

```

    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    if (C_UDSI(c,t,1)>= VOL_INF*(1-IN_POR))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = VOLA*exp(-VOLE/(8.3*tem));
    }
    source=k*(VOL_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,1))*SOL_DEN;
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_h2o_pyrolysis,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    if (C_UDSI(c,t,1)>= VOL_INF*(1-IN_POR))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = VOLA*exp(-VOLE/(8.3*tem));
    }
    source=VOL_H2O*k*(VOL_INF*(1-IN_POR)-
C_UDSI(c,t,1))*SOL_DEN;
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_h2_pyrolysis,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    if (dum>TLIMIT)
    {

```

```

        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    if (C_UDSI(c,t,1)>= VOL_INF*(1-IN_POR))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = VOLA*exp(-VOLE/(8.3*tem));
    }
    source=VOL_H2*k*(VOL_INF*(1-IN_POR)-
C_UDSI(c,t,1))*SOL_DEN;
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_co_pyrolysis,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    if (C_UDSI(c,t,1)>= VOL_INF*(1-IN_POR))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = VOLA*exp(-VOLE/(8.3*tem));
    }
    source=VOL_CO*k*(VOL_INF*(1-IN_POR)-
C_UDSI(c,t,1))*SOL_DEN;
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_co2_pyrolysis,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {

```

```

        tem = dum;
    }
    if (C_UDSI(c,t,1)>= VOL_INF*(1-IN_POR))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = VOLA*exp(-VOLE/(8.3*tem));
    }
    source=VOL_CO2*k*(VOL_INF*(1-IN_POR)-
C_UDSI(c,t,1))*SOL_DEN;
    return source;
}

/*****
*****
Sabit karbon yanma kaynak terimleri
C+ O2 ==> CO2
*****
*****/
DEFINE_SOURCE(solid_FC_combustion_source,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yo2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yo2= C_YI(c,t,0)/Mtot/32.;
    if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = C1A*exp((-C1E)/(8.3*tem));
    }
    C_UDMI(c,t,2)=k*gfunc*((C_P(c,t)+PATM)/PATM)*yo2*C_R(c,t
);
    source=k*gfunc*((C_P(c,t)+PATM)/PATM)*yo2*C_R(c,t);
    return source;
}

```



```

DEFINE_SOURCE(mass_source_o2_FC_combustion,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yo2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
    C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yo2= C_YI(c,t,0)/Mtot/32;
    if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
    C_UDSI(c,t,0)<(0.9*M0IS_INF*(1-IN_POR)))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = C1A*exp((-C1E)/(8.3*tem));
    }
    source=(-
    k)*gfunc*((C_P(c,t)+PATM)/PATM)*yo2*SOL_DEN*0.032/0.012;
    return source;
}

DEFINE_SOURCE(mass_source_net_combustion,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yo2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
    C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yo2= C_YI(c,t,0)/Mtot/32;

```

```

        if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)))
        {
            k = 0.;
        }
        else
        {
            k = C1A*exp((-C1E)/(8.3*tem));
        }
        source=k*gfunc*((C_P(c,t)+PATM)/PATM)*yo2*SOL_DEN*(0.044
-0.032)/0.012;
        return source;
    }
DEFINE_SOURCE(mass_source_co2_FC_combustion,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yo2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yo2= C_YI(c,t,0)/Mtot/32;
    if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)))
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = C1A*exp((-C1E)/(8.3*tem));
    }
    source=k*gfunc*((C_P(c,t)+PATM)/PATM)*yo2*SOL_DEN*0.044/
0.012;
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(heat_source_FC_combustion,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yo2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);

```

```

        real gfunc=conv;
        if (dum>TLIMIT)
        {
            tem=TLIMIT;
        }
        else
        {
            tem = dum;
        }
        Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
        C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
        yo2= C_YI(c,t,0)/Mtot/32;
        if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
        C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)))
        {
            k = 0.;
        }
        else
        {
            k = C1A*exp((-C1E)/(8.3*tem));
        }
        source=k*gfunc*((C_P(c,t)+PATM)/PATM)*yo2*SOL_DEN*C1_HEA
        T/0.012;
        return source;
    }

/*****
*****
C-CO2 gazlasma kaynak terimleri
C+ CO2 ==> 2CO dH= 171 KJ/mol
*****
*****/
DEFINE_SOURCE(solid_FC_co2gasification,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yco2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
    C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yco2= C_YI(c,t,1)/Mtot/44;
    if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
    C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)) || yco2<0.001)
    {

```

```

        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = C2A*exp((-C2E)/(8.3*tem));
    }
    C_UDMI(c,t,3)=k*gfunc*C_R(c,t);
    source=k*gfunc*C_R(c,t);
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_net_co2gasification,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yco2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yco2= C_YI(c,t,1)/Mtot/44;
    if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)) || yco2<0.001)
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = C2A*exp((-C2E)/(8.3*tem));
    }
    source=k*gfunc*SOL_DEN*(2*0.028-0.044)/0.012;
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_co2_co2gasification,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yco2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;

```

```

    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
    C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yco2= C_YI(c,t,1)/Mtot/44;
    if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
    C_UDSI(c,t,0)<(0.9*M0IS_INF*(1-IN_POR)) || yco2<0.001)
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = C2A*exp((-C2E)/(8.3*tem));
    }
    source=(-k)*gfunc*SOL_DEN*0.044/0.012;
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_co_co2gasification,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yco2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
    C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yco2= C_YI(c,t,1)/Mtot/44;
    if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
    C_UDSI(c,t,0)<(0.9*M0IS_INF*(1-IN_POR)) || yco2<0.001)
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = C2A*exp((-C2E)/(8.3*tem));
    }
    source=2*k*gfunc*SOL_DEN*0.028/0.012;
    return source;
}
DEFINE_SOURCE(heat_source_co2gasification,c,t,dS,eqn)
{
    real source;

```

```

    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yco2;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yco2= C_YI(c,t,1)/Mtot/44;
    if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)) || yco2<0.001)
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = C2A*exp((-C2E)/(8.3*tem));
    }
    source=(-k)*gfunc*SOL_DEN*C2_HEAT/0.012;
    return source;
}

/*****
*****
C-H2O gazlasma kaynak terimleri
C+ H2O ==>CO+H2
*****
*****/
DEFINE_SOURCE(solid_FC_h2ogasificatio,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yh2o;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
}

```

```

        Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
        yh2o= C_YI(c,t,3)/Mtot/18;
        if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*M0IS_INF*(1-IN_POR)) || yh2o<0.001)
        {
            k = 0.;
        }
        else
        {
            k = C3A*exp((-C3E)/(8.3*tem));
        }
        C_UDMI(c,t,4)=k*gfunc*C_R(c,t);
        source=k*gfunc*C_R(c,t);
        return source;
    }
    DEFINE_SOURCE(mass_source_net_h2ogasificatio,c,t,dS,eqn)
    {
        real source;
        real tem;
        real dum = C_T(c,t);
        real k;
        real Mtot;
        real yh2o;
        real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
        real gfunc=conv;
        if (dum>TLIMIT)
        {
            tem=TLIMIT;
        }
        else
        {
            tem = dum;
        }
        Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
        yh2o= C_YI(c,t,3)/Mtot/18;
        if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*M0IS_INF*(1-IN_POR)) || yh2o<0.001)
        {
            k = 0.;
        }
        else
        {
            k = C3A*exp((-C3E)/(8.3*tem));
        }
        source=k*gfunc*SOL_DEN*(0.002+0.028-0.018)/0.012;
        return source;
    }
    DEFINE_SOURCE(mass_source_h2o_h2ogasification,c,t,dS,eqn)
    {
        real source;
        real tem;
        real dum = C_T(c,t);
        real k;
        real Mtot;

```

```

real yh2o;
real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
real gfunc=conv*sqrt(1-PSI*log(conv/C_INF));
if (dum>TLIMIT)
{
    tem=TLIMIT;
}
else
{
    tem = dum;
}
Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
yh2o= C_YI(c,t,3)/Mtot/18;
if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)) || yh2o<0.001)
{
    k = 0.;
}
else
{
    k = C3A*exp((-C3E)/(8.3*tem));
}
source=(-k)*gfunc*SOL_DEN*0.018/0.012;
return source;
}
DEFINE_SOURCE(mass_source_h2_h2ogasification,c,t,dS,eqn)
{
    real source;
    real tem;
    real dum = C_T(c,t);
    real k;
    real Mtot;
    real yh2o;
    real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
    real gfunc=conv;
    if (dum>TLIMIT)
    {
        tem=TLIMIT;
    }
    else
    {
        tem = dum;
    }
    Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
    yh2o= C_YI(c,t,3)/Mtot/18;
    if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)) || yh2o<0.001)
    {
        k = 0.;
    }
    else
    {
        k = C3A*exp((-C3E)/(8.3*tem));
    }
}

```



```

        source=k*gfunc*SOL_DEN*0.002/0.012;
        return source;
    }
    DEFINE_SOURCE(mass_source_co_h2ogasification,c,t,dS,eqn)
    {
        real source;
        real tem;
        real dum = C_T(c,t);
        real k;
        real Mtot;
        real yh2o;
        real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
        real gfunc=conv;
        if (dum>TLIMIT)
        {
            tem=TLIMIT;
        }
        else
        {
            tem = dum;
        }
        Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
        C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;
        yh2o= C_YI(c,t,3)/Mtot/18;
        if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
        C_UDSI(c,t,0)<(0.9*M0IS_INF*(1-IN_POR)) || yh2o<0.001)
        {
            k = 0.;
        }
        else
        {
            k = C3A*exp((-C3E)/(8.3*tem));
        }
        source=k*gfunc*SOL_DEN*0.028/0.012;
        return source;
    }
    DEFINE_SOURCE(heat_source_h2ogasification,c,t,dS,eqn)
    {
        real source;
        real tem;
        real dum = C_T(c,t);
        real k;
        real Mtot;
        real yh2o;
        real conv=C_INF*(1-IN_POR)-C_UDSI(c,t,2);
        real gfunc=conv;
        if (dum>TLIMIT)
        {
            tem=TLIMIT;
        }
        else
        {
            tem = dum;
        }
        Mtot=C_YI(c,t,0)/32.0+C_YI(c,t,1)/44.0+C_YI(c,t,2)/28.0+
        C_YI(c,t,3)/18.0+C_YI(c,t,4)/2.0+C_YI(c,t,5)/28.0;

```

```

        yh2o= C_YI(c,t,3)/Mtot/18;
        if (C_UDSI(c,t,2)>= C_INF*(1-IN_POR) ||
C_UDSI(c,t,0)<(0.9*MOIS_INF*(1-IN_POR)) || yh2o<0.001)
        {
            k = 0.;
        }
        else
        {
            k = C3A*exp((-C3E)/(8.3*tem));
        }
        source=(-k)*gfunc*SOL_DEN*C3_HEAT/0.012;
        return source;
    }

```



ÖZGEÇMİŞ



Ad-Soyad : Engin Deniz CANBAZ

Doğum Tarihi ve Yeri : 11.03.1993 Çanakkale

E-posta : canbaze@itu.edu.tr

ÖĞRENİM DURUMU:

- **Lise** : 2011, Çanakkale Milli Piyango Anadolu Lisesi, Çanakkale
- **Lisans** : 2016, İTÜ, Makina Fakültesi, Makina Mühendisliği, İstanbul
- **Yüksek Lisans** : 2018, İTÜ, Makina Fakültesi, Makina Mühendisliği Anabilim Dalı, Isı-Akışkan Programı, İstanbul