
GAZİ ÜNİVERSİTESİ
Gazi
1926

AMONYAK-HİDROJEN VE AMONYAK-KÖMÜR GAZI KARIŞIMI KOMPOZİT YAKITLARIN YANMA VE EMİSYON DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ

Ozan KEKÜL

DOKTORA TEZİ
ENERJİ SİSTEMLERİ MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KASIM 2022

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmasında yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Ozan KEKÜL

25/11/2022

AMONYAK-HİDROJEN VE AMONYAK-KÖMÜR GAZI KARIŞIMI KOMPOZİT YAKITLARIN YANMA VE EMİSYON DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ

(Doktora Tezi)

Ozan KEKÜL

GAZİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Kasım 2022

ÖZET

Amonyak, kütlece %17,8 oranında hidrojen içeriği ile fosil yakıtlara alternatif olması açısından umut verici bir enerji kaynağıdır. Bununla birlikte, amonyağın yanma performansı ile fosil yakıtların yanma performansı kıyaslandığında, dar alevlenebilirlik limiti, düşük yanma hızı ve alev sıcaklığı gibi aşılması gereken bazı zorluklar mevcuttur. Bu tez kapsamında, ülkemiz şartları dahilinde üretilmesi mümkün olan amonyağın yanma performansının geliştirilmesi amaçlanmıştır. Bu amaçla, kömür gazları kullanılmış ve tamamen yerli kaynaklar ile elde edilebilen amonyak-hidrojence zengin kömür gazları yakıt karışımlarının yanma ve emisyon davranışları HAD kodu yardımı ile sayısal olarak incelenmiştir. Bununla birlikte, amonyak-hava karışımı içerisine yapılan HZKG ilavesinin etkilerinin daha detaylı olarak irdelenmesi amacıyla, amonyak-hidrojen yakıt karışımları ve amonyak-hava karışımı için de çalışmalar yapılmış olup, elde edilen sonuçlar birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Böylece, amonyak-hava karışımı içerisine yapılan HZKG ilavesinin, amonyak-hava karışımının yanma ve emisyon performansı açısından hidrojen eklentisine göre ne ölçüde alternatif olabileceği değerlendirilmiştir. Deneysel çalışmalar sırasında amonyak-hava karışımı için kararlı bir alev elde edilmesi, brülöre yapılan hidrojen beslemesi ile öncelikle bir pilot alev meydana getirilmesiyle mümkün olmuştur. Amonyak-hava karışımına yapılan hidrojen ilavesi, amonyak-hava karışımının reaktivitesi, alev sıcaklığı ve yanma hızı gibi özellikleri üzerinde pozitif etkiler meydana getirmiştir. Buna karşın, hidrojen miktarının artmasıyla, yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonları yükselmiştir. Diğer taraftan amonyak-hava karışımı içerisine yapılan HZKG ilavesi de yanma odası içerisindeki sıcaklık seviyelerini yükseltmiştir. Bununla birlikte, KFG ile karıştırma, SG ile karıştırmaya göre daha iyi bir yanma performansı meydana getirmiştir. Ayrıca, amonyak-hava karışımına yapılan HZKG ilavesi, yanma odası boyunca tahmin edilen emisyonlarının yükselmesine neden olmuştur. NO emisyon oluşumu açısından da KFG ile karıştırma daha olumlu sonuçlar vermiştir. Sonuç olarak, bu tez çalışması ile, HZKG ilavesinin, amonyak-hava karışımının yanma performansını yükseltmede, özellikle yanma odası boyunca meydana gelen sıcaklık dağılımı ve NO emisyonları açısından hidrojene karşı iyi bir alternatif olabileceği ortaya konulmuştur.

Bilim Kodu : 91440
Anahtar Kelimeler : Yanma, emisyon, amonyak, hidrojen, kömür gazı
Sayfa Adedi : 162
Danışman : Prof. Dr. Mustafa İLBAŞ

INVESTIGATION OF COMBUSTION AND EMISSION BEHAVIORS OF AMMONIA-HYDROGEN AND AMMONIA-COAL GASES MIXTURE COMPOSITE FUELS

(Ph. D. Thesis)

Ozan KEKÜL

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

November 2022

ABSTRACT

Ammonia is a promising energy carrier in terms of being an alternative to the fossil fuels with the high hydrogen storing capability. However, when the combustion performances of ammonia and the traditional fossil fuels compared, it can be said that there are some drawbacks that should be negotiated for the combustion of ammonia such as narrow flammability limit, low burning velocity and flame temperature. In this thesis, it was aimed to enhance the combustion performance of ammonia that can be produced in our country. For this purpose, the hydrogen rich coal gases (HRCG) were used and the combustion and emission behaviors of Ammonia-HRCG fuel mixtures were investigated via CFD code. Besides, in order to scrutinize the effects of adding HRCG into ammonia-air mixture in more detail, the studies were also conducted for ammonia-hydrogen-air and ammonia-air mixtures and the obtained results were compared with each other. Thus, it was evaluated to what extent the HRCG addition into ammonia-air mixture can be an alternative to the hydrogen addition in terms of the combustion and emission performance of ammonia-air mixture. During the experiments, a pilot flame was generated by feeding ammonia into the burner firstly, hence, a stable flame could be achieved for ammonia-air mixture via this strategy. The hydrogen addition into ammonia-air mixture provided positive effects on the reactivity, flame temperature and burning velocity of ammonia-air mixture. However, the NO emissions emerged in the combustor promoted with the increasing amount of hydrogen in the fuel mixture. On the other hand, the addition of HRCG into ammonia-air mixture increased the temperature values in the combustor, as well. Besides, mixing with coke oven gas introduced a better combustion performance in comparison to the mixing with water gas. However, the addition of HRCG into ammonia-air mixture caused to increase the NO emissions predicted in the combustor. The mixing with coke oven gas provided more positive results in terms of NO formation. To sum up, in scope of this thesis, it was revealed that the addition of HRCG can be a good alternative to hydrogen for increasing the combustion performance of the ammonia-air mixture, especially in terms of temperature distribution and NO emissions throughout the combustor.

Science Code : 91440
Key Words : Combustion, emission, ammonia, hydrogen, coal gases
Page Number : 162
Supervisor : Prof. Dr. Mustafa İLBAŞ

TEŞEKKÜR

Tez çalışmasının her aşamasında (tez konusunun belirlenmesi, proje başvurusunun yapılması, tez çalışmasının proje ile birlikte koordineli olarak yürütülmesi vs.) bilgisini ve kıymetli deneyimlerini esirgemeyen, tez çalışmam sırasında ortaya çıkan problemlere sağduyu ile yaklaşmamı sağlayan ve her türlü yardım ve desteğini gördüğüm "Gazi Üniversitesi Enerji Sistemleri Mühendisliği Bölümü Öğretim Üyesi" çok kıymetli tez danışmanım ve hocam Sayın Prof. Dr. Mustafa İLBAŞ'a en içten duygularımla teşekkürlerimi sunarım.

Tez çalışmam kapsamındaki deneylerin gerçekleştirilmesi sırasında sürekli yanımda bulunan, deney düzeneğinin kullanımı ve ekipmanları hakkında değerli tecrübelerine ve bilgisine başvurduğum, deneylerin başarılı bir şekilde tamamlanmasında çok büyük emeği olan ve çalışma ile ilgili her türlü soruma bir arkadaş içtenliğiyle cevap veren Sayın Doç. Dr. Serhat KARYEYEN'e teşekkürlerimi arz ederim.

Bu tez çalışması kapsamında gerçekleştirilen deneysel çalışmaların Gazi Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi tarafından "FDK-2021-6971" kodu ile desteklendiğini ve bu nedenle Gazi Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi'ne müteşekkir olduğumu bildirmekten mutluluk duyarım. Ayrıca deney düzeneğinin kurulması ve karşılaşılan problemlerin giderilmesinde katkı veren teknisyen Ergül HİÇYILMAZ'a teşekkürü bir borç bilirim.

Eğitim hayatım boyunca maddi ve manevi desteklerini gördüğüm başta babaannem Güngör KEKÜL olmak üzere annem, babam ve kardeşime, doktora çalışmalarım sırasında yeri geldiğinde kahrımı çeken, anlayış, sabır ve desteklerini benden bir an olsun esirgemeyen sevgili eşim Ayşegül AKKAYA KEKÜL'e ve son olarak en değerli zamanlarını almama rağmen, bana gösterdiği anlayış için biricik oğlum Kerem KEKÜL'e teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET iv

ABSTRACT v

TEŞEKKÜR vi

İÇİNDEKİLER vii

ÇİZELGELERİN LİSTESİ x

ŞEKİLLERİN LİSTESİ xi

RESİMLERİN LİSTESİ xiii

SİMGELER VE KISALTMALAR xiv

1. GİRİŞ 1

2. YAKITLAR, YANMA VE HAVA KİRLİLİĞİ 25

2.1. Yakıtlar 25

2.1.1. Katı yakıtlar 26

2.1.2. Sıvı yakıtlar 27

2.1.3. Gaz yakıtlar 28

2.2. Yanma 29

2.2.1. Yanma entalpisi ve reaksiyon kinetiği 31

2.2.2. Reaksiyon kinetiği 32

2.3. Hava Kirliliği 34

2.3.1. Azot oksit (NO_x) oluşumu 35

2.3.2. Karbon monoksit (CO) oluşum mekanizması 44

2.3.3. Karbon dioksit (CO_2) oluşumu 45

3. AMONYAK VE KÖMÜR GAZLARININ YANMASI 47

3.1. Amonyak Gazının Yanma Karakteristikleri ve Elde Edilmesi 47

Sayfa

3.1.1. Amonyak gazının elde edilmesi 51

3.2. Kömür Gazlarının Yanma Karakteristikleri ve Elde Edilmesi 54

3.2.1. Kömür gazlarının elde edilmesi 59

4. HESAPLAMALI AKIŞKANLAR DİNAMİĞİ (HAD) İLE YANMA ANALİZİ 65

4.1.Temel Denklemler 67

4.2.Türbülanslı Yanmanın Modellenmesi 68

4.2.1. Standard k- ε model 69

4.2.2. RNG k- ε model 70

4.2.3. Realizable k- ε model 71

4.3.The Mixture Fraction/PDF Yanma Modeli 72

4.4.Radyasyon Modeli 74

4.5. Sınır Koşulları 75

4.6. Fiziksel Özellikler 76

4.7. Sayısal Çözüm Teorisi 77

4.7.1. Momentum denkleminin ayrıklaştırılması 77

4.7.2. Süreklilik denkleminin ayrıklaştırılması 78

4.8. Çözüm Algoritması 79

4.9. Artıkların Hesaplanması 81

4.10. Rahatlatma Değişkenleri 83

5. MATERYAL VE METOT: SAYISAL MODELLEME VE DENEYSEL SİSTEM 85

5.1. Sayısal Modelleme ve Ağ Yapısı 86

5.2. Deney Düzeneği ve Ekipmanları 89

5.3. Sıcaklık Ölçümlerinin Düzeltilmesi 94

Sayfa

5.4. Debimetrelerin Kalibrasyonu 97

6. SONUÇLAR VE İRDELEME 99

6.1. Deneysel Çalışma Sonuçları 100

6.2. Sayısal Modelleme Sonuçları 103

6.2.1. Hücre sayısından bağımsızlaştırma 103

6.2.2. Sayısal model doğrulanması 104

6.2.3. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının sayısal modelleme sonuçları 108

6.2.4. NH_3-HZKG yakıt karışımlarının sayısal modelleme sonuçları 116

7. SONUÇ VE ÖNERİLER 141

7.1. Sonuçlar 142

7.2. Öneriler 146

KAYNAKLAR 147

EKLER 155

ÖZGEÇMİŞ 161

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge **Sayfa**

Çizelge 1.1. Amonyak ve hidrokarbon yakıtların temel yanma karakteristikleri 5

Çizelge 3.1. Amonyak içeren karışımlar için geliştirilen reaksiyon mekanizmaları 48

Çizelge 3.2. Kömür gazı yanmasında kritik reaksiyonlar 56

Çizelge 3.3. Seyrelticilerin alev karakteristikleri üzerine etkisi 59

Çizelge 5.1. Yakıt ve hava giriş debileri 85

Çizelge 5.2. Yakıt bileşimlerinin hacimsel içerikleri 85

Çizelge 5.3. Yakıt karışımlarının fiziksel özellikleri 86

Çizelge 5.4. Modelleme parametreleri 89

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil **Sayfa**

Şekil 1.1. 2020 yılında tedarikçilere göre Türkiye'nin doğalgaz ithalat oranı 2

Şekil 2.1. Başlıca petrol ürünleri, kaynama noktaları ve karbon atomu sayıları 27

Şekil 2.2. NO oluşum mekanizmalarının basitleştirilmiş şeması 36

Şekil 2.3. Fazla havanın NO emisyonları üzerine etkisi 37

Şekil 2.4. Yanma sıcaklığına bağlı olarak NO oluşumları 39

Şekil 2.5. Zengin hidrokarbon alevlerdeki reaksiyon yolları 40

Şekil 2.6. Yakıt NO oluşum mekanizması 42

Şekil 3.1. NH_3/H_2, NH_3/CO ve NH_3/sentetik gaz karışımlarının reaksiyon yolları 49

Şekil 3.2. Anlık alev görüntüleri 50

Şekil 3.3. Haber-Bosh prosesi akış diyagramı 52

Şekil 3.4. Amonyak gazı üretimi için seçenekler 53

Şekil 3.5. Modern bir amonyak üretim tesisinin elemanları 54

Şekil 3.6. Seyrelticilerin alev sıcaklığı ve yanma hızı üzerine etkisi 58

Şekil 3.7. Başlıca kömür gazlaştırma teknolojileri 60

Şekil 3.8. Kömürün gazlaştırma ürünleri 62

Şekil 4.1. ANSYS Fluent çözüm algoritması akış şeması 81

Şekil 5.1. Sayısal çalışmalarda kullanılan akış hacmi 88

Şekil 5.2. Sayısal çalışmalarda kullanılan ağ yapısı 89

Şekil 5.3. Brülörün katı model görünümü ve teknik resmi 90

Şekil 6.1. %85 NH_3-%15 H_2 ve %100 NH_3 içeren yakıtların sıcaklık dağılımı 102

Şekil 6.2. Hücre sayısından bağımsızlaştırma işlemi için eksenel sıcaklık profilleri 103

Şekil 6.3. %100 NH_3 içeren yakıtın sayısal model doğrulaması 105

Şekil 6.4. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının sayısal model doğrulaması 106

Şekil **Sayfa**

Şekil 6.5. NH_3-HZKG yakıt karışımlarının sayısal model doğrulaması 107

Şekil 6.6. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının eksenel sıcaklık profilleri..... 109

Şekil 6.7. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının radyal sıcaklık profilleri..... 110

Şekil 6.8. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının eksenel hız profilleri 112

Şekil 6.9. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının NO emisyon profilleri..... 114

Şekil 6.10. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının alev bölgesindeki O radikal profilleri 116

Şekil 6.11. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının eksenel sıcaklık profilleri 117

Şekil 6.12. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının radyal sıcaklık profilleri 119

Şekil 6.13. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının eksenel hız profilleri..... 120

Şekil 6.14. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının NO emisyon profilleri 122

Şekil 6.15. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının O radikal profilleri 124

Şekil 6.16. %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının eksenel sıcaklık profilleri 125

Şekil 6.17. %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının radyal sıcaklık profilleri 128

Şekil 6.18. %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının eksenel hız profilleri..... 129

Şekil 6.19. %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının NO emisyon profilleri 131

Şekil 6.20. %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının O radikal profilleri 132

Şekil 6.21. %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının eksenel sıcaklık profilleri 134

Şekil 6.22. %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının radyal sıcaklık profilleri 136

Şekil 6.23. %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının eksenel hız profilleri..... 137

Şekil 6.24. %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının NO emisyon profilleri 139

Şekil 6.25. %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının O radikal profilleri 140

RESİMLERİN LİSTESİ

Resim **Sayfa**

Resim 5.1. Brülöre ait fotoğraf 90

Resim 5.2. Yanma odası 91

Resim 5.3. Yanma odasının altında bulunan tabla..... 92

Resim 5.4. Hava kompresörü..... 93

Resim 5.5. Seramik uçlu sıcaklık ölçer ve kontrol cihazı..... 93

Resim 5.6. Deney düzeneğinin genel görünümü 94

Resim 6.1. (a) %100 NH_3 yakıtının alevi,(b)%85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımının alevi 101

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklamalar
A	Frekans faktörü, Alan
atm	Atmosfer
bar	Bar
C	Karbon atomu
C_2	Diatomik karbon
C_2H	Asetilen
CH_2	Metilen
CH_4	Metan
cm	Santimetre
CN	Hidrosiyanik asit
CO_2	Karbondioksit
CO	Karbon monoksit
E_a	Aktivasyon enerjisi
f	Karışım oranı
h	Taşınım ısı transfer katsayısı, Entalpi
H	Hidrojen atomu
H_2	Hidrojen
HCN	Hidrojen siyanür
HNO	Nitroksil
H_2O	Su buharı
I	Radyasyon şiddeti
J_f	Kütle akısı
k	Isı iletim katsayısı, Kinetik enerji
K	Kelvin
Kg	Kilogram
kW	Kilowatt

Simgeler	Açıklamalar
kmol	Kilomol
m	Metre
m^3	Metreküp
mbar	Milibar
MJ	Megajoule
MPa	Megapaskal
ms	Milisaniye
$\boldsymbol{n}$	Kırılma endeksi
N	Azot atomu
N_2	Azot
NH	İmidojen
NH_2	Amino radikali
NH_3	Amonyak
NO	Azot monoksit
NO_x	Azot oksit
NO_2	Azot dioksit
N_2O	Diazot oksit
$\boldsymbol{Nu}$	Nusselt sayısı
O	Oksijen atomu
O_2	Oksijen
O_3	Ozon
OH	Hidroksit
$\boldsymbol{P}$	Basınç
ppm	Parts per million
ppmv	Parts per million by volume
$\boldsymbol{R}$	Üniversal gaz sabiti
$\boldsymbol{Re}$	Reynold Sayısı
rpm	Dakikadaki devir sayısı
s	Saniye
S_l	Laminer yanma hızı
SO_2	Kükürt dioksit
St	Türbülanslı yanma hızı

Simgeler	**Açıklamalar**
$\boldsymbol{T}$	Sıcaklık
U	Eksenel hız
°C	Santigrad
$\boldsymbol{\Phi}$	Dağılma fonksiyonu
$\boldsymbol{\rho}$	Yoğunluk
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Yayılım oranı
$\boldsymbol{\sigma}$	Prandtl sayısı
$\boldsymbol{\mu}$	Vizkozite
$\boldsymbol{\tau_i}$	Zaman oranı
$\boldsymbol{\alpha}$	Absorpsiyon katsayısı
$\boldsymbol{\sigma_s}$	Saçılma katsayısı
$\boldsymbol{\sigma}$	Stefan-Boltzman sabiti
$\boldsymbol{\Omega^{\iota}}$	Açı
Φ	Faz fonksiyonu
$\boldsymbol{\alpha_i}$	Ağırlık faktörü
$\bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}$	Gerilme tensörü
$\vec{\boldsymbol{F}}$	Kuvvet vektörü

Kısaltmalar	**Açıklamalar**
AID	Alt ısıl değer
CFD	Computational fluid dynamics
CWS	Coal-water slurry
DBI	Deutsches Brennstoffinstitut
ECUST	East China University of Science and Technology
GE	General Electric
HAD	Hesaplamalı akışkanlar dinamiği
HRCG	Hydrogen rich coal gases
HY	Hava-yakıt oranı
HZKG	Hidrojence zengin kömür gazları
IGCC	Integrated gasification combined cycle

Kısaltmalar	Açıklamalar
LEG	Lineer engine generator
LNG	Liquefied natural gas
LPG	Liquefied petroleum gas
KFG	Kok fırını gazı
MILD	Moderate or intense low oxygen dilution
PDF	Probability density function
PSA	Pressure swing adsorption
RNG	Renormalization group
RQL	Rich-Burn, Quick-Mix, Lean-Burn
SCGP	Shell coal gasification process
SCR	Selective catalytic reduction
SES	Synthesis Energy Systems
SG	Su gazı
SNG	Substitude natural gas
ÜID	Üst ısıl değer

1. GİRİŞ

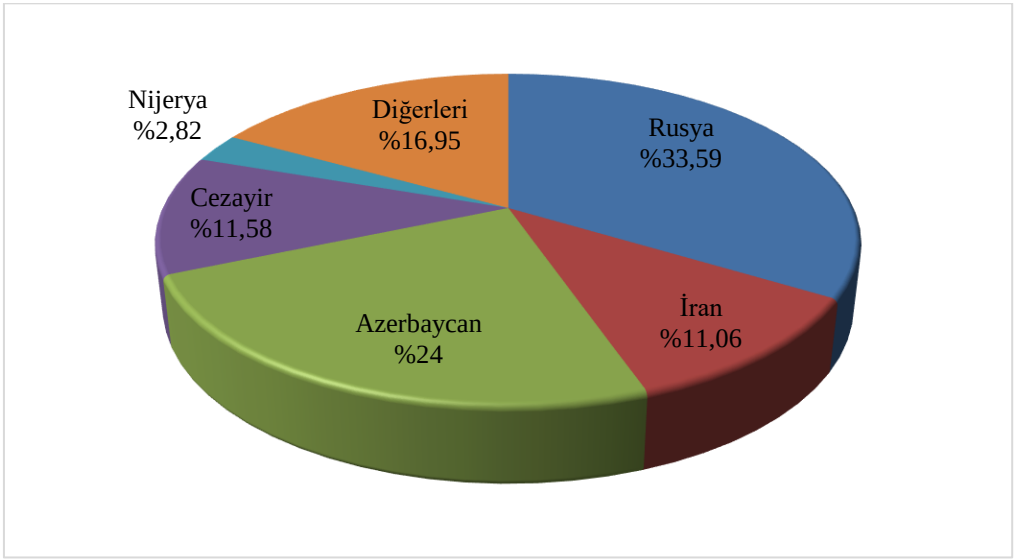
Dünyadaki enerji ihtiyacı, nüfus artışı ve endüstriyel gelişim ile birlikte önemli ölçüde artmaktadır. Dünya nüfusu sadece bir nesilde iki milyar seviyesinde artmış olup, bu artıştaki en önemli katkı, gelişmekte olan ülkeler tarafından yapılmıştır. Buna bağlı olarak, 21. yüzyılın en temel tartışma konularından bir tanesi, enerji krizinin önlenmesi olmuştur. Dolayısıyla, artan nüfusun ihtiyaçlarını karşılayabilmek için enerjiye olan ihtiyaç da hızla yükselmiştir. Bunun sonucunda dünyada bulunan enerji kaynakları tükenmekte ve söz konusu ülkeler, buna karşı kendi planlarını, stratejilerini ve politikalarını oluşturmaktadırlar. Enerji kaynaklarının dünya nüfusunun gereklerini karşılamada önemli bir role sahip olmasından dolayı, bu kaynakların en verimli şekilde tüketilmesi, canlılar açısından oldukça önemlidir [1].

Dünyadaki birçok ülke, ekonomik gelişimlerini sürdürebilmek için, kömür, doğalgaz ve petrol kullanımına günden güne artan bir oranda devam etmektedirler [2]. Günümüzde, dünya enerji gereksiniminin büyük bir oranı fosil yakıtlar ile karşılanmaktadır ve küresel ölçekte bakıldığında, bu oran yaklaşık %80'dir. 2040 yılına kadar olan dönemde, toplam enerji talebinde yaklaşık %40 oranında bir büyüme beklenmekte olup, kömür, doğalgaz ve petrol gibi yakıtların dünya enerji ihtiyacını karşılamada önemli enerji kaynakları olmaya devam edeceği tahmin edilmektedir [3].

Bugüne kadar ülkemizdeki petrol ve doğalgaz rezerv ve üretiminin alt seviyelerde kalması, maalesef ülkemiz için söz konusu yakıtların ithalatını zorunlu kılmıştır. Ülkemizin enerji ihtiyacının %60'dan fazlasının petrol ve doğalgaz ile karşılandığı düşünüldüğünde, söz konusu yakıtlar için yüksek oranda dışarı bağımlı olduğumuz söylenebilir [4]. Enerji elde edilmesindeki dışa bağımlılık, yüksek enerji faturaları ve enerji temininde sorunlar yaşanması gibi faktörler nedeniyle ekonomik gelişmenin önündeki en önemli engellerden biridir.

Bir çeşit fosil yakıt olan doğalgaz, yenilenemez bir enerji kaynağı olup, dünyada çoğunlukla enerji ve ısıtma amacıyla kullanılmaktadır. Diğer fosil yakıtlarla kıyaslandığında, daha temiz bir enerji kaynağı olması nedeniyle, son 30 yılda dünyadaki doğalgaz kullanımı çok hızlı bir şekilde artmıştır. Dünyada olduğu gibi ülkemizde de

doğalgaz kullanımı yıldan yıla artmaktadır. Ülkemizin doğalgaz ihtiyacı, diğer üretici ülkelerden sıvılaştırılmış doğalgaz (LNG) şeklinde tedarik edilerek giderilmektedir. Tedarik edilen doğalgazın büyük kısmı Rusya, İran, Azerbaycan, Cezayir ve Nijerya gibi ülkeler tarafından uluslararası boru hatları vasıtasıyla sağlanmaktadır. Bu ülkeler arasında, Rusya, en büyük tedarikçi ülke konumundadır [5]. Şekil 1.1'de 2020 yılında ithal edilen doğalgaz miktarının ülkelere göre yüzdesel oranları verilmiştir [6].



Şekil 1.1. 2020 yılında tedarikçilere göre Türkiye'nin doğalgaz ithalat oranı [6]

Ülkemizde doğalgaza karşı yerli kaynak olarak sahip olduğumuz ve rezervi en çok olan enerji kaynağı kömürdür. Kömürün doğrudan kullanılamaması ve ısıl değerinin düşük olması, istenilen boyutta enerji elde edilememesine yol açmaktadır. Ayrıca, kömürün bünyesinde bulunan kükürt, emisyon değerleri dikkate alındığında çevreye önemli zararlar vermektedir. Bu nedenle, kömürün hem yanma performansı hem de emisyon parametreleri açısından bazı işlemler ile daha verimli bir halde kullanılması gerekmektedir. Kömürün koklaştırılması ile yüksek miktarda karbon içeren kok elde edilmektedir. Bununla birlikte kömürün gazlaştırılması da oldukça yaygın kullanılan bir yöntemdir. Bu işlemlerin uygulanmasındaki temel amaç, daha temiz bir yakıt elde edilmesi, kolay taşıma, hava ile daha iyi karışma, yanmada daha az hava gereksinimi, kolay yakılma, kül ve cüruf gibi atıkların giderilmesidir. Kömürün koklaştırması sonucu elde edilen kok fırını gazı ve kömürün gazlaştırılması ile açığa çıkan çeşitli gazlar, alternatif yakıt olarak kullanılabilecek özelliklere sahiptir. Ülkemizde bu proseslerle ilgili birçok yatırım yapılmakta ve desteklenmektedir.

Yanma, dünya genelinde endüstriyel uygulamalar ve beşeri faaliyetler açısından çok önemli bir enerji kaynağı olmuştur. Geçmişten günümüze, verimli yanma sistemi ekipmanlarının tasarımı ve yanma sonu ürünleri olan seragazı emisyonlarının azaltılması ile ilgili çeşitli çalışmalar yapılmış ve yapılmaya devam edilmektedir. Fakat, yanma sistemleri kullanan endüstriyel sektörlerde daha düşük emisyon seviyelerine ulaşılması için karbon içermeyen alternatif yakıtların kullanılması gerekmektedir [7]. Fosil yakıtlardan daha verimli olması, ısı enerjisi gerektiren her alanda kullanımının temiz ve kolay olması, enerji elde edilmesi sırasında çevreyi kirletici veya sera etkisini arttırıcı hiçbir gaz ve zararlı kimyasal madde üretiminin meydana gelmemesi nedeniyle, hidrojen enerjisinin kullanılabilmesi oldukça önem ihtiva etmektedir.

Hidrojen, suda oksijenle, fosil yakıtlarda ve sayısız hidrokarbonlarda ise karbon ve diğer elementlerle bileşik halde bulunmaktadır. Ülkemizin üç tarafının denizlerle çevrili olması ve fosil yakıt olarak kömür rezervlerinin bulunması, Türkiye'nin hidrojen bakımından zengin bir ülke olduğunu göstermektedir. Dolayısıyla, hidrojen enerjisi ve teknolojilerinin ülkemiz adına büyük bir fırsat olduğu ortadadır. Ek olarak, hidrojenin depolanması ve üretimi, diğer yakıtlara göre daha pahalıdır. Bu nedenle, hidrojen enerjisi maliyetinin, teknolojik ilerlemeler ve alternatif depolama yöntemleri ile düşürülmesi, uzun dönemde önemli bir rol oynayacaktır. Günümüzde, hidrojenin büyük kısmı hidrokarbonlardan, az bir kısmı ise elektroliz ile üretilmektedir. Ülkemiz kaynakları dikkate alındığında, hidrojen üretiminin ilk etapta kömürün gazlaştırılması yöntemiyle ve ilerleyen yıllarda ise yenilebilir enerji teknolojilerinin geliştirilmesine bağlı olarak elektroliz yöntemi veya biyokütle esas alınarak gerçekleştirilmesinin uygun olduğu düşünülmektedir.

Enerji üretim sistemleri için hidrojen kullanılmasındaki en önemli problem hidrojenin depolanmasıdır. Günümüzde bazı hidrojen depolama sistemleri mevcuttur. Hidrojen, bu sistemler vasıtasıyla, tanklar içerisinde sıvı veya gaz formunda, fiziksel olarak nanotüplerde ve kimyasal olarak hidrür şeklinde depolanmaktadır. Özellikle araç içi sistemler için depolamadaki hafiflik de dikkate değer bir hal almaktadır. Maliyet, ulaşım mesafesi, performans ve yakıt tasarrufu gibi faktörlerin optimize edilebilmesi için, verimli hidrojen depolama yöntemlerine ihtiyaç vardır [8].

Hidrojenin yoğunluğu, atmosferik basınç ve oda sıcaklığı koşulları altında çok düşüktür. Dolayısıyla, bu şartlar altında yapılan depolamanın verimli kullanım açısından elverişli bir

yöntem olmadığı açıktır. Endüstriyel kullanım amacıyla hidrojenin tanklar içerisinde muhafaza edilmesi, basınç seviyesinin arttırılması ile mümkün olmaktadır. Tanklar içerisinde uygun bir depolama ortamı elde etmek için uygulanması gereken basınç seviyeleri 35-70 MPa arasında olmalıdır. Yetersiz enerji yoğunluğu nedeniyle, bu seviyelerden daha düşük basınç değerlerinin uygulanması mantıklı değildir. Bu nedenle, yüksek basınç seviyelerine karşı hafif tank ağırlığı gereksiniminin, tasarımcılar için yeni zorluklar meydana getirebileceği söylenebilir. Hacimsel yoğunluğu göreceli olarak iyileştirmenin başka bir yolu da, hidrojenin düşük sıcaklık koşulları altında sıvı şekilde depolanmasıdır. Hidrojenin sıvılaştırılması için -253 °C sıcaklık seviyesine soğutulması gerekmektedir [9]. Ek olarak, hidrojenin sıvılaştırılması için ulaşılması gereken sıcaklık değerinin gerektirdiği enerji miktarı oldukça önemlidir ve dikkatle değerlendirilmelidir. Söz konusu enerji gereksinimi, hidrojenden elde edilen enerjisinin dörtte biri seviyelerine ulaşabilmektedir.

Hidrojen depolama yöntemlerinden biri olan metal hidrürler umut verici bir depolama ortamı olarak görülmektedir. Bununla birlikte, oda sıcaklığı ve atmosfer basıncı altında kullanılan tüm metal hidrürler geçiş metalleri içerirler ve hidrojen depolama yoğunlukları kısıtlıdır. Diğer taraftan, metal hidrür üretimi sırasında ekzotermik reaksiyonlar meydana gelmektedir. Dolayısıyla, bu yöntemle yapılan depolama işlemi önemli ölçüde ısı açığa çıkardığından, hidrojenin tekrardan serbest kalması için aynı miktarda ısının uygulanması gerekmektedir [10].

Emisyonların çevresel etkileri ve hidrojenin depolanması ile ilgili zorluklar dikkate alındığında, amonyak, hem iyi bir alternatif yakıt hem de etkili bir hidrojen depolama ortamı olarak kullanılabilir. Amonyağın kütlesel olarak hidrojen depolama kapasitesi %17,8 seviyelerindedir [11] ve bu oran, diğer hidrojen depolama ortamları ile kıyaslandığında, bilim adamları ve mühendislerin dikkatini çekmektedir. Ayrıca, amonyak, güneş ve rüzgar gibi yenilenebilir enerji kaynaklarından elde edilebilen hidrojen ve havadan ayrıştırılabilen azotun kombinasyonu sonucunda üretilebilmektedir. Amonyağın kaynama sıcaklığı ve yoğunlaşma basıncı gibi özellikleri propan ile neredeyse aynı olup, bu iki yakıt arasındaki benzerlikler, amonyağın yanma sistemleri için iyi bir alternatif yakıt olarak düşünülmesine olanak sağlamaktadır. Amonyağın yüksek hidrojen depolama özelliğinin dışında, herhangi bir hidrojen ayrıştırma prosesine gerek kalmadan yanma sistemlerinde direkt olarak kullanılabiliyor olması da önemli avantajlarından biridir [7].

Çizelge 1.1'de ısıl özellikler ve temel yanma karakteristikleri açısından amonyak, hidrojen ve bazı hidrokarbonların özellikleri verilmiştir.

Çizelge 1.1. Amonyak ve hidrokarbon yakıtların temel yanma karakteristikleri [7]

Tanım	NH_3	H_2	CH_4	C_3H_8
1 atm'deki Kaynama Sıcaklığı (°C)	-33,4	-253	-161	-42,1
25 °C'deki Yoğuşma Basıncı (atm)	9,90	-	-	9,40
Alt Isıl Değer, AID (MJ/Kg)	18,6	120	50	46,4
Alevlenebilirlik Limiti (Eşdeğerlik Oranı)	0,63 ~1,40	0,10 ~ 7,1	0,50 ~ 1,7	0,51 ~ 2,5
Adyabatik Alev Sıcaklığı (°C)	1800	2110	1950	2000
Maksimum Yanma Hızı (m/s)	0,07	2,91	0,37	0,43
Tutuşma Sıcaklığı (°C)	650	520	630	450

İlk amonyak üretimi yaklaşık 100 yıl önce F. Haber ve C. Bosh tarafından gerçekleştirilmiş olup ilk seri üretim de 1990'lı yıllarda yapılmaya başlanmıştır. Amonyak, ilk olarak tarım sektöründe gübre olarak kullanılmış olup, büyüyen küresel popülasyonun gıda ihtiyacını desteklemede ciddi bir etkisi olmuştur [12]. 100 yılı aşkın süredir amonyağın üretilmesi, depolanması, taşınması ve kullanılması üzerine kurulmuş iyi bilinen endüstri, bu yakıtın, minimum yatırım maliyeti ile güven içerisinde kullanılmasına olanak sağlamaktadır.

Amonyağın yakıt olarak yukarıda bahsedilen avantajları dışında, yanma sistemlerinde verimli olarak kullanılabilmesi için aşılması gereken bazı zorluklar mevcuttur: Amonyağın yanması için gerekli olan ateşleme enerjisi yüksektir [13], alev sıcaklığı düşüktür ve alevlenebilirlik aralığı kısıtlıdır [7]. Bununla birlikte, yakıtların yanma hızı karakteristiği, yanma performanslarının belirlenmesi açısından oldukça önemli bir özelliktir. Amonyak gazının laminar yanma hızı düşüktür ve verimli bir yanma performansı elde etmek için bu özelliğinin iyileştirilmesi gerekmektedir [11]. Saf amonyak yanmasında CO_2 emisyonları meydana gelmemesine rağmen, yüksek seviyedeki NO_x emisyonlarının oluşumu da amonyak gazının yanma sistemlerinde kullanılmasında aşılması gereken başka bir engeldir [14,15].

Bu tez çalışması kapsamında, yüksek miktarda hidrojen depolama kapasitesine sahip olan ve ülkemizdeki mevcut teknolojik durum itibariyle üretilebilen amonyağın yanabilmesi için, kömür gazları kullanarak meydana getirilecek olan ve tamamen yerli kaynaklar ile

elde edilebilen amonyak/kömür gazları karışımı kompozit yakıtların yanma ve emisyon davranışlarının araştırılması amaçlanmıştır. Ek olarak, amonyak gazı içerisine yapılan kömür gazları ilavesinin etkilerinin daha detaylı olarak incelenmesi amacıyla amonyak/hidrojen gazı yakıt karışımlarının da yanma ve emisyon davranışları incelenmiş ve elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır. Tez çalışması kapsamındaki sayısal ve deneysel çalışmalara başlanmadan önce, konu ile ilgili detaylı bir literatür taraması yapılmıştır.

Literatür araştırması

Okafor ve diğerleri, yaptıkları sayısal ve deneysel bir çalışmada, girdaplı bir mikro gaz türbini yanma odasında amonyak yakmışlar, verimli yanma ve düşük NO_x emisyon seviyeleri elde edilebilecek yakma teknikleri ve yakıcı tasarımları öne sürmüşlerdir. Bu kapsamda, yüksek basınçlı bir yanma odası kullanılarak, yakıt enjeksiyon açısının, yanma odası giriş sıcaklığının, eşdeğerlik oranının ve ortam basıncının alev kararlılığı ve emisyonlar üzerine olan etkisini araştırmışlardır. Deneysel ve sayısal sonuçlara göre, dikey yakıt enjeksiyonu stratejisi ile kıyaslandığında, eğimli yakıt enjeksiyonunun alev kararlılığını arttırdığı ve yanma odası çıkışında daha düşük NH_3 ve NO_x emisyonları meydana getirdiği görülmüştür. Diğer taraftan, uygulanan iki aşamalı yanma şartları sayesinde NO_x seviyelerinde azalma elde edilmiştir. Böylece, yanma odası girişindeki eşdeğerlik oranı kontrolünün NO_x emisyonları açısından önemli olduğu ortaya konulmuştur. Çalışma kapsamında gerçekleştirilen ön karışımlı ve ön karışımız yanma şartları değerlendirildiğinde, ön karışımlı yanma şartları altında daha düşük NO_x oluşumu meydana gelmiştir. Böylece, amonyak gazının yanması sonucu meydana gelen emisyon seviyelerinin azaltılabilmesi açısından karışımın homojenliğinin önemli bir faktör olduğu görülmüştür. Bununla birlikte, NO_x emisyonlarının ortam basıncı arttıkça azaldığı tespit edilmiştir. Sonuç olarak, önerilen yanma odası tasarımı ile 0,3 MPa basınç ve 31,44 kW ısıl güç için 42 ppmv NO_x emisyon sevileri elde edilmiş ve % 99,5 oranında yanma verimliliğine ulaşılmıştır [16].

Pugh ve diğerleri, ön karışımlı bir NH_3/H_2/hava alevi için NO_x emisyonlarının azaltılmasının yollarını sayısal ve deneysel olarak değerlendirmek amacıyla girdaplı bir yakıcı kullanmışlardır. Yakıcıya gönderilen karışım, basınç ve neme yapılan parametrik değişikliklerle birlikte yüksek sıcaklıkta sağlanmıştır. Bir reaktör ağ modeli kullanılarak yapılan modellemelerde, baca gazları ölçümleri ve kimyasal kinetik simülasyonların tutarlı

olduğu görülmüş olup, NO_x emisyonlarının operasyonel eşdeğerlik oranına göre değişkenlik gösterdiği gözlemlenmiştir. Ek olarak, yanma odası içerisindeki basıncın yükseltilmesi sonucunda, esas olarak artan NH_2 oluşumu ve ardından alev sonrası bölgedeki NO tüketimi sayesinde, baca gazları içerisindeki NO_x konsantrasyonları azalmıştır. Çalışmaya konu olan karışımın H_2O ile reaktif olarak nemlendirilmesi işlemi ilk kez bu çalışmada detaylı olarak araştırılmıştır. Böylece, uygulanan nemlendirme işleminin, genişletilmiş Zeldovich mekanizması ısıl yollarını sınırlaması neticesinde NO_x üretimini azalttığı ortaya konulmuştur. Ayrıca, emisyon performansının ve yakıtın yanma verimliliğinin arttırılması için iki aşamalı yanma stratejisi uygulanmış, global eşdeğerlik oranının fakir (0,98) olduğu konfigürasyonda, nem ve basınç optimize edilerek, sırasıyla NO_x ve NH_3 fraksiyonlarında 32 ppmv ve 50 ppmv'lik emisyon seviyelerine ulaşılmıştır [17].

Kurata ve diğerleri, mikro gaz türbini şartları için tasarladıkları bir yanma odasında, NH_3/hava ve NH_3/CH_4/hava karışımlarını ayrı ayrı yakmışlar, belirtilen hava ve yakıt karışımlarının yanma ve ısıl verimliliklerini, egzoz gazı analizlerini ve NO dönüşüm oranlarını deneysel olarak incelemişlerdir. Çalışmada kullanılan yanma odası sistemi, yanma hızı düşük olan ve yandığında yüksek NO_x emisyonları meydana getiren amonyağın, tamamen kabul edilebilir bir yanma verimliliği ile kullanılabilmesi amacıyla tasarlanmıştır. Bu amaçla, ön karışımsız yanma şartlarına uygun bir yakıcı ve NO_x emisyonlarının azaltılması için bir selektif katalitik indirgeme (SCR) ekipmanı kullanmışlardır. Tasarlanan yanma odası kullanılarak yapılan deneysel çalışmalar sonucunda, NH_3/hava karışımının yakıldığı gaz türbini güç üretim sisteminde, çeşitli güç ve dönme hızları için %89 ile %96 oranları arasında bir yanma verimliliği elde edilmiştir. Ek olarak, CH_4/NH_3/hava karışımı içindeki amonyak miktarındaki artışının NO emisyonlarını önemli ölçüde arttırdığı, fakat karışım içerisindeki amonyak yakıt oranının daha da arttırılması sonucu meydana gelen artık amonyak gazı oluşumunun NO emisyonlarını azalttığı tespit edilmiştir. Sistemde bir SCR mekanizmasının bulunması da yakıt açısından zengin bölgeden salınan yanmamış amonyağın, fakir bölgeden salınan NO ile tepkimeye girmesini sağlamış ve NO_x oluşum miktarını azaltmıştır [18].

Kurata ve diğerleri, daha önce yaptıkları bir çalışmadaki [18] 50-kW mikro gaz türbin sistemi şartları altında meydana gelen NO_x emisyon seviyelerini optimize etmek amacıyla deneysel bir çalışma yapmışlardır. Yapılan çalışma kapsamında, mevcut sistem üzerinde

çeşitli modifikasyonlar uygulayarak, bir NH_3/hava karışımı için güç üretimi gerçekleştirmişlerdir. Temel sistemden farklı olarak, birincil seyreltme deliklerinin, hava türbülatör alanının, soğutma deliklerinin ve ikincil seyreltme delikleri alanının farklı konfigürasyonları için beş farklı durum oluşturmuşladır. Böylece, tasarlanan yeni yanma odası sisteminde, ön karışımsız zengin-fakir iki aşamalı yanma şartları altındaki NH_3/hava karışımının yanma ve emisyon parametrelerini değerlendirmişlerdir. Yapılan deneyler sonucunda, zengin-fakir iki aşamalı yanma stratejisi kullanılarak gerçekleştirilen amonyak yakıtlı güç üretiminin, geniş kapsamlı güç ve dönme hızlarında (sırasıyla 10-40 kW ve 75.000-80.000 rpm) başarılı olduğu görülmüştür. Ayrıca, mevcut yanma odasına yapılan modifikasyonlar sonucunda, NO emisyonları, temel sistemin yaklaşık üçte biri olan 337 ppm seviyelerine indirgenmiştir. Bununla birlikte, yüksek yanma verimliliği ve geniş çalıştırma aralığının bir göstergesi olarak, özellikle düşük elektrik gücü üretimlerinde yanmamış amonyak gazı seviyeleri de önemli ölçüde azaltılmıştır [19].

Han ve diğerleri, ön karışımlı NH_3/hava, NH_3/H_2/hava, NH_3/CO/hava ve NH_3/CH_4/hava alevlerinin laminer yanma hızlarını sayısal ve deneysel olarak incelemişlerdir. Bu kapsamda, söz konusu karışımlar için, eşdeğerlik oranı ve karışım içerisindeki yakıt miktarındaki değişimin laminer yanma hızları üzerindeki etkisi araştırılmıştır. Böylece, amonyak gazının yanma karakteristiklerinin detaylı olarak ortaya konulması amaçlanmıştır. Yapılan çalışmalar sonucunda, en yüksek laminer yanma hızlarına NH_3/H_2/hava karışımları ile ulaşılmıştır. Dolayısıyla, amonyak gazı esaslı yakıt karışımlarının laminer yanma hızlarını yükseltmedeki en etkili yolun, yakıt karışımı içerisindeki H_2 miktarının artışı ile mümkün olabileceği görülmüştür. Buna karşın, NH_3'ün CH_4 ile karıştırılması, amonyak esaslı yakıtların laminer yanma hızını arttırmada en az etkiyi meydana getirmiştir. Ayrıca, çalışma kapsamında kullanılan kinetik mekanizmaların hiçbiri, deneysel olarak ölçülen yanma hızlarını tam olarak tahmin edememiştir [20].

Li, Zhang, Zhou ve Ren, gaz türbini koşullarında çalışan model bir yanma odasında, NH_3/CH_4 yakıt karışımının iki aşamalı yanma analizini yapmışlardır. Sayısal modellemeler, 84 tür ve 703 reaksiyonun bulunduğu bir kinetik mekanizma kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Böylece, uygun gaz türbini çalışma koşulları altında, NH_3/CH_4 yakıt karışımı için NO_x oluşum karakteristikleri incelenmiştir. Çalışmanın ilk bölümünde, geniş aralıkta hacimsel bir NH_3 oranı belirlenmiş olup, karışımdaki hacimsel NH_3 oranı değişikliğinin NO_x oluşumu üzerine olan etkisi araştırılmıştır. Yapılan sayısal

modellemeler sonucunda, karışım içerisindeki NH_3 oranındaki artışın ana reaksiyon bölgesindeki NO_x emisyonlarını ani bir şekilde yükselttiği gözlemlenmiş, bu yükselişin, gelişmiş HNO yolu vasıtasıyla meydana geldiği ortaya konulmuştur. Çalışmanın ikinci bölümünde, birincil yanma bölgesindeki eşdeğerlik oranının 1.5 olduğu iki aşamalı bir yanma sistemi belirlenmiştir. Yapılan çalışma neticesinde, yakıt karışımı içerisindeki hacimsel NH_3 oranının %40 seviyelerine ulaşması durumunda bile, basit bir iki aşamalı yanma sistemi ile 30 ppm değerinden daha düşük NO_x emisyonlarının elde edilebileceği ortaya konulmuştur [21].

Bozo, Zuniga, Buffi, Seljak ve Medina, su buharıyla nemlendirilmiş koşullardaki NH_3/H_2 yakıt karışımlarının yanma verimliliğini belirlemek ve güç üretiminde kullanılabilirliğini incelemek amacıyla, sayısal ve deneysel hesaplamalar içeren bir çalışma gerçekleştirmişlerdir. Çalışma kapsamındaki yakıt karışım miktarları hacimce %70 NH_3 ve %30 H_2 olarak belirlenmiş, söz konusu yakıt karışımı 1,20 eşdeğerlik oranı altında yakılmıştır. Elde edilen sonuçlara göre, su buharı/yakıt karışım oranının 0,72 olduğu seviyelere kadar nemlendirme yapılmasının mümkün olduğu, fakat yakıt karışımı içerisindeki nemlendirme oranının daha yüksek değerleri için yanma performansının düşük ve kararlı olmadığı belirlenmiştir. Su buharı/yakıt karışım oranının 0,40 olduğu şartlar altında ise, nemlendirilmiş doğalgaz çevrimleri kullanılarak elde edilen verim değerlerine yaklaşıldığı görülmüştür. Bununla birlikte, nemlendirilmiş NH_3/H_2 yakıt koşulları için alev tabanında ve alev çekirdeğinde dalgalanma görülmemiş, dolayısıyla alevin kararlı bir yapıya sahip olduğu ileri sürülmüştür. Çalışma kapsamında gerçekleştirilen su buharı enjeksiyon stratejisi, alev sıcaklığının azalmasını ve kirletici üretimine karşı negatif duyarlılığa sahip olan radikallerin oluşmasını sağlayarak NO_x oluşum mekanizmalarını sınırlamıştır. Ayrıca, çalışmada kullanılan yakıt karışımları için optimum su buharı/yakıt karışım oranının 0,28 ile 0,40 arasında olması gerektiği ortaya konulmuştur [22].

Hussein, Medina ve Alsaegh, yaptıkları çalışmada, NH_3/H_2/hava karışımının düşük basınç ve zengin yanma koşulları altındaki yanma karakteristiklerini sayısal olarak incelemişlerdir. Çalışmada kapsamında, girdaplı bir yakıcı tasarlanmış olup, yakıt karışımı içerisindeki amonyak gazının bir kısmı parçalanarak kullanılmıştır. Amonyağın parçalanması için gerekli olan ön ısıtma koşulları, ısıl değiştiriciler vasıtasıyla oluşturulmuştur. Isıl kırılma sistemi tarafından alınan ve yakıcıya enjekte edilen NH_3/H_2 yakıt karışımı miktarı, sistemdeki toplam kullanılabilir yakıt miktarının hacimce %0'dan

%4'ü aralığında belirlenmiş olup, geri kalan yakıt miktarı ise birincil yakıt olarak kullanılmıştır. Amonyak ve hidrojen karışım oranları, yakıt karışımı içerisindeki geri kalan miktar hidrojen olacak şekilde, hacimce %50 amonyak oranından itibaren, %10 amonyak artışlı olarak seçilmiştir. Sayısal modellemeler sonucunda elde edilen sonuçlara göre, baca gazı içerisindeki minimum yanmamış amonyak seviyesi ve daha yüksek alev sıcaklıkları %60-%40 NH_3/H_2 oranındaki yakıt karışımının kullanıldığı yanma şartlarında meydana gelmiş olup, buna karşın, söz konusu karışım oranı için yüksek NO emisyonlarının oluştuğu gözlemlenmiştir [23].

Pochet ve diğerleri, düşük sıcaklıklı yanma koşulları altında, sıcaklık, basınç, eşdeğerlik oranı ve karışım içerisindeki hidrojen miktarının, amonyak gazının tutuşma gecikmesi karakteristiği üzerine olan etkilerini sayısal ve deneysel olarak araştırmışlardır. Sayısal ve deneysel çalışmalar sonucunda, sıkıştırma sıcaklığının bir fonksiyonu olarak elde edilen tutuşma gecikmesi değerleri incelendiğinde, bir ön ısıtma sistemi yardımıyla sıcaklığı 170 °C seviyelerine yükseltilmiş olan saf amonyağın, 25:1 sıkıştırma oranına sahip düşük sıcaklıklı bir yanma motorunda kullanılabilir olduğu ortaya konulmuştur. Ek olarak, sıkıştırma sonundaki basıncın, amonyağın kendi kendine tutuşma özelliği üzerine etkisi değerlendirilmiş olup, basınç arttıkça, amonyağın tutuşma gecikmesinde belirli bir düşüş olduğu görülmüştür. Diğer taraftan, yakıt karışımı içerisindeki hidrojen miktarının %10'dan daha fazla olduğu durumlarda, amonyak gazının tutuşma gecikmesi karakteristiğinde iyileşmeler gözlemlenmiştir. Son olarak, eşdeğerlik oranının 0,35 olduğu durumda daha düşük tutuşma gecikmesi değerleri tespit edilmiş olmasına rağmen, eşdeğerlik oranı değişimlerinin amonyak gazının söz konusu özelliği üzerinde önemli bir etkisi olmadığı görülmüştür [24].

Xiao, Medina ve Bowen, amonyak/hidrojen yakıt karışımlarının ön karışımlı yanma karakteristiklerini doğrulamak için detaylı bir kimyasal kinetik mekanizma geliştirmişler ve gaz türbini şartları için uygun bir model elde etmeyi amaçlamışlardır. Çalışma kapsamında geliştirilen kinetik model, eşdeğerlik oranı, basınç ve yakıt karışımı içerisindeki amonyak miktarı gibi faktörlere bağlı olarak test edilmiştir. Böylece, amonyak/hidrojen yakıt karışımlarının tutuşma gecikmesi, yanma hızı ve NO_x emisyonları gibi çeşitli yanma ve emisyon karakteristikleri kapsamlı bir şekilde tahmin edilmeye çalışılmıştır. Önerilen kinetik mekanizma ile yapılan sayısal modelleme sonuçlarına göre, en tutarlı sonuçlar, çalışmaya konu olan yakıt karışımlarının yanma hızlarının tahmin

edilmesinde meydana gelmiştir. Aynı zamanda, tutuşma gecikmesi tahminlerinin de kabul edilebilir seviyede olduğu görülmüştür. Böylece, gaz türbini koşulları için önerilen kinetik mekanizmanın, amonyak gazının yanma ve emisyon parametrelerinin ortaya konulması açısından kullanılabilir olduğu öne sürülmüştür [25].

Xiao, Medina, Bowen ve Dooley, yaptıkları çalışmada, tipik bir gaz türbini yanma odası şartları için amonyak/hidrojen yakıt karışımlarının yanma ve emisyon parametrelerini modellemişler ve geliştirilen modeli paralel bir projede gerçekleştirilen deneysel sonuçlarla karşılaştırmışlardır. Yapılan çalışma kapsamında, akış alanı, alev yapısı ve emisyonlar ile ilgili sonuçlar ortaya konulmuş olup, üç boyutlu simülasyonlar için indirgenmiş Konnov mekanizması kullanılmıştır. Modelleme sonuçlarına göre, NO emisyonlarının çeşitli eşdeğerlik oranlarına bağlı olarak bir trend halinde değiştiği gözlemlenmiştir. Ek olarak, ön karışımlı amonyak/hidrojen alevinin girdaplı bir yakıcıda kararlı hale getirilebileceği görülmüş fakat meydana gelen NO_x emisyonlarının yüksek olduğu belirtilmiştir. Son olarak, NO_x emisyonlarının düşürülmesi ve yanma prosesi sırasındaki meydana gelen ürünlerin daha etkili kullanılması için yeni enjeksiyon tekniklerinin geliştirilmesi gerektiği vurgulanmıştır [26].

Medina, Pugh, Marsh, Bulat ve Bowen, bir gaz türbini yanma odasında, ön karışımlı bir amonyak/hidrojen alevinin fakir yanma koşulları altındaki yanma ve emisyon karakteristiklerini sayısal ve deneysel olarak incelemişlerdir. Çalışma kapsamındaki yakıt karışımı, hacimsel olarak %50 oranında hidrojen ve % 50 oranında amonyak içermekte olup, bu karışımın yakılmasında 1,05 girdap sayısına sahip bir yakıcı kullanılmıştır. Yapılan sayısal çalışmalarda, eşdeğerlik oranı, basınç ve giriş sıcaklığı gibi faktörlerin, NO_x emisyonları, adyabatik alev sıcaklığı ve alev hızı üzerindeki etkileri araştırılmıştır. Deneysel çalışmalar ise, çeşitli eşdeğerlik oranları dikkate alınarak yapılmış olup, fakir ön karışımlı yanma şartları altında meydana gelen NO_x emisyonları ve yakıt karışımının yanma kararlılığı değerlendirilmiştir. Yapılan çalışmalar sonucunda, eşdeğerlik oranının 0,5'den büyük olduğu durumlar için meydana gelen NO_x seviyelerinin çok yüksek olduğu belirtilmiştir. Ayrıca, eşdeğerlik oranının 0,43'den daha düşük olduğu durumlarda, alev kararlılığının istenilen düzeyde olmadığı görülmüştür. Alev kararlığının sağlandığı şartlar için meydana gelen NO_x emisyonlarının, amonyak/metan karışımının yakılması sonucu oluşan NO_x seviyelerinden daha düşük olduğu gözlemlenmiştir. Ek olarak, karışımın yanma hızının iyi seviyede olduğu ve metana benzerlik gösterdiği gözlemlenmiş, buna

karşın, söz konusu koşullar altında, hidrojenin yüksek yayılma gücünün geri tepme olasılığını arttığı ve bu nedenle karışımın dar bir operasyonel aralık arasında kullanılabileceği belirtilmiştir. Diğer taraftan, fazla miktarda oluşan OH ve O radikallerinin yüksek oranda NO_x emisyonları meydan getirdiği ortaya konulmuştur [27].

Mashruk, Xiao ve Medina, basamaklı yakma (RQL) tekniği kullanarak amonyak/hidrojen yakıt karışımın yanma ve emisyon parametrelerini sayısal olarak incelemişlerdir. Çalışma kapsamında oksitleyici olarak nemlendirilmiş hava kullanılmış olup, sayısal modellemelerde, bu koşullar için en tutarlı sonuçları veren Okafor, Xiao, Glarborg, Tian ve Otomo kimyasal kinetik mekanizmalarından yararlanılmıştır. Yapılan sayısal çalışmalarda, yanma hızı, adyabatik alev sıcaklığı ve NO emisyonları gibi parametreler araştırılmıştır. Ayrıca, kullanılan yakıt karışım oranı hacimce %70 oranında amonyak ve %30 oranında hidrojen olarak belirlenmiş olup, eşdeğerlik oranı 1,2 olarak seçilmiştir. Çalışma kapsamında elde edilen sonuçlara göre, nemlendirilmiş basamaklı yakma (RQL) tekniğinin, amonyak/hidrojen yakıt karışımı için düşük NO_x emisyonları sağlaması açısından kullanılabilir olduğu, tek aşamalı zengin yanma yöntemine kıyasla, basamaklı yakma (RQL) sistemi ile yaklaşık 100 ppm seviyelerinde NO_x emisyonları meydana geldiği ve yakıtın tamamen tükendiği gözlemlenmiştir. Ek olarak, sayısal sonuçların farklı kinetik mekanizmalara göre değişkenlik gösterdiği belirtilmiş olup, en yüksek NO_x tahminlerinin Glarborg mekanizmasının, en düşük NO_x tahminlerinin ise Otomo mekanizmasının kullanıldığı modellerde meydana geldiği görülmüştür [28].

Li ve diğerleri, yaptıkları sayısal çalışmada, oksijen zenginleştirme yöntemi kullanarak amonyak gazı yakmışlar, böylece, saf amonyağın yanma performansını iyileştirmeyi amaçlamışlardır. Ek olarak, zengin ve fakir yanma koşulları için sayısal modellemeler yapılmış olup, oksijen zenginleştirme yönteminin amonyak gazının yanma ve emisyon parametreleri üzerindeki etkileri araştırılmıştır. Bu kapsamda, oksitleyici içerisindeki oksijen miktarının, adyabatik alev sıcaklığı, laminer yanma hızı ve NO emisyon değerleri üzerindeki etkileri irdelenmiştir. Sayısal hesaplamalar sonucunda, hava içerisindeki oksijen miktarının artışı ile NO emisyonlarının arttığı gözlemlenmiştir. Ek olarak, zengin yanma koşullarında daha düşük NO seviyeleri meydana geldiği görülmüş olup, diğer taraftan, amonyağın hava ile yakılmasının düşük NO değerleri açısından potansiyel bir yakma tekniği olduğu vurgulanmıştır. Ayrıca, yanma havası içerisindeki oksijen miktarındaki artış sonucunda adyabatik alev sıcaklığının ve laminar yanma hızının arttığı gözlemlenmiştir.

Sonuç olarak amonyağın yanma performansının arttırılması için oksijen zenginleştirme şartlarının uygun bir metot olduğu ortaya konulmuştur [29].

Xiao, Wang, Medina ve Bowen, yaptıkları bir çalışmada, oksijen zenginleştirme koşulları altında yakılan amonyak/metan yakıt karışımın yanma ve emisyon davranışlarını sayısal olarak araştırmışlardır. Bu kapsamda, gerçekleştirilen oksijen zenginleştirme yönteminin, laminar yanma hızı, NO ve CO emisyonları üzerine etkileri incelenmiştir. Sayısal modellemelerde Konnov mekanizması ile bu mekanizmanın üç farklı indirgenmiş hali kullanılmış olup, kullanılan mekanizmalardan elde edilen yanma ve emisyon parametreleri karşılaştırılmıştır. Yakıt karışım oranları %61 oranında amonyak ve %39 oranında metan olarak belirlenmiş, yakma havası içerisindeki oksijen miktarı da %21 ile %40 arasında seçilmiştir. Elde edilen sonuçlara göre, eşdeğerlik oranının artışı ile laminar yanma hızının ilk etapta arttığı, daha sonra ise düşüş gösterdiği ifade edilmiştir. Ek olarak, indirgenmiş Konnov mekanizmalarından elde edilen sonuçlar ile genel Konnov mekanizması kullanılarak elde edilen sonuçların bir uyum içerisinde olduğu vurgulanmıştır. Oksijen zenginleştirme şartlarının amonyak/metan karışımının laminar yanma hızını arttırdığı ve yüksek basınçlı şartlar altında ise emisyon seviyelerinde büyük ölçüde düşüş meydana geldiği ortaya konulmuştur [30].

Hayakawa, Goto, Mimoto, Kudo ve Kobayashi, ön karışımlı bir amonyak/hava alevinin, farklı eşdeğerlik oranları ve basınç koşulları altındaki yanma ve emisyon parametrelerini sayısal ve deneysel olarak incelemişlerdir. 0,7 ile 1,1 eşdeğerlik oranları aralığı için yapılan deneysel ve sayısal çalışmalar sonucunda, amonyak alevinin turuncu renkte olduğu görülmüş olup, bu renk oluşumunun NH_2 amonyak alfa bandı ve H_2O spektrumu tarafından belirlendiği ortaya konulmuştur. Atmosferik basınç altındaki şartlar için, NO emisyonlarının, artan eşdeğerlik oranı veya artan basınç ile azaldığı belirtilmiştir. Yapılan reaksiyon akış analizlerine göre, zengin karışım durumundaki NO emisyonlarındaki azalma nedeninin NH_i (i = 1,2,0) radikalleri nedeniyle olduğu ortaya konulmuştur. Genel olarak, reaksiyon bölgesinde NO emisyonunun hızlı bir şekilde arttığı ve daha sonra kademeli bir şekilde azaldığı rapor edilmiştir. Buna karşın, zengin alev şartları için meydana gelen NO emisyonlarının oluşum miktarı incelendiğinde, alev sonrası bölgede NO emisyonlarının çok hızlı bir azaldığı görülmüş olup, sağlanan bu düşüşün zengin yanma koşullarındaki fazla NH_3 tarafından oluşturulan NH_2, NH ve N radikalleri nedeniyle olduğu ortaya konulmuştur [31].

Li, Huang, Kobayashi, He ve Nagai, yaptıkları çalışmada, eşdeğerlik oranındaki değişimin ve karışım içerisindeki hidrojen konsantrasyonun amonyak/hidrojen yakıt karışımın yanma karakteristikleri ve NO_x oluşum miktarları üzerindeki etkisini deneysel olarak araştırmışlardır. Çalışmada oksitleyici olarak hava kullanılmış olup, eşdeğerlik oranları 1,0, 1,10 ve 1,25 olarak seçilmiştir. Deneysel çalışmalar, yakıt içerisindeki amonyak oranının %40 ile %66,7 olduğu aralık için gerçekleştirilmiştir. Elde edilen sonuçlara göre, karışım içerisine uygun oranlarda hidrojen gazı eklenerek meydana getirilen kompozit yakıtlar sayesinde, amonyak gazının nispeten düşük olan yanma hızının artırılabileceği belirtilmiştir. Ayrıca, yakıt karışımı içerisindeki amonyak miktarının artışı, alev sıcaklığının düşmesine, dolayısıyla daha düşük NO_x emisyonları oluşmasına olanak sağlamıştır. Özellikle, zengin yanma koşulları altında, NO_x emisyonlarının dikkate değer bir şekilde azaldığı görülmüştür. Diğer taraftan, amonyak/hidrojen/hava karışımının yakıldığı durumlar için ısıl NO_x oluşum mekanizmasının ihmal edilebilir olduğu, buna karşın yakıt kaynaklı NO_x oluşumunun baskın bir role sahip olduğu vurgulanmıştır. Maksimum NO_x seviyeleri stokiyometrik yanma şartlarında meydana gelirken ve en düşük NO_x seviyelerine zengin yanma koşullarında ulaşılmıştır [32].

Wang ve diğerleri, farklı eşdeğerlik oranları, giriş sıcaklıkları ve karışım içerisindeki oksijen miktarına bağlı olarak, amonyak/oksijen karışımın laminar yanma hızı değişimlerini deneysel ve sayısal olarak araştırmışlardır. Söz konusu çalışmalar, oksitleyici içerisindeki oksijen oranının %60 ile %100, eşdeğerlik oranının 0,6 ile 1,4 ve giriş sıcaklıklarının ise 303 K ile 393 K arasındaki değiştiği şartlar için gerçekleştirilmiştir. Çalışma kapsamında, amonyak yanması için literatürde bulunan on üç farklı kinetik mekanizma kullanılmış olup, bu mekanizmalar ile gerçekleştirilen sayısal tahminler, birbirleri ve deneysel çalışma sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen sonuçlara göre, karışım içerisindeki oksijen miktarının artması ve yakıcı giriş sıcaklıklarının yükselmesi, amonyağın laminer yanma hızı değerleri üzerinde olumlu bir etki meydana getirmiştir. Ek olarak, oksitleyici içerisindeki oksijen konsantrasyonu arttıkça, zengin yanma koşullarında ulaşılan maksimum laminar yanma hızı değerleri fakir yanma koşullarına doğru geçiş yapmıştır. Diğer taraftan, çalışma kapsamında kullanılan kinetik mekanizma sonuçları değerlendirildiğinde, deneysel çalışma sonuçları ile en tutarlı tahminleri sağlayan mekanizmaların, fakir karışımlar için indirgenmiş Okafor mekanizması, zengin karışımlar için ise Zhang mekanizması olduğu belirtilmiştir [11].

Cheng, Wang, Xiao, Luo ve Fan, atmosferik ve yüksek basınç koşulları altında, ön karışımlı bir amonyak/hava alevinin yanma ve emisyon karakteristiklerini sayısal olarak incelemişlerdir. Çalışma kapsamındaki modellemeler amonyak gazının yanma ve emisyon parametrelerinin tahmin edilmesi ile ilgili önerilmiş olan dört farklı kimyasal kinetik mekanizma kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Elde edilen sonuçlar değerlendirildiğinde, amonyak/hava alevi için en yüksek yanma hızı değerlerine, eşdeğerlik oranının 1,1 olduğu yanma şartları altında ulaşılmıştır. Ayrıca, çalışma kapsamında kullanılan mekanizmalar vasıtasıyla tahmin edilen alev hızı değerlerinin, genel olarak deneysel çalışma sonuçlarıyla tutarlı bir yapıda olduğu görülmüş olup, en iyi performansı gösteren mekanizmaların Okafor ve Mathieu mekanizmaları olduğu belirtilmiştir. Atmosferik koşullar altında gerçekleştirilen sayısal modellemeler sonucunda, en düşük NO ve NH_3 emisyonları, eşdeğerlik oranının 1,1 olduğu yanma şartlarında meydana gelmiştir. Yüksek basınç koşulları değerlendirildiğinde ise eşdeğerlik oranının 1,1 ile 1,5 olduğu aralıkta, kayda değer bir NO ve NH_3 emisyonu oluşumu gözlemlenmemiştir [33].

Cai, Zhao, Wang, Li ve Guan, yaptıkları çalışmada, mikro yanma odası şartları altındaki ön karışımlı bir amonyak/oksijen alevinin ısıl performans ve NO emisyon karakteristiklerini sayısal olarak araştırmışlardır. Böylece, eşdeğerlik oranı, giriş sıcaklığı ve giriş basıncı değerlerindeki değişimlerin, karışımın yanma ve emisyon parametreleri üzerinde oluşturduğu etkileri irdelemişlerdir. Yapılan sayısal çalışmalar, 22 tür ve 67 reaksiyondan meydana gelen detaylı bir kimyasal mekanizma kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Sayısal modelleme sonuçlarına göre, maksimum yanma odası duvar sıcaklığı değerleri, eşdeğerlik oranının 0,9 olduğu şartlar altında elde edilmiştir. Ek olarak, eşdeğerlik oranı ile NO oluşum miktarları arasında güçlü bir ilişki olduğu görülmüştür. Zengin yanma şartlarına kıyasla, fakir karışımlar için daha yüksek NO seviyeleri meydana gelmiştir. Ayrıca, yakıcı giriş sıcaklığının artırılması, yanma odası ortalama duvar sıcaklığı ve NO emisyon seviyelerinde düşüş meydana getirmiştir. Yanma odası giriş basıncının artması durumunda ise ortalama duvar sıcaklığı artarken, NO emisyonlarında önemli derecede bir düşüş gözlemlenmiştir [34].

Franco, Rocha, Costa ve Yehia, tasarladıkları bir yanma odasında, amonyak/hidrojen gazları yakıt karışımının yanma ve emisyon parametrelerini sayısal ve deneysel olarak incelemişlerdir. Çalışma kapsamında, eşdeğerlik oranının ve yakıt karışımı içerisindeki amonyak gazı miktarının, NO_x emisyonları ve yanmamış amonyak gazı oluşumu üzerine

etkileri araştırılmıştır. Sayısal ve deneysel sonuçlara göre, söz konusu yakıt karışımını verimli bir şekilde yakmak için tasarlanan brülör vasıtasıyla, yanma odası içerisinde geniş bir merkezi resirkülasyon bölgesi meydana gelmiştir. Oluşan merkezi resirkülasyon bölgesi, kalma süresini arttırmış olup, NH_3/H_2/hava karışımı için kararlı bir yanma rejimi meydana gelmesini sağlamıştır. Yakıt karışımındaki yüksek hidrojen oranları, geri tepme olayına neden olurken, çok az miktardaki hidrojen konsantrasyonlarında ise yanma kararlılığın azaldığı görülmüştür. Diğer taraftan, belirli bir eşdeğerlik oranı için, yakıt karışımı içerisindeki artan hidrojen miktarı ile doğru orantılı olarak, NO_x emisyon seviyelerinde artış meydana gelmiştir. Sonuç olarak, çalışma kapsamında kullanılan yanma odasının, alev kararlılığı, NO_x ve NH_3 emisyonları açısından iyi bir performans gösterdiği ve söz konusu tasarımın endüstriyel uygulamalar için katkı sağlayabileceği öne sürülmüştür [35].

Ariemma ve diğerleri, MILD (moderate or intense low oxygen dilution) yanma koşulları altındaki amonyak/hava karışımının yanma ve emisyon parametrelerini sayısal olarak araştırmışlardır. Çalışma kapsamındaki deneyler, geniş bir eşdeğerlik oranı aralığı için, hem ön karışımlı hem de ön karışımsız yanma koşulları altında gerçekleştirilmiştir. Deneysel çalışmalar sonucunda, reaktantlar içerisindeki su oranı artışının, amonyak/hava karışımın yanma performansı üzerinde herhangi bir negatif etkisi olmadığı ve NO_x emisyonlarını düşürdüğü görülmüştür. Ayrıca, daha düşük NO_x emisyonlarının yakıt açısından zengin durumlar altında meydana geldiği ifade edilmiştir. Özellikle, yakıt açısından fakir ve stokiyometrik koşullar altında meydana gelen NO_x emisyonları seviyelerinin, reaktantlar içerisindeki su miktarına karşı oldukça duyarlı olduğu belirtilmiştir. Ön karışımsız yanma koşulları altında, amonyak açısından zengin bölgelerin meydana gelmesi ve baca gazlarının devir-daim edilmesi sonucunda, NO_x emisyonlarında azalma olduğu görülmüştür. Fakir karışımlar için daha düşük emisyon seviyelerinin ön karışımsız yanma şartları altında meydana gelmesi, ön karışımlı yanma koşulları altında yerel tabakalı bölgelerin oluşmaması ve karışım gradyanlarının çok dar bir bölgede sınırlı olması ile açıklanmıştır [36].

Mei, Zhang, Shi, Xi ve Li, yaptıkları sayısal ve deneysel çalışmada, bir yakıt parçalama stratejisi kullanarak amonyak/hava karışımlarının yanma ve emisyon performansını arttırmayı amaçlamışlardır. Bu kapsamda, yüksek basınçlı ve sabit hacimli silindirik bir yanma odası kullanılmış olup, yakıt parçalama oranı, basınç ve eşdeğerlik oranındaki

değişimlerin, laminer yanma hızı, adyabatik alev sıcaklığı ve NO oluşum miktarları üzerine olan etkilerini ortaya koymaya çalışmışlardır. Elde edilen sonuçlara göre, kısmen parçalanmış amonyak/hava karışımlarının laminer yanma hızları, parçalanma oranı arttıkça artarken, basınç arttıkça azalmıştır. En yüksek laminer yanma hızı değerine, parçalanma oranının %40 ve eşdeğerlik oranının 1,1 olduğu durumda ulaşılmış olup, uygun şartlar sağlandığında metan/hava karışımlarının yanma hızlarına yakın değerler elde edildiği görülmüştür. Böylece, kısmen yakıt parçalama stratejisinin amonyak gazının yanma performansı üzerinde pozitif bir etkisi olduğu vurgulanmıştır. Ayrıca, zengin ve fakir yanma koşulları birlikte değerlendirildiğinde, daha düşük NO emisyonlarının zengin yanma şartlarında meydana gelmiş olduğu ortaya konulmuştur [37].

Zhang ve diğerleri, bir lineer jeneratör (LEG) çalışma şartlarında, ön karışımlı bir NH_3/H_2 alevinin yanma ve emisyon karakteristiklerini sayısal olarak incelemişlerdir. Çalışma kapsamında, eşdeğerlik oranı, karışım içerisindeki hidrojen miktarı, giriş sıcaklığı ve basıncında meydana gelen değişimlerin, NH_3/H_2 yakıt karışımının laminar yanma hızı, tutuşma gecikmesi ve NO_x emisyonları üzerinde oluşturduğu etkiler araştırılmıştır. Sayısal simülasyonlar sonucunda, alev kararlılığı açısından en uygun eşdeğerlik oranının 1,1 ile 1,2 değerleri arasında olduğu ve en düşük NO_x emisyonlarının bu aralıkta meydana geldiği görülmüştür. 10 bar seviyesinden daha yüksek giriş basıncı değerlerinin, tutuşma gecikmesi üzerinde ihmal edilebilir bir etkisinin olduğu görülmüş olup, giriş sıcaklığı, giriş basıncı ve hidrojen karıştırma oranının artması ile tutuşma gecikmesi değerlerinin azaldığı belirtilmiştir. Aynı zamanda yüksek giriş basıncı ve sıcaklığının, NO_x emisyonların azaltılmasında etkili olduğu belirtilerek, amonyak/hidrojen yakıt karışımının, lineer jeneratör şartlarında kullanımı açısından önemli bir potansiyele sahip olduğu sonucuna varılmıştır [38].

Kumar ve Meyer, NH_3/H_2/hava karışımlarının laminer alev hızı karakteristiklerini, yakıt karışımı içerisindeki farklı amonyak yüzdesi ve eşdeğerlik oranlarına göre sayısal ve deneysel olarak incelemişlerdir. Çalışma, yakıt karışımı içerisindeki amonyak yüzdesinin %0 ile %80 ve eşdeğerlik oranının da 0,5 ile 1,1 aralığı için gerçekleştirilmiştir. Alev hızları tahminleri için Tian, Konnov ve GRI-Mech 3.0 detaylı kimyasal kinetik mekanizmaları kullanılmış ve bu mekanizmalardan elde edilen tahminler deneysel çalışma sonuçları ile karşılaştırılarak söz konusu mekanizmaların performansları değerlendirilmiştir. Sonuçlara ilişkin olarak, yakıt karışımı içindeki amonyak yüzdesi

arttıkça karışımın alev hızında düşüş gözlemlenmiştir. Kullanılan üç farklı kinetik mekanizmanın da H_2/hava karışımı için iyi bir performans gösterdiği, fakat karışım içerisinde amonyak eklenmesi sonucunda, mekanizmalardan elde edilen tahminler arasında saplamaların meydana geldiği belirtilmiştir. Deneysel sonuçlar göstermiştir ki, karışım içerisindeki amonyak miktarının artışına bağlı olarak en iyi performans, Tian ve Konnov mekanizmaları ile elde edilmiştir. Bununla birlikte, yakıt içerisindeki amonyak oranının %80 olduğu durumda, Tian mekanizması iyi bir sonuç göstermemiş olup, yüksek oranda amonyak içeren durumlar için Konnov mekanizmasının daha iyi tahminler yaptığı ortaya konulmuştur. Benzer olarak yüksek amonyak oranları ve fakir yanma şartları için GRI-Mech 3.0 mekanizmasının kullanımı, yazarlar tarafından önerilmemiştir. Ayrıca, NH_3/H_2/hava karışımlarının laminer alev hızı değerlerinin, alevden olan ısı kayıpları değerlerine ve H, OH ve O radikallerinin miktarlarına büyük ölçüde bağlı olduğu vurgulanmıştır [39].

Nozari ve Karabeyoğlu, yaptıkları sayısal çalışmada, amonyak/hidrojen/hava karışımlarının yanma ve emisyon parametrelerini, eşdeğerlik oranı ve yakıt içerisindeki amonyak miktarına bağlı olarak araştırmışlardır. Amonyak gazının yanma ve emisyon karakteristiklerinin incelenmesinde en baskın parametrelerin NO_x emisyonları ve alev hızları olduğunu ileri sürerek, çalışma kapsamındaki sayısal modellemeleri bu doğrultuda gerçekleştirmişlerdir. Gerçekleştirilen sayısal modellemeler kapsamında, Konnov mekanizması esas alınarak, indirgenmiş iki adet kinetik mekanizma geliştirilmiş, bu mekanizmaların NO_x emisyonları ve alev hızları açısından performansları araştırılmıştır. Çalışmadan elde edilen sonuçlara göre, radikallerin, yanma karakteristikleri üzerinde güçlü bir etkisinin olduğu vurgulanmıştır. Ayrıca, amonyağın parçalanması ve alev hızı üzerinde en etkili radikalin OH radikali olduğu belirtilmiştir. Ek olarak, optimum NO_x emisyonları açısından yakıt karışımı içerisindeki amonyak oranının ve eşdeğerlik oranının güçlü bir faktör olduğu vurgulanmış, en düşük NO_x emisyonları seviyesine yakıt açısından zengin koşullarda ulaşılmıştır [40].

Ichikawa, Naito, Hayakawa, Kudo ve Kobayashi, yaptıkları çalışmada CH_4/NH_3/hava karışımlarının, ön karışımlı ve türbülanslı yanma karakteristiklerini, yüksek basınç şartları altında deneysel olarak araştırmışlardır. Böylece, 0,5 MPa basınç değeri altındaki karışım için, türbülanslı ve laminer yanma hızı oranları, alev bölgesinin ortalama hacmi ve alev cephesi yapıları incelenmiştir. Yapılan deneyler sonucunda, karışım içerisindeki artan

amonyak oranı ile birlikte, türbülanslı ve laminar yanma hızı oranlarında (St/Sl) artış olduğu gözlemlenmiştir. Genel olarak, çalışma kapsamındaki şartlar için alev yüzeyi yoğunluklarının simetrik olduğu, buna karşın, karışım içerisinde artan amonyak miktarının alev yüzeyi yoğunluk değerleri ve karışımın laminer yanma seviyelerinde bir azalma meydana getirdiği belirtilmiştir [41].

Li, Huang, Kobayashi, Wang ve Yuan, amonyak gazının içten yanmalı sistemlerde alternatif bir yakıt olarak kullanılabilirliği üzerine odaklanmışlar ve bu kapsamda, amonyak/hidrojen gazı yakıt karışımlarının yanma karakteristiklerini sayısal olarak incelemişlerdir. Böylece, karışım içerisindeki hidrojen miktarındaki değişimlerin, tutuşma gecikmesi ve yanma hızı değerlerinde meydana getirdiği farklılıklar araştırılmıştır. Yapılan sayısal çalışmalarda Dagaut-Keromnes, Miller-Bowman ve indirgenmiş Konnov mekanizmaları kullanılmış olup, bu mekanizmaların performansları değerlendirilmiştir. Yapısal sayısal modellemeler sonucunda, yakıt karışımı içerisine hidrojen eklenmesi ile amonyak gazının reaktivitesinin arttığı ve laminer yanma hızı değerlerinde iyileşme olduğu görülmüştür. Laminer yanma hızında meydana gelen bu iyileşmenin, kimyasal aktivasyon enerjisinin azalması ve hidrojenin yüksek mobilitesi gibi etkiler nedeniyle sağlandığı vurgulanmıştır. Ek olarak, karışım içerisindeki hidrojen konsantrasyonunun yükselmesi, tutuşma gecikmesi değerlerinde azalmalar meydana getirmiştir. Diğer taraftan, laminer yanma hızındaki artışın, O, OH ve H gibi serbest radikallerin konsantrasyonundaki yükselmelere bağlı olduğu ortaya konulmuştur [42].

Okafor ve diğerleri, ön karışımlı NH_3/CH_4/hava alevinin laminer yanma hızlarını, geniş bir eşdeğerlik oranı aralığı ve yakıt karışımı içerisindeki amonyak miktarına bağlı olarak sayısal ve deneysel yöntemlerle araştırmışlardır. Aynı zamanda, GRI Mech 3.0 ve Tian mekanizmaları esas alınarak bir reaksiyon mekanizması geliştirilmiş olup, söz konusu mekanizmalar kullanılarak alev bölgesinde meydana gelen NO_x emisyonları tahmin edilmeye çalışılmıştır. Yapılan deneysel ve çalışmalar sonucunda, artan amonyak konsantrasyonuna bağlı olarak, karışımın laminer yanma hızı değerlerinde lineer olmayan azalmalar meydana geldiği görülmüştür. Ayrıca, karışımın laminer yanma hızı karakteristiği üzerinde en çok etkiye sahip olan radikallerin H ve OH olduğu ortaya konulmuştur. Çalışma kapsamında geliştirilen reaksiyon mekanizması ile elde edilen sıcaklık ve NO_x değerlerinin GRI Mech 3.0 mekanizmasının tahminleri ile genel olarak tutarlılık gösterdiği, fakat yüksek amonyak içeren karışımlar için elde edilen NO_x

emisyonlarının Tian mekanizması tahminleri ile daha uyumlu olduğu gözlemlenmiştir [43].

Han, Wang, He, Zhu ve Cen, yaptıkları sayısal ve deneysel çalışmada, ön karışımlı amonyak/sentetik gaz/hava alevlerinin yanma ve emisyon parametrelerini, yakıt karışım miktarları ve eşdeğerlik oranlarının geniş bir aralığı için araştırmışlardır. Bu kapsamda, deneysel çalışmalar sonucunda elde edilen laminer yanma hızı değerleri ile literatürde bulunan kinetik mekanizmaların tahminleri karşılaştırılmış olup, elde edilen veriler ışığında yeni bir kinetik mekanizma önerilmiştir. Önerilen yeni reaksiyon mekanizması, laminer yanma hızları, tutuşma gecikmesi ve NO_x emisyonları gibi yanma ve emisyon parametreleri açısından test edilmiştir. Çalışmadan elde edilen sonuçlara göre, karışım içerisindeki sentetik gaz oranı arttıkça karışımın laminer yanma hızı artmıştır. Ayrıca, en yüksek laminer yanma hızlarına eşdeğerlik oranının 1 ile 1,2 değerleri arasında ulaşılmıştır. Diğer taraftan, çalışma kapsamında önerilen kinetik mekanizma vasıtasıyla tahmin edilen NO_x emisyonları ile deneysel çalışmalardan elde edilen değerler birebir tutarlı olmasa da, benzer bir trend göstermiştir. Ek olarak, amonyak karışımlı yakıtların laminer yanma hızı karakteristiği açısından, C ve N içeren türlerin arasındaki ilişkinin önemsiz olduğu ortaya konulmuştur [44].

Ding ve diğerleri, yaptıkları çalışmada, amonyak/sentetik gaz yakıt karışımlarının N_2 ve CO_2 atmosferi altındaki NO_x oluşum mekanizmalarını sayısal ve deneysel olarak araştırmışlardır. Bu kapsamda, CO_2 konsantrasyonunun, sıcaklığın, eşdeğerlik oranının, yakıt içerisindeki CH_4 miktarının, CO/H_2 oranının ve kalma süresinin, söz konusu yakıt karışımın yanma ve emisyon parametreleri üzerindeki etkileri incelenmiştir. Yapılan sayısal modellemeler ve deneyler sonucunda, karışım içerisindeki CH_4 miktarında, sıcaklık değerlerinde ve CO/H_2 oranındaki artışın, NO emisyon seviyelerinde yükselme meydana getirdiği görülmüştür. Buna karşın eşdeğerlik oranının 0,4'den 1,65'e doğru olduğu durumda ise NO seviyelerinde azalma olduğu belirtilmiştir. Ek olarak, karışım içerisindeki CO_2 miktarının artması sonucu, fakir yanma şartları için NO miktarı azalırken, zengin yanma şartlarındaki NO emisyonlarında artış olduğu ortaya konulmuştur [45].

Wang ve diğerleri, NH_3/sentetik gaz/hava, NH_3/CO/hava ve NH_3/H_2/hava karışımlarının yanma ve emisyon parametrelerini deneysel ve sayısal olarak araştırmışlardır. Bu kapsamda, yakıt karışımı içerisindeki farklı amonyak miktarları, basınç değerleri ve

eşdeğerlik oranlarına göre karışımların laminer yanma hızları ve emisyon değerleri incelenmiştir. Elde edilen sonuçlara göre, hem H_2 içeren hem de CO içeren yakıt karışımları için, amonyak miktarının veya basıncın artışı ile laminer yanma hızlarında azalma meydana geldiği görülmüştür. Ek olarak, NH_3'ün CO, H_2 veya sentez gazı ile karıştırılması sonucunda elde edilen farklı laminer yanma hızı değerlerinin kimyasal ve difüzyon etkiler sonucunda meydana geldiği ortaya konulmuştur. Ayrıca, amonyağın H_2 veya CO ile karıştırılması, bu yakıtın parçalanma hızını önemli ölçüde arttırmış ve NO emisyonları oluşum mekanizmalarını desteklemiştir [46].

Zhou ve diğerleri, NH_3/sentetik gaz/hava ve NH_3/biyo-sentetik gaz/hava karışımlarının laminer yanma hızlarını, önemli radikallerin oluşum mekanizmalarını ve bu radikallerin NO emisyonları üzerindeki etkisini, karışımlar içerisindeki hidrojen ve amonyak miktarına, 0,7-1,4 aralığı için eşdeğerlik oranına ve farklı sıcaklık değerlerine göre sayısal ve deneysel olarak incelemişlerdir. Ek olarak NH_3/sentetik-gaz/hava karışımı için detaylı bir reaksiyon mekanizması ortaya konulmuş ve bu mekanizmanın literatürdeki diğer çalışmalara göre doğrulaması yapılmıştır. Yapılan çalışmalar sonucunda, NH_3/sentetik-gaz/hava karışımındaki sentetik gaz miktarının, NH_3/biyo-sentetik gaz/hava karışımı içerisindeki biyo-sentetik gaz miktarının ve sentetik gaz içerisindeki H_2 miktarının artması sonucunda, söz konusu yakıt karışımlarının laminer yanma hızları değerlerinde yükselme olduğu görülmüştür. Ayrıca, giriş sıcaklıklarının yükseltilmesi de, karışımların laminar yanma hızı değerlerinin iyileşmesini sağlamıştır. Diğer taraftan, karışım içerisindeki sentetik gazda bulunan hidrojen miktarının artması, yanma hızı üzerinde daha güçlü bir kimyasal etkinin oluşmasına neden olmuştur. Böylece, NH_3/sentetik gaz/hava ve NH_3/biyo-sentetik gaz/hava karışımlarının laminer yanma hızlarındaki artışın, kimyasal etki ile meydana geldiği ortaya konulmuştur. Ek olarak, NH_3/biyo-sentetik gaz/hava karışımı içerisinde mevcut olan CO_2 ve N_2 gazları, bu karışımların laminer yanma hızı üzerinde negatif bir sonuç meydana getirmiştir. Son olarak, eşdeğerlik oranlarındaki değişime bakılmaksızın, NO emisyonları oluşumu açısından en önemli radikalin HNO olduğu vurgulanmıştır [47].

Chen ve Jiang, yaptıkları çalışmada, bir amonyak/hava karışımı içerisine, H_2, CO veya sentetik gaz eklenmesi sonucunda meydana getirilen yeni yakıt karışımlarının yanma ve emisyon karakteristiklerini sayısal olarak araştırmışlardır. Çalışma kapsamında, karışımların, laminer yanma hızları, adyabatik alev sıcaklıkları, H ve NH_2 radikalleri, NO_x

emisyonları, net ısı salım oranları ve alev kararlılıkları gibi yanma ve emisyon karakteristikleri incelenmiştir. Sayısal modellemeler sonucunda, Han mekanizmasının literatürdeki yapılan diğer deneysel çalışmalarla daha iyi bir uyum içerisinde olduğu belirlenmiştir. Amonyak/hava karışımına H_2, CO veya sentetik gaz eklenmesi sonucunda, laminer yanma hızları ve adyabatik alev sıcaklıklarında artış olduğu ortaya konulmuştur. Karışıma eklenen gazlar içerisinde H_2'nin laminer yanma hızını en fazla arttıran yakıt olduğu, buna karşın adyabatik alev sıcaklığı artışında da en etkili olan yakıtın CO olduğu gözlemlenmiştir. Diğer taraftan, H ve NH_2 gibi önemli radikallerin oluşum miktarları üzerinde en etkili olan yakıtın H_2 olduğu ve bunu sentetik gaz ve CO'nun takip ettiği ortaya konulmuştur. Ayrıca, ısı salım oranının, amonyak/hava karışımına yapılan diğer yakıt eklentileri ile gelişme gösterdiği de vurgulanmıştır. Amonyak/hava karışımı içerisine çalışmaya konu olan diğer yakıtların eklenmesinin, NO emisyonlarında artışa neden olduğu görülmüş, NO oluşumu açısından, yakıtlar arasında en etkili gazın CO olduğu ileri sürülmüştür. Son olarak, NO emisyonları üzerinde en etkili ara ürünün H radikali olduğu ortaya konulmuştur [48].

Medina ve diğerleri, girdaplı yakıcı şartları altında yakılan NH_3/CH_4 karışımı kompozit yakıtların yanma ve emisyon karakteristiklerini sayısal ve deneysel olarak araştırmışlardır. Çalışma kapsamında, teğetsel girdaplı bir yakıcı kullanılmış olup, eşdeğerlik oranındaki değişimlerin alev kararlılığı ve emisyonlar üzerindeki etkilerini incelemişlerdir. Yapılan deneysel ve sayısal çalışmalar sonucunda, NH_3/CH_4 alevi için karmaşık bir reaksiyon mekanizmasının meydana geldiği görülmüştür. Ek olarak, eşdeğerlik oranının 1,15 ve 1,25 değerleri arasındaki yanma şartları altında meydana gelen CO emisyon seviyelerinin kabul edilemez olduğu gözlemlenmiştir. Ayrıca, NH_3/CH_4 gazları yakıt karışımları için tamamen ön karışımlı bir yanma stratejisinin uygun olmadığı belirtilmiştir. Bu nedenle, NO_x emisyonlarının optimize edilmesi açısından aşamalı bir yakıt enjeksiyon stratejisinin gerekli olduğu vurgulanmıştır. Son olarak, orta seviye girdap numaralarına sahip brülör kullanılması durumunda, alev kararlılıklarının olumsuz yönde etkilendiği ortaya konulmuştur [49].

NH_3 gazının yanma ve emisyon davranışları ile ilgili literatürde daha önce yapılan çalışmalar yukarıda verilmiştir. Söz konusu çalışmalar değerlendirildiğinde, NH_3'ün alevlenebilirlik özelliklerinin geliştirilmesi ve NO_x oluşum miktarlarının optimum seviyelere indirgenmesinin amaçlandığı görülmektedir. Buna karşın, gerçekleştirilen

literatür taraması sonucunda, NH_3-kömür gazları karışımları kompozit yakıtların yanma ve emisyon davranışlarının daha önce araştırılmamış olduğu tespit edilmiştir. Bu çalışmada, HZKG (hidrojence zengin kömür gazları) ile karıştırılarak, NH_3 gazının yanma performansının arttırılması amaçlanmıştır. Böylece, belirli kütlesel karışım oranlarındaki NH_3-KFG (kok fırını gazı) ve NH_3-SG (su gazı) yakıt karışımlarının model bir yanma odası içerisinde meydana getirdiği sıcaklık dağılımları ve NO emisyon profilleri sayısal olarak incelenmiştir. Ek olarak, çalışma kapsamında NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıt de için sayısal ve deneysel çalışmalar yapılmıştır.

Sonuç olarak, bu tez çalışmasında, belirli kütlesel karıştırma oranlarındaki NH_3-KFG ve NH_3-SG yakıt karışımlarının yanma ve emisyon karakteristikleri incelenmiş olup, elde edilen sonuçlar NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıtın yanma ve emisyon performansları ile karşılaştırılmıştır. Böylece, HZKG ile karıştırmanın, NH_3 gazının yanma ve emisyon performansı üzerinde göstermiş olduğu etki, karşılaştırmalı olarak incelenmiştir.

2. YAKITLAR, YANMA VE HAVA KİRLİLİĞİ

2.1. Yakıtlar

Bir oksitleyici ile reaksiyona girerek, ısı ve ışık formunda enerji veren maddeler "yakıt" olarak tanımlanır. Yakıtların bünyelerinde yanıcı bileşenler olarak karbon, hidrojen ve hidrokarbonlar bulunmaktadır. Bu bileşenlerin oksijen ile meydana getirdiği kimyasal reaksiyonlar sonucunda, yakıtın kimyasal enerjisi diğer enerji türlerine dönüşmektedir. Bununla birlikte, içeriğinde hidrokarbon bulunan her maddeye de yakıt denilemez [50].

Bir yanıcı maddenin yakıt olarak tanımlanabilmesi için üç koşul vardır: Bunlar, kullanılabilirlik, verimlilik ve ekonomikliktir. Birinci koşul, yakıtın faydalı olmasına işaret etmektedir. Bir maddenin yanması sonucunda, yeterli seviyede enerji açığa çıkması gerekmektedir. Bu nedenle, düşük miktarda yanıcı madde içeren ve düşük kalorifik değerler oluşturan maddeler yakıt olarak adlandırılamaz. İkinci koşul ise, maddenin verimli bir şekilde yanması ve bazı uygulamalar için ısıl enerjisinin geri kazanılmasını ifade etmektedir. Örnek vermek gerekirse, bazı materyaller doğada yanıcı olarak bulunmasına rağmen, yanma prosesinin çok hızlı veya çok yavaş olması, malzemenin kimyasal enerjisinden faydalanma ile ilgili olarak bazı zorluklar meydana getirebilmektedir. Son koşul ise, yanma prosesi ile elde edilen enerjinin ekonomik olması anlamına gelmektedir. Eğer, yanıcı materyalin oluştuğu maliyet, yanma sonucu elde edilen enerji değerinden fazla ise, söz konusu yanıcının yakıt olarak adlandırılması uygun değildir. Örneğin, kağıt yanıcı bir maddedir, fakat yakıt olarak kullanılması açısından pahalıdır [50].

Yakıtlar, genel olarak, fiziksel durumlarına, kaynağına, üretim prosesine ve niteliklerine göre sınıflandırılabilir. Bu sınıflandırma ile ilgili detaylar aşağıda verilmiştir [50]:

- Yakıtın fiziksel durumu: Katı (kömür, odun vs.), sıvı (bezin, motorin vs.), gaz (metan, hidrojen vs.).
- Yakıtın kaynağı: Doğal olarak meydana gelen yakıtlar (kömür, ham petrol ve doğal gaz) ve endüstriyel işlemler ile üretilen yakıtlar (kok, motorin, hidrojen vs.).
- Üretim prosesi: Amaca yönelik olarak üretilmiş metalürjik kok veya üretim yan ürünü olarak elde edilen yüksek fırın gazı.

- Yakıtın niteliği: Kömür, ham petrol, doğalgaz gibi yenilenemez (fosil) yakıtlar ya da hidrojen veya biyokütle gibi yenilebilir yakıtlar.

2.1.1. Katı yakıtlar

Odun, turba, kömür, kok ve odun kömürü gibi yakıtlar katı yakıtlara örnek olarak verilebilir. Günümüzde, temiz ve verimli yanma şartları sağladıkları için gaz veya sıvı yakıtlar daha fazla tercih edilmektedir. Buna rağmen, ucuz ve kolaylıkla elde edilebilir olmalarından dolayı, dünya enerji ihtiyacının yaklaşık %33'lük kısmı katı yakıtlar ile karşılanmaktadır. Katı yakıtların büyük çoğunluğu endüstriyel işlemler olmadan doğal yollarla meydana gelmektedir [51].

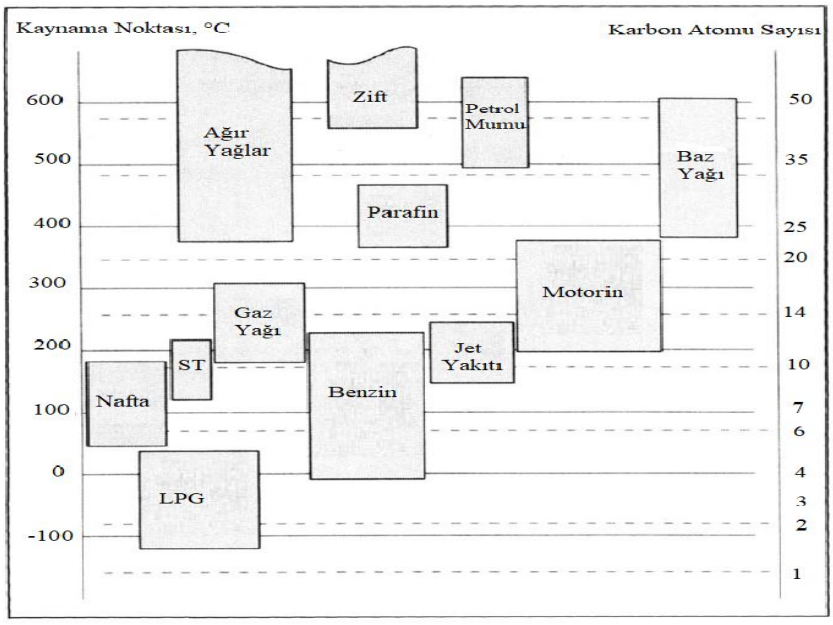
Yaygın bir anlayışa göre, ekonomik açıdan en uygun olan katı yakıtlar odun ve kömür olarak gösterilmektedir. Bunun yanı sıra kentsel atıklar da karışık katı yakıtlar olarak dikkat çekmektedir. Katı yakıtlar genel olarak üç kategoride sınıflandırılabilirler. Bunlar, biyokütle, fosil yakıtlar ve atıklardır. Biyokütle yakıtları, ısıtma sistemlerinde (kazan, fırın vs.), kıyılmış ağaç yongası, testere talaşı, kağıt hamuru, pirinç kabuğu, şeker kamışı küspesi ve gübre formlarında yakılabilmektedir. Fosil katı yakıtlara örnek olarak ise, kömür, linyit, bitümlü şist ve katran kumu gösterilebilir. Biyokütleden fosil katı yakıta olan geçiş ise turba ile olmaktadır. Katı atıklar, genel olarak enerji elde etmek için kullanılmakla birlikte, daha da önemlisi, toplumun meydana getirdiği kirleticilerin güvenli bir şekilde bertarafı için yakılmaktadır. Kentsel katı atıklar, biyokütle yakıtlarının çeşitli formları olan ağaç, kağıt ürünleri ve yiyecek atıkları gibi bileşenler içerirler. Aynı zamanda bu atıklar, fosil yakıtlardan elde edilen polietilen, polistren, polivinil klorid ve buna benzer plastik bileşenler de içermektedirler [52].

Yukarıda anlatılan tüm katı yakıtların, özgül ağırlık, ısıl iletkenlik, ısıl kapasite, kalorifik değer ve parçacık boyutu gibi karakteristikleri dikkate alındığında, fiziksel, kimyasal ve termodinamik özellikleri açısından birbirleri ile farklılıklar göstermekte olduğu söylenebilir. Bu özellikler, herhangi bir katı yakıtın bir yanma ortamı veya teknolojisi için sergileyeceği davranışın belirlenmesinde oldukça önemli bir rol oynamaktadır [52].

2.1.2. Sıvı yakıtlar

Dünya genelinde sıvı yakıtlara olan talebin artması, petrol esaslı yakıtların üretim oranlarının yükselmesine neden olmaktadır. Bu yükselişe bağlı olarak, sıvı yakıtlar toplumun her alanında yaygın olarak kullanılmaktadır. Genellikle, sıvı yakıtların en çok kullanıldığı alanlar ulaşım, ısıtma ve kimya endüstrisidir. Bu yakıtların yaygın olarak kullanılmasının en temel sebebi, diğer enerji taşıyıcılarına kıyasla yüksek enerji yoğunluğu ve depolamada kararlılık gibi avantajlar sağlayabiliyor olmalarıdır. Bu nedenle, sıvı yakıtların, ulaşım ve endüstriyel uygulamalar açısından gelecekte de önemli bir role sahip olacağı tahmin edilmektedir [53].

Sıvı yakıtlar, petrol esaslı ve yenilenebilir sıvı yakıtlar olarak kategorize edilebilir. Petrol esaslı sıvı yakıtların en yaygın olarak kullanıldığı alan ulaşım sektörüdür. Bu yakıtlar, otomotiv alanında motorin ve benzin olarak, havacılık ve denizcilik uygulamalarında ise kerosen formunda kullanılmaktadırlar. Isıtma sistemlerinde ise, çoğunlukla, LPG (sıvılaştırılmış petrol gazı) ve kırsal motorin kullanılmaktadır. Petrol esaslı sıvı yakıtlardan üretilen özel ürünler ise bitüm, nafta ve motor yağıdır. Bitüm, inşaat sektöründe ve yol yapımında kullanılırken, nafta ise petrokimya endüstrisinde kullanılmaktadır. Yanma sistemlerinde yaygın olarak kullanılan petrol esaslı sıvı yakıtlar ise benzin ve motorindir [53]. Petrolden elde edilen sıvı yakıtlar ve diğer ürünler Şekil 2.1'de gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Başlıca petrol ürünleri, kaynama noktaları ve karbon atomu sayıları [54]

Yenilenebilir sıvı yakıtlar ise, birinci nesil ve ikinci nesil yenilenebilir yakıtlar olarak ikiye ayrılmaktadır. Birinci nesil yenilenebilir yakıtlar, biyoetanol, biyodizel ve saf bitkisel yağlardır. İkinci nesil yenilenebilir yakıt proseslerinin temel amacı ise, farklı biyokütle kaynakları kullanılarak, biyoyakıt üretimindeki sürekliliğin sağlanmasıdır [53].

2.1.3. Gaz yakıtlar

Gaz yakıtlar popüler bir yakıt türü olup, katı ve sıvı yakıtlara göre bazı avantajlara sahiptirler. Taşıma açısından elverişlidirler. Genellikle herhangi bir mineral safsızlığı içermezler. Gaz yakıt yakan sistemlerin bakım gereksinimleri çok azdır veya ihmal edilebilir. Ayrıca, gaz yakıtların yanma verimlilikleri de yüksektir. Genellikle, yoğun nüfuslu bir sanayi bölgesinde, gaz yakıtların iletimi için bir dağıtım ağı kullanılırken, bazı endüstrilerde ise depolama yöntemlerinden istifade edilmektedir [53].

Gaz yakıtlar, doğal yollarla meydana gelen kaynaklardan direkt olarak çıkarılabilir veya üretilebilirler. Elde edilen gaz yakıtlar, çoğunlukla, hidrokarbonlar (metan, propan, bütan), karbonmonoksit, hidrojen veya bunların karışımları olan sentetik gazlardır [53].

Metan, gaz halindeki yakıtların en yaygın bileşenlerinden biridir. Metanın oluşumu, organik materyallerin (fosil veya atık) biyojenik veya termojenik degradasyonu sonucunda meydana gelmektedir. Metanın oluşum yüzdesi, degradasyonun meydana geldiği yıl sayısına, maruz kalınan çevresel şartlara ve öncül maddelerin bileşimine bağlı olarak değişkenlik göstermektedir. Doğalgaz, kömür madeni metanı, metan hidrat, biyogaz, çöp gazı gibi yakıtların hepsi, ana yanıcı madde olarak metan içermektedirler. Sentetik gazların çoğunda ise kalorik değere katkı sağlayan karbonmonoksit ve hidrojen bulunur. Propan ve bütan gibi hidrokarbonlar çoğunlukla ulaşımda kullanılmaktadırlar [53].

Gaz yakıtlar, genellikle oluşma şekline göre sınıflandırılırlar ve aşağıdaki gibi gruplandırılabilirler [53]:

- Doğal yollarla meydana gelen gaz yakıtlar (gazlar doğrudan çıkarılabilir veya rafine etme gibi başka bir işlemin ürünü olarak elde edilebilir.).
- Sentetik gaz yakıtlar (katı, sıvı yakıtlar veya su gibi diğer kaynaklardan üretilen yakıtlardır.).

- Üretim yan ürünü olan gaz yakıtlar (kömürün işlemleri sırasında veya reaktörlerin kullanımı ile yan ürün olarak meydana gelen gaz yakıtlardır.).

2.2. Yanma

Yanma, enerjinin kullanımı, küresel iklim değişikliği ve sürdürülebilirlik başta olmak üzere, hayatımızın birçok yönünü etkilemektedir. Mühendisler, çevreyi koruyacak ve sürdürülebilir yaşam tarzlarını mümkün kılacak şekilde birçok farklı yakıt türü için güvenli, verimli ve kirletici olmayan yanma sistemleri tasarlamaya çalışmaktadırlar. Yanma sistemlerinin tasarımında gelişme sağlayabilmek için, yanmanın, hem bilimsel hem de mühendislik yönleri açısından iyi bir şekilde anlaşılması gerekmektedir. Yanmanın detaylarını anlamak zordur. Kimya, matematik, termodinamik, ısı transferi ve akışkanlar mekaniği gibi bilim dalları ve konularının kullanımını gerektirir. Bu nedenle, yanma sistemleri üzerine çalışan mühendislerin pratik tasarım çözümleri bulabilmeleri için, bilim, deney ve tecrübenin bir kombinasyonunu kullanmak zorunda oldukları aşikardır [55].

"Yanma", o kadar yaygın olarak görülen bir olgudur ki, terim olarak tanımlamak çok zor değildir. Bilimsel açıdan bakıldığında, yanma, kimyasal reaksiyon kinetiğinden meydana gelmektedir. Yanma olayı sırasında, reaksiyonlar çok hızlı bir şekilde oluşmaktadır. Böylece, büyük miktarda kimyasal enerji duyulur enerjiye dönüşür. Bununla birlikte, her reaksiyonun yanma olarak tanımlanması da kesin bir ifade oluşturmaz. Örneğin, bir otomobilde meydana gelen paslanma, söz konusu oksidasyon reaksiyonunun tercih edilenden çok daha hızlı olmasına rağmen "yanma" olarak tanımlanamaz. Buna karşın, bir şömine içerisindeki odunun ısı vermesi sırasında meydana gelen olay ise açıkça yanmayı temsil etmektedir [55].

Yanma, reaksiyonun akış koşulları (laminer veya türbülanslı) ve yakıtın tipi (katı, sıvı, gaz) dikkate alınarak, oksitleyicinin ve yakıtın reaksiyon bölgesinden önce homojen olarak karışması durumunda ön karışımlı, sadece reaksiyon bölgesinde karşılaşması durumunda ise ön karışımsız olarak adlandırılabilir [55].

Verimli yanma prosesi elde etmek ve reaksiyon hızlarını arttırmak için birçok yöntem bulunmaktadır. Yüzey alanını genişletmek reaksiyon hızını önemli ölçüde attırır. Örneğin, toz metaller çok hızlı bir şekilde yanabilirken, demir bir çubuk sadece yavaşça paslanır.

Kazanlar, dizel motorlar ve gaz türbinleri gibi toz halinde kömür veya püskürtme sıvı yakıt yakan sistemlerde, hızlı yanma için küçük parçacıklar veya damlacıklar kullanılmaktadır. Reaksiyon hızını arttırmanın diğer bir yolu da sıcaklığın artırılmasıdır. Reaksiyona giren maddelerin sıcaklık seviyelerini yükseltmek, kimyasal ekzotermik reaksiyonların hızını üssel olarak artırır. Reaktantlar ısıtıldığında, ısıl enerji açığa çıkar. Eğer bu enerji, ısı transferi ile taşınabilecek miktardan daha hızlı salınırsa sistemin sıcaklığı artar. Bu sıcaklık artışı reaksiyonların hızlanmasına neden olur [55].

Yanma sistemlerinde oksitleyici olarak, kolay erişilebilir ve serbest olmasından dolayı, çoğunlukla hava kullanılmaktadır. Saf oksijen ise, kaynak veya kesme işlemleri gibi özel proseslerde kullanılır. Hacimce kuru hava, %20 oksijen, %78,1 azot, %0,9 argon, az miktarda karbondioksit, helyum, neon ve hidrojenden oluşmaktadır. Genellikle, yanma uygulamalarında, kuru havanın içerik olarak %21 oranında oksijen ve %79 oranında azottan meydana geldiği kabul edilir. Bu nedenle, havanın oksitleyici olarak kullanıldığı yanma sistemlerinde her mol oksijen, beraberinde 3,76 mol azot getirir [56].

$$1 \text{ kmol } O_2 + 3{,}76 \text{ kmol } N_2 = 4{,}76 \text{ kmol hava} \quad (2.1)$$

Azot, yanma sırasında inert gaz olarak davranır ve çok az miktarda azot oksit oluşumu dışında diğer elementler ile reaksiyona girmez. Bununla birlikte, azot, genellikle yanma odasına düşük sıcaklıkta girer ve yanma sırasında meydana gelen enerjinin büyük bir oranını soğurarak yanma odasından yüksek sıcaklıklarda çıkar. Buradan da, azotun varlığının yanma prosesini önemli ölçüde etkilediği sonucuna varılabilir. Bununla birlikte, yüksek alev sıcaklıklarında, azotun oksijenle tepkimeye girerek zararlı NO_x emisyonlarına neden olduğu da unutulmamalıdır [56].

Yanma olayının başlaması için sadece yakıtın oksitleyici ile temas etmesi yeterli değildir. Yanmanın gerçekleşmesi, yakıtın sıcaklığının, belirli bir tutuşma sıcaklığından daha üst seviyelere getirilmesi ile mümkün olabilir. Atmosferik hava içerisindeki bazı maddelerin minimum tutuşma sıcaklıkları, benzin için 260 °C, karbon için 400 °C, hidrojen için 580 °C, karbon monoksit için 610 °C ve metan için ise 630 °C‘dir. Diğer taraftan, optimum yanma şartlarının sağlanması için yakıt ve havanın karışım oranlarının da uygun bir aralık içerisinde olması gerekmektedir. Örneğin, doğalgaz, %5 ile %15 arasındaki derişim oranlarında yanabilmektedir. Yanma prosesinin analizinde, karışım içerisindeki yakıt ve

hava oranlarını ifade etmek için sayısal bir büyüklük kullanılmaktadır. Bu büyüklük, "hava-yakıt oranı (HY)" olarak ifade edilmektedir. Hava-yakıt oranı, havanın kütlesinin yakıtın kütlesine oranı olarak tanımlanmaktadır ve aşağıdaki eşitlik yardımıyla hesaplanmaktadır [56].

$$HY = \frac{m_{hava}}{m_{yakıt}} \tag{2.2}$$

2.2.1. Yanma entalpisi ve reaksiyon kinetiği

Tepkime entalpisi, belirli bir haldeki ürünlerin entalpileri ile aynı haldeki reaktantların entalpileri arasındaki fark olarak tanımlanır ve "h_T" ile gösterilir. Yanma proseslerinde ise tepkime entalpisi, çoğunlukla yanma entalpisi olarak tanımlanır ve "h_Y" ile ifade edilir. Yanma entalpisi, belirli bir basınç ve sıcaklıkta, kararlı bir yanma işlemi sırasında, 1 kmol veya 1 kg yakıtın tamamen yanmasıyla ortaya çıkan ısı miktarını temsil eder [56].

$$h_T = h_Y = H_{\text{ürün}} - H_{girdi} \tag{2.3}$$

Yanma entalpisinin yakıtların yanma işlemlerinin analizinde çok faydalı bir özellik olduğu açıktır. Bununla birlikte, olası durumlar dikkate alındığında, yanma entalpisi değerlerinin her bir yakıt için bir liste halinde gösterilmesi mümkün değildir. Ayrıca yanma entalpisi, yanma tam olmadığında kullanılamaz. Bu nedenle, birkaç referans durumdaki bir elementin veya bileşiğin kimyasal enerjisini temsil eden daha temel bir özellik tanımlamak, çok daha pratik bir yaklaşım olabilir. Bu özellik, oluşum entalpisidir. Oluşum entalpisi, belirli durumdaki bir maddenin kimyasal bileşiminden dolayı ileri gelen entalpi olarak tanımlanır ve "$\bar{h}_{ol}$" olarak gösterilir [56].

Yakıtların yanması ile bağlantılı olan diğer yaygın bir terim de yakıtın ısıl değeridir. Yakıtın ısıl değeri, sürekli akış durumunda, yakıt tamamen yandığında ve ürünler reaktantların halinde döndüğünde oluşan ısı miktarı olarak tanımlanır. Başka bir deyişle, yakıtın ısıl değeri, yanma entalpisinin mutlak değerine eşittir [56]. Yani,

$$Isıl\ Değer\ \ (kj/kg\ yakıt) = |h_Y| \tag{2.4}$$

Isıl değer, ürünler içerisindeki suyun fazına bağlıdır. Ürünler içerisindeki su sıvı formda ise "üst ısıl değer (ÜID)", ürünler içerisindeki suyun fazının buhar formunda olması durumunda ise "alt ısıl değer (AID)" olarak adlandırılır. İki ısıl değer arasında ilişki Eş. (2.5)'de gösterilmiştir [56].

$$\text{Ü}ID = AID + (mh_b)_{H_2O} \tag{2.5}$$

Eş. (2.5)'de m, ürünler içerisindeki suyun kütlesi ve h_b ise suyun buharlaşma entalpisidir.

2.2.2. Reaksiyon kinetiği

Reaksiyon kinetiği, kimyasal reaksiyonların zamansal değişimi ile ilgilenen fiziksel kimyanın bir dalıdır. Reaksiyonlar sonucunda meydana gelen ürünler, termodinamik açıdan girdilerden daha kararlı halde olmalarına rağmen, neden söz konusu reaksiyonların başlamadığı hakkında açıklamalar sağlar ve bazı reaksiyonların çok hızlı, bazılarının ise çok yavaş olduğu gerçeğini ortaya koyar. Ayrıca, sıcaklık ve basınç değişimlerinin reaksiyonların oluşum mekanizmaları üzerindeki etkilerini de dikkate alarak, farklı koşullar altındaki reaksiyon hızlarının hesaplanması için yararlı araçlar oluşturur. Reaksiyon kinetiği ile ilişkili olan bir diğer önemli terim de "aktivasyondur". Terim olarak reaksiyonun başlaması anlamına gelen aktivasyon, ısı, ışık ve radyoaktivite gibi faktörlerle etkileşim halindedir. Diğer bir deyişle aktivasyon, reaksiyonun başlaması için gerekli olan minimum enerjinin moleküller tarafından kazanılmasıdır [57].

Kinetik araştırmanın en önemli amacı, girdilerin ürünlere dönüşmesini mümkün kılan temel moleküler olayların tanımlanması ve sınıflandırılmasıdır. Mekanik modellerin doğa bilimlerine egemen olduğu reaksiyon kinetiği çalışmalarının başlangıcında, genel tepkimeyi oluşturan bu basit moleküler olayların şeması, reaksiyonun mekanizması olarak isimlendirilmiştir ve bu "mekanizma" terimi günümüzde halen yaygın olarak kullanılmaktadır. Mekanizmada, iki molekülün direkt olarak karşılaştığı en basit olaylar, yani reaksiyonun temel adımları tanımlanır ve bu temel adımlar birleştirilerek karmaşık reaksiyon mekanizması meydana getirilir. Gerçek hayattaki reaksiyonların çoğu, kompozit reaksiyonlar olarak adlandırılmakta olup, bu reaksiyonlar çok sayıda tür ve temel adımlardan oluşur. Örneğin, gaz reaksiyonlarında bu adımlar birkaç yüz kadar olabilir. Belirli koşullar altında, bütün temel reaksiyonların hızları hesaplandığında ve ayrıca,

reaksiyon mekanizması içindeki bağlantılarının yolu bilindiğinde, bu reaksiyonların genel hız değerleri başarılı bir şekilde hesaplanabilir. Dolayısıyla, kimyasal kinetik alanındaki temel reaksiyon teorisinin çok önemli olmasının nedeni de budur [57].

Kompozit reaksiyonlar için hassas mekanizmaların ortaya konulması kolay bir iş değildir. Güvenilir bir mekanizma oluşturulması, kısa ömürlü veya düşük konsantrasyona sahip olmalarına rağmen, reaksiyondaki tüm bileşenlerin tanımlanması ile mümkün olmaktadır. Aynı zamanda, her zaman mümkün olmasa da, bu bileşenlerin zamansal değişimlerinin de takip edilmesi gerekmektedir. Birçok reaksiyonda bulunan kısa ömürlü ve düşük konsantrasyona sahip olan bu bileşenlere "ara ürün" denir. Ara ürünler, girdilerden meydana gelen, devam eden reaksiyonlarla yok edilen ve ürünlerin oluşmasını sağlayan maddelerdir. Kısa ömürlü ve düşük konsantrasyonlara sahip olduklarından, deneysel çalışmalarda kolayca fark edilemeyebilirler. Kinetikçinin görevi, reaksiyona giren karışımın mümkün olan en çok bileşeninin zamansal evrimini izledikten sonra, tüm konsantrasyon değişikliklerini zamanın bir fonksiyonu olarak açıklayabilen uygun bir mekanizma oluşturmaktır. Sonuç olarak, kompozit reaksiyon teorilerinin, reaksiyon kinetiğinin önemli bir konusunu oluşturduğu söylenebilir [57].

Arrhenius, hız katsayısının sıcaklık ile olan ilişkisini açıklamak için, deneysel sonuçlarla tutarlı olan üstel bir fonksiyon önermiş olup, bu fonksiyon Eş. 2.6'da gösterilmiştir [57].

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}} \tag{2.6}$$

Arrhenius eşitiği, "A" ile gösterilen ve frekans faktörü olarak tanımlanan öğe ile ilgili hiçbir şey belirtmemiştir. Çarpışma teorisinde, bu değer, reaksiyondaki girdilerin çarpışma sıklığı ile ilişkilendirilmektedir. Bu nedenle, eşitlikteki " A" değeri, frekans faktörü olarak isimlendirilmiştir. Eşitlik içerisindeki "E_a" ile gösterilen diğer parametre de aktivasyon enerjisidir ve sınırlı bir sıcaklık aralığında bile makul bir hassasiyetle tahmin edilebilir. Buna karşın, frekans faktörünün tahmin edilmesi sıcaklıktan bağımsızdır ve gazların kinetik teorisi temel alınarak hesaplanan çarpışma sıklığına bağlı olarak, azımsanmayacak bir şekilde değişkenlik göstermektedir. Buradan da anlaşılacağı üzere, çarpışma teorisi hız katsayısı için hassas olmayan bir yaklaşım göstermektedir [57].

Uzun bir süre boyunca, sıcaklığa bağlı olarak yapılan kinetik ölçümler, Eş. 2.7'de gösterilen dönüşüm kullanılarak grafiksel olarak değerlendirilmektedir [57].

$$ln\,k = ln\,A - \frac{E_a}{R}\frac{1}{T} \tag{2.7}$$

Ek olarak, aktivasyon enerjisinin tanımı da aynı ilişkiye dayanmaktadır [57]:

$$\frac{d\,ln\,k}{d\left(\frac{1}{T}\right)} = -\frac{E_a}{R} \tag{2.8}$$

Eş. (2.8)'deki ilişki, yaklaşık olarak geçerli olduğu için, elde edilen "E_a" parametresi genellikle, "görünür aktivasyon enerjisi" olarak tanımlanır.

2.3. Hava Kirliliği

Hava kirliliği, tüm dünyada hem gelişmiş hem de gelişmekte olan ülkeler için önemli bir problemdir. Hızlı nüfus artışı ve enerji talebi, çevre ve insan sağlığını olumsuz yönde etkileyen zehirli hava kirleticilerin emisyonlarının artmasına neden olmuştur. Dünya sağlık örgütünün verilerine göre, gelişmekte olan ülkelerde her yıl 4 milyon ölüm ve sayısız solunum hastalıkları, hava kirliliğinin bir sonucu olarak meydana gelmektedir. Havanın kalitesini olumsuz yönde etkileyen en önemli hava kirleticileri, azot oksitler (NO_x), kükürt dioksit (SO_2), karbon monoksit (CO), karbon dioksit (CO_2), partikül maddeler, uçucu organik bileşenler ve ozon (O_3)'dur [58].

Hava kirliliğinin, bitkiler, hayvanlar, insanlar gibi canlı sistemler üzerindeki etkileri daha da kötüdür. Hava kirliliği, bitkilerin biyokimyasal ve fizyolojik süreçlerini olumsuz yönde etkileyerek verim kayıplarına neden olabilir. Birçok bilimsel çalışmada, kalp damar hastalıkları, azalan akciğer fonksiyonları, öksürük veya zor nefes alma gibi solunum yolu hastalıklarının, solunum yolu enfeksiyonlarına karşı artan duyarlılığın, kanser ve erken doğum ölümleri gibi çeşitli sağlık problemlerinin, hava kirliliği ile ilişkili olduğu ortaya konulmuştur [58].

Hava kirliliğinin aynı zamanda çevremiz üzerinde de zararlı etkileri bulunmaktadır. Yer seviyesi ozon (O_3), bitki örtüsüne zarar vererek, bitki ve ağaçların büyümesini olumsuz

yönde etkilemektedir. Bitki ve ağaçların atmosferden CO_2 çekme kabiliyetlerini azaltır ve dolaylı olarak tüm ekosistemi etkiler. Ayrıca, asitler ve asit oluşturan bileşiklerin (kükürt dioksit (SO_2) ve azot oksitler (NO_x)), atmosferden Dünya yüzeyine doğru çökelmesine neden olur. Bu asit çökelmesi, ya ıslak ya da kuru şekilde gerçekleşmektedir. Islak olan çökelme, genellikle asit yağmuru olarak bilinmektedir. Asit yağmuru her yerde meydana gelebilir ve hatta bazı bölgelerde doğal yağıştan 100 kat daha asidik olabilir. Asit birikimi, kömür yakan güç tesisleri, dökümhaneler ve fabrikalar gibi SO_2 ve NO_x yayan kaynaklara yakın olan bölgeler için çok ciddi bir bölgesel problem olup, hem su ve hem de kara sistemleri üzerinde çeşitli zararlı ekolojik etkilere sahiptir. Ağaçların yapraklarına direkt olarak etki ederken, toprağın kimyasal ve fiziksel özellikleri üzerinde de olumsuz etkileri bulunmaktadır. Ek olarak, göllerde yaşayan balıkların ve diğer canlıların ölümüne neden olmaktadır. Hava kirliliği, iklim şartlarını da negatif yönde etkilemektedir. Karbon dioksit (CO_2), metan (CH_4) ve troposferik ozon (O_3) gibi sera gazları Dünya'nın radyasyon dengesini bozar ve küresel ısınmaya neden olur [58]. İlerleyen bölümlerde, amonyak ve kömür gazları gibi yakıtların yanma sonu ürünlerinin oluşum mekanizmaları detaylı olarak anlatılmıştır.

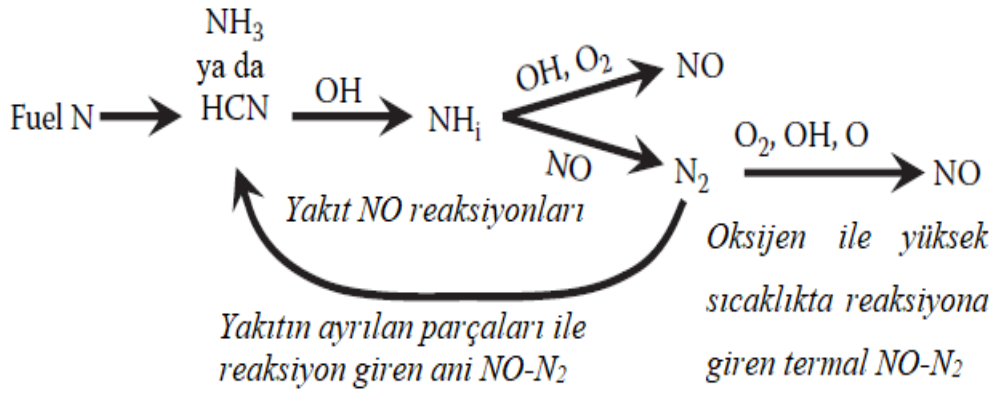
2.3.1. Azot oksit (NO_x) oluşumu

NO_x, yanma sistemlerinde meydana gelen azot oksitleri tanımlamak için kullanılan ortak bir terimdir. Azot monoksit (NO), genellikle en yaygın olarak salınan NO_x türüdür ve bir çok yanma işleminde toplam NO_x oluşumunun en az %95'inin NO olduğu kabul edilmektedir. Bununla birlikte, NO, çevreye salındığında sağlık ve çevresel açıdan birçok kirletici etkiye sahip olup, fotokimyasal reaksiyonlar yoluyla azot dioksit (NO_2) meydana getirmektedir [59,60].

Azot dioksit (NO_2), yanma sistemlerinden çoğunlukla düşük yüzdelerde salınır. Bu yanma sonu ürününün meydana getirdiği risklerden biri, direkt olarak salınan NO_2 emisyonlarıyla ya da NO_2'nin uçucu organik bileşikleriyle reaksiyona girerek ozon oluşumuna neden olan ikincil reaksiyonlardır [59].

Diazot oksit (N_2O), akışkan yataklı yanma odaları gibi düşük sıcaklıklar ile çalışan yakıcılarda meydana gelmekte olup, genellikle azot oksitlerin daha az önem teşkil eden bir bileşenidir. [59].

Sentez gazlarının yanması sırasında meydana gelen en önemli NO_x türü NO'dur ve toplam NO_x oluşumunun %95'den fazlasını NO oluşturmaktadır [59,60]. Bu nedenle, bu tez çalışması kapsamında yapılan NO_x tahminlerinde sadece NO oluşumu hesaplanmıştır. Sıcaklık, konsantrasyon, kalma süresi ve yakıtın çeşidi gibi belirli koşullara bağlı olarak üç farklı NO oluşum mekanizması vardır. Bunlar: termal NO, ani NO ve yakıt NO oluşum mekanizmalarıdır [61]. NO oluşum mekanizmalarının basitleştirilmiş hali aşağıdaki şekilde verilmiştir:



Şekil 2.2. NO oluşum mekanizmalarının basitleştirilmiş şeması [59]

Termal NO oluşum mekanizması

Termal NO oluşumu olarak adlandırılan bu mekanizma Zeldovich tarafından bulunmuştur. Yanma sırasında veya sonrasında oluşan oksijen (O) atomları, bu tip NO oluşumunun temel nedenidir. 1300 °C'den daha yüksek olan sıcaklıklarda, oksijenin (O_2) ayrışması sonucunda O atomu konsantrasyonları önemli ölçüde artmakta, buna bağlı olarak, NO emisyon değerlerinde yükselme meydana gelmektedir. Termal NO_x oluşum mekanizması ile ilgili olarak, alev veya alev sonrası bölgenin yüksek oksijen içeren alanlarında aşağıdaki reaksiyonlar gerçekleşmektedir [61].

$$O + N_2 \leftrightarrow NO + N \tag{2.9}$$

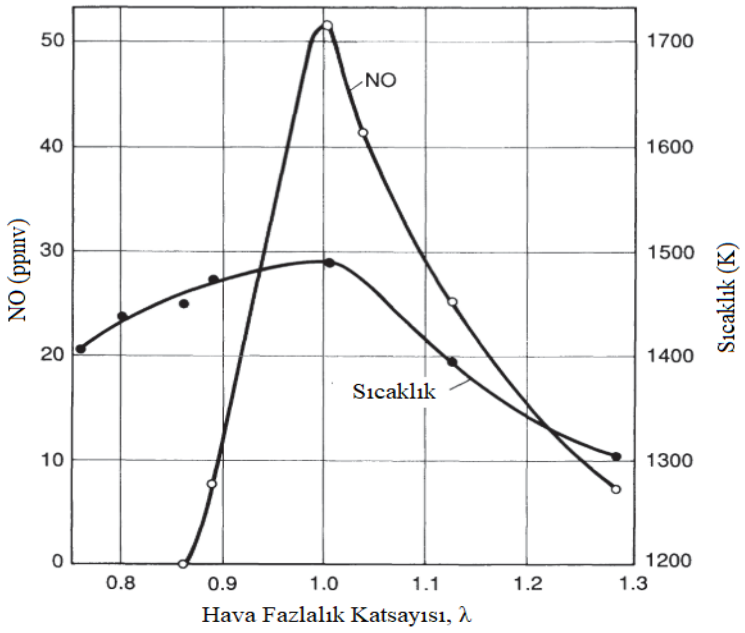
$$N + O_2 \leftrightarrow NO + O \tag{2.10}$$

$$N + OH \leftrightarrow NO + H \tag{2.11}$$

Bir yanma odasında meydana gelen NO emisyonları, aşağıdaki faktörlere bağlı olarak değişim göstermektedir [61].

- Reaksiyon bölgesindeki hava fazlalık katsayısı: NO emisyonları, genellikle, azalan hava fazlalık katsayısı ile azalmaktadır.
- Reaksiyon bölgesindeki sıcaklık: O_2'nin ayrışmasının dışında, Eş. (2.10)'da gösterilen reaksiyon yüksek oranda sıcaklığa bağlıdır. Böylece, yükselen sıcaklıklar, NO oluşumunda açık bir artışa yol açmaktadır.
- Gazların, maksimum sıcaklık seviyelerinin meydana geldiği reaksiyon bölgesinde kalma zamanları: Kalma süresinin kısalması, NO emisyonlarının oluşum miktarlarını düşürmektedir.

Bir laboratuvarda, ön karışımlı bir metan alevi için hava fazlalığının etkisi ve ortaya çıkan sıcaklık dağılımı Şekil 2.3'de gösterilmiştir. Yavaş yavaş yükselen bir sıcaklıkta bile, artan hava fazlalık katsayısının bir sonucu olarak, NO emisyonunda çarpıcı bir artış olduğu görülmektedir. Fazla hava ile alevin soğutulması durumunda ise NO emisyonları belirgin bir şekilde azalmaktadır. Teknik yanma sistemlerinde tam yanma, sadece belirli bir hava fazlalığının olduğu durumlarda meydana gelmektedir. Böylece, maksimum NO emisyonları da havanın belirli oranda fazla olduğu bir aralıkta oluşmaktadır [61].



Şekil 2.3. Fazla havanın NO emisyonları üzerine etkisi [61]

Termal NO oluşum mekanizmasının fakir yanma şartları altında daha yüksek seviyelerde NO emisyonu meydana getirmesinin temel sebebi, ortamdaki mevcut oksijen için yakıt ile azotun rekabet halinde olmasıdır. Diğer taraftan, yakıt açısından zengin durumlarda daha düşük NO emisyonlarının oluşması ise, mevcut oksijenin öncelikli olarak yakıt tarafından tüketilmesi ile ilişkilidir [62].

Ani NO oluşum mekanizması

Ani NO oluşum mekanizmasının, azot (N_2) ile yakıtın ayrışmış parçalarının (örneğin, CH radikali) çok hızlı bir şekilde reaksiyona girmesi sonucu meydana geldiği düşünülmektedir [59]. Bu çok hızlı NO oluşumunun, aleve yakın bölgelerde meydana gelmesinden dolayı, Fenimore tarafından bulunan bu oluşum mekanizması, "Ani NO" olarak adlandırılmıştır. Ani NO mekanizmasının normal seviyeleri birkaç ppmv ile 100 ppmv aralığında değişmektedir. Mevcut veriler, bazı ani NO oluşumlarının Eş. 2.9 ve Eş. 2.11'de verilen reaksiyonların hızlarının artmasına neden olan O ve OH radikallerinin süper denge konsantrasyonundan dolayı meydana geldiğini göstermektedir. Bununla birlikte, birçok çalışmada, ani NO mekanizmasının, hidrokarbon radikaller ile moleküler azotun hızlı bir şekilde tepkimeye girmesi sonucunda başlayan bir kimyasal reaksiyon dizisi ile oluştuğu ortaya konulmuştur [63].

Yapılan deneyler sonucunda, hidrokarbon alevler içerisindeki ani NO oluşumu ile ilgili esas katkıda bulunan radikallerin CH ve CH_2 olduğu belirtilmesine rağmen, bazı çalışmalarda CH, CH_2, C_2, C_2H ve C gibi çok sayıda hidrokarbon radikalinin de sorumlu olabileceği ileri sürülmüştür [63]. Bu kapsamda, ani NO oluşumuna neden olan temel reaksiyonlar aşağıda verilmiştir [61]:

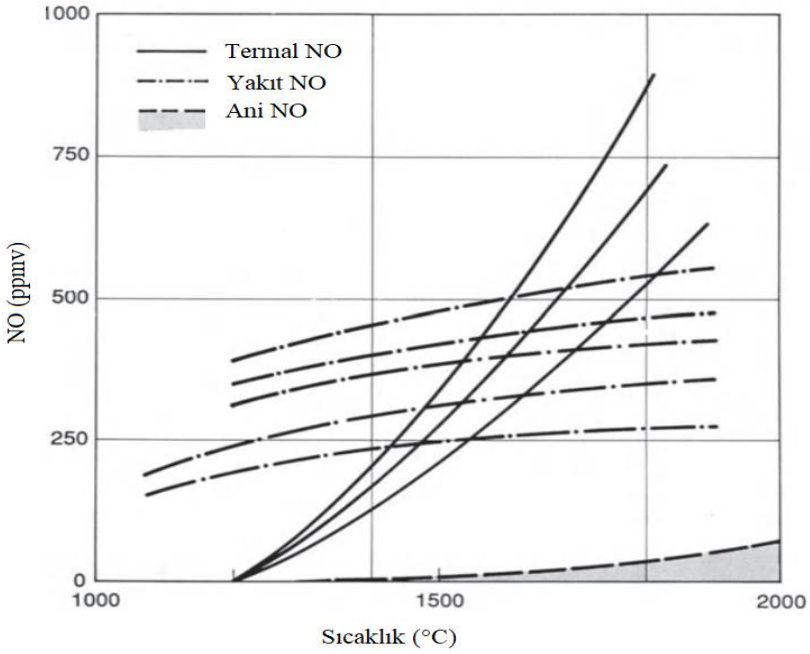
$$CH + N_2 \leftrightarrow HCN + N \quad (2.12)$$

$$C + N_2 \leftrightarrow CN + N \quad (2.13)$$

$$CN + H_2 \leftrightarrow HCN + H \quad (2.14)$$

$$CN + H_2O \leftrightarrow HCN + OH \quad (2.15)$$

Yukarıdaki reaksiyonlar incelendiğinde, yakıttaki azot bileşenlerinin meydana getirdiği CN radikalinin, daha sonradan HCN radikaline dönüştüğü görülmektedir. Ek olarak, söz konusu reaksiyon dizisi sonucunda atomik azot oluşumu da gerçekleşmektedir. Böylece, siyanojen bileşenleri ve azot atomları oksitlenerek NO oluşumuna neden olmaktadır. Ani NO oluşumunun başladığı sıcaklık aralığı ise Şekil 2.4'de verilmiştir [61].



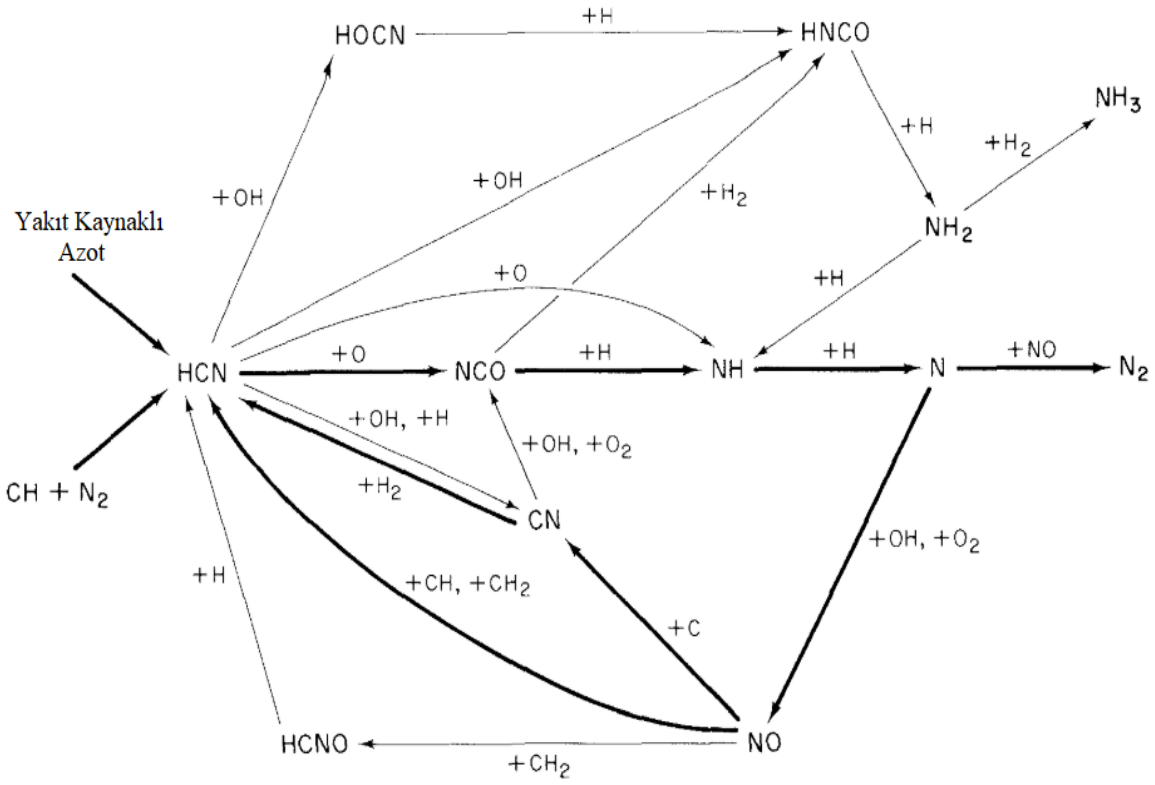
Şekil 2.4. Yanma sıcaklığına bağlı olarak NO oluşumları [61]

Genellikle, alev içerisinde meydana gelen ani NO oluşumunun ikincil bir öneme sahip olduğu ileri sürülmektedir. Buna karşın, söz konusu ani NO oluşum mekanizması, yakıt açısından zengin bölgelerde oluşan CN ve N radikallerinin konsantrasyonlarına bağlı olarak, özellikle küçük ısıtma kazanlarında önem kazanmaktadır [61].

Yakıt NO oluşum mekanizması

Birçok yakıt bünyesinde azot molekülü bulundurmaktadır. Buna bağlı olarak, söz konusu azot molekülleri, yanma sırasında kolayca oksitlenerek NO emisyonu meydana gelmesine neden olmaktadır [64]. Yakıt NO mekanizması, NH_3 ve HCN gibi azot taşıyan türlerin oksitlenmesi sonucunda gerçekleşmektedir. Bu türler, yanma sırasında kolayca NO oluşturmaktadırlar ve konsantrasyonlarına bağlı olarak, NO emisyonlarının oluşumu açısından önemli bir kaynak haline dönüşmektedirler. Yeterli kalma süresi ve sıcaklığın

sağlandığı durumlarda, bu azot taşıyan türler, oksijensiz ortamda N_2'ye indirgenebilir. Bu nedenle, yakıt NO oluşumunu azaltmak için kullanılan birçok kontrol tekniği bu etkiyi kullanmaktadır [59].



Şekil 2.5. Zengin hidrokarbon alevlerdeki reaksiyon yolları [64]

Şekil 2.5'de zengin hidrokarbon alevlerdeki HCN radikalinin, NO ve diğer ürünlere dönüşmesini temsil eden reaksiyon yolları gösterilmiştir. Kalın oklar baskın olan adımları simgelemektedir. Çoğu koşulda HCN radikalinden NO'ya olan baskın yol, HCN radikali ile atomik oksijen arasındaki aşağıdaki reaksiyonla başlayan dizidir [64].

$$HCN + O \leftrightarrow NCO + H \tag{2.16}$$

Eş. 2.16'daki reaksiyondan sonra Eş. 2.17 ve Eş. 2.18 reaksiyonları gerçekleşmektedir:

$$NCO + H \leftrightarrow NH + CO \tag{2.17}$$

$$NH + H \leftrightarrow N + H_2 \tag{2.18}$$

Eş. 2.17 ve Eş. 2.18'deki reaksiyonlar sonucunda meydana gelen N atomu, Eş. 2.19 ve Eş. 2.20 'deki reaksiyonlar aracılığı ile NO oluşumuna yol açmaktadır.

$$N + OH \leftrightarrow NO + H \quad (2.19)$$

$$N + O_2 \leftrightarrow NO + H_2 \quad (2.20)$$

Yukarıdaki reaksiyonlar yoluyla meydana gelen NO, N atomları ile reaksiyona girerek, N_2 oluşturmaktadır.

$$NO + N \leftrightarrow N_2 + O \quad (2.21)$$

ya da serbest hidrokarbon radikaller ile reaksiyon girerek CN ve HCN meydana getirmektedir.

$$NO + C \leftrightarrow CN + O \quad (2.22)$$

$$NO + CH \leftrightarrow HCN + O \quad (2.23)$$

$$NO + CH_2 \leftrightarrow HCN + OH \quad (2.24)$$

Aynı zamanda CN ve HNCO içeren reaksiyon yolları da önemlidir. Bu reaksiyonlar, NH_3 meydana getirmektedirler.

$$HCN + OH \leftrightarrow HNCO \quad (2.25)$$

$$HNCO + H \leftrightarrow NH_2 + CO \quad (2.26)$$

$$NH_2 + H_2 \leftrightarrow NH_3 + H \quad (2.27)$$

Oksijen atomu konsantrasyonunun yeteri kadar yüksek olduğu daha fakir koşullar altında, NCO ve CN radikalleri, oksijen atomları ile reaksiyona girerek direkt veya dolaylı yollardan

NO oluşturmaktadırlar. NH radikali ise, O veya OH radikali ile reaksiyona girerek ve NO meydana getirmektedir:

$$NH + O \leftrightarrow NO + H \quad (2.28)$$

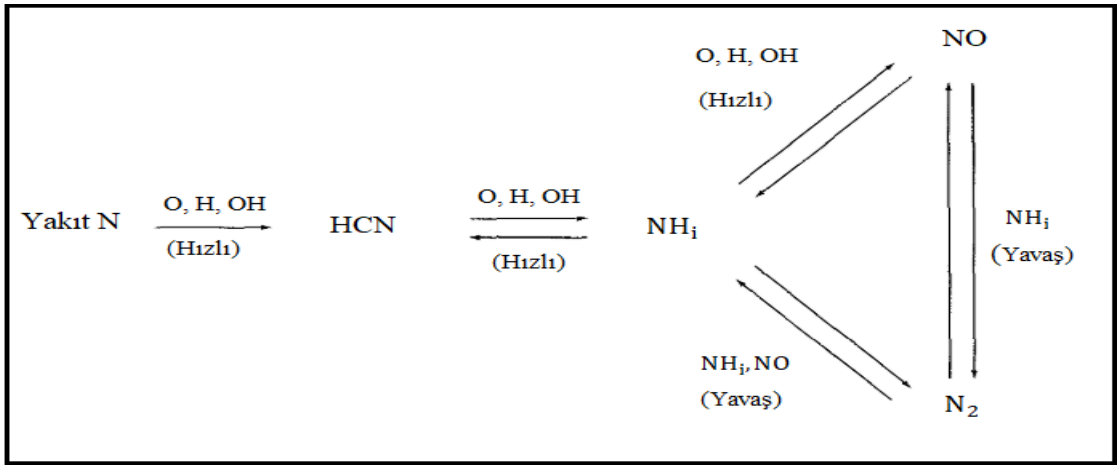
$$NH + O \leftrightarrow N + OH \quad (2.29)$$

Yukarıdaki reaksiyon zincirleri ile meydana gelen azot içeren türler, aynı zamanda birbirleri ile reaksiyona girerek N_2 meydana getirirler. Yakıttaki azottan N_2 oluşumu, azot içeren sabit türlerin reaksiyonunu gerektirir:

$$NO + N \leftrightarrow N_2 + O \quad (2.30)$$

$$NH + N \leftrightarrow N_2 + H \quad (2.31)$$

Eş. 2.30'deki ters reaksiyon, yakıt açısından fakir veya stokiyometrik yanmaya yakın şartlarda N_2'den NO meydana gelmesine katkı sağlayan Zeldovich mekanizmasının ilk baskın reaksiyonudur. Genel olarak, yakıt NO oluşum mekanizması, Şekil 2.6'da en temel haliyle sunulmuştur [64].



Şekil 2.6. Yakıt NO oluşum mekanizması [64]

Yakıt NO oluşum mekanizması sıcaklığa çok az bağlı olup yanma stokiyometrisinin oldukça güçlü bir fonksiyonudur. Bu nedenle, termal NO mekanizması için kullanılan buhar enjeksiyonu veya yanma sonu ürünlerinin resirkülasyonu ile sıcaklık düşürme

metotları, yakıt NO oluşum mekanizması üzerinde çok az bir etkiye sahiptir. Bir yanma odası çıkışında yakıt NO oluşum mekanizması tarafından meydana gelen NO emisyonlarını azaltmak için, N_2 oluşturan reaksiyonların baskın hale getirilmesi amacıyla, ortamın yeterince uzun süre yakıt açısından zengin şartlar altında bulunması gerekmektedir. Böylece, yüksek yanma verimliliği, yanma prosesinin yakıt açısından zengin ve fakir olarak bölünerek aşamalı yanma stratejisinin uygulandığı durumda sağlanabilir [64].

NO_2 reaksiyon mekanizması

Yanma sırasında meydana gelen NO'nun azot içeren radikaller ile tekrardan reaksiyona girerek N_2 meydana getirmesi mümkündür. Ek olarak, NO, bu reaksiyonlar nedeniyle oksijen içeren radikaller ile reaksiyona girerek NO_2 oluşturabilmektedir. Genel NO_2 oluşum reaksiyonu Eş. 2.32 'de verilmiştir [65].

$$NO + H_2O \leftrightarrow NO_2 + OH \tag{2.32}$$

Temel ayrışma adımı ise NO_2'nin hidrojen radikali ile girdiği aşağıdaki reaksiyondur:

$$NO_2 + H \leftrightarrow NO + OH \tag{2.33}$$

Yanma sistemlerinde meydana gelen NO_2'nin miktarı, sisteme bağlı olarak fazlasıyla değişebilir fakat toplam NO_x oluşum miktarının yaklaşık %5'i kadardır. Kimyasal denge dikkate alındığında, 1500 K sıcaklığındaki tipik alevler için NO_2/NO oranı çok azdır [65].

N_2O reaksiyon mekanizması

Yanma sistemlerindeki N_2O emisyonları ardışık reaksiyonlar sonucunda meydana gelmektedir. Yanma esnasında, N_2O oluşumuna ve ayrışmasına neden olan temel reaksiyonlar aşağıda verilmiştir [65].

$$NCO + NO \leftrightarrow N_2O + CO \tag{2.34}$$

$$NH + NO \leftrightarrow N_2O + H \tag{2.35}$$

Alev sıcaklığının 1500 K'den daha yüksek olduğu durumlarda N_2O'nun ömrü 10 ms'den daha azdır. Dolayısıyla, düşük sıcaklık yanmasının olmadığı şartlar altında, N_2O emisyonlarının önemsiz olduğu kabul edilmektedir [65].

2.3.2. Karbon monoksit (CO) oluşum mekanizması

Karbon monoksit, renksiz ve kokusuz bir gazdır. Motorlu araçlar, güç istasyonları, atık yakma fırınları, kazanlar gibi tüm karbon içeren yakıt yakan sistemler, karbon monoksit emisyonu meydana getirirler. Karbon monoksit, zehirli bir gaz olmamasına rağmen, solunum sistemi üzerinde geçici bir etkiye sahiptir. Solunum sistemi üzerindeki en önemli etkisi alyuvarlara tutunarak oksijen alımını zorlaştırmasıdır [66].

Sentetik gazların yanması sırasında meydana gelen karbon monoksit emisyonlarının üç temel kaynağı bulunmaktadır. Bunlar, sentetik gazların bünyesinde bulunan karbon monoksitin tam yanmaması, yakıt ve oksitleyicinin yeterince karışamaması nedeniyle eşdeğerlik oranının tutuşma aralığının dışında olması ve sentetik gazların içerdiği hidrokarbon türlerinin eksik yanmasıdır. Aynı zamanda, sentetik gazların pistonlu motorlarda yanması sırasında, motor yağının ayrışması da karbon monoksit oluşumuna neden olmaktadır [59].

Karbon monoksit emisyonları, karışımlardaki oksijen içeriği ile ilişkilidir. Düşük oksijen oranı karbon monoksit oluşumunu arttırmaktadır. Daha yüksek hava fazlalık katsayısı ise karbon monoksit emisyonlarını azaltır. Ayrıca, yüksek sıcaklık ve uzun kalma süreleri de karbon monoksit oluşum seviyelerini düşürmektedir. Karbon monoksit emisyonları birçok hidrokarbon emisyonları ile benzer bir davranış sergilediğinden, çoğunlukla yanmanın genel verimliliğini gösteren bir düzenleyici olarak kullanılır. Bu nedenle, karbon monoksit emisyonlarının düzenlenmesi, yanma sonucu oluşan hidrokarbon emisyonlarının kısıtlanması ile ilişkilendirilebilir. İlave olarak, karbon monoksit emisyonunun azalması ile NO_x emisyonları artmaktadır [66].

2.3.3. Karbon dioksit (CO_2) oluşumu

Nüfus artışı ile birlikte fosil yakıt kullanımının artması sonucu, atmosfere salınan karbon dioksit miktarı artmakta ve bunun sonucunda da atmosferik bileşim önemli ölçüde değişmektedir. Küresel ısınma üzerinde önemli bir etkisi olan karbon dioksit emisyonları ile ekonomi arasındaki ilişkiyi anlamak, karbon dioksit emisyonların azalması için uluslararası kontrol mekanizmaları meydana getirmek ve bu mekanizmaları küresel anlamda uygulamak oldukça önemlidir [67].

Sentetik gazların yeterli oksijen ve karışma sağlanarak yanması durumunda, sentetik gaz bileşenlerinde bulunan tüm karbonun karbon dioksite dönüşeceği açıktır. Karbon dioksit oluşumuna katıda bulunan sentetik gaz bileşenleri, karbon monoksit, hidrokarbonlar ve doğal olarak sentetik gazın içerdiği karbon dioksittir [59].

3. AMONYAK VE KÖMÜR GAZLARININ YANMASI

3.1. Amonyak Gazının Yanma Karakteristikleri ve Elde Edilmesi

NH_3 keskin bir kokuya sahip olan renksiz bir gazdır. Bununla birlikte, NH_3'ün kaynama noktası –33,5 °C olup, donma noktası ise -77,7 °C'dir. NH_3'ün solunması halinde ise canlı sağlığını tehdit eden çeşitli unsurlar meydana gelebilmektedir. Buna karşın, kokusu sayesinde kolaylıkla algılanabilirken, havadan daha hafif olması özelliği ile herhangi bir kaçak olması durumunda hızlıca yükselme eğilimi göstermektedir. Ayrıca, NH_3'ün kendi kendine tutuşma sıcaklığının 650 °C olması ve 5,2 kWh/kg enerji içeriği, NH_3'ü enerji dağıtımı açısından uygun bir madde olarak öne çıkarmaktadır [22].

NH_3 gazının stokiyometrik yanma reaksiyonu aşağıda verilmiştir. Yanması sonucunda herhangi bir CO_2, SO_2 veya kurum gibi çevreye zararlı yanma sonu ürünlerini meydana getirmemesi dolayısıyla, NH_3, hidrokarbonlar karşısında en umut verici alternatif yakıt olarak düşünülmektedir. Ek olarak, NH_3, en etkili hidrojen depolama yöntemlerinden biri olan metal hidrürlerden 4 kat daha fazla hidrojen depolama kapasitesine sahiptir. Dahası, NH_3'ün hacim başına depoladığı enerji miktarı göz önüne alındığında, hidrojenin depolanma maliyetine göre daha avantajlı olduğu söylenebilir. NH_3, zehirli bir gaz olmasına rağmen, hidrojen veya benzine kıyasla çok daha az oranda bir yangın tehlikesi meydana getirmektedir. Bununla birlikte, NH_3 gazının yanması ile ilgili yapılan çalışmalarda, NH_3'ün gaz türbini motorlarında yüksek verimlilikle yanmasının mümkün olduğu ve dolayısıyla, gaz türbinlerinde kullanılan geleneksel hidrokarbonların yerini alabileceği ortaya konulmuştur [22,23,29].

$$4NH_3 + 3O_2 \rightarrow 2N_2 + 6H_2O + \text{ısı} \qquad (3.1)$$

NH_3 gazının yanma sistemleri için yukarıda bahsedilen avantajlarına rağmen, NH_3/hava karışımının verimli yanması için aşılması gereken bazı zorluklar mevcuttur. NH_3/hava karışımının yanması, yüksek bir ateşleme enerjisi gerektirmesi ve yanma hızının geleneksel hidrokarbonlara göre çok daha düşük olması nedeniyle oldukça zorlayıcı bir olaydır. Ek olarak, NH_3/hava karışımı düşük bir reaktiviteye sahip olup, alevlenebilirlik limiti dardır. NH_3/hava karışımının yanmasında karşılaşılan bu sorunlar genellikle, CH_4

veya H_2 ile karıştırma stratejisiyle aşılmaya çalışılmaktadır. Aynı zamanda, NH_3/hava alevinin temel karakteristikleri henüz tam olarak anlaşılamamış olup, yanma sonu ürün oluşumlarının farklı reaksiyon mekanizmalarına göre farklı davranışlar sergilemesi, sayısal modellemeler açısından önemli bir problem teşkil etmektedir [18,35].

Son 10 yılda, NH_3 içeren karışımların yanması ile ilgili çeşitli reaksiyon mekanizmaları geliştirilmiştir. Bu kapsamda, geliştirilen önemli reaksiyon mekanizmalarına ait detaylar Çizelge 3.1'de sunulmuştur. Çizelge 3.1'deki reaksiyon mekanizmalarının isimlendirilmesi, mekanizmayı yayınlayan kişilerden ilk yazarın adı kullanılarak yapılmıştır [11].

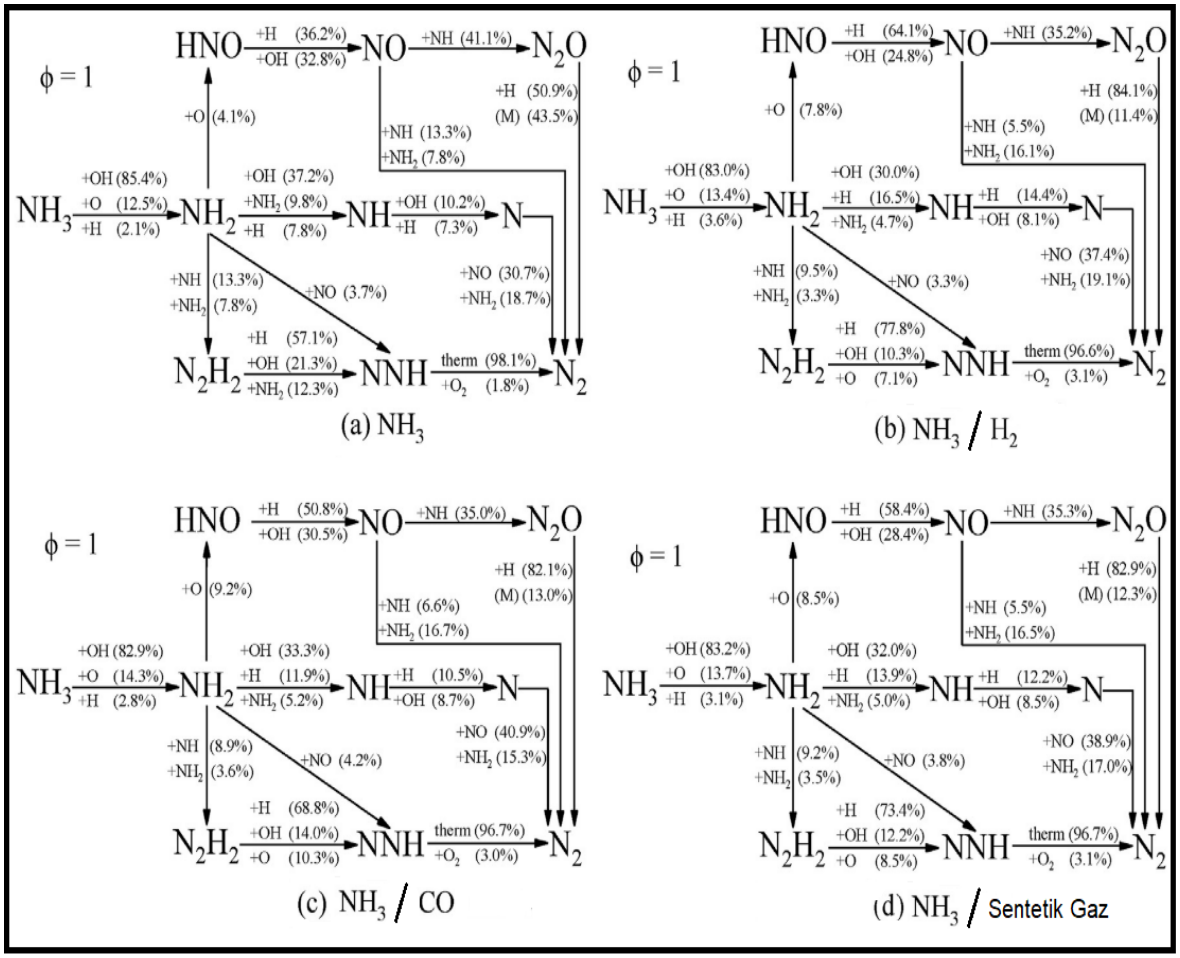
Çizelge 3.1. Amonyak içeren karışımlar için geliştirilen reaksiyon mekanizmaları [11]

Reaksiyon Mekanizması	Yıl	Reaksiyon Sayısı	Tür Sayısı
Dagaut	2008	250	41
Konnov	2009	241	31
Zhang	2011	148	31
Duynslaegher	2018	80	19
Mathieu	2015	278	54
Zhang	2017	229	37
Nakamura	2017	232	38
Klippenstein	2017	211	33
Otomo	2018	213	32
Shrestha	2018	264	34
Okafor	2019	130	42
Okafor (NH_3 alt mekanizması)	2019	67	21
Mei	2019	265	38
Stagni	2020	203	31

Kimyasal mekanizmalarının içermiş olduğu çok sayıdaki tür ve reaksiyonlar, bir yakıtın yanması sırasında meydana gelen temel reaksiyon yollarının ve sayısal modelleme sonuçlarının etkili bir şekilde analiz edilmesini zorlaştırmaktadır. Reaksiyon yolu analizi, bu gibi zorlukların üstesinden gelinmesi açısından oldukça faydalı bir araçtır. Özellikle, her bir reaksiyonun, türlerin oluşum veya yok olma hızları üzerine yapmış olduğu katkının belirlenmesinde önemli avantajlar sağlamaktadır [68].

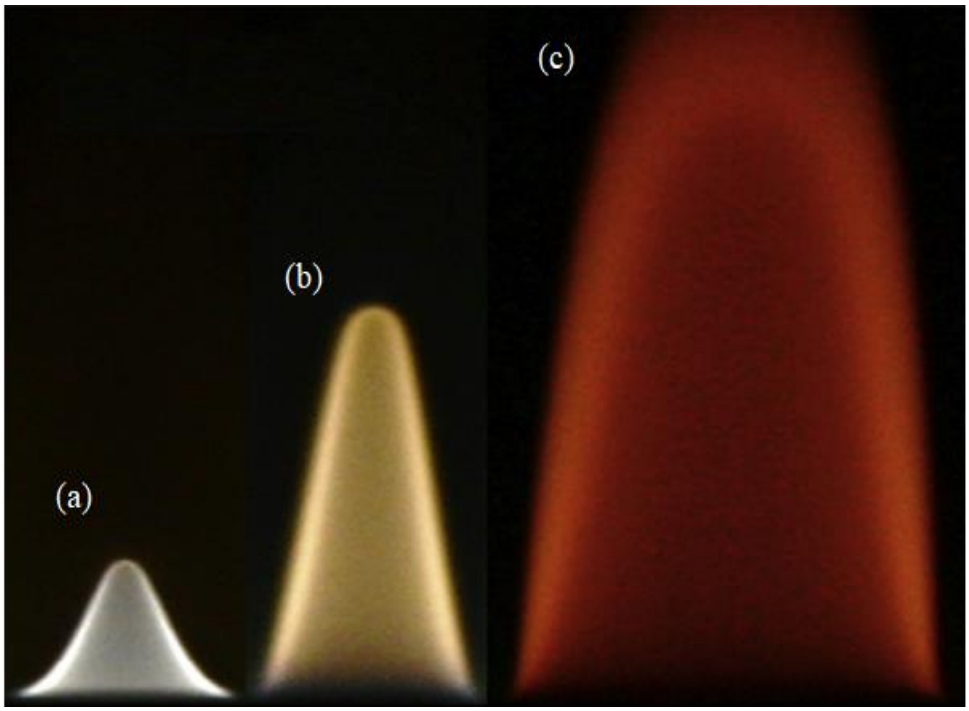
NH_3 gazının yanma karakteristiklerinin daha detaylı bir şekilde analiz edilmesi amacıyla, NH_3, NH_3/H_2, NH_3/CO ve NH_3/sentetik gaz yakıt bileşimlerinin yanmasına ilişkin reaksiyon yolu analizleri Şekil 3.1'de verilmiştir. Şekil 3.1'den görüldüğü gibi, NH_3,

NH_3/H_2, NH_3/CO ve NH_3/sentetik gaz yakıt bileşimlerinin yanması sırasında meydana gelen reaksiyon yolları büyük ölçüde birbirlerine benzerdir. Bununla birlikte, NH_3 gazının reaksiyon yolları üç ana rota şeklinde kategorize edilebilmektedir: (1) $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow NH \rightarrow N \rightarrow N_2$, (2) $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow HNO \rightarrow NO \rightarrow N_2O \rightarrow N_2$, (3) $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow N_2H_2 \rightarrow NNH \rightarrow N_2$. Şekil 3.1 incelendiğinde, yukarıda verilen üç ana reaksiyon yolunun ilk olarak, NH_3'ün, NH_2 oluşturmak üzere reaksiyona girmesiyle başladığı görülmektedir. Dolayısıyla, her yolun NH_3 reaksiyonuna oranı, NH_2'nin reaksiyon yolu vasıtasıyla belirlenebilmektedir. Ayrıca, NH_3 gazının yanma reaksiyonu için $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow NH \rightarrow N \rightarrow N_2$ yolunun daha baskın olduğu söylenebilir. Buna karşın, NH_3 gazına yapılan H_2, CO veya sentetik gaz eklentisiyle, $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow HNO \rightarrow NO \rightarrow N_2O \rightarrow N_2$ yolunun oranı artarken, $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow N_2H_2 \rightarrow NNH \rightarrow N_2$ yolunun oranı azalmaktadır. Bununla birlikte, CO, NH_3/hava alevinin üç farklı NH_3 reaksiyon yolunun oranları üzerinde en büyük etkiye sahipken, ardından sentetik gaz ve H_2 gelmektedir [48].



Şekil 3.1. NH_3/H_2, NH_3/CO ve NH_3/sentetik gaz karışımlarının reaksiyon yolları [48]

Yanma hızı, bir karışımın yanma davranışı üzerinde etkili olan önemli özelliklerden biridir. Ek olarak, bu özellik, bir alevin kararlılığı ya da geri tepmesi veya kopması gibi olayların karakterize edilmesine olanak sağlamakta olup, adyabatik düzlemsel gerilimsiz alev yapıları temel alınarak tanımlanmaktadır. Bununla birlikte, yanma hızı, bir alevin ısıl salım hızı ve sönme limiti gibi özellikleri ile ilişkilendirilmektedir. NH_3/hava alevinin yanma hızı, yaklaşık olarak 7 cm/s olup, bu değer, çoğu hidrokarbon yakıtların yanma hızlarına kıyasla oldukça düşüktür. NH_3/hava karışımının reaktivitesini, dolayısıyla yanma hızını herhangi bir karbon emisyonu meydana gelmeden arttırmanın en etkili yollarından biri ise, H_2 ile karıştırmadır [11,43].



Şekil 3.2. Anlık alev görüntüleri, (a) %20 NH_3, (b) %40 NH_3, (c) %80 NH_3 [39]

H_2 ile karıştırmanın NH_3 gazının alev yapısı üzerinde meydana getirdiği değişimlerin incelenmesi amacıyla, Şekil 3.2'de NH_3/H_2/hava karışımının, karışım içerisindeki farklı NH_3 miktarları (%20, %40, %80) için elde edilen anlık alev görüntüleri sunulmuştur. Şekil 3.2'ye göre, yakıt karışımı içerisindeki NH_3 miktarının artması, alev yapısının ve renginin önemli ölçüde değişmesine neden olmaktadır. Bununla birlikte, yakıt karışımı içerisindeki NH_3 miktarının %20 olduğu durumda alevin brülör çıkışına doğru yaklaştığı görülmektedir. Ek olarak, yakıt karışımı içerisindeki NH_3 miktarının %20'den %80'e yükseldiği durumda ise, alev uzunluğu 6 mm'den 28 mm'ye ulaşmış olup, bu olay, karışım içerisindeki NH_3 miktarının artmasıyla, reaksiyon bölgesinin brülör çıkışından

uzaklaştığının açık bir göstergesidir. NH_3 miktarının artması, karışımın yanma hızında bir düşüş meydana getirdiğinden, alev, brülör çıkışından uzaklaşma eğilimi göstermektedir. Aynı zamanda, karışım içerisindeki NH_3 miktarının %20, %40 ve %80 olduğu durumlar için, alev renginin sırasıyla beyazdan sarıya ve daha sonra turuncuya yakın bir renge dönmesi, NH_3'ün H_2 ile karıştırılmasının alev kimyasında önemli değişiklikler meydana getirdiğinin bir göstergesidir [39].

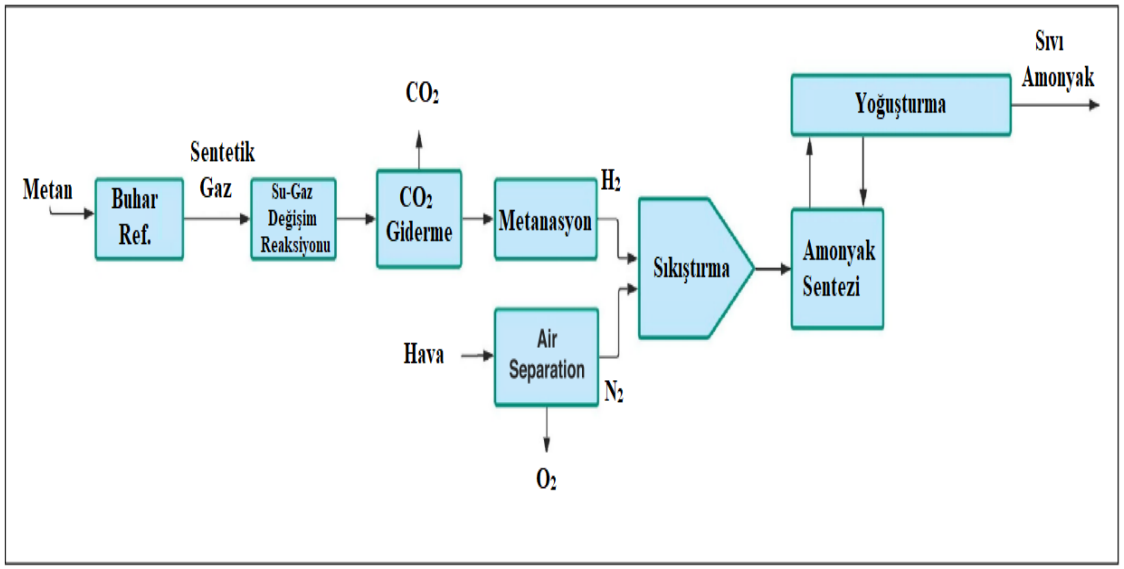
NH_3 gazının yanması ile ilgili bu bölümde verilen bilgiler genel olarak değerlendirildiğinde, NH_3'ün içermiş olduğu H_2 miktarı sayesinde, yanma sistemlerinde kullanılabilirliği açısından umut verici bir enerji kaynağı olduğu söylenebilir. Buna karşın, yanma karakteristikleri geleneksel hidrokarbonlara göre daha düşük olan NH_3'ün, çeşitli yakma yöntemleri ve stratejileri kullanarak yanma veriminin artırılması gerektiği de açıktır. Bu konuda yapılacak olan çalışmalardan olumlu sonuçlar elde edilmesi halinde, NH_3' ün gaz türbinleri, brülörler ve motorlarda kullanılabilir özellikte olması, çevresel, ekonomik ve teknolojik anlamda önemli katkılar sağlayacaktır.

3.1.1. Amonyak gazının elde edilmesi

NH_3, doğada hemen hemen yalnızca amonyum tuzları şeklinde bulunmaktadır. NH_3'ün doğal oluşumu, öncelikle azot içeren organik materyallerin ayrışması veya volkanik hareketler yoluyla meydana gelmektedir. Amonyum klorür, açıkta kalan ve içten içe yanan kömür yataklarının kenarlarında birikmektedir. Buna benzer birikimler, yanardağlarda da görülür. NH_3, kömür, linyit ve turba gibi yakıtların gazlaştırılması veya koklaştırılması gibi ticari proseslerin bir yan ürünüdür [69].

1840 yılında, Liebig tarafından mineral gübrelemenin doğası ve değeri keşfedildikten sonra, azot içeren bileşikler, mineral gübrelerin bir bileşeni olarak artan miktarda kullanılmışladır. Geçen yüzyılın sonunda, NH_3, kömürün kuru damıtılmasının bir yan ürünü olarak kok fırını tesislerinde ve gazhanelerde elde edilmeye başlanmıştır. Günümüzde, NH_3 en çok üretilen ikinci sentetik kimyasal üründür. Dünyada tüketilen NH_3'ün %90'ından fazlası, Alwin Mittasc tarafından bulunan bir demir katalizörünün kullanıldığı Fritz Haber ve Carl Bosh tarafından geliştirilen bir katalitik prosesten elde edilen azot ve hidrojen elementlerinden üretilmektedir. Genel olarak bu proseste hidrojen azot karışımı 400-500 °C sıcaklık aralığında ve 100 bar basınçta bir demir katalizör

üzerinden reaksiyona girerek NH_3 meydana getirmektedir [69]. Haber-Bosh prosesine ait basitleştirilmiş bir akış diyagramı Şekil 3.3'de verilmiştir.

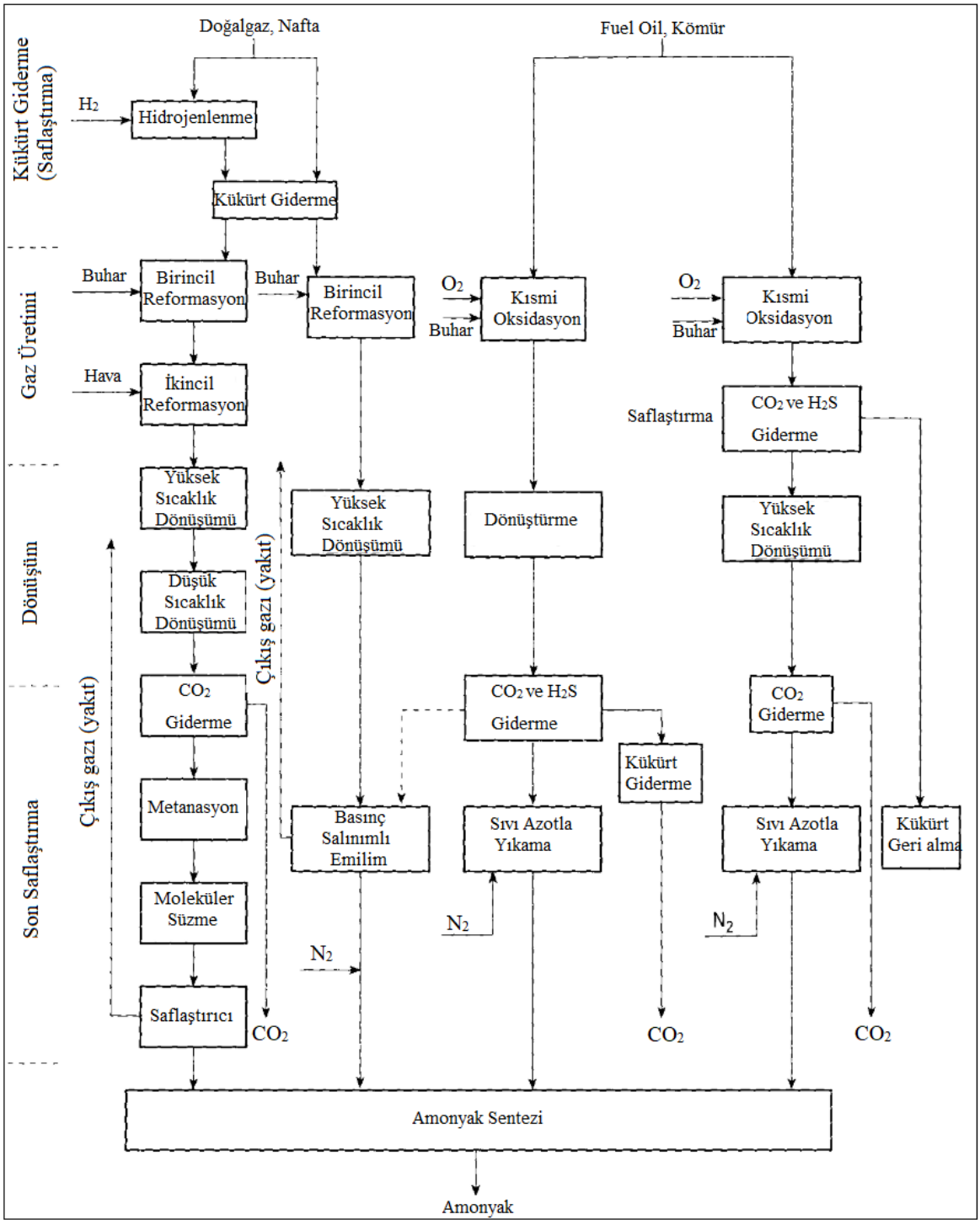


Şekil 3.3. Haber-Bosh prosesi akış diyagramı [70]

Saf hidrojen-azot karışımının elde edilmesi, amonyak üretiminin toplam maliyeti üzerindeki en yüksek paya sahiptir. Bu nedenle, yıllar geçtikçe sentetik gaz üretim teknolojisi üzerinde bazı değişiklikler gerçekleştirilmiştir. Günümüzde, amonyak üretim proseslerinden olan sentetik gaz hazırlanması ve saflaştırılması gibi işlemler üzerinde çeşitli gelişmeler olmuştur. Azot ve hidrojen elementleri, havada ve suda fazlasıyla bulunmaktadır. Bu elementler, tamamen fosil enerji kullanılarak fiziksel metotlarla veya kimyasal reaksiyonlarla söz konusu ortamlardan elde edilebilmektedirler. Söz konusu fosil yakıtlar, doğal gaz, sıvılaştırılmış petrol gazı (LPG), nafta ve daha yüksek petrol ürünleridir. Kömür veya kok ise sadece coğrafi veya ekonomik şartlar önemli olduğunda kullanılmaktadır [69].

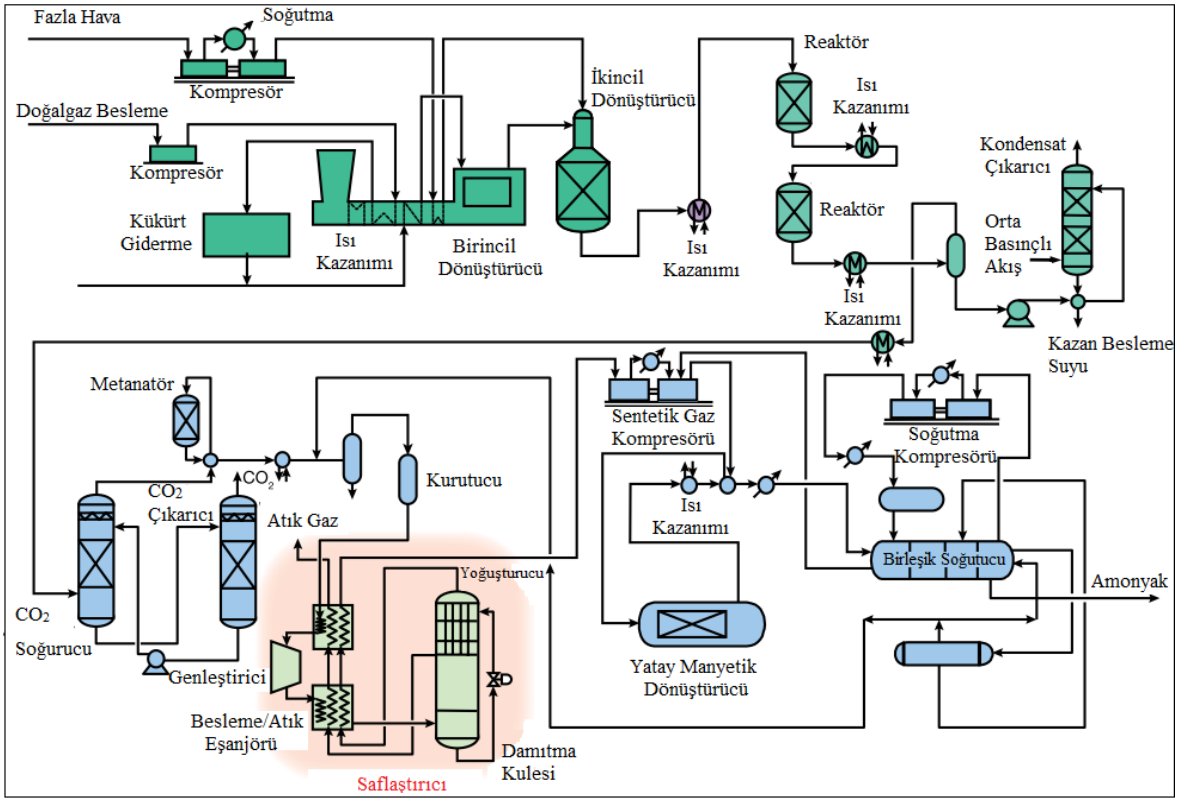
Endüstriyel uygulamalarda NH_3 üretiminin ana adımları aşağıdaki gibi alt bölümlere ayrılabilir ve bu adımlar Şekil 3.4' de detaylı olarak gösterilmiştir [69,71]:

- Sentetik gaz üretimi (Gaz hazırlama ve Gaz saflaştırma)
- Gaz sıkıştırma
- NH_3 sentezi



Şekil 3.4. Amonyak gazı üretimi için seçenekler [69]

21. yüzyılın ilk zamanlarında NH_3 üretim tesisleri ile ilgili sektörün önde gelen firmaları tarafından çeşitli gelişmeler yapılmıştır. Böylece mevcut tesisler ile üretim miktarı arttırılırken yapılan yeni tesislerle vasıtasıyla da çok daha fazla üretim kapasitelerine ulaşılmıştır. Şekil 3.5'de modern bir NH_3 üretim tesisinin elemanları gösterilmiştir [72].



Şekil 3.5. Modern bir amonyak üretim tesisinin elemanları [72]

3.2. Kömür Gazlarının Yanma Karakteristikleri ve Elde Edilmesi

Kömürden elde edilen yakıtlar genellikle gaz yakıtlardır ve bir gazlaştırma prosesinin ürünleri olduklarından dolayı çoğunlukla sentez gazı veya sentetik gaz olarak isimlendirilirler. Bu sentetik gazlar, bünyelerinde bulundurduğu yüksek orandaki H_2 sayesinde önemli miktarda enerji içeriğine sahiptirler. Bu nedenle, bu gazlara hidrojence zengin kömür gazları da denilmektedir. Hidrojence zengin kömür gazları, aynı zamanda içermiş oldukları CH_4 ile, doğalgaza karşı alternatif bir enerji kaynağı olarak da düşünülmektedirler.

Sentetik gazların yanmasına ilişkin olarak, geniş işletme koşullarını kapsayan, deneylerle tamamen doğrulanmış hesaplamalı akışkanlar dinamiği modellemelerinin ve güçlü reaksiyon mekanizmalarının kullanılması oldukça önemlidir. Böylece, alev sönmesi, geri tepme, alev kararlılığı, kendi kendine tutuşma gibi dinamik yanma özellikleri hakkında hassas tahminler yapılabilmektedir. Bu bölümde, kömür gazları gibi sentetik gazların yanma karakteristikleri ve bu yanma karakteristiklerinin yakıt içeriğindeki değişmelere bağlı olarak ne şekilde değişim gösterdiği hakkında genel bilgiler sunulmuştur.

Kömür gazlarının yanmasında, özellikle CO_2 üreten ana reaksiyonun $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$ olması, bu gazların yanması ile H_2 yanması arasında bir ilişki oluşmasına neden olmaktadır. Herhangi bir yakıt-oksitleyici karışımının reaktivitesi, serbest aktif radikallerin oluşumu ve bunların zincir reaksiyonları tarafından kontrol edilmektedir. Kömür gazının içerdiği CO'nun oksitlenmesi sırasında, hiçbir hidrojen atomunun bulunmaması dolayısıyla, zinciri başlatabilen reaksiyonlar (O atomlarının CO ile meydana getirmiş olduğu reaksiyonlar) genel olarak yavaştır. Yakıt bileşimi içerisinde çok az miktarda H_2 içeren bir türün bulunması, CO oksidasyon hızının çok büyük oranda artmasını sağlamaktadır. Bunun en önemli nedeni, H_2 içeren reaksiyonlar yoluyla, serbest radikallerin çok daha hızlı şekilde oluşmaya başlamasıdır. Bu nedenle, kömür gazları yakan sistemlerin tasarımında H_2'nin yanma karakteristiklerinin iyi anlaşılması, kömür gazını alevinin yayılması, yanma ve sönme limitleri gibi özelliklerinin belirlenmesi açısından oldukça önem ihtiva etmektedir [59].

Çizelge 3.2'de kömür gazlarının yanması sırasında önemli rol oynayan ana reaksiyonlar gösterilmiştir. Çizelge 3.2'de verilen reaksiyonlar arasında en etkili zincir reaksiyon $H + O_2 \rightarrow O + OH$ (R1) iken, ikinci en önemli reaksiyon ise OH ve O radikallerinden daha az bir reaktiviye sahip olan HO_2 radikalinin meydana gelmesini sağlayan $H + O_2(+M) \rightarrow HO_2(+M)$ (R2) reaksiyonudur. HO_2 radikalinin yeniden aktif radikal oluşturması için gereken zaman ölçeği, genel reaksiyonun zaman ölçeğine kıyasla oldukça fazladır. (R2) ve (R3) reaksiyonları, endotermik bir reaksiyon olan $H_2O_2(+M) \rightarrow OH + OH$ (R4) tarafından yönetilmekte olup, yüksek oranda ekzotermik özelliğe sahip olan reaksiyonlardır. Yanma sırasında yükselen sıcaklıklar, $HO_2 + H_2 \rightarrow H_2O_2 + H$ (R5) reaksiyonu vasıtasıyla, artan bir HO_2 radikal akışı üretir ve (R5), H radikallerini meydana getirir. Meydana gelen H radikalleri, $HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$ (R6) ve $HO_2 + H \rightarrow OH + OH$ (R7) reaksiyonları vasıtasıyla fazla miktardaki HO_2 radikalleri ile reaksiyona girer. Burada, (R6) bir zincir sonlandırma reaksiyonu iken, (R7) ise bir zincir uzatımı reaksiyonudur. Bu nedenle, genel reaksiyon yolunda, başlangıçta düz zincir olan bir sistem (R2 → R3 → R4), sıcaklık artışının bir sonucu olarak zincir uzamasına (R2 → R5 → R7) dönüşebilir [59].

Kömür gazları çoğunlukla H_2 ve CO' dan meydana gelmesine rağmen, bileşimlerinde bulunan diğer türler, kömür gazlarının yanma karakteristikleri üzerinde önemli etkilere sahiptir. Bu türler, yeni radikal oluşumunu veya yeniden birleşme prosesini harekete

geçirerek, kömür gazının yanma davranışını değiştirmektedirler. Kömürün gazlaştırılması sırasında azot ve sülfür oksitler gibi bileşenler meydana gelebilmektedir. Kömür gazının içerisinde NO_x gibi türlerin çok az miktarlarının bulunması bile, HO_2 radikali ile ilgili reaksiyonları büyük ölçüde etkileyerek, kömür gazının yanma davranışını değiştirmektedir. NO_x, $NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH$, (R8) ve $NO_2 + H \rightarrow NO + OH$ (R9) reaksiyonları vasıtasıyla HO_2 radikali için farklı bir reaksiyon yolu meydana getirmektedir. Bu reaksiyon yolu, H atomları açısından (R2) reaksiyonu ile rekabet halindedir. Bu nedenle, (R8) ve (R9), OH radikalinin çok hızlı şekilde oluşumuna neden olan katalitik bir dönüşüm oluşturur. Böylece, sistemin ateşleme limitinin çok altındaki sıcaklıklarda hızlı yakıt tüketimi meydana gelmektedir. Katalitik dönüşümün aktif olduğu sıcaklık aralığında, yakıt bileşiminde bulunan NO_x gibi türlerin az bir miktarı, genel kimyasal reaksiyon hızını önemli ölçüde artırmaktadır [59].

Çizelge 3.2. Kömür gazı yanmasında kritik reaksiyonlar [59]

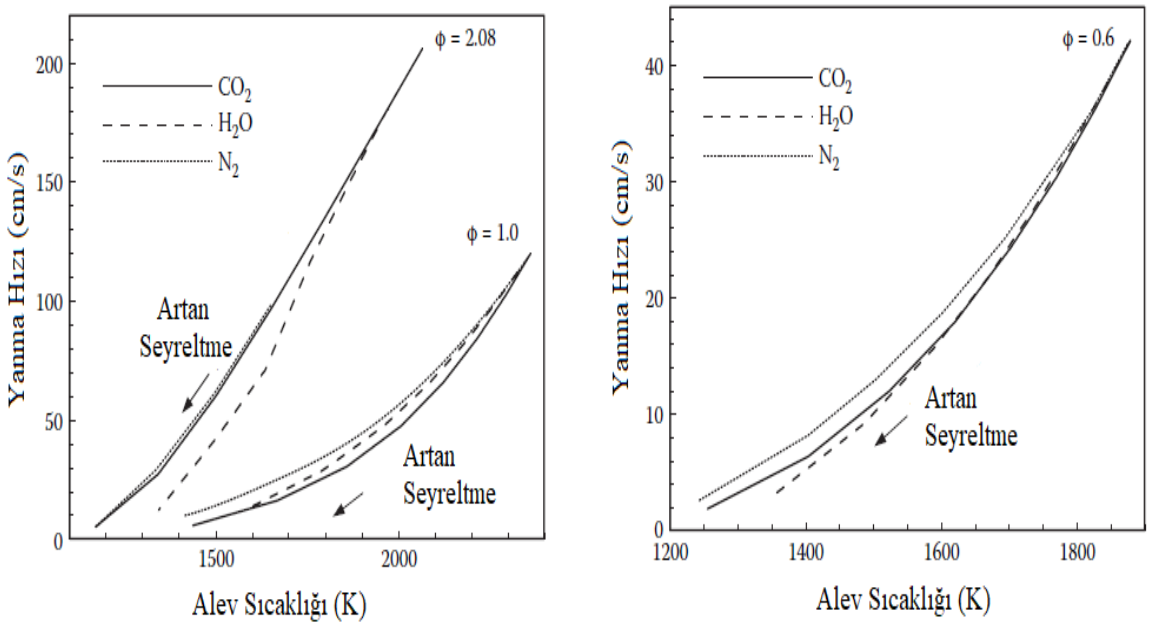
Reaksiyon Numarası	Reaksiyon	Reaksiyon Numarası	Reaksiyon
R1	$H + O_2 \rightarrow O + OH$	R10	$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$
R2	$H + O_2(+M) \rightarrow HO_2(+M)$	R11	$HCO + M \rightarrow H + CO + M$
R3	$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	R12	$HCO + O_2 \rightarrow HO_2 + CO$
R4	$H_2O_2(+M) \rightarrow OH + OH$	R13	$CO + HO_2 \rightarrow CO_2 + OH$
R5	$HO_2 + H_2 \rightarrow H_2O_2 + H$	R14	$HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$
R6	$HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$	R15	$H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$
R7	$HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	R16	$O + H_2 \rightarrow H + OH$
R8	$NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH$	R17	$H + OH + M \rightarrow H_2O + M$
R9	$NO_2 + H \rightarrow NO + OH$		

Kömür gazlarının yanmasında kritik öneme sahip diğer reaksiyonlar ise, aynı zamanda hidrokarbon alevlerin de yanma hızları üzerinde büyük etkiye sahip olan $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$ (R10), $HCO + M \rightarrow H + CO + M$ (R11) ve $HCO + O_2 \rightarrow HO_2 + CO$ (R12) reaksiyonlarıdır. $CO + HO_2 \rightarrow CO_2 + OH$ (R13) ve $HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$ (R14)

reaksiyonları ise hız bağıntıları açısından birbirleri ile ilişkileri bulunan ve ortak HO_2 radikali içeren reaksiyonlardır. Bunlardan (R13) reaksiyonu, reaksiyon hızı açısından 10 kat daha düşük bir değere sahip olmasından dolayı, bu reaksiyon, kömür gazlarının yanmasındaki diğer önemli reaksiyonlara göre daha az oranda bir ilgi görmüştür. (R14) reaksiyonu, oksijen açısından zengin yanma şartları altına bilhassa önemlidir. Örneğin, (R14) reaksiyonu, ortamda fazla oksijen olması durumunda, kömür gazlarının yanma karakteristikleri üzerinde oldukça etkili olan O ve OH radikallerinin oluşum miktarlarını değiştirerek, yanma sırasında meydana gelen sıcaklık ve emisyon seviyelerinde önemli etkiler oluşturabilmektedir. Bununla birlikte, ortamdaki basıncın artması, (R14) reaksiyonunu HO_2 radikali açısından (R7) reaksiyonu ile rekabet haline sokmaktadır. (R7) reaksiyonu, yüksek basınç koşulları altında OH radikalinin oluşum miktarı açısından başlıca kaynaklardan biri olmasından dolayı, (R10) reaksiyonunun gerçekleşmesinde, CO ile reaksiyona girebilecek OH radikalinin miktarını belirlemektedir. Bu nedenle, (R7) ve (R14) gibi HO_2 içeren ve OH radikali için rekabet halinde olan reaksiyonlar, CO türünün oksidasyon hızının OH radikalleri tarafından belirlenmesinden dolayı, kömür gazlarının yanmasında önemli hale gelmektedirler. $O + H_2 \rightarrow H + OH$ (R16) reaksiyonu ise bir dallanma reaksiyonudur ve O radikallerinin oluşum miktarlarının ortamdaki fazla oksijen nedeniyle artmasından dolayı, bu reaksiyon, özellikle fakir yanma koşulları altında önemli hale gelmektedir. Kömür gazlarının fakir yanma koşulları altında, aynı zamanda, (R1) reaksiyonu da baskın bir rol oynamaktadır. Son olarak, $H + OH + M \rightarrow H_2O + M$ (R17) reaksiyonu ise, yüksek oranda ekzotermik bir reaksiyondur ve kömür gazlarının yanma hızları üzerinde önemli bir etkiye sahiptir [59].

Kömür gazları, içermiş oldukları yanabilir bileşenlerin dışında, aynı zamanda CO_2, N_2 ve H_2O gibi seyrelticiler de bulundurmaktadırlar. Bu seyrelticiler, adyabatik alev sıcaklığı, kimyasal kinetik hızlar ve ışınımla ısı transferi gibi faktörler üzerindeki değişiklikler yoluyla, kömür gazlarının alev yapılarını etkilemektedirler. Örneğin, yakıt bileşimi bünyesinde bulunan seyrelticilerin miktarındaki artış, alev sıcaklığının düşmesine, dolayısıyla, reaksiyon hızlarında meydana gelen düşüşe bağlı olarak yanma hızlarında azalmalara neden olmaktadır. Diğer taraftan, kömür gazları içerisinde bulunan bazı seyrelticiler "inert" değildirler. Örneğin, CO_2 seyreltmesinin kimyasal kinetik etkileri, ana CO oksidasyon reaksiyonu olan $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$ reaksiyonu ile ortaya konulabilir. Kömür gazının içerisindeki CO_2 seyreltme seviyesinin arttırılması, ters reaksiyon hızlarını yükselmekte olup, CO oksidasyonunun ve H atomu üretim hızlarının azalmasına neden

olmaktadır. Dolayısıyla, bu olay, alev yayılma hızlarını düşürmektedir. Bu durumun daha detaylı olarak irdelenmesi amacıyla gerçekleştirilen kimyasal kinetik çalışmalarda, CO_2'nin mevcut olduğu ve CO_2 ile aynı özgül ısıya sahip fakat inert bir türün bulunduğu iki farklı karışımın yanma hızları karşılaştırılmıştır. Elde edilen sonuçlar, CO_2 ile seyreltilmiş karışımların alev hızlarının daha düşük olduğunu göstermiştir. Bu kinetik etki, H atom konsantrasyonunun öneminden dolayı, fakir yanma şartları altında yakılan kömür gazlarının yanma hızları üzerinde daha fazla bir etkiye sahip olacaktır. Bu durumun temel nedeni, H atomunun ana dallanma ($H + O_2 \rightarrow O + OH$) ve sonlandırma ($H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$) reaksiyonlarını kontrol ediyor olmasıdır. Ek olarak, kömür gazları içerisinde bulunan seyrelticiler, ışınımla ısı transferi nedeniyle alev yayılması üzerinde de bir etki meydana getirirler. Örneğin, CO_2 ve H_2O, N_2 ve O_2'nin aksine kızılötesi radyasyonun etkili birer yutucu ve yayıcılarıdır. Karışım içerisinde bulunan CO_2 veya H_2O gibi türler, sıcak yanma sonu ürünlerinden yayılan enerjinin, yeniden yutulmasına neden olmaktadırlar. Alev bölgesine transfer edilen bu ısıl enerji, kömür gazı alevinin hızını yükseltirken, aynı zamanda alevlenebilirlik limitini genişletmektedir. Bununla birlikte, reaksiyon bölgesinin başlangıç kısmında etkili bir radyasyon yayıcının bulunması, aynı zamanda, artan ısı kayıplarına ve düşük alev hızlarına da yol açabilmektedir. Son olarak, Şekil 3.6 ve Çizelge 3.3'de sırasıyla, kömür gazları içerisinde bulunan seyrelticilerin yanma hızları, alev sıcakları ve alev karakteristikleri üzerine olan etkileri gösterilmiştir. [59].



Şekil 3.6. Seyrelticilerin alev sıcaklığı ve yanma hızı üzerine etkisi [59]

Çizelge 3.3. Seyrelticilerin alev karakteristikleri üzerine etkisi [59]

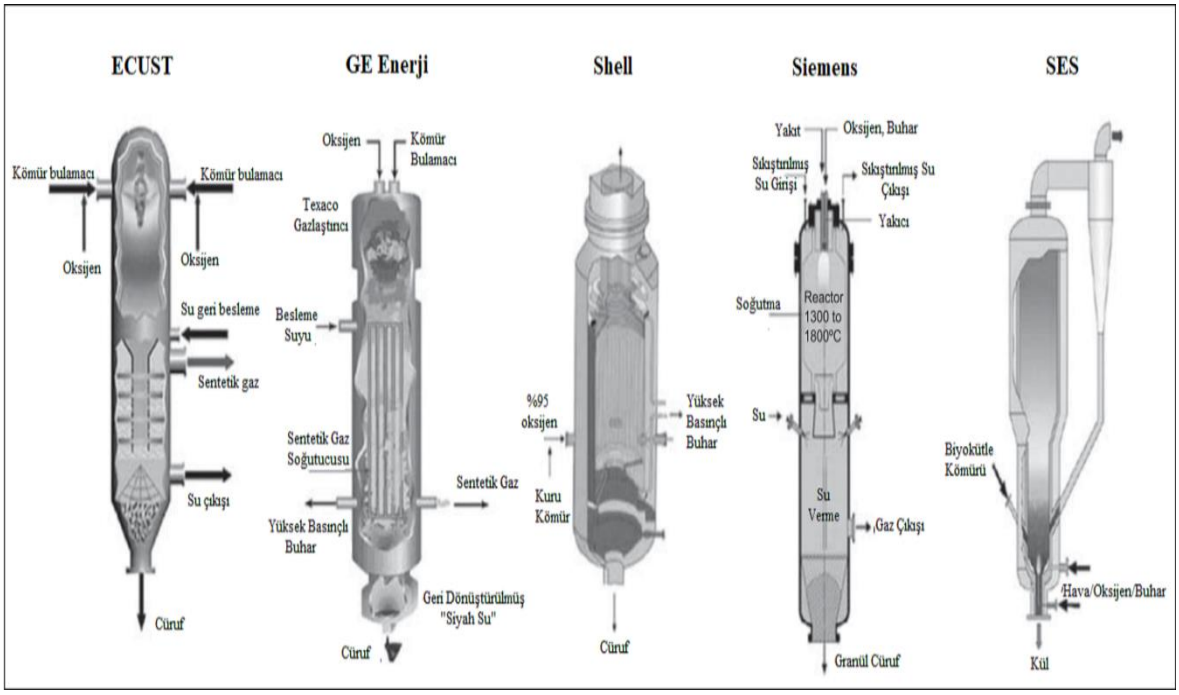
Seyreltme Derecesi	Seyreltici Bileşimi CH_4:H_2O:CO_2:N_2	Yanma Hızı (cm/s)	Adyabatik Alev Sıcaklığı (K)
%0	0:0:0:0	120	2362
%5	5:0:0:0	121	2371
	0:2,5:1,25:1,25	114,3	2334
%10	5:2,5:1,25:1,25	101,7	2322
	0:5:2,5:2,5	108,1	2311
%20	5:7,5:3,75:3,75	89,2	2271
	0:10:5:5	94,4	2250
%45	5:20:10:10	53,7	2090
	0:22,5:11,25:11,25	53,85	2020

3.2.1. Kömür gazlarının elde edilmesi

Katı yakıtlardan yanıcı gaz üretimi uzun zamandır gerçekleştirilmektedir. “Gazlaştırma” terimi, en geniş anlamıyla, karbon içerikli herhangi bir yakıtın kullanılabilir bir ısıl değere sahip olan gaz halindeki bir ürüne dönüştürülmesi diye tanımlanabilir. En önemli gazlaştırma teknolojileri, piroliz, kısmi oksidasyon ve hidrojenasyondur. Çoğunlukla, gerçekleştirilen ilk gazlaştırma işlemleri, kullanılan hammaddenin oksijensiz ortamda ısıtılması esasına dayanan piroliz yöntemi ile yapılmıştır. Buna karşın, son zamanlarda ise piroliz yöntemi ile gaz üretiminin önemi azalarak, bu proses daha az kullanılmaya başlanılmıştır. Günümüzde en yaygın olarak kullanılan yöntem kısmi oksidasyon yöntemidir. Kısmi oksidasyon yönteminde, hammadde yakıttan çeşitli oranlarda hidrojen ve karbon monoksit gibi bileşenler içeren sentetik gazlar üretilmektedir. Ayrıca, oksitleyici olarak saf oksijen, hava veya buhar kullanılmaktadır. Kısmi oksidasyon yöntemi, kömür, artık yağlar ve doğal gaz gibi katı, sıvı ve gaz yakıtlara uygulanabilmektedir. Hidrojenasyon ise gazlaştırma teknolojilerinin gelişmesi sırasında kısa bir süre için ilgi görmüştür [73].

Kömürün gazlaştırma işlemi yaklaşık olarak 200 yıldır gerçekleştirilmektedir. 1970’li yıllarda meydana gelen petrol krizleri sonucunda, kömürden faydalanma teknolojilerine olan ilgi yeniden canlanmıştır. Bu teknolojilerden biri olan gazlaştırma entegreli birleşik güç santrali (IGCC), kömürden düşük emisyonlarla yüksek verimlilikte güç üretimini mümkün kılmıştır. IGCC teknolojisi ile verimli şekilde güç üretiminin gerçekleştirilmesi

üzerine, bu yöntem ile ilgili daha fazla araştırma ve geliştirme çalışmaları yapılmıştır. Böylece, ilerleyen yıllarda söz konusu prosesin ticarileşmesi sağlanmıştır. Yakın zamanda ise, bazı kömür gazlaştırma tesislerinde karbon yakalama veya ayırma ile ilgili başarılı çalışmalar gerçekleştirilmiştir. Şekil 3.7'de başlıca kömür gazlaştırma teknolojileri gösterilmiştir [74].



Şekil 3.7. Başlıca kömür gazlaştırma teknolojileri [74]

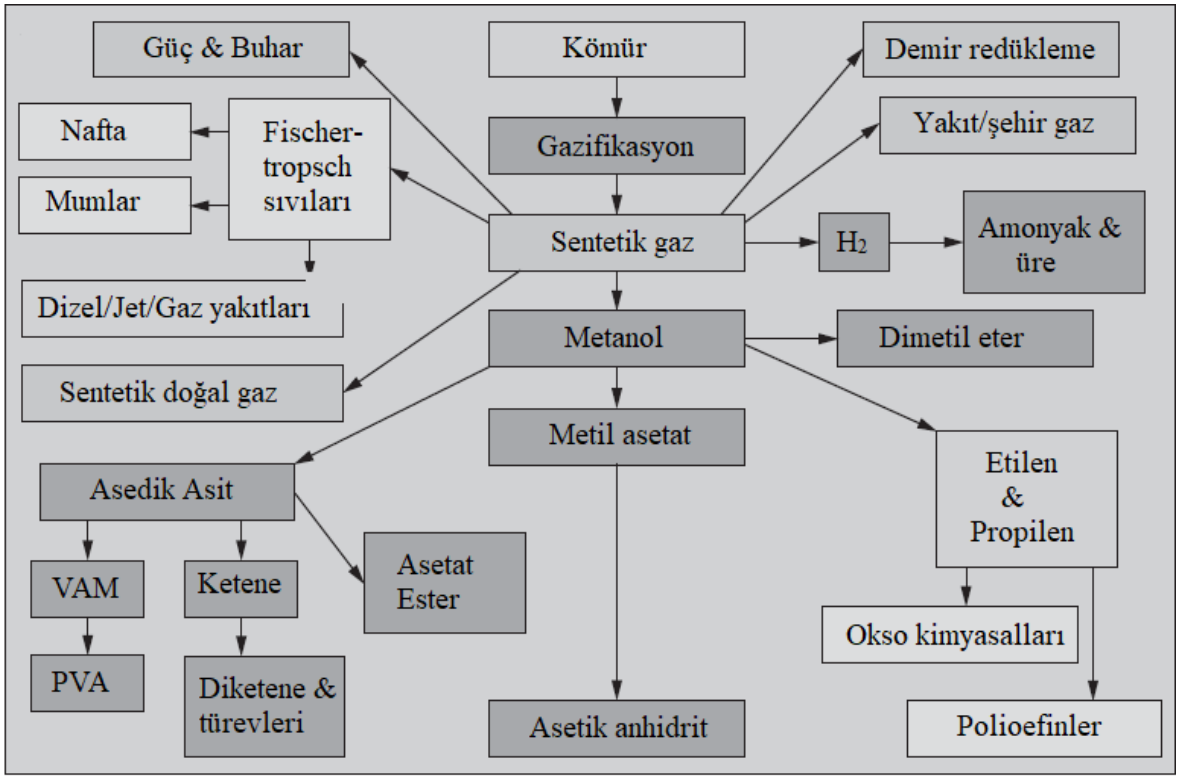
Şekil 3.7'de Doğu Çin Bilim ve Teknoloji Üniversitesi (ECUST), General Electric (GE), Shell, Siemens ve Synthesis Energy Systems (SES) firmaları tarafından geliştirilen kömür gazlaştırma teknolojileri gösterilmiştir. ECUST tarafından geliştirilen sistemde bir kömür-su bulamacı (CWS) gazlaştırma teknolojisi kullanılmaktadır. Bu sistem, %98,5'den daha yüksek oranlarda karbon dönüşümü sağlayarak, 1,0 ile 8,7 MPa arasında yüksek basınç ve 1200-1400 °C gibi sıcaklık şartları altında günlük 750-4000 ton kömür kapasitesi ile sentetik gaz üretimi gerçekleştirebilmektedir. Shell kömür gazlaştırma prosesi (SCGP) ile sentetik gaz üretiminde ise, kömür, linyit ve petrol koku gibi çeşitli hammaddeler ile çalışabilen basınçlandırılmış bir gazlaştırıcı kullanılmaktadır. Siemens gazlaştırma prosesi, ilk kez 1975 yılında Alman Yakıt Araştırma Enstitüsü (DBI) tarafından başlatılmıştır. Bu sistemde, 40-46 bar basınç ve 1300-1800 °C gibi yüksek sıcaklık aralıklarında çalışabilen kuru beslemeli bir gazlaştırıcı bulunmaktadır. General Electric (GE) firması tarafından geliştirilen gazlaştırma sistemi ise geniş çeşitlilikteki hammaddeler için 45 yıldan fazla

kullanılmaktadır. GE gazlaştırma teknolojisi, tek aşamalı, aşağı beslemeli ve ısıya dayanıklı malzeme ile kaplanmış bir reaktör içermektedir. SES firması ise geliştirdiği kömür gazlaştırma teknolojisi açısından önemli firmalar arasındadır. Kömürün SES gazlaştırma teknolojisi (SGT) ile gazlaştırılması, akışkan yataklı bir gazlaştırıcı vasıtasıyla gerçekleştirilmektedir. Üretilecek sentetik gazın son kullanımına bağlı olarak bu teknolojide kullanılan gazlaştırıcı, işletme basıncı aralığının 3 ila 30 bar, sıcaklığın ise 850 ila 1000 °C arasında olduğu şartlar altında çalışmaktadır [74].

Gazlaştırma ile elde edilen kömür gazları

Çeşitli kömür gazlaştırma prosesleri sonucunda üretilen sentetik gazların içerdiği bileşenler, kullanılan gazlaştırma teknolojisine bağlı olarak birbirlerinden farklılık gösterebilirler. Aynı zamanda, kullanılan kömürün yapısı, oksijenin saflığı ve gazlaştırma şartları (sıcaklık ve basınç) da elde edilen kömür gazının bileşimini etkilemektedir [75].

Kömürün gazlaştırılması prosesi ile elde edilen başlıca ürünler Şekil 3.8'de gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi, kömürün gazlaştırılması ile sıvı yakıtları da içeren geniş aralıkta bir ürün yelpazesi meydana gelmektedir. Ek olarak, üretilen gazlar, özellikle su gaz dönüşümü veya metanasyon gibi proseslerde kullanılmadan önce, içeriğindeki partiküller veya kükürtten arındırılmaktadır. Kömürün gazlaştırılması prosesi ile elde edilen gazlar, düşük kalorili, orta kalorili ve yüksek kalorili olmak üzere üçe ayrılır. Bu gazlar ile ilgili detaylı bilgiler aşağıda sunulmuştur [76].



Şekil 3.8. Kömürün gazlaştırma ürünleri [76]

Düşük kalorili gazlar

Kömür gazının üretimindeki oksidasyon işlemi hava ile yapıldığında, oksijenin havadan ayrıştırılmaması nedeniyle ürün olarak düşük kalorili kömür gazları meydana gelmektedir (5,6-11,2 MJ/m^3). Aynı zamanda, düşük kalorili kömür gazları, kömürün yerinde gazlaştırılmasının olağan bir ürünüdür. Kömürün bulunduğu yerde gazlaştırılması, madencilik işlemlerinin yapılamadığı veya ekonomik olmadığı durumlarda kömürden enerji elde edilmesine olanak sağlamaktadır [76].

Düşük kalorili kömür gazlarının üretimi, yüksek sıcaklık şartları altında gerçekleştirilir. Üretim prosesi sırasında çok sayıda yan reaksiyon ile birçok önemli kimyasal tepkime meydana gelmektedir. Bu gazlar, çeşitli yüzde oranlarında en az dört farklı ana bileşenden oluşmaktadırlar. Çok az miktarda metan gazı da beşinci bir bileşen olarak karşımıza çıkmaktadır. Düşük kalorili kömür gazları hacimce %33 ila % 55 oranları aralığında azot gazı içermektedirler. Yakıtın içerisinde bu derecede yüksek miktarda azot gazının bulunması, elde edilen sentetik gazın "düşük kalorili kömür gazı" olarak tanımlanmasına neden olmaktadır. Bununla birlikte, üretilen kömür gazı içerisindeki azot, gazın kimyasal

senteze olan uygunluğunu da kısıtlamaktadır. Düşük kalorili kömür gazları içerisinde azotun dışında yanıcı olmayan bileşenler olarak su buharı ve karbon dioksit gazı da bulunmaktadır. Gazın içerisindeki karbon dioksit çeşitli kimyasal yollarla ayrıştırılabilirken, su buharı ise buharlaşma yolu ile giderilebilmektedir [76].

Düşük kalorili kömür gazları içerisindeki yanabilir bileşenler hidrojen ve karbon monoksittir. Gazın içerisindeki H_2/CO oranı, yaklaşık olarak 2:3 ila 3:2 aralığında değişmektedir. Ayrıca, gazın sahip olduğu düşük miktardaki metan gazı da yakıtın ısıl değerini kayda değer derecede arttırmaktadır. Yukarıda anlatılan bileşenlere kıyasla daha az öneme sahip olan başka bir bileşen de hidrojen sülfürdür. Meydana gelen hidrojen sülfürün oranı hammadde olarak kullanılan kömürün içerisindeki kükürt miktarına bağlıdır. Yakıtın, sahip olduğu hidrojen sülfürden çeşitli işlemler uygulanarak tasfiye edilmesi gerekmektedir. Ek olarak, düşük kalorili kömür gazları, yanma sistemlerinde yakıt olarak kullanılabilmekte olup, amonyak ve metanol gibi gazların sentezlenmesinde, bu gazlardan istifade edilmektedir [76].

Orta kalorili gazlar

Orta kalorili kömür gazlarının ısıl değerleri 11,2 ile 20,5 MJ/m^3 aralığında değişmektedir. Bu tip gazların bileşimleri düşük kalorili kömür gazları ile benzerdir ama içeriklerinde düşük kalorili kömür gazları kadar azot bulundurmazlar. Orta kalorili kömür gazlarının içeriğindeki yanabilir bileşenler hidrojen ve karbon monoksittir. Ek olarak, orta kalorili kömür gazlarının uçuculuğu düşük kalorili kömür gazlarına göre daha fazladır. Düşük kalorili kömür gazlarında olduğu gibi bu tip kömür gazları da, yanma sistemlerinde yakıt olarak ya da kombine bir güç çevrimindeki gaz türbinini çalıştırmak için kullanılabilir. Bununla birlikte, orta kalorili kömür gazları, metanasyon yöntemi ile metan, Fischer-Tropsch metodu ile yüksek hidrokarbonlar, metanol ve çeşitli sentetik kimyasallar elde etmek için uygun yapıdadırlar [76].

Orta kalorili kömür gazlarının üretilmesi için kullanılan reaksiyonlar düşük kalorili kömür gazlarını üretmek için kullanılanlarla aynıdır. Bu iki kömür gazının üretimindeki en önemli fark, orta kalorili kömür gazlarının elde edilmesinde azotun sistemden uzaklaştırılması için saf oksijen kullanılmasıdır [76].

Orta kalorili kömür gazlarındaki H_2/CO oranı 2:3 ile 3:1 arasında değişiklik gösterir. Düşük kalorili kömür gazlarına kıyasla orta kalorili kömür gazlarının ısıl değerinin daha yüksek olması, bu tip kömür gazlarının içerdiği metan ve hidrojen miktarının daha yüksek, karbon dioksit içeriğinin ise daha az olması ile ilgilidir [76].

Yüksek kalorili gazlar

Yüksek kalorili gazlar esasen saf metandır ve çoğu zaman sentetik doğal gaz ya da SNG (substitude natural gas) olarak ifade edilir. Ek olarak, bir gaz karışımını yüksek kalorili gaz olarak nitelendirmek için karışım içerisindeki metan oranının %95 oranlarında olması gerekmektedir. Yüksek kalorili kömür gazlarının ısıl değeri 36,5-40,2 MJ/m^3 arasında değişmektedir [76].

Yüksek kalorili gazların sentezlenmesi için hidrojen ve karbon monoksitin katalitik reaksiyonunun gerçekleşmesi gerekmektedir. Bu reaksiyon Eş. 3.2'de gösterilmiştir. Katalizörün olumsuz anlamda etkilenmemesi için beslenen gazların oldukça saf olması gerekmektedir. Reaksiyon sonucunda yüksek miktarda su buharı da meydana gelmektedir. Ayrıca, karbon monoksitin tamamen reaksiyona girmesini sağlamak için tepkimedeki hidrojen miktarı biraz fazla tutulmakta, fakat bu küçük hidrojen fazlalığı gazın kalorifik değerini düşürmektedir [76].

$$3H_2 + CO \leftrightarrow CH_4 + H_2O \qquad (3.2)$$

4. HESAPLAMALI AKIŞKANLAR DİNAMİĞİ (HAD) İLE YANMA ANALİZİ

Çalışmanın bu bölümünde, yanmanın hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) ile modellemesi hakkında genel bilgiler verilmiş olup, kütlenin, momentumun ve enerjinin korunumu esasına dayanan temel eşitlikler sunulmuştur. Ayrıca, bu tez kapsamındaki sayısal çalışmalarda kullanılan türbülans ve radyasyon modelleri ile ilgili detaylara da bu bölümde yer verilmiştir.

Hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD), bir yanma odası içerisindeki ısı transferini, akışkan akışını ve kimyasal reaksiyonları modellemek için kullanılan nümerik bir araçtır. Bu araç birçok faktörden dolayı son yıllarda popülerlik kazanmıştır. Bu faktörlerden bir tanesi neredeyse tüm işletmeler tarafından uygun bir maliyetle elde edilebilen daha güçlü bilgisayarların üretilebiliyor olmasıdır. Her yeni nesil bilgisayar donanımı, daha düşük maliyetlerle daha yüksek hız ve hafızaya sahip olarak piyasaya sürülmektedir. Bugün kullanılan kişisel bilgisayarlar sadece birkaç yıl önce "iş istasyonu" olarak tanımlanan bilgisayarlardan daha güçlüdür. Hesaplamalı akışkanlar dinamiği yazılımlarının popülerlik kazanmasındaki diğer bir neden ise, bu yazılımların artık makul fiyatlarla kullanıcılara sunuluyor olmasıdır. Hem genel hem de özel uygulamalar için kullanıcılar tarafından elde edilen bu yazılımlar, bünyelerinde destek paketlerini de kapsamaktadırlar. Ek olarak, son geliştirilen HAD yazılımlarının problemlere ait verilerin girişi ve sonuçların gözlemlenmesi açısından kolay kullanım olanağı sağlaması da bu yazılımların yaygınlaşmasına neden olan önemli faktörlerden biridir. HAD uygulamalarının benimsenmesindeki diğer önemli bir faktör de fizikteki ve kullanıcıya sunulan alt model sayısındaki gelişmelerdir. Bu gelişmeler ile sıkıştırılabilir veya sıkıştırılamaz, viskoz veya viskoz olmayan, laminer veya türbülanslı, reaktif veya reaktif olmayan, çok fazlı ve diğer birçok akış türünü modellemek mümkün olmaktadır. Ayrıca, termal radyasyon, türbülans, kurum ve kirlilik kimyası gibi farklı alt model seçenekleri de kullanılabilmektedir. Yukarıda anlatılan faktörler göz önüne alındığında HAD uygulamalarının ilerleyen dönemde daha da yaygınlaşması beklenmektedir [77].

Bir yanma sisteminin modellenmesinin birçok farklı nedeni olabilir. Bu nedenlerden en önemlisi, yanma sisteminin yapılandırılmasında uygun şartların elde edilebilmesi için üretimden önce bir öngörü kazanılmasıdır. Burada bahsedilen uygun şartlar farklı insanlar

için farklı anlamlar ifade edebilir. Şartların uygun hale getirilmesi veya optimizasyon, ısıl verim, kirletici emisyonların azaltılması, yanma odası veriminin en üst düzeye çıkarılması, işletme maliyetlerinin azaltılması veya bu faktörlerin bazılarının birleşimi anlamına gelmektedir. Modellemenin bir diğer nedeni de yeni teknolojilerin geliştiriliyor olmasıdır. Böylece, yeni geometriler, tam bir yanma sisteminin oluşturulmasına kıyasla nispeten daha kısa sürelerde analiz edilebilir. İdeal bir modelleme, yanma sisteminde gerçekleştirilmesi planlanan yeni tasarımı doğrulamak için deneyler ile bağlantılı olarak yapılmaktadır. Modelleme, belirli bir yanma sistemi tasarımının gerçek anlamda test edilmesine gerek kalmadan doğrulanabilmesine olanak sağladığından, prototip geliştirme zamanı ve maliyeti açısından önemli derecede avantaj sağlamaktadır. Aynı zamanda, mevcut bir yanma sistemi için çok riskli veya pahalı olabilecek farklı senaryoların test edilmesi amacıyla da kullanılmaktadır. Örnek olarak, bir cam üreticisi kullandığı mevcut bir ön ısıtma sisteminde hava yerine saf oksijen kullanımının etkilerini değerlendirmek isteyebilir. Son olarak, modelleme, yanma sistemleri için uygun güvenlik ekipmanlarının tasarlanmasında olası tehlikeli durumların değerlendirilmesi amacıyla da kullanılmaktadır [77].

Yanma sistemlerinin HAD modellemesinin risklerinden en önemlisi sonuçlara çok fazla güvenilmesidir. Eğer modelleme uygun olarak doğrulanmamışsa, elde edilen sonuçlar yüksek oranda riskli olabilir. Bundan dolayı kullanıcı sağduyulu davranmalı ve sonuçları garanti edilenin ötesine çok fazla taşımamalıdır. Örneğin, çoğu durumda, kullanılan modeller kirletici emisyonların trendleri açısından çok kullanışlı olmasına rağmen genellikle gerçek emisyonların tahmin edilmesinde tutarsızlık gösterebilmektedirler. Bu nedenle, modellerin kapasitelerinin iyi bilinmesi, hangi sonuçların daha güvenilir hangilerinin ise daha az güvenilir olduğu konusunda kullanıcılara fayda sağlamaktadır. Genellikle, yanma sistemindeki ısı transferi ve akış alanı, yüksek hassasiyet ile tahmin edilebilirken küçük ölçekli türbülans ve kimyasal türlerin oluşum miktarlarının tahmini ise daha az güvenilir olabilir. Bu nedenle yanma sistemlerinin HAD modellemelerinin bu alanda yetkin kişiler tarafından yapılması önerilmektedir [77].

Yanmanın modellenmesinde, yanma mekanizmasının iyi anlaşılmamış olması, yanma mekanizması ile türbülans yapısı arasındaki açıklanmamış bağlantılar ve kimyasal reaksiyonlarla ile ilgili olan çözümü zor eşitlikler karşılaşılan başlıca zorluklardır [78].

Endüstriyel yanma sistemlerinin modellenmesinde elde edilmek istenen çıktılar, yanma odası içerisindeki hız, sıcaklık, türlerin oluşum miktarları ve yanma odasından olan ısı transferidir. Ayrıca, problem tanımlama ile ilgili bazı önemli faktörler de aşağıda verilmiştir [77]:

- Yanma odasının geometrisi,
- Yakıt ve oksitleyicinin giriş şartları,
- Isıl sınır koşulları,
- Termodinamik, radyasyon ve kimyasal kinetik özellikler.

4.1. Temel Denklemler

HAD modellemesi ile bir alan içerisindeki akış fiziğinin çözülmesi için, söz konusu akış hacminin daha küçük alt alanlara bölünmesi gerekmektedir. Bu işlem, bütün alanı kaplayan bir hücre ağı şeklinde kontrol hacimleri oluşturulması ile gerçekleştirilmektedir. Böylece, tanımlanan her bir hücre için akış alanı özellikleri, akışkanlar dinamiğindeki temel denklemler vasıtasıyla nümerik olarak çözülmektedir [79].

Akışkan akışının temel denklemleri, fiziğin korunum kanunlarının matematiksel ifadeleri ile temsil edilmektedir. Fiziğin korunum kanunlarına göre: Akışkanın kütlesi korunur. Momentumdaki değişim hızı bir akışkan partikülü üzerindeki tüm kuvvetlerin toplamına eşittir (Newton'un ikinci yasası). Enerji değişim hızı ise, bir akışkan parçacığına eklenen ısı ile yapılan işin hızının toplamına eşittir (termodinamiğin birinci yasası). Sıkıştırılır bir akışkan için kütlenin korunumu veya süreklilik denklemi, en temel haliyle aşağıdaki gibi gösterilmektedir [80].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho u) = 0 \tag{4.1}$$

Eş. 4.1'deki ilk ifade, yoğunluğun zaman içerisindeki değişim oranıdır. Eşitlikteki ikinci ifade ise, kontrol hacmi sınırlarından geçen net kütle akışı olarak tanımlanmaktadır ve konvektif terim olarak ifade edilmektedir [80].

Üç boyutlu momentum eşitlikleri, u, v ve w hız bileşenleri için kısmi diferansiyel formda aşağıdaki şekilde yazılabilmektedir [80].

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(-p+\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx} \quad (4.2)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial(-p+\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + S_{My} \quad (4.3)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial(-p+\tau_{xx})}{\partial x} + S_{Mx} \quad (4.4)$$

Enerji denklemi, bir akışkan parçacığının enerji değişim hızının, sıvı parçacığına eklenen ısının hızı ile parçacık üzerinde yapılan işin hızına eşit olduğunu belirten termodinamiğin birinci yasasından türetilmiştir. Enerji denkleminin "h" toplam entalpi cinsinden kısmi diferansiyel formu Eş. 4.5' de verilmiştir [79].

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u h)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v h)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w h)}{\partial z} = \frac{\partial p}{\partial t} + \Phi + \frac{\partial}{\partial x}\left[k \frac{\partial T}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[k \frac{\partial T}{\partial y}\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left[k \frac{\partial T}{\partial z}\right] + \dot{Q}_s \quad (4.5)$$

Eş. 4.5'de T sıcaklığı, Φ dağılma fonksiyonunu, h entalpiyi, $\dot{Q}_s$ akışkana olan net ısı transfer hızını, k ısı iletim katsayısını, ρ akışkanın yoğunluğunu ve x, y, z ise Kartezyen koordinat sistemini temsil etmektedir [79].

4.2. Türbülanslı Yanmanın Modellenmesi

Türbülans, bir akışkanın hareketinde meydana gelen kararsızlar sonucunda, akışın rastgele veya kaotik bir şekilde davranması olarak tanımlanmaktadır. Türbülanslı akışlarda genellikle çok hızlı dalgalanmalar meydana gelmektedir. Bu tür akışlar ile ilgili yapılan sayısız araştırmalar sonucunda, akış içerisinde girdap olarak tanımlanan dönel yapıların mevcut olduğu ortaya konulmuştur [79].

Türbülanslı yanma, genellikle, roketler, içten yanmalı motorlar, endüstriyel yakıcılar ve fırınlar gibi yaygın yanma sistemlerinde meydana gelmektedir. Bu nedenle, düşük yakıt tüketimi ve emisyonlar açısından verimli yanma sistemlerinin geliştirilmesi için, türbülanslı yanmanın modellenmesi ile ilgili yapılan çalışmalar oldukça önemlidir. Yanma

süreçlerinin analitik teknikler kullanılarak ele alınmasının zorluklarından dolayı, türbülanslı alevler ile ilgili analizlerin sayısal modellemeler yardımıyla yapılması oldukça yaygınlaşmıştır. Ek olarak, türbülanslı akışın mevcut olmadığı şartlarda bile yanma modellemesinin zor bir süreç olduğu düşünüldüğünde, türbülanslı reaktif akışların sayısal simülasyonlarında çeşitli karmaşık durumlar ile karşılaşılması kaçınılmazdır [81].

Homojen izotropik türbülans için, büyük ölçekli akışların enerjisi, Kolmogorov enerji akışı yoluyla daha küçük ölçekli akışlara geçmektedir. Bir ölçekten diğerine olan enerji akışı ölçekler boyunca sabit olup, bu enerji akışı, kinetik enerjinin (k) yayılım oranı (ε) ile ifade edilmektedir. Enerjinin yayılımı (ε), kinetik enerjinin ($u^{\prime 2}(r)$) zaman ölçeğine ($r/u^{\prime}(r)$) bölünmesiyle elde edilen oran olarak tahmin edilmektedir [81].

$$\varepsilon = \frac{u^{\prime 2}(r)}{r/u^{\prime}(r)} = \frac{u^{\prime}(r)^3}{r} \tag{4.6}$$

Yanma simülasyonlarında kullanılan en yaygın türbülans modellerinden biri k-ε türbülans modelidir. Bu model, bir denklemli türbülans modellerine kıyasla, akışın türbülans ile ilgili özelliklerini temsil eden iki ekstra taşıyıcı denklemi içermektedir. Böylece, türbülanslı enerjinin iletilmesi ve yayılmasının etkileri hesaba katılarak modelleme yapılmasına olanak sağlamaktadır. Taşınan birinci değişken türbülanslı kinetik enerji (k) iken, ikinci değişken ise türbülansın yayılımıdır (ε). K-ε türbülans modeli, Standard, RNG (renormalization group) ve Realizable olmak üzere üçe ayrılmaktadır [82].

4.2.1. Standard k-ε model

İki denklemli türbülans modelleri, farklı taşıyıcı eşitliklerini çözerek türbülans uzunluk ölçüsü ve zaman ölçeğinin belirlenmesine olanak sağlamaktadır. ANSYS Fluent yazılımı içerisinde bulunan bu türbülans modeli, iki denklemli türbülans modeli olarak sınıflandırılmakla birlikte, Launder ve Spalding tarafından önerildiği zamandan beri pratik mühendislik uygulamalarında kullanılan akış hesaplamalarının amiral gemisi olmuştur. Standart k-ε türbülans modeli, türbülanslı akışlar için göstermiş olduğu güvenirlik, ekonomiklik ve hassasiyet özelliklerinden dolayı, endüstriyel akış ve ısı transferi simülasyonları için oldukça popülerlik kazanmıştır. Bu model, yarı deneysel bir modeldir ve model kapsamında kullanılan denklemler olgusal faktörlere ve deneyselciliğe

dayanmaktadır. Türbülanslı kinetik enerjinin (k) taşıyıcı denklemleri, kesin bir eşitlikten türetilirken, türbülansın yayılım oranı (ε) için olan taşıyıcı denklemleri ise fiziksel mantık kullanılarak elde edilmiştir. Standart k-ε modelin türetilmesinde, akışın tamamen türbülanslı ve moleküler viskozitenin ihmal edilebilir olduğu varsayılmıştır. Bu nedenle, bu model, sadece tam türbülanslı akışlar için geçerlidir. Standart k-ε türbülans modelinde, türbülanslı kinetik enerji (k) ve yayılım oranı (ε), aşağıdaki taşıyıcı eşitlikleri ile elde edilmektedir [82].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right] + G_k + G_b - \rho\varepsilon - Y_M + S_k \tag{4.7}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right] + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}(G_k + C_{3\varepsilon}G_b) - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \tag{4.8}$$

Yukarıda verilen eşitliklerde G_k, ortalama hız gradyanlarından dolayı meydana gelen, G_b ise kaldırma kuvveti nedeniyle oluşan türbülanslı kinetik enerjiyi göstermektedir. Ek olarak, Y_M, sıkıştırılabilir türbülanstaki dalgalı genişlemenin genel yayılma hızına katkısını ifade etmektedir. $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ ve $C_{3\varepsilon}$ ile gösterilen ifadeler sabitler olup σ_k ve σ_ε, sırasıyla k ve ε için türbülanslı Prandtl sayılarıdır. Son olarak, S_k ve S_ε ise kullanıcı tanımlı kaynak terimlerini temsil etmektedir [82].

Türbülans viskozitesi, μ_t, türbülanslı kinetik enerji (k) ile yayılım oranı (ε) birleştirilerek aşağıda verilen eşitlik ile hesaplanmaktadır [82].

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{4.9}$$

Burada, C_μ, sabit bir ifadeyi temsil etmektedir. Model sabitleri $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, C_μ, σ_k ve σ_ε'un varsayılan değerleri ise, $C_{1\varepsilon}$=1,44, $C_{2\varepsilon}$=1,92, C_μ=0,09, σ_k=1 ve σ_ε=1,3'dür.

4.2.2. RNG k-ε model

RNG k-ε türbülans modeli, renormalizasyon grup teorisi olarak tanımlanan istatistiksel bir teknik kullanılarak, anlık Navier–Stokes eşitliklerinden türetilmiştir. Örneğin, bu model, gerilimli veya girdaplı akışlara uygulandığında, yayılım oranı denklemindeki ek terimler

sayesinde modellemelerdeki hassasiyet artmaktadır. RNG k-ε türbülans modelinde, türbülanslı Prandtl sayıları için, kullanıcı tanımlı veya sabit değerler yerine, analitik bir formül önerilmektedir. Ek olarak, düşük Reynolds sayısı etkilerini hesaba katan etkin viskozite, diferansiyel bir formülle temsil edilmektedir [83].

Genel olarak, Standart k-ε türbülans modeli ile benzerlikler göstermesine rağmen, RNG k-ε türbülans modeli ile ilgili temel denklemler bazı değişiklikler içermektedir [82].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j}\right] + G_k + G_b - \rho\varepsilon - Y_M + S_k \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right] + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}(G_k + C_{3\varepsilon}G_b) - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon + S_\varepsilon \quad (4.11)$$

Yukarıdaki denklemlerde α_k ve α_ε, sırasıyla, k ve ε için türbülanslı Prandtl sayılarıdır [82]. Ek olarak, efektif viskozite ise, aşağıdaki eşitlik ile türetilebilmektedir [83].

$$d\left(\frac{\rho^2}{\sqrt{\varepsilon\mu}}\right) = 1{,}72\frac{\mu_{eff}/\mu}{\sqrt{(\mu_{eff}/\mu)^3 - 1 + 100}}\, d\left(\frac{\mu_{eff}}{\mu}\right) \quad (4.12)$$

Yüksek Reynolds sayısının mevcut olduğu akış durumları için türbülanslı viskozitenin hesaplanmasında aşağıdaki ifade kullanılmaktadır. ANSYS Fluent yazılımında, varsayılan olarak, akışın yüksek Reynolds sayısına sahip olduğu kabul edilmektedir. Böylece, RNG k-ε türbülans modeli kapsamında kullanılan sabit değerler $C_{1\varepsilon}$=1,42, $C_{2\varepsilon}$=1,68, C_μ=0,0845, $\alpha_k = \alpha_\varepsilon$=1,393 olup efektif viskoziteye ilişkin eşitlik ise aşağıda sunulmuştur [83].

$$\mu_{eff,m} = \mu_{t,m} = \rho_m C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.13)$$

4.2.3. Realizable k-ε model

Realizable k-ε türbülans modeli, 1995 yılında Shih ve arkadaşları tarafından geliştirilmiştir. Bu model, türbülanslı akışların fiziği ile tutarlı olarak, Reynolds gerilmelerinin hesaplamalarıyla ilgili olan kısıtlamaları ortadan kaldırmaktadır. Realizable

model kapsamındaki türbülanslı kinetik enerji (k) ve bunun yayılımı (ε) ile ilgili eşitlikler aşağıda verilmiştir [84].

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_i \frac{\partial k}{\partial_{xi}} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial_{xj}}\right] + \tau_{ij}\frac{\partial U_i}{\partial_{xj}} - \rho\varepsilon \tag{4.14}$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho U_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial_{xi}} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial_{xj}}\right] + \rho C_1 S_\varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k+\sqrt{\nu\varepsilon}} \tag{4.15}$$

Burada model sabitleri: $C_{1\varepsilon}$=1,44, σ_k=1 ve σ_ε=1.2'dir. Realizable k-ε model, Standart k-ε modelden iki şekilde değişiklik göstermektedir. Bunlardan birinci, model, türbülanslı viskozitenin hesaplanmasında farklı bir eşitlik kullanmaktadır. İkinci olarak ise, enerjinin yayılımı (ε) için yeni bir model kullanarak, Eş. (4.15)'de görüldüğü gibi üretim terimi türbülanslı kinetik enerjinin (k) üretimini içermemektedir. Ayrıca, yok etme terimindeki payda, k'nın sıfırdan küçük olması durumunda bile kaybolmamaktadır. Böylece, Realizable k-ε model ile ilgili yukarıda anlatılan özellikler, modelin normal gerilmeler üzerinde etkili olan matematiksel sınırlamaları gidermesine olanak sağlamaktadır [84].

4.3. The Mixture Fraction/PDF Yanma Modeli

The Mixture Fraction/PDF yanma modelinde termokimya, karışım fraksiyonu adı verilen tek bir parametreye indirgenmektedir. Karışım oranı, f ile gösterilir ve bu parametre yakıtın akışından kaynaklanan bir kütle kesridir. Diğer bir deyişle, CO_2, H_2O veya O_2 gibi tüm türlerin içerisindeki yanmış veya yanmamış yakıt akışı elemanlarının (karbon ve hidrojen atomları) yerel atomik kütle kesri olarak ifade edilebilir. Bu yaklaşım, atomik elemanların kimyasal reaksiyonlarda korunması nedeniyle oldukça önemlidir. Bu modelde yanma, bir karışım problemi olarak basitleştirilmektedir ve doğrusal olmayan reaksiyon hızları ile ilgili zorluklar giderilmektedir [85].

Bu yanma modelinde, taşıyıcı eşitlikler her bir tür için ayrı ayrı çözülmez. Bunun yerine, ilgili türler için ayrı bileşen konsantrasyonları, tahmin edilen karışım oran dağılımından türetilmektedir. Türbülans ile kimya arasındaki etkileşim, bir olasılık yoğunluk fonksiyonu (PDF) yardımı ile gösterilmektedir [60].

Olasılık yoğunluk fonksiyonu (PDF) yaklaşımı türbülanslı difüzyon alevlerinin modellenmesi için önerilmiştir. Bir yakıt-oksitleyici sistemi için karışım oranı (f), aşağıdaki eşitlikteki gibi ifade edilmektedir [60].

$$f = \frac{m_f}{m_f + m_o} \tag{4.16}$$

Yukarıdaki eşiklikte verilen m_f ve m_o, sırasıyla, yakıt ve oksitleyicinin kütle oranlarıdır. Karışım oranı (f), akış alanındaki her nokta için korunan bir büyüklüktür ve türbülanslı bir akış için aşağıda verilen korunum denklemi ile hesaplanmaktadır [60].

$$\frac{\partial(\rho\bar{f})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \bar{f})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i}\right) + S_m \tag{4.17}$$

Burada, S_m, sıvı yakıt damlacıklarından gaz fazına transfer olan kütle ile ilgili bir kaynak terimidir.

Ortalama karışım oranının çözümüne ek olarak, türbülans-kimya etkileşiminin tanımlandığı bir kapanma modelinde kullanılan karışım oranı varyansı ($\overline{f'^2}$) için de aşağıdaki gibi bir korunum denklemi çözülmektedir [60].

$$\frac{\partial(\rho\overline{f'^2})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \overline{f'^2})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\overline{f'^2}}{\partial x_i}\right) + C_g t_i \left(\frac{\overline{f'^2}}{\partial x_i}\right)^2 - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k}\overline{f'^2} \tag{4.18}$$

Yukarıdaki eşitlikte, $\sigma_t = 0{,}7$, $C_g = 2{,}86$ ve $C_d = 2{,}0$ kullanılan sabitlerdir [60].
Türbülans kimya etkileşiminin modellenmesinde olasılık yoğunluk fonksiyonu (PDF) kullanılmaktadır. Modellemelerde, $p(f)$ dalgalı değişken olarak tanımlanır ve bu değişken f değerinin $f + \Delta f$ arasındaki bir değerin zaman oranını ifade etmektedir [60].

$$p(f)\Delta f = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\sum_i \tau_i \tag{4.19}$$

Burada, τ_i, bir Δf aralığında f'in geçirdiği zamanın bir oranıdır [60].

4.4. Radyasyon Modeli

Yanma uygulamalarında alev sıcaklığı genellikle 1000 °C'nin üzerinde olduğundan, yanma odasından ışınımla gerçekleşen ısı transferi de önemli bir hal almaktadır. Bu nedenle, herhangi bir yanma odası içerisindeki sıcaklık profilinin daha hassas bir şekilde tahmin edilebilmesi için, bir radyasyon modelinin kullanılması gerekmektedir [86].

Bir $\vec{s}$ yönünde ve $\vec{r}$ konumundaki bir ortam için ışınım ısı transfer denklemi aşağıda sunulmuştur [85].

$$\frac{dI(\vec{r},\vec{s})}{ds} + (\alpha + \sigma_s)I(\vec{r},\vec{s}) = \alpha n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi}\int_0^{4\pi} I(\vec{r},\vec{s}^{\iota})\,\Phi(\vec{s}\,.\,\vec{s}^{\iota})d\Omega^{\iota} \qquad (4.20)$$

Yukarıdaki eşitlikte, $\vec{r}$ konum vektörü, $\vec{s}$ yön vektörü, $\vec{s}^{\iota}$ saçılma yön vektörü, s yol uzunluğu, α absorpsiyon katsayısı, n kırılma endeksi, σ_s saçılma katsayısı, σ Stefan-Boltzman sabiti, I radyasyon şiddeti, Ω^{ι} açı, T sıcaklık, Φ faz fonksiyonudur [85].

P-1 radyasyon modeli, genel P-N modelinin en basit halidir ve diğer modeller ile karşılaştırıldığında çeşitli avantajlara sahiptir. P-1 radyasyon modeli için ışınımla ısı transfer denklemi, çok az işlemci gücü gereksinimiyle çözülmesi kolay olan bir difüzyon denklemidir. Ayrıca, eğrisel koordinatlara sahip karmaşık geometrilere kolayca uygulanabilmekte ve saçılma etkileri modellemelere dahil edilebilmektedir [85,86].

ANSYS Fluent yazılımındaki radyasyon modeli gri-yayılmalı bir modeldir [65]. Bu modelin prensibi, birkaç gri gaza şeffaf bir gaz ekleyerek gerçek gazların gri olmayan radyasyon özelliklerini simüle etmektir. Gri-yayılmalı modelin hassasiyetin artırılması ve kullanım alanlarının genişletilebilmesi için, gazların kısmi basınç oranları ile absorpsiyon katsayısının karşılıklı ilişki içinde olduğu bir eşitlik önerilmiştir. Gazın toplam yayıcılığı N, gri gazlar ile ağırlıklandırılabilir [87]:

$$\varepsilon = \sum_{i=0}^{N} \alpha_i(T)(1 - e^{-k_i PXL}) \qquad (4.21)$$

Yukarıdaki eşitlikte, α_i ağırlık faktörü, k_i ise absorpsiyon katsayısıdır. Gri gaz absorpsiyon katsayısı da aşağıdaki eşitlik yardımıyla hesaplanabilmektedir [87].

$$k_i = k1_i + k2_i \frac{P_{H_2O}}{P_{CO_2}} \tag{4.22}$$

Işınım ısı transfer denklemi, absorpsiyon katsayısı ve ağırlık faktörünün elde edilmesinden sonra her bir gri gaz için çözülmektedir. Daha sonra, her bir gri gazın ısı akışının ağırlıklı toplamı kullanılarak toplam ısı akısı elde edilmektedir. Gazların absorpsiyon katsayıları, gri gaz modelinden direkt olarak elde edilebildiğinden, bunlar, ışınım ısı transfer denkleminin çözüm yöntemi ile kolayca birleştirilebilmektedir. Böylece, yüksek hesaplama verimi elde edilmektedir [87].

4.5. Sınır Koşulları

Sayısal modellemelerin gerçekleştirilmesinde uygun sınır koşullarının belirlenmesi ve bu sınır koşullarının modellemelere dahil edilmesi gerekmektedir. Çalışma kapsamındaki sayısal modellemeler için belirlenen sınır koşulları hakkındaki genel bilgiler bu bölümde sunulmuştur.

Gerçekleştirilen deneyler ve sayısal modellemeler için gerekli olan oksitleyici ve yakıt giriş hızları, çalışma kapsamında sağlanması istenen ısıl güç, eşdeğerlik oranı ve gaz karışımlarının bileşimine göre hesaplanmıştır. Deneysel ve sayısal çalışmalar, 10 kW ısıl güç ve 0,83 eşdeğerlik oranı için gerçekleştirilmiştir. Deneysel çalışmaların yapıldığı koşullar dikkate alındığında, sayısal modellemeler için kullanılan yakıt ve oksitleyici giriş sıcaklıkları 20 °C olup, giriş basınçları ise 21 mbar'dır. Ayrıca, yanma odasının bulunduğu ortam sıcaklığı 20 °C olarak belirlenmiş, yanma odasının duvar malzemesi ise deneysel çalışmalar ile paralel olacak şekilde çelik olarak seçilmiştir. Tüm sayısal çalışmalar için yanma odası duvarları ile ilgili olan ısıl koşullar "karışık" olarak işaretlenmiş olup, böylece, yanma odasından ışınım, taşınım ve iletim yoluyla ortama olan ısı transfer mekanizmalarının hepsi hesaba katılmıştır. Ek olarak, yanma odasının bulunduğu laboratuvar şartlarındaki havanın ısı taşınım katsayısı da 20 W/m^{2}K olarak girilmiştir.

4.6. Fiziksel Özellikler

Sayısal modellemeler kullanılarak akışkanların akış problemlerini çözmede en önemli adımlardan biri, akışkanların fiziksel özelliklerinin belirlenmesidir. Akışkan özellikleri ya sıcaklığın ya da bir gaz karışımı için bileşimin bir fonksiyonu olarak tanımlanmaktadır [85].

ANSYS Fluent yazılımında, akış rejimine göre yoğunluk ilişkisinin belirlenmesi çok önemlidir. Sıkıştırılabilir akışlar için en uygun yoğunluk ilişkisinin tanımlanmasında ideal gaz kanunun kullanılması gerekmektedir. İdeal gaz kanunu ile yoğunluk ilişkisi, aşağıdaki eşitlikte verilmiştir [85]. Çalışma kapsamındaki gazların yoğunluklarının hesaplanmasında bu eşitlik kullanılmıştır.

$$\rho = \frac{P_{op}+P}{\frac{R}{M_w}T} \tag{4.23}$$

Yukarıdaki eşitlikte, R üniversal gaz sabiti, M_w gazın moleküler ağırlığı, T sıcaklık, P_{op} işletme basıncı ve P ise ANSYS Fluent tarafından tahmin edilen yerel bağıl basınçtır.

Bu çalışmada, gaz karışımlarının fiziksel özelliklerin hesaplanmasında ideal gaz kanunu kullanıldığından dolayı, karışımların viskoziteleri (Eş. 4.24) kinetik teoriye dayalı olarak hesaplanmıştır. Ek olarak, gazların özgül ısı (Eş. 4.26) ve ısıl iletkenliklerinin (Eş. 4.27) hesaplanmasında kullanılan eşitler de aşağıda verilmiştir [85].

$$\mu = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_j x_j \phi_{ij}} \tag{4.24}$$

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1+\left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2}\left(\frac{M_{w,j}}{M_{w,i}}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1+\frac{M_{w,j}}{M_{w,i}}\right)\right]^{1/2}} \tag{4.25}$$

$$C_p = \sum_{i^\iota} m_{i^\iota} c_{P,i^\iota} \tag{4.26}$$

$$k = \sum_i \frac{X_i k_i}{\sum_j X_j \phi_{ij}} \tag{4.27}$$

Yukarıdaki eşitliklerde, x_i ve μ_i, i kimyasalının mol kesrini ve viskozitesini, x_j ve μ_j, j kimyasal türünün mol kesrini ve viskozitesini, $M_{w,i}$ ve $M_{w,j}$, i ve j kimyasalının moleküler ağırlığını, c_{P,i^i} ve k_i ise i kimyasalının özgül ısı ve ısıl iletkenliğini temsil etmektedir.

4.7. Sayısal Çözüm Teorisi

Bu çalışma kapsamındaki gazların yanma ve emisyon parametrelerinin tahmin edilmesi için çözülmesi gereken temel denklemler kontrol hacmi yöntemi ile çözülmektedir. Bu yöntemde, öncelikle bir akış hacmi oluşturulmakta olup, daha sonra bu akış hacmi, genel bir hesaplama ağı yardımıyla ayrıklaştırılmış kontrol hacimlerine dönüştürülmektedir. Dönüştürülme işlemini müteakiben, hız, basınç ve diğer skaler büyüklükler hesaplanmaktadır. Bu hesaplama işlemi, her bir kontrol hacmi için temel denklemlerin bütünleştirilmesi ile gerçekleştirilmektedir [88].

ANSYS Fluent yazılımı kullanılarak yapılan modellemelerdeki momentum ve süreklilik denklemlerinin çözümü, bu denklemlerin ayrıklaştırılması yöntemi ile yapılmaktadır. Bu ayrıklaştırma işlemi, kararlı haldeki momentum ve süreklilik denklemlerinin aşağıdaki gibi integral formu ele alınarak kolayca gerçekleştirebilmektedir [89].

$$\oint \rho \vec{v} \,.\, d\vec{A} = 0 \tag{4.28}$$

$$\oint \rho \, \vec{v}\vec{v}.d\vec{A} = -\oint \rho I.d\vec{A} + \oint \bar{\bar{\tau}}.d\vec{A} + \int_V \vec{F} dV \tag{4.29}$$

Yukarıdaki eşitliklerde, I birim matris, $\bar{\bar{\tau}}$ gerilme tensörü ve $\vec{F}$ ise kuvvet vektörüdür [89].

4.7.1. Momentum denkleminin ayrıklaştırılması

Skaler bir transport eşitliği için kullanılan ayrıklaştırma şeması, aynı zamanda momentum denklemlerinin de ayrıklaştırılması için kullanılabilmektedir. Örneğin, x yönündeki momentum denklemi aşağıdaki gibi gösterilebilir [89].

$$a_p u = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + \sum p_f A \,.\, \hat{\imath} + S \tag{4.30}$$

Eğer basınç alanı ve yüzey kütle akısı biliniyorsa, Eş. 4.30 çözülerek bir hız alanı elde edilebilmektedir. Basınç alanı ve yüzey kütle akısının bilinmediği durumlarda ise, bu değerler, çözümün bir parçası olarak ayrıca elde edilmelidir. Ek olarak, basınç gradyanı teriminin ayrıklaştırılması ile ilgili olarak önemli hususlar mevcuttur. ANSYS Fluent yazılımı, basınç ve hızın hücre merkezlerinde toplandığı bir eş konumlu şema kullanmaktadır. Bununla birlikte, Eş. 4.30'un çözülebilmesi için iki farklı hücre yüzeyleri arasındaki basınç değerine ihtiyaç duyulmaktadır. Dolayısıyla, hücre yüzeylerindeki basınç değerinin çözülebilmesi için bir interpolasyon şeması bulunması gerekmektedir [89].

4.7.2. Süreklilik denkleminin ayrıklaştırılması

Aşağıda verilen ayrık denklemin elde edilebilmesi için, Eş. 4.28' de verilen süreklilik denklemi, kontrol hacmi üzerine entegre edilebilmektedir [89].

$$\sum_{f}^{N_{yüzeyler}} J_f A_f = 0 \tag{4.31}$$

Burada, J_f, f yüzeyi üzerinden geçen kütle akısıdır.

İleri hesaplamalar için, hızın yüzey değerleri ($\vec{V_n}$) ile hücre merkezlerindeki hız değerlerinin ilişkilendirilmesi gerekmektedir. Hızların hücre merkezlerinden hücre yüzeyine olan lineer interpolasyonu, basıncın fiziksel olmayan bir duruma girmesine neden olmaktadır. Bu durumun engellenmesi amacıyla, ANSYS Fluent yazılımında, hızın yüzeysel değerlerinin ortalaması doğrusal olarak alınmamaktadır. Bunun yerine, Eş. 4.30 'daki a_p katsayısına bağlı olan ağırlık faktörleri kullanılarak momentum ağırlıklı ortalama alınır. Bu prosedür kullanılarak J_f 'nin elde edildiği eşitlik aşağıdaki gibi gösterilmektedir [89].

$$J_f = \rho_f \frac{a_{p,C_0} V_{n,C_0} + a_{p,C_1} V_{n,C_1}}{a_{p,C_0} + a_{p,C_1}} + d_f \left(\left(p_{C_0} + (\nabla p)_{C_0} . \overrightarrow{r_0} \right) - \left(p_{C_1} + (\nabla p)_{C_1} . \overrightarrow{r_1} \right) \right) = \widehat{J_f} + d_f \left(p_{C_0} - p_{C_1} \right) \tag{4.32}$$

Yukarıdaki eşitlikte, p_{C_0}, p_{C_1} ve V_{n,C_0}, V_{n,C_1} sırasıyla, iki hücrenin her bir tarafındaki basınç ve normal hızlardır. Ek olarak, $\widehat{J_f}$ ise bu hücrelerdeki hızların etkilerini içermektedir. d_f,

momentum denkleminin a_p katsayılarının bir ortalaması olan $\bar{a}_p$ 'nin bir fonksiyonudur [89].

4.8. Çözüm Algoritması

Bu çalışma kapsamında, genel bir yöntem sınıfına ait olan ve "izdüşüm yöntemi" adı verilen bir çözüm algoritması kullanılmıştır. İzdüşüm yönteminde, hız alanındaki kütle korunumu ile ilgili olan zorluklar bir basınç eşitliğinin çözülmesi ile aşılmaktadır. Bu basınç eşitliği, kütlenin korunumu ve momentum denklemlerinden türetilmektedir. Modellemede kullanılan temel denklemlerin doğrusal olmaması ve birbirleri ile bütünleştirilmiş olmasından dolayı, çözümleme işlemi iterasyonlar içermektedir. Böylece, söz konusu temel denklemler, çözüm yakınsayıncaya kadar tekrarlayan bir şekilde çözülmektedir [89].

ANSYS Fluent yazılımı, temel denklemlerin sırayla çözüldüğü bir çözüm algoritması kullanmaktadır. Temel denklemlerin doğrusal olmaması ve birbirleri ile bütünleştirilmesi dolayısıyla, yakınsamış bir sayısal çözüm elde edilmesi için, bir çözüm döngüsünün uygulanması gerekmektedir [89].

Çözüm algoritmasında, temel denklemler, hız, sıcaklık, basınç vs. gibi çözüm değişkenleri için birbiri ardına çözülmektedir. Hesaplanan korunum denklemleri, sonlu farklar yaklaşımına indirgenerek her bir hesaplama hücresi üzerine integre edilmektedir. Söz konusu temel denklemlerin hücreler üzerine integre edilmesi sonucu elde edilen genel cebirsel denklemler aşağıda sunulmuştur [88].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \Phi) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}\right] + S_\Phi \tag{4.33}$$

$$\Phi \mathrm{P} \sum_i (A_i - S_p) = \sum_i (A_i \Phi_i) + S_c \tag{4.34}$$

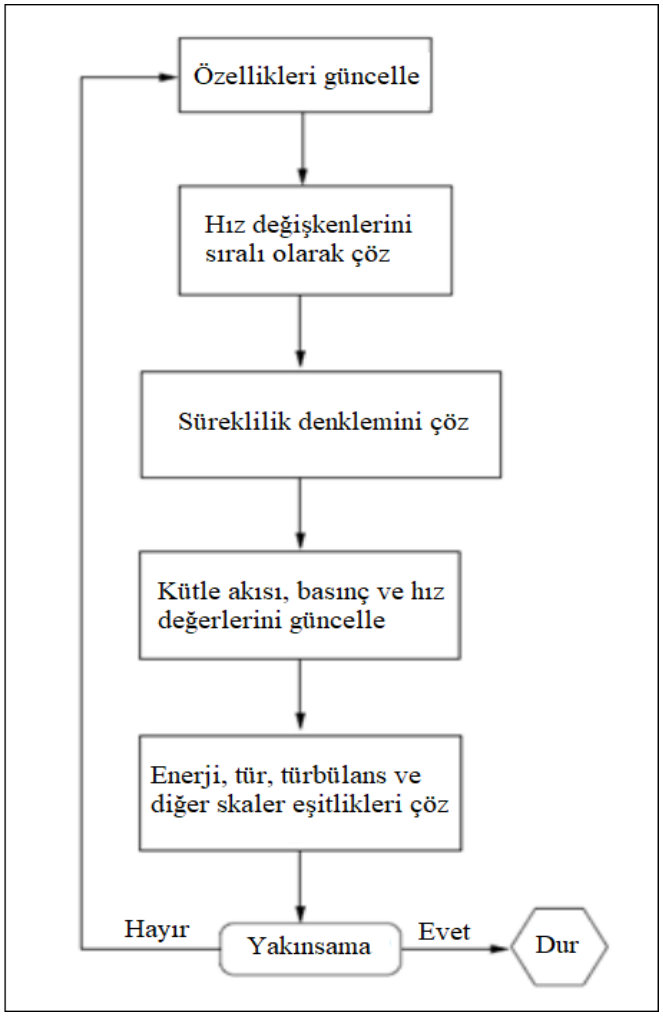
Yukarıdaki eşitliklerde, A konvektif ve difüzyon akılarından kaynaklanan katkıları içeren katsayılar olup S_c ve S_p ise doğrusallaştırılmış kaynak teriminin bileşenleridir. Ek olarak, bu çalışmada kullanılan çözüm algoritmasındaki her bir iterasyon, aşağıdaki adımları içermektedir [89].

- Mevcut çözüm esas alınarak, türbülanslı viskozite de dahil olmak üzere, yoğunluk, viskozite ve özgül ısı gibi akışkan özellikleri güncellenmektedir.
- Güncel basınç ve yüzey kütle akısına ait değerlerin yardımıyla momentum eşitlikleri birbiri ardına çözülmektedir.
- En son elde edilmiş olan hız alanı ve kütle akısı değerleri kullanılarak basınç doğrulama eşitliği çözülmektedir.
- Bir önceki adımda çözülen eşitlikten elde edilen değerler vasıtasıyla, kütle akısı, basınç ve hız alanı doğrulanmaktadır.
- Çözüm değişkenlerinin güncel değerleri kullanılarak, türbülans miktarları, enerji, türler ve radyasyon şiddeti gibi ek skaler değerler için gerekli olan eşitlikler çözülmektedir.
- Farklı fazların birbirleri ile etkileşimi sonucu meydana gelen kaynak terimleri güncellenmektedir.
- Son olarak, çözülen denklemlerin yakınsaklığı kontrol edilmektedir.

Yukarıda değinilen çözüm adımları, yakınsamış bir çözüm elde edilene kadar bir döngü şeklinde devam ettirilmektedir. Ayrıca, bu sürece ait akış diyagramı da Şekil 4.1'de sunulmuştur [89].

Çalışma kapsamında kullanılan hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) yazılımı, kontrol hacmi içerisindeki her bir hücre için artıkların hesaplamasını gerçekleştirmekte olup her bir temel denklem için bir artık raporu meydana getirerek bunların çözümlenmesini sağlamaktadır. ANSYS Fluent yazılımı, iterasyonlar sonucunda hesaplanan artık raporunun yardımıyla, çözümdeki akış değişkenlerine ait hata derecesinin ölçüsü ile ilgili bilgiler verebilmektedir. Genel olarak, bir çözümün iyi yakınsamış olması için normalleştirilmiş artıkların $1x10^{-3}$ seviyelerinde olması gerekmektedir. Bununla birlikte, entalpi ve kimyasal türler için kabul edilebilir değer ise $1x10^{-6}$'dır [88].

Bu çalışma kapsamında yapılan modellemeler üç boyutlu bir kontrol hacmi kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Üç boyutlu kontrol hacimlerinin kullanıldığı ve türbülanslı yanmanın modellendiği şartlar için iyi yakınsayan çözümlerin elde edilmesi kolay değildir. Dolayısıyla, çalışma kapsamında elde edilen sayısal tahminler için yakınsama kriteri, radyasyon ve enerji için $1x10^{-6}$ ve diğer değişkenler için $1x10^{-4}$ olarak belirlenmiştir.



Şekil 4.1. ANSYS Fluent çözüm algoritması akış şeması [89]

4.9. Artıkların Hesaplanması

Yanma uygulamaları ile ilgili olarak yapılan sayısal çalışmaların doğrulanması açısından, modellemelerde iyi yakınsamış çözümlerin elde edilmesi oldukça önemlidir. Çalışma kapsamında kullanılan ANSYS Fluent yazılımı, korunum denklemindeki dengesizliklerin toplamlarına bağlı olarak, kontrol hacmi içerisindeki her bir hücre için artıkların hesaplanmasını gerçekleştirmektedir. Bu artıklar, akış alanı için hesaplanan korunum denklemlerinin sağladığı çözümlerin derecelerini göstermektedir. İki boyutlu bir sayısal modellemede, herhangi bir genel değişken, aşağıdaki gibi ifade edilebilir [88].

$$A_p \emptyset_p = A_E \emptyset_E + A_W \emptyset_W + A_N \emptyset_N + A_S \emptyset_S + S_c \quad (4.35)$$

Yukarıdaki eşitlikte, ∅ değeri, hız, entalpi vb. herhangi bir bağımlı değişken olabilir. S_c ise, konvektif/difüzyon şeklinde olmayan lineer bir kaynak teriminin bileşenini temsil etmektedir. Ek olarak, A ile gösterilen terimler kontrol hacmindeki bir P noktası çevresinde konvektif ve difüzyonu bir araya getiren sonlu fark katsayılarıdır. Söz konusu A terimleri arasındaki etkileşim ise Eş. 4.36'da gösterilmiştir [88].

$$A_p = A_E + A_W + A_N + A_S - S_P \tag{4.36}$$

Eş. 4.36'da gösterilen S_P terimi, Eş. 4.35'deki S_c terimi ile benzer şekilde lineer kaynak teriminin bir bileşenidir. Artıklar ise aşağıdaki eşitlik yardımıyla hesaplanmaktadır.

$$R = \sum_{\text{düğümler}} |[A_E \emptyset_E + A_W \emptyset_W + A_N \emptyset_N + A_S \emptyset_S + S_c - A_P \emptyset_P]| \tag{4.37}$$

Burada R, bütün hesaplama noktaları için doğrusal artıkların toplamıdır. ANSYS Fluent yazılımı tarafından rapor edilen doğrusal artıklar ($\bar{R}$) aşağıdaki denklem yardımıyla hesaplanmaktadır [88].

$$\bar{R} = \frac{\sum_{\text{düğümler}} |[A_E \emptyset_E + A_W \emptyset_W + A_N \emptyset_N + A_S \emptyset_S + S_c - A_P \emptyset_P]|}{\sum_{\text{düğümler}} |(A_P \emptyset_P)|} \tag{4.38}$$

Yukarıdaki eşitliklerde hesaplanan lineer artıklar basınç dışındaki diğer değişkenler için kullanılmaktadır. Basınç değişkeni için artıkların hesaplanması ise aşağıdaki eşitlik vasıtasıyla gerçekleştirilmektedir [88].

$$R = \sum_{\text{düğümler}} |(C_W - C_E + C_s + C_N)| \tag{4.39}$$

Eş. (4.39)' da C_W, C_E, C_s, C_N değişkenleri kontrol hacminin bütün yüzeyleri boyunca olan kütle yayılımını göstermektedir. Basınç değişkenine ait artıkların doğrusallaştırılması ise Eş. 4.40 ile yapılmaktadır [88].

$$\bar{R} = \frac{R_{N.iterasyon}}{R_{2.iterasyon}} \tag{4.40}$$

4.10. Rahatlatma Değişkenleri

Sayısal modellemelerde çözülen eşitliklerin doğrusal olmamasından dolayı iyi yakınsayan çözümlere ulaşmak her zaman kolay olmamaktadır. Özellikle uygun olmayan sınır koşullarının seçilmesi ve yeterli olmayan rahatlatma faktörlerinin kullanımı, çözümün yakınsamamasına neden olmaktadır. Her bir iterasyon sırasında elde edilen değişkenlerdeki değişimlerin minimize edilmesi ile yakınsayan çözümlere ulaşmak mümkün olabilir. Bir P düğümü için $\emptyset$ değişkeninin eski ($\emptyset_{P,eski}$) ve yeni ($\emptyset_{P,yeni}$) değerleri arasındaki karşılıklı ilişki aşağıdaki eşitlik ile verilmektedir [90].

$$\emptyset_P = \emptyset_{P,eski} + \alpha \Delta \emptyset_P \tag{4.41}$$

Yukarıdaki eşitlikte, α rahatlatma faktörünü temsil etmektedir. $\Delta\emptyset_P$ ve $\emptyset_P$ ise çözümü yapılan değişkeni göstermektedir. Yanma uygulamalarının modellemesinde kullanılacak olan rahatlatma faktörleri genellikle tecrübe ile belirlenmektedir. Ek olarak, söz konusu rahatlatma faktörleri, modellenen probleme, akışın yapısına ve kullanılan hesaplama ağına göre de değişiklik göstermektedir.

5. MATERYAL VE METOT: SAYISAL MODELLEME VE DENEYSEL SİSTEM

Tez çalışmasının bu bölümünde, çalışma kapsamında gerçekleştirilen sayısal modellemeler, ağ yapısı, sınır koşulları ve kullanılan deney düzeneği hakkında detaylı bilgiler sunulmuştur. Sayısal modellemeler ve deneysel çalışmalar 0,83 eşdeğerlik oranı ve 10 kW ısıl güçte gerçekleştirilmiştir. Bu yanma şartının sağlanabilmesi için hesaplanan yakıt ve hava giriş debileri Çizelge 5.1'de sunulmuştur. Ayrıca, yakıt karışımlarının isimlendirilmesi, kütlesel karıştırma oranları dikkate alınarak yapılmış olup, NH_3-HZKG (hidrojence zengin kömür gazları) yakıt karışımları ifadesi, NH_3-KFG ve NH_3-SG yakıt karışımlarının her ikisini de kapsamaktadır.

Çizelge 5.1. Yakıt ve hava giriş debileri

Karışım	Yakıt Giriş Debisi (kg/s)	Hava Giriş Debisi (kg/s)
NH_3-Hava	0,0005376	0,0039290
KFG-Hava	0,0002913	0,0037910
%85 NH_3-%15 H_2-Hava	0,0002950	0,0036655
%70 NH_3-%30 H_2-Hava	0,0002033	0,0035659
%55 NH_3-%45 H_2-Hava	0,0001550	0,0035135
%85 NH_3-%15 KFG-Hava	0,0004771	0,0038951
%70 NH_3-%30 KFG-Hava	0,0004288	0,0038680
%55 NH_3-%45 KFG-Hava	0,0003894	0,0038460
%85 NH_3-%15 SG -Hava	0,0005528	0,0038374
%70 NH_3-%30 SG-Hava	0,0005690	0,0037405
%55 NH_3-%45 SG -Hava	0,0005861	0,0036378

Çizelge 5.2' de ise yakıt karışımlarının kütlesel karıştırma oranlarına karşılık gelen hacimsel içerikleri verilmiştir.

Çizelge 5.2. Yakıt bileşimlerinin hacimsel içerikleri

Yakıt Bileşimi	% NH_3	% H_2	% SG	% KFG
%100 NH_3	100	-	-	-
%85 NH_3-%15 H_2	40,35	59,65	-	-
%70 NH_3-%30 H_2	21,78	78,22	-	-
%55 NH_3-%45 H_2	12,73	87,27	-	-
%85 NH_3-%15 SG	84	-	16	-
%70 NH_3-%30 SG	68,12	-	31,48	-
%55 NH_3-%45 SG	53,25	-	46,73	-
%85 NH_3-%15 KFG	78	-	-	21
%70 NH_3-%30 KFG	59,88	-	-	40,12
%55 NH_3-%45 KFG	43,87	-	-	56,13

Çizelge 5.3'de, çalışma kapsamında yakılan yakıtların yoğunlukları, alt ısıl değerleri ve kütlesel olarak içermiş oldukları NH_3, CH_4, H_2, CO, CO_2 ve N_2 yüzdeleri gösterilmiştir.

Çizelge 5.3. Yakıt karışımlarının fiziksel özellikleri

Yakıt Bileşimi	% NH_3	% H_2	% CH_4	% CO	% CO_2	% N_2	AID (kj/kg)	Yoğunluk (kg/m^3)
%100 NH_3	100	-	-	-			18600	0,7069
%85 NH_3-%15 H_2	85	15	-	-		-	33892,35	0,3355
%70 NH_3-%30 H_2	70	30	-	-		-	49191,87	0,2199
%55 NH_3-%45 H_2	55	45	-	-		-	64482,86	0,1636
%85 NH_3-%15 SG	85	0,96	0,08	10,67	2,10	1,20	18082,75	0,6993
%70 NH_3-%30 SG	70	1,92	0,15	21,34	4,19	2,40	17565,61	0,6919
%55 NH_3-%45 SG	55	2,88	0,23	32	6,29	3,60	17048,42	0,6846
%85 NH_3-%15 KFG	85	1,54	6,02	2,33	1,22	3,89	20912,22	0,6518
%70 NH_3-%30 KFG	70	3,08	12,03	4,67	2,44	7,78	23224,79	0,6046
%55 NH_3-%45 KFG	55	4,62	18,04	7	3,67	11,67	25537,29	0,5639

5.1. Sayısal Modelleme ve Ağ Yapısı

Bu çalışmada, Sheffield Üniversitesi tarafından geliştirilen ANSYS Fluent hesaplamalı akışkanlar dinamiği yazılımı kullanılmıştır. Böylece, söz konusu yazılım vasıtasıyla, çalışmaya konu olan yakıtların yanma ve emisyon parametreleri tahmin edilmiştir. Çalışmada kullanılan yanma modeli ise sentetik gazlar gibi karışım yakıtların ön-karışımsız yanma şartları için daha iyi tahminler yapılmasına olanak sağlayan The Mixture Fraction/PDF yanma modelidir. Ayrıca, sayısal modellemelerde, k-ε türbülans ve P-1 radyasyon modelleri kullanılmıştır. Bununla birlikte, yanma odası duvarlarından hem ışınım, hem de taşınım ile olan ısı transferinin de hesaba katılması amacıyla, duvarlarla ilgili olan sınır koşulları "mixed" olarak seçilmiş olup, ANSYS Fluent programına entegre edilmiştir. Modellemeler sırasında gerçekleştirilen iterasyonlar sonucunda, enerji ve radyasyon için $1x10^{-6}$ olan yakınsama kriterine ulaşılmış, süreklilik ve diğer denklemler için bu değer $1x10^{-4}$ olmuştur. Böylece, çalışma kapsamında gerçekleştirilen bütün sayısal modellemeler yakınsamıştır.

ANSYS Fluent yazılımı, The Mixture Fraction/PDF yanma modeli esasına dayanan çeşitli yaklaşımlar içermektedir. Bu yaklaşımlardan, kararlı yayılan alevcik modeli (steady diffusion flamelet combustion model), gerçekçi kimyasal etkilerin ve reaksiyon mekanizmalarının modellemelere dahil edilmesine olanak sağlamaktadır. Ek olarak, bu model, kimyanın ön işleme tabi tutularak tablo haline getirilmesi sonucu, çok yüksek oranda hesaplama tasarrufları meydana getirmektedir. Yukarıda anlatılan avantajları nedeniyle, çalışma kapsamında gerçekleştirilen modellemelerde, kararlı yayılan alevcik modeli kullanılmıştır.

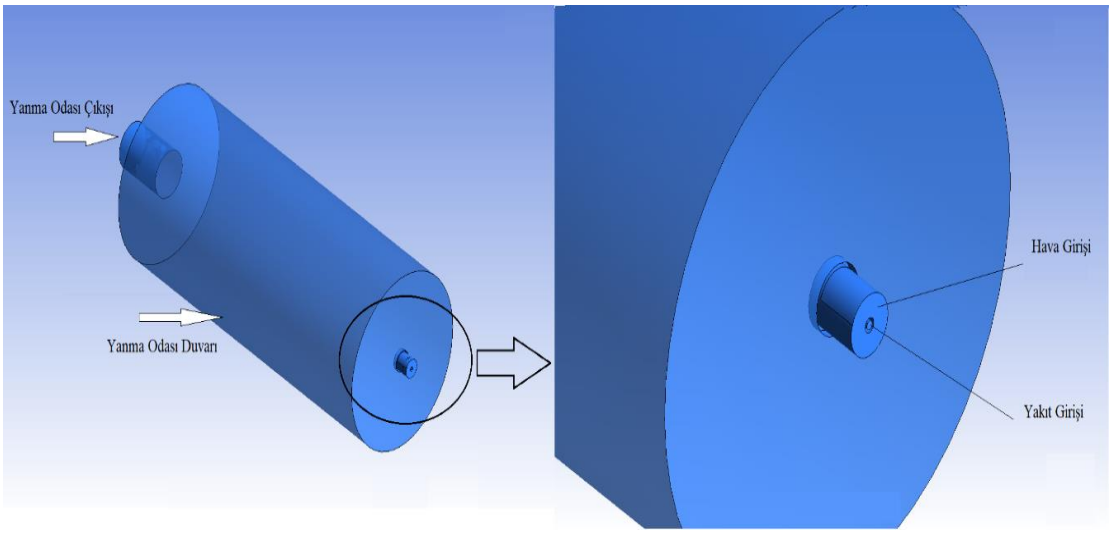
Kararlı yayılan alevcik modeli, türbülanslı bir alevi, "alevcik" adı verilen ayrık ve kararlı alevlerin bir topluluğu olarak modellemektedir. Bu modelde, her bir alevciğin basit yapılardaki laminer alevlerle aynı yapılarda oldukları varsayılmaktadır ve bu alevcikler, deneyler veya hesaplamalar ile elde edilmektedir. ANSYS Fluent yazılımı, detaylı kimyasal mekanizmalar kullanarak, ön-karışımsız yanma şartları için ters akışlı yayılan alevcikleri hesaplayabilmektedir. Bu alevcikler daha sonra, istatistiksel PDF metotları vasıtasıyla türbülanslı bir alev içerisine gömülmektedir. Ek olarak, bu modelde, alevin aerodinamik gerilmelere anında cevap vermesi nedeniyle, NO_x gibi yavaş oluşan türler ile ilgili tahminlerin hassaslaştırılması önerilmektedir. Söz konusu hassaslaştırma işlemi, kararsız laminer alevcik yanma modelinin (unsteady laminar flamelet model) bir son işlemci olarak kullanılmasıyla gerçekleştirebilmektedir [85].

Kararsız laminer alevcik yanma modelinde, NO_x gibi yavaş oluşan türlerin tahminleri, kararlı yayılan alevcik yanma modeline kıyasla daha hassas bir şekilde yapılabilmektedir. Bununla birlikte, kararsız laminer alevcik yanma modelinde NO_x emisyonlarının tahmin edilebilmesi için tam yakınsamış bir çözüm gerekmektedir [85]. Bu çalışma kapsamındaki NO_x emisyonları, yanmanın ilk olarak kararlı yayılan alevcik modeli ile modellenmesi ve yakınsamış bir çözüm elde edilmesini müteakip, kararsız laminer alevcik modelinin bir son işlemci olarak kullanılmasıyla tahmin edilmiştir.

Kararlı yayılan alevcik modeli ile gerçekleştirilen sayısal çalışmalarda, reaksiyon mekanizmalarının modellemelere entegre edilebildiği yukarıda belirtilmiştir. Bu kapsamda, NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıtın yakılmasında, 21 tür ve 67 reaksiyondan meydana gelen bir reaksiyon mekanizması kullanılmıştır. NH_3-HZKG yakıt karışımlarının yakılmasında kullanılan reaksiyon mekanizması ise 42 tür ve 130

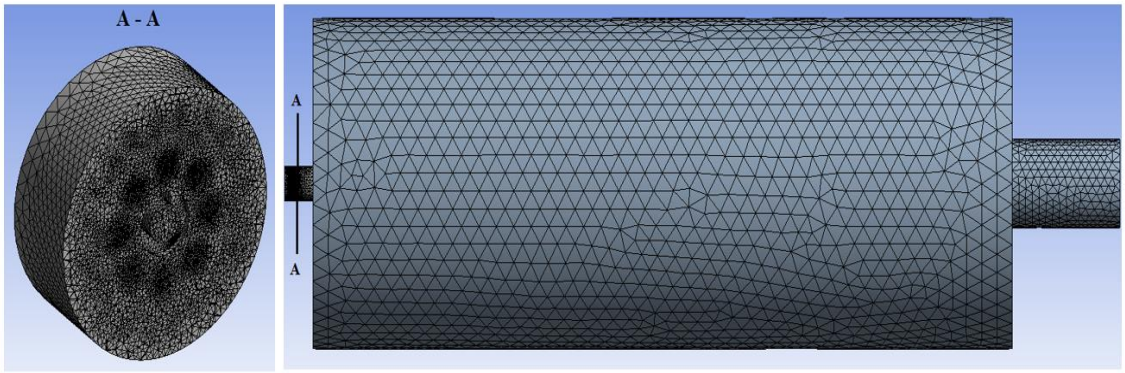
reaksiyondan oluşmaktadır. Söz konusu reaksiyon mekanizmalarına ait detaylar tez çalışmasının "EKLER" bölümünde sunulmuştur.

Tez çalışması kapsamındaki yakıt karışımlarına ilişkin sayısal modellemelerin gerçekleştirilmesinden önce, daha güvenilir sonuçların elde edilmesi ve hesaplama süresinden tasarruf edilmesi amacıyla, çalışmada kullanılan akış hacmi için hücre sayısından bağımsızlaştırma işlemi yapılmıştır. Şekil 5.1'de, söz konusu akış hacmi ve akış hacmi üzerindeki önemli bölgeler (yakıt girişi, hava girişi, yanma odası duvarı ve yanma odası çıkışı) gösterilmiştir.



Şekil 5.1. Sayısal çalışmalarda kullanılan akış hacmi

Şekil 5.2'de, çalışma kapsamında kullanılan ağ yapısı gösterilmiştir. Yanma reaksiyonları, yanma odasının birincil bölgesinde meydana geldiğinden ve bu bölgedeki geometrinin daha karmaşık olmasından dolayı, yakınsama problemlerinin önüne geçmek amacıyla, birincil bölgedeki hücre sayısı daha da sıklaştırılmıştır. Söz konusu ağ yapısı 613947 adet tetrahedron hücre ve 112719 adet düğüm noktasından meydana gelmekte olup, en yüksek "Skewness" değeri 0,83, ortalama "Skewness" değeri ise 0,23 şeklindedir. Ayrıca, en düşük "Orthagonal Quality" değeri ise 0,167'dir.



Şekil 5.2. Sayısal çalışmalarda kullanılan ağ yapısı

Çalışma kapsamında yakılan yakıtların yanma modellemelerine ait bazı önemli parametreler ise Çizelge 5.4'de sunulmuştur.

Çizelge 5.4. Modelleme parametreleri

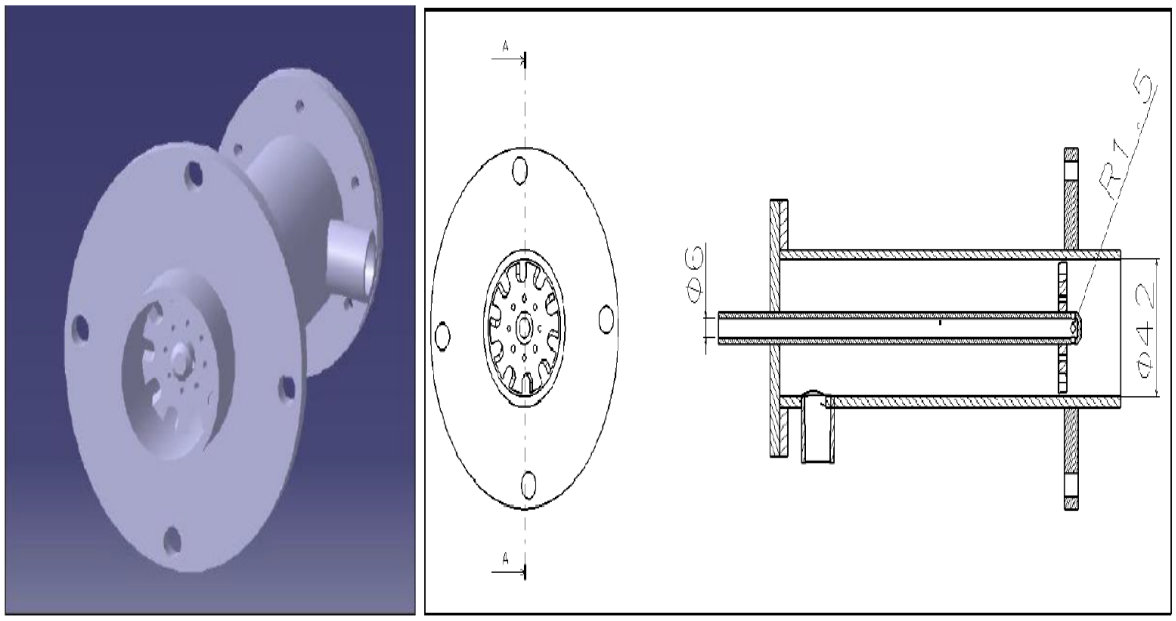
Tanım	Değer/Parametre	Birim
Giriş Türbülans Şiddeti	% 5	-
Isıl Güç	10	kW
Eşdeğerlik Oranı	0,83	-
Ortam Havasının Isı Taşınım Katsayısı	20	W/m^2K
Yanma Odası Duvar Kalınlığı	0,002	m
Çözücü	Basınç Esaslı	-
Mekansal Ayrıklaştırma	Second Order Upwind	-
Gradyanlar	Least Squares Cell Based	-
Basınç	PRESTO	-
Basınç-Hız Bağlaşımı	Simple	-

5.2. Deney Düzeneği ve Ekipmanları

Bu tez çalışması kapsamındaki deneyler, Gazi Üniversitesi, Enerji Sistemleri Mühendisliği, Yakıtlar ve Yanma Laboratuvarında mevcut olan bir deney düzeneği kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Çalışmanın bu bölümünde, söz konusu deney düzeneği ve bu deney düzeneğinin içerdiği donanımlar hakkında detaylı bilgiler sunulmuştur.

Deneylerin gerçekleştirilmesi için mevcut ön karışımsız bir brülör kullanılmıştır. Söz konusu brülöre ait katı model, teknik resim ve fotoğraf, Şekil 5.3 ve Resim 5.1'de gösterilmiştir. Şekillerde gösterilen brülörde, oksitleyici (hava) hattında iki farklı çıkış bulunmaktadır. Bunlardan birincisi, 15° türbülatör açısına sahip, gövde kenarında bulunan yarım ay şeklindeki çıkışlardır. Bu çıkışlar sayesinde, brülöre giren hava ve yakıtın daha

iyi karışması sağlanmaktadır. Böylece, daha kararlı alevler elde edilebilmektedir. Diğer hava hattı çıkışı ise 2,6 mm çapında düz deliklerden meydana gelmektedir. Yakıt hattı ise, brülörün merkezine yerleştirilmiş olup, yakıtın karışma bölgesine radyal olarak girmesini sağlayan 3 mm çapında deliklerden oluşmaktadır. Brülör gövdesinin dış tarafında bulunan 4 adet deliğin amacı da brülörün yanma odasına sökülüp takılmasını sağlamaktır.



Şekil 5.3. Brülörün katı model görünümü ve teknik resmi



Resim 5.1. Brülöre ait fotoğraf

Resim 5.2'de çalışmanın deneysel kısmında kullanılan yanma odası gösterilmiştir. Söz konusu yanma odasının uzunluğu 1 m olup, çapı ise 0,4 m'dir. Yanma odası, paslanmaz çelik malzemeden üretilmiş olup, daha estetik bir görünüm elde edilmesi amacıyla kumlama yaptırılmıştır. Resim 5.2'de gösterilen yanma odası üzerinde 6 adet ölçüm noktası mevcuttur. Bu ölçüm noktaları, yanma odası girişinden itibaren 0,1 m'de, 0,3 m'de, 0,5 m'de, 0,7 m'de, 0,9 m'de ve baca üzerinde konumlandırılmıştır. Böylece, bahsi geçen ölçüm noktaları sayesinde, yanma odası içerisindeki eksenel ve radyal yöndeki sıcaklık ve emisyon değerleri alınabilmektedir. Ek olarak, yanma odası içerisindeki alevin yanma deneyleri sırasında gözlenebilmesi için, yanma odası üzerine bir adet gözetleme camı yerleştirilmiştir. Bu gözetleme camı, yüksek sıcaklıklara dayanabilen temperli bir camdan yapılmıştır.



Resim 5.2. Yanma odası

Resim 5.3’de yanma odasının altında bulunan tabla gösterilmiştir. Bu tabla üzerinde, yakıt ve hava hattından gelen hortumlar, pilot ateşleme hattı, yakıcı girişi öncesinde bulunan yakıt mikseri, hava-yakıt karıştırıcıları ve birtakım kontrol vanaları bulunmaktadır. Ek olarak, bahsi geçen tablanın sağ tarafında bir adet kontrol panosu mevcuttur. Bu kontrol panosuna, yakıt ve hava hattının üzerine yerleştirilmiş olan selenoid vanalar bağlıdır. Bu selenoid vanalar, alev bölgesinde bulunan iyonizasyon çubuğundan alevi algılamadığı sürece, yakıt hattından olan geçişe izin vermemekte ve bu yolla sistemin güvenliği sağlanmaktadır. Sistemde bulunan kontrol panosunun, bahsi geçen selenoid vanaların açma/kapama işlemlerini gerçekleştirmek dışında başka işlevleri de mevcuttur. Bunlardan birisi, deney sisteminde bulunan pilot hattının devreye alınması veya devreden çıkarılmasıdır. Diğer bir görevi ise, bacaya yerleştirilmiş olan PT-100 tipi bir ısıl çiftten aldığı değerlere göre, aşırı ısınma durumunda sistemin kapatılmasını sağlamaktır.



Resim 5.3. Yanma odasının altında bulunan tabla

Resim 5.4’te ise deneyler sırasında oksitleyici olarak kullanılan havanın beslenmesine olanak sağlayan kompresöre ait bir fotoğraf sunulmuştur. Bu kompresör, yüksek basınçta hava depolayabilmekte olup, depolanan hava, yanma işlemi sırasında hatta beslenebilmektedir. Sisteme beslenen havanın sahip olduğu yüksek basınç, hava hattının girişinde bulunan pnömatik regülatör vasıtasıyla olması gereken seviyelere düşürülmektedir.



Resim 5.4. Hava kompresörü

Çalışma kapsamındaki deneyler sırasında, yanma odası içerisindeki radyal yönlerde meydana gelen sıcaklık değerlerinin ölçülmesi için yüksek sıcaklığa dayanıklı olan bir sıcaklık ölçer kullanılmıştır. Söz konusu sıcaklık ölçerin uzunluğu, yanma odası çapından oldukça büyük olup, seramik kaplıdır ve 0-1760 °C aralığında ±0,3 hassasiyette ölçüm yapabilmektedir. Bahsi geçen sıcaklık ölçer ve ölçüm değerlerinin okunduğu kontrol cihazı Resim 5.5'te gösterilmiştir.



Resim 5.5. Seramik uçlu sıcaklık ölçer ve kontrol cihazı

Resim 5.6’da ise deney düzeneğinin genel bir görüntüsü sunulmuştur. Resim 5.6’da gösterilen deney düzeneğinin sağ tarafında hidrojen (kırmızı tüp) ve hava hattı, sol tarafında ise amonyak (gri tüp) hattı bulunmaktadır. Deney düzeneğinde bulunan yakıt ve hava hatları üzerinde, basıncın istenilen seviyelere düşürülmesi için regülatörler yerleştirilmiştir. Ayrıca, hatlardaki gaz basıncının gözlemlenebilmesi için, yakıt ve hava hatlarının belirli kısımlarında manometreler mevcuttur. Bununla birlikte, deney düzeneğindeki yakıt hatları üzerinde, tüketilen toplam yakıt miktarınının belirlenebilmesi için, sayaçlar da kullanılmıştır. Sayaçlardan sonra, yukarıda bahsedilen elektrik panosu tarafından kontrol edilen selenoid vanalar, selenoid vanalardan sonra, anlık debi ölçümlerinin yapıldığı debimetreler ve yakıcıdan önce yerleştirilmiş olan karıştırıcıya girmeden önce son kez basıncın ölçüldüğü manometreler bulunmaktadır.



Resim 5.6. Deney düzeneğinin genel görünümü

5.3. Sıcaklık Ölçümlerinin Düzeltilmesi

Deneysel çalışmalar sırasında elde edilen sıcaklık değerleri, yanma odası içerisindeki yüksek sıcaklık seviyeleri nedeniyle meydana gelen ışınımla ısı transferinden dolayı gerçek sıcaklık değerlerini yansıtmamaktadır. Dolayısıyla, ölçülen sıcaklık değerlerinin, yanma odası içerisinden olan ısı kayıpları da dikkate alınarak düzeltilmesi gerekmektedir. Sıcaklık

ölçümlerinin düzeltilmesi ve iyileştirilmesi ile ilgili literatürde çeşitli çalışmalar bulunmaktadır [60,91].

Isıl çiftler, çevre sıcaklığının sabit olarak kabul edildiği şartlar altında, kimyasal ve ısıl dengede bulunan yüksek sıcaklıktaki bir gaz akışının olduğu bir ortama dikey olarak yerleştirildikleri zaman, gazdan tele taşınım ve ışınımla olan ısı transferi, telden iletimle seramik koruyucu tabakaya ve ışınımla yanma odası duvarına olan toplam ısı transfer miktarına eşittir [60].

$$Q_1 + Q_2 = Q_3 + Q_4 \tag{5.1}$$

Yukarıdaki eşitlikte, Q_1, gazdan tele taşınımla olan ısı transferini, Q_2, gazdan tele ışınımla olan ısı transferini, Q_3, telden seramik koruyucu tabakaya iletimle olan ısı transferini ve Q_4, telden yanma odası duvarlarına ışınımla olan ısı transferini ifade etmektedir.

Gazın yayınım katsayısı çok küçük bir büyüklüğe sahip olduğundan dolayı, gazdan tele ışınımla olan ısı transferi (Q_2) göz ardı edilebilir. Diğer taraftan, telden seramik koruyucu tabakaya iletimle olan ısı kaybı, telin ısıl iletkenliği, boyutları ve koruyucu tabakanın yapısı ile ilgilidir. Bu nedenle, ısıl çiftler için olan bu ısı kayıpları, ısıl çiftin ucu ile direkt olarak bağlantılı olduğundan ihmal edilebilir. Dolayısıyla, Eş. 5.1'de verilen ifade aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$Q_1 = Q_4 \tag{5.2}$$

Gazdan tele taşınımla olan ısı kayıpları (Q_1), şöyle ifade edilebilir:

$$Q_1 = hA(T_g - T) \tag{5.3}$$

Burada, h (W/m^2.K), taşınım ısı transfer katsayısını, A (m^2), telin yüzey alanını, T_g (K), gaz sıcaklığını ve T (K) tel sıcaklığını göstermektedir. Telden yanma odası duvarlarına ışınımla ısı kaybı (Q_4), aşağıdaki eşitlik ile gösterilebilir:

$$Q_4 = \sigma A(\varepsilon T^4 - \alpha T_w^4) \tag{5.4}$$

Yukarıdaki eşitlikte, σ, Stefan-Boltzman sabitini, ε, telin yayma katsayısını, α, telin yutma katsayısını, T_w, duvar sıcaklığını göstermektedir. Kirchoff yasasına göre, ısıl denge halinde bulunan bir cismin yayma ve yutma katsayısı eşittir. Dolayısıyla, Eş. 5.4 aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$Q_4 = \sigma A \varepsilon (T^4 - T_w^4) \tag{5.5}$$

Yukarıdaki eşitlikler Eş. 5.2'de yerine konulduğunda, Eş. 5.6 elde edilir:

$$hA\left(T_g - T\right) = \sigma A \varepsilon (T^4 - T_w^4) \tag{5.6}$$

Eş. 5.6 yeniden düzenlendiğinde,

$$T_g = \frac{\sigma \varepsilon (T^4 - T_w^4)}{h} + T \tag{5.7}$$

eşitliği elde edilir. Eşitliğin sağ tarafında gösterilen ilk terim, ısı kayıpları nedeniyle azalan ısıl çift sıcaklığını telafi etmek amacıyla bir düzeltme faktörünü ifade etmektedir. Bu tez çalışması kapsamında gerçekleştirilen deneysel çalışmalar sırasında ölçülen sıcaklık değerlerinin düzeltilmesi için Eş. 5.7 kullanılmıştır. Eş. 5.7'de, $\sigma = 5{,}67x10^{-8}$, Stefan-Boltzman sabitidir. ε ise ısıl çiftlerin yayma katsayıdır ve 0,22' ye eşittir [92]. T (K), deneyler esnasında ölçülen hatalı sıcaklık değerini, T_w (K) ise deneyler sırasında ölçülen duvar sıcaklığını göstermektedir. Eş. 5.7'deki h ifadesi, bir silindir etrafındaki akış durumu için hesaplanan ısı taşınım katsayısıdır. Söz konusu ısı taşınım katsayısı, Nusselt sayısına [93] bağlı olarak, aşağıdaki eşitlikler yardımıyla elde edilmiştir.

$$Nu = 0{,}8x(Re^{0{,}25}) \tag{5.8}$$

$$Nu = \frac{hxD}{k} \tag{5.9}$$

$$Re = \frac{UxD}{v} \tag{5.10}$$

Eş. 5.10'daki Reynold sayısının hesaplanması için gerekli olan hız değeri, teorik olarak hesaplanan yakıt hızlarıdır. Hidrolik çap (D), ısıl çiftin çapıdır ve 0,5 mm' ye eşittir. Öncelikle, bahsi geçen değerler kullanılarak Reynold sayısı hesaplanmış olup, daha sonra hesaplanan Reynold sayısına göre Nusselt sayıları belirlenmiştir. Son olarak, elde edilen Nusselt sayıları kullanılarak her bir yakıt için ısı taşınım katsayıları (h) hesaplanmıştır. Eş. 5.9'da bulunan yanma sonu ürünlerinin ısı iletim katsayısı (k) ise, yanma sonu ürünlerinin tamamının hava olduğu varsayımı ile, 800 °C'deki havanın ısı iletim katsayısı olan 0,051 W/m.K olarak alınmıştır [92].

5.4. Debimetrelerin Kalibrasyonu

Bu tez çalışmasındaki deneysel çalışmalar, daha önce de belirtildiği gibi 10 kW ısıl güç ve 0,83 eşdeğerlik oranındaki yanma şartları altında gerçekleştirilmiştir. Bu kapsamda, deneylerde kullanılacak olan yakıt miktarlarının hesaplanması ve debimetrelerden doğru şekilde ayarlanması gerekmektedir. Söz konusu işlem için aşağıdaki eşitlikten faydalanılmıştır [88]:

$$Q\ \left(\frac{Nm^3}{h}\right) = \frac{Isıl\ Güç}{AID\left(\frac{kj}{Nm^3}\right) x \frac{1(h)}{3600\ s}} \tag{5.11}$$

Eş. 5.11'de, AID yakıtların alt ısıl değerlerini, Q ise hacimsel olarak yakıt hattına beslenmesi gereken yakıt debisini ifade etmektedir.

Deneysel çalışmaların gerçekleştirildiği deney düzeneğinde kullanılan debimetreler hava debimetreleridir. Dolayısıyla, yakıt hatlarında bulunan debimetreler NH_3 ve NH_3-H_2 yakıt karışımının yoğunluklarına göre kalibre edilmeli, deneyler esnasında beslenen yakıt debilerinin aşağıdaki eşitlik yardımıyla elde edilen değerlere göre okunması gerekmektedir [88].

$$Q_{çalışma\ akışkanı} = kxQ_{kalibrasyon\ akışkanı} \tag{5.12}$$

$$k = \sqrt{\frac{kalibrasyon\ akışkanının\ yoğunluğu}{çalışma\ akışkanının\ yoğunluğu}} \tag{5.13}$$

Eş. 5.13'de bahsi geçen çalışma akışkanı sisteme beslenen yakıtı, k, dönüşüm faktörünü, kalibrasyon akışkanı ise havanın yoğunluğunu temsil etmektedir.

Çalışma kapsamında gerçekleştirilen debimetrelerin kalibrasyon işleminin daha iyi anlaşılması amacıyla, NH_3 gazı için yapılan hesaplama işlemi iyi bir örnek teşkil edecektir. 10 kW ısıl güç elde edilebilmesi için ($LHV_{NH_3} = 13148{,}34\ \frac{kj}{Nm^3}$) 2,738 m^3/h NH_3 gazı gereklidir. Fakat, bu değerin elde edilebilmesi için debimetrelerden okunan değerin (20 °C'de $\rho_{hava} = 1{,}204\ kg/m^3$ ve $\rho_{NH_3} = 0{,}7069\ kg/m^3$) yaklaşık olarak 2,1 m^3/h olması gerekmektedir. Bu hesaplama, deneysel çalışmalar kapsamındaki NH_3-H_2 yakıt karışımı için de aynı şekilde gerçekleştirilmiştir.

6. SONUÇLAR VE İRDELEME

Tez çalışmasının bu bölümünde, belirli karışım oranlarındaki NH_3-H_2, NH_3-HZKG (KFG, SG) yakıt karışımlarının ve %100 NH_3 içeren yakıtın yanma ve emisyon davranışlarına ilişkin sayısal tahminler ve deneysel çalışma sonuçları sunulmuştur. Bu kapsamda, söz konusu yakıtların yakılmasında, yanma odası boyunca meydana gelen sıcaklık dağılımları, hız profilleri ve NO emisyonları incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar neticesinde, NH_3-hava karışımına yapılan HZKG ilavesinin, söz konusu karışımın yanma ve emisyon performansını iyileştirmede, H_2 ilavesine kıyasla ne ölçüde alternatif olabileceği değerlendirilmiştir. Diğer taraftan, NH_3-KFG ve NH_3-SG yakıt karışımları için elde edilen sayısal modelleme sonuçları da birbirleri ile karşılaştırılarak, farklı bileşimlere sahip bu iki kömür gazı ile karıştırmanın, NH_3-hava karışımının yanma ve emisyon davranışları üzerinde meydana getirdiği etkiler karşılaştırmalı olarak araştırılmıştır.

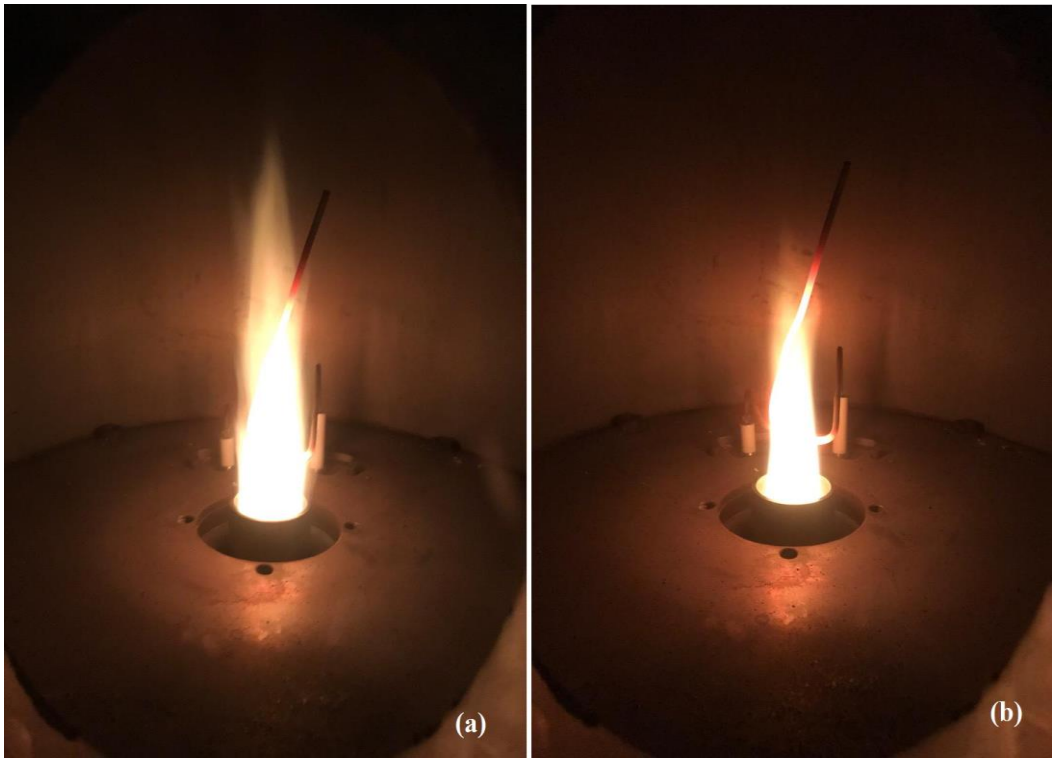
Çalışma kapsamında gerçekleştirilen sayısal modelleme sonuçlarının incelenmesi, iki kısma ayrılacak şekilde planlanmıştır. Birinci kısımda, öncelikle, NH_3-H_2 yakıt karışımlarının, karışım içerisindeki artan kütlesel H_2 oranlarına (%15,%30,%45) bağlı olarak, yanma odası içerisinde meydana gelen sıcaklık dağılımları, hız profilleri ve NO emisyonları sunulmuştur. İkinci kısımda ise, çalışma kapsamında belirlenen kütlesel yakıt karışma oranlarının her biri için, NH_3-KFG, NH_3-SG, NH_3-H_2 yakıt karışımlarının ve %100 NH_3 içeren yakıtın yanma ve emisyon davranışları bir bütün olarak tartışılmıştır.

Bu tez kapsamındaki deneysel çalışmalar, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı ve %100 NH_3 içeren yakıt için gerçekleştirilmiştir. Ek olarak, deneysel çalışmalar sırasında ölçülen sıcaklık değerleri, söz konusu yakıtlar için yapılan HAD modellemelerinin doğrulanması amacıyla kullanılmıştır. Diğer taraftan, NH_3-HZKG yakıt karışımlarının yanma ve emisyon karakteristikleri için gerçekleştirilen sayısal modellemeler ise, KFG'nin deneysel olarak yakıldığı bir referans çalışma [65] kullanılarak doğrulanmıştır. Bu doğrulama işlemindeki yanma şartları ve yanma düzeneği, referans çalışma [65] ile aynı olacak şekilde seçilmiştir.

6.1. Deneysel Çalışma Sonuçları

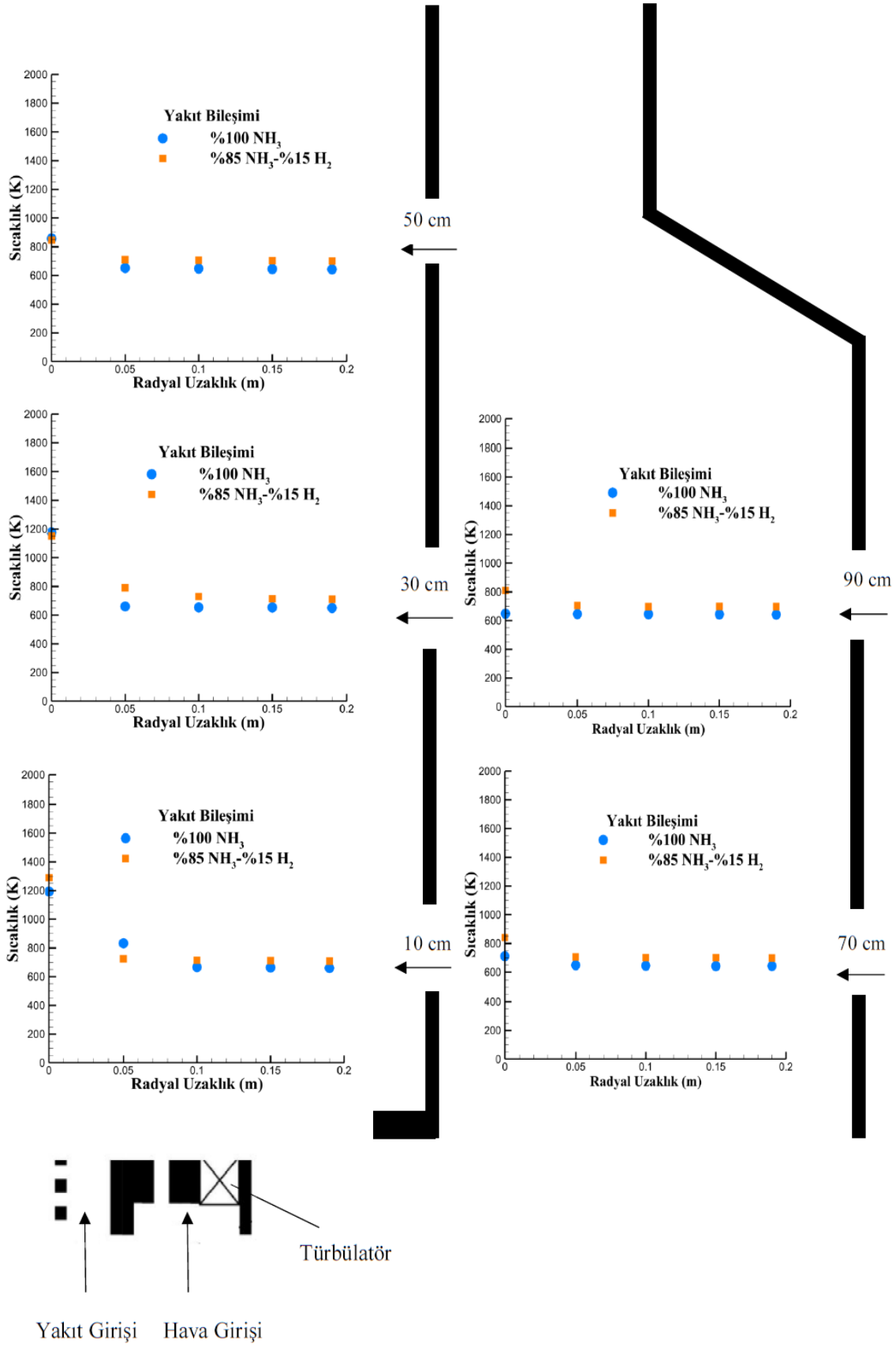
Bu tez kapsamında gerçekleştirilen deneysel çalışmalarda, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı ve %100 NH_3 içeren yakıt için yanma odası boyunca meydana gelen radyal sıcaklık dağılımları ölçülmüştür. Deneysel çalışmalar iki bölüme ayrılacak şekilde gerçekleştirilmiştir. Birinci bölümde %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı, ikinci bölümde ise %100 NH_3 içeren yakıt yakılmıştır. Yakıt bileşiminin %100 NH_3 olduğu durumda, birçok kez denenmesine rağmen, kararlı bir alev yakalanamamıştır. Bu durumun esas nedeni, NH_3 gazının reaktivitesinin düşük olması ve tutuşması için yüksek bir ateşleme enerjisine ihtiyaç duyulmasıdır. Bu nedenle, %100 NH_3 içeren yakıtın deneysel çalışmaları, ilk olarak bir pilot alev elde edildikten sonra gerçekleştirilmiştir. Söz konusu pilot alevin elde edilmesi için H_2 gazı kullanılmıştır. Yanma düzeneğinde bulunan yakıt mikseri sayesinde, brülöre kütlece %15 oranında H_2 gazı beslenerek, ilk olarak, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı için kararlı bir alev elde edilmiştir. Bu durumda, söz konusu yakıt bileşimi 20 dk. boyunca yakılmış olup, yanma odası içerisinden gerekli olan sıcaklık ölçümleri alınmıştır. İkinci etapta ise, brülöre beslenen hidrojen miktarı kademeli olarak azaltılarak, yakıt bileşiminin %100 NH_3 olması sağlanmıştır. Bu işlemin sonunda, 10 kW ısıl güç ve 0,83 eşdeğerlik oranında, %100 NH_3 içeren yakıt için kararlı bir alev elde edilebilmiştir. Tıpkı, deneysel çalışmaların ilk bölümünde olduğu gibi %100 NH_3 içeren yakıt da 20 dk. boyunca yakılmış olup, gerekli ölçümler tamamlanmıştır.

Resim 6.1'de, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı ve %100 NH_3 içeren yakıtın alev görüntüleri sunulmuştur. Resim 6.1 incelendiğinde, alev renklerinin turuncuya yakın olduğu görülmektedir. Bu alev rengi, yapılan bir çalışmada [43] da bahsedildiği gibi, $NH_2\alpha$ bandı ve aşırı sıcak H_2O spektrumları nedeniyle meydana gelmiştir. Diğer taraftan, deneyler sırasında, her iki yakıtın da alev yapıları sürekli gözlemlenmiş olup, herhangi bir alev kopması veya geri tepme olayı görülmemiştir. Bununla birlikte, alev görüntüleri birbirleri ile kıyaslandığında, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı alevinin brülöre daha yakın olarak konumlandığı görülmektedir. Gözlemlenen bu durum, yakıt karışımlarının yanma hızlarının değerlendirilmesi ile açıklanabilir. NH_3-H_2 yakıt karışımları ile ilgili literatürde yapılan bir çalışmaya [20] göre, karışım içerisine hidrojen eklenmesi, amonyağın yanma hızını yükseltmektedir. Bu bilgi ışığında, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımının yanma hızının daha yüksek olduğu ve dolayısıyla, söz konusu yakıt karışımı alevinin brülöre daha yakın olarak konumlandığı söylenebilir.



Resim 6.1. (a) %100 NH_3 yakıtının alevi, (b) %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımının alevi

Şekil 6.1'de, deneysel çalışmalar sırasında yanma odası içerisinde meydana gelen düzeltilmiş radyal sıcaklık değerleri gösterilmiştir. Şekil 6.1'den yapılabilecek ilk çıkarım, her iki yakıt için de en yüksek sıcaklık değerlerine alevin içerisinde alınan ölçümler neticesinde ulaşıldığıdır. Bu değerler, %100 NH_3 içeren yakıt için 1192,9 K, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı için ise 1290,2 K olmuştur. Bu noktadan hareketle, %100 NH_3 içeren yakıt içerisine yapılan kütlece %15 oranında H_2 eklentisinin, NH_3'ün reaktivitesini arttırdığı ve bunun sonucunda da alev sıcaklığında yükselme meydana getirdiği söylenebilir. Diğer taraftan, yanma odasının 10 cm eksenel mesafesindeki radyal sıcaklık değerleri, yanma odasının merkezinden duvarına doğru gidildikçe ani bir şekilde azalmıştır. Bu azalmanın temel nedeni, kullanılan yanma odasının ani genişlemeli bir tasarıma sahip olmasıdır. Yanma odası içerisindeki sıcaklık dağılımları genel olarak incelendiğinde, daha yüksek sıcaklık değerleri %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımının yakılması sonucunda elde edilmiştir. Ayrıca, her iki yakıt bileşiminin yakılmasında, yanma odasının merkez ekseni boyunca, yanma odası çıkışına doğru sıcaklık seviyelerinde, ışınım ve taşınımla ısı kaybından dolayı azalmalar olduğu rahatlıkla söylenebilir.

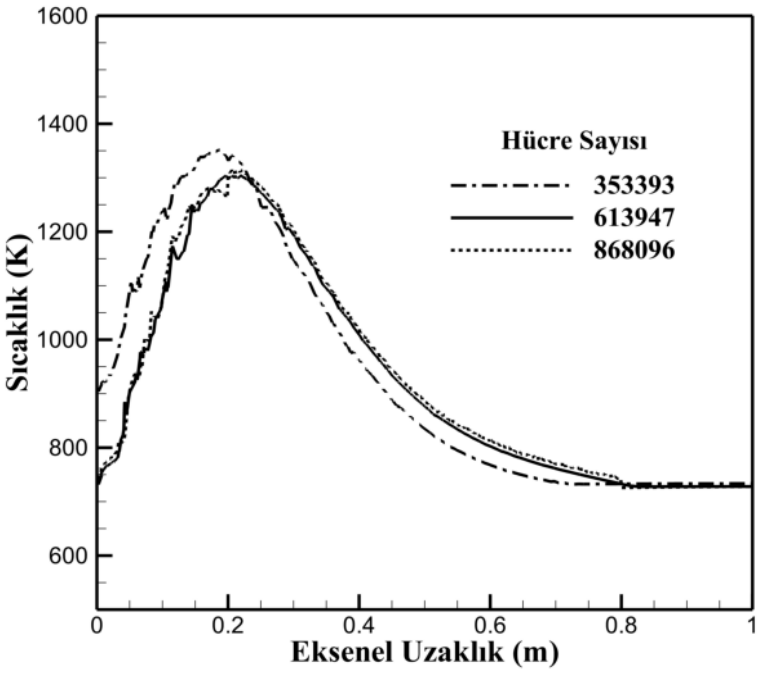


Şekil 6.1. %85 NH_3-%15 H_2 ve %100 NH_3 içeren yakıtların sıcaklık dağılımı

6.2. Sayısal Modelleme Sonuçları

6.2.1. Hücre sayısından bağımsızlaştırma

Sayısal modellemelerde optimum hesaplama süresi sağlanarak hassas sonuçlar elde edilebilmesi için, hücre sayısından bağımsızlaştırma işleminin gerçekleştirilmesi oldukça yaygın bir uygulamadır. Bu nedenle, çalışma kapsamında, dört farklı hücre sayısı (259269, 353393, 613947, 868096) içeren ağ yapıları kullanılarak elde edilen sonuçların değerlendirilmesini müteakip, en uygun ağ yapısı belirlenmiştir. Simülasyonlar sırasında, tüm sınır koşulları ve diğer parametreler sabit tutulmuştur. Modellemeler, NH_3-hava karışımı için gerçekleştirilmiş olup, yanma odası içerisinde meydana gelen eksenel sıcaklık dağılımları birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Bununla birlikte, 259269 adet hücre içeren ağ yapısı için gerçekleştirilen sayısal modelleme yakınsamadığından, bu ağ yapısı için herhangi bir sonuç elde edilememiştir. Belirlenen diğer üç ağ yapısı için yanma odası içerisinde meydana gelen eksenel sıcaklık profilleri Şekil 6.2'de sunulmuştur. Sonuçlar incelendiğinde, 613947 adet hücre sayısından daha fazla hücre içeren ağ yapısı için oluşan eksenel sıcaklık profilinin çok fazla değişim göstermediği gözlemlenmiştir. Dolayısıyla, en uygun ağ yapısının 613947 adet hücre içeren ağ yapısı olduğu belirlenmiş olup, çalışma kapsamındaki tüm modellemeler için bu ağ yapısı kullanılmıştır.

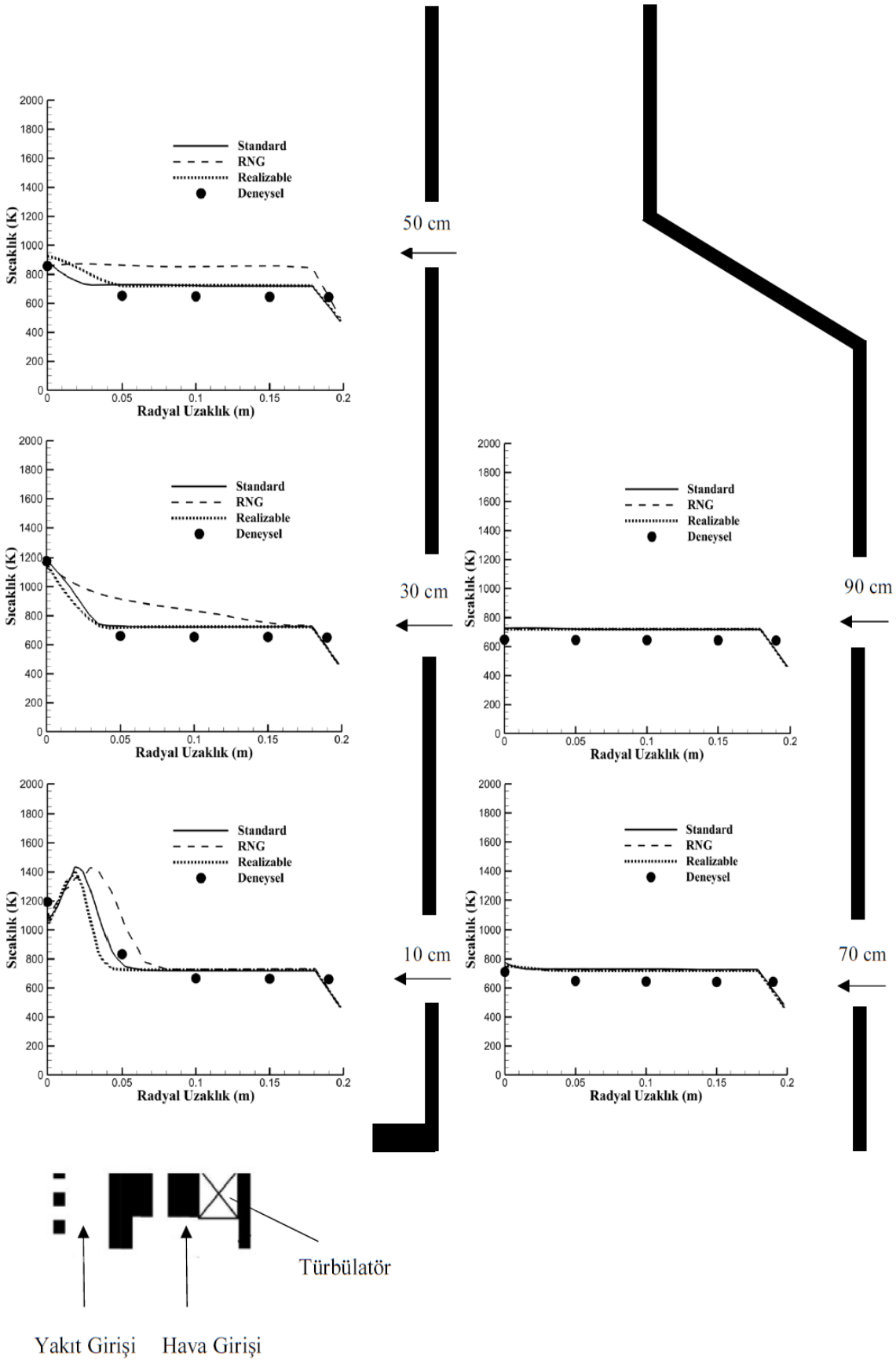


Şekil 6.2. Hücre sayısından bağımsızlaştırma işlemi için eksenel sıcaklık profilleri

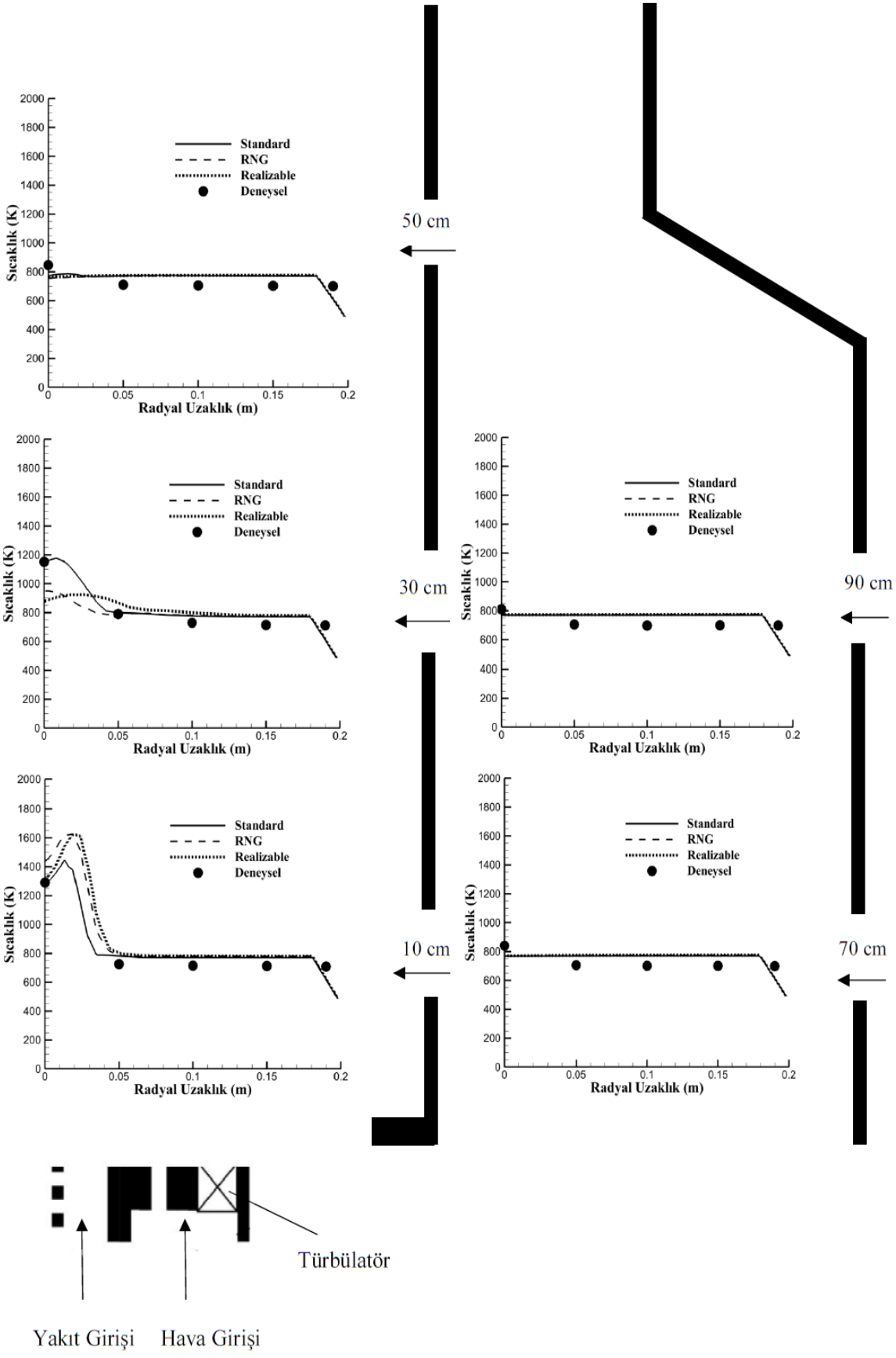
6.2.2. Sayısal model doğrulanması

Tez çalışmasının bu bölümünde, NH_3-H_2, NH_3-HZKG yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıt için gerçekleştirilen model doğrulama işleminin sonuçları sunulmuştur. NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıtın model doğrulama işlemleri için bu çalışma kapsamında gerçekleştirilen deneysel çalışma sonuçları (düzeltilmiş radyal sıcaklık değerleri) kullanılmıştır. NH_3-HZKG yakıt karışımlarının model doğrulama işlemi ise KFG-hava karışımının deneysel olarak yakıldığı bir çalışma [65] referans alınarak yapılmıştır. Model doğrulamaları, bu tez kapsamındaki deneysel çalışmalar ve referans çalışmadaki [65] yanma şartları ile aynı olacak şekilde, üç farklı k-ε (Standard, RNG, Realizable) türbülans modeli için uygulanan sayısal modellemeler dahilide gerçekleştirilmiştir. Böylece, çalışmaya konu olan yakıtların yakılmasında, hem en uygun türbülans modelleri belirlenmiş, hem de kullanılan sayısal modellemeler doğrulanmıştır.

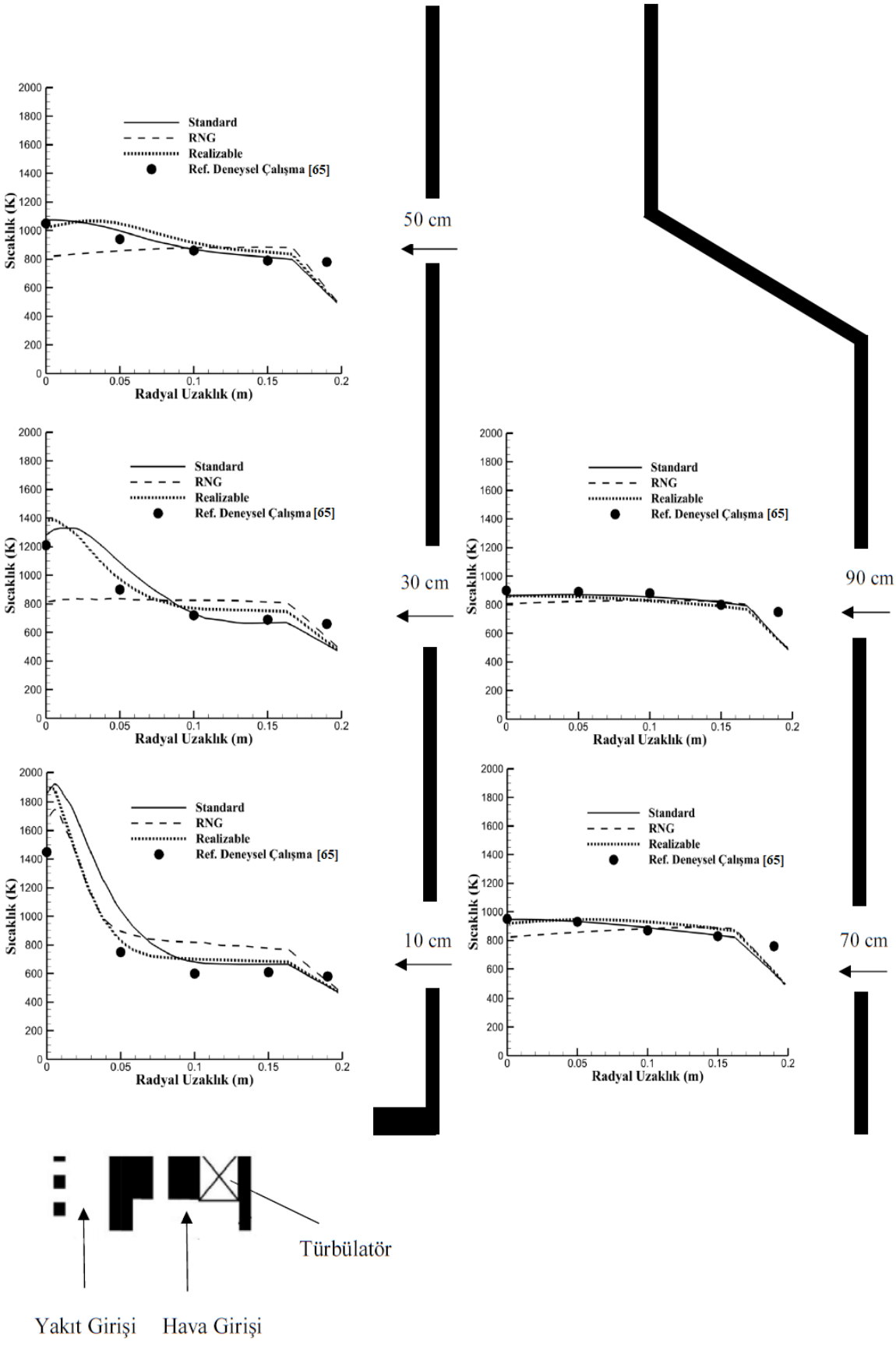
Şekil 6.3 ve Şekil 6.4'de, sırasıyla, %100 NH_3 içeren yakıt ve %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı için elde edilen deneysel ve sayısal sıcaklık dağılımları gösterilmiştir. Şekil 6.5'de ise KFG-hava karışımı için bu tez kapsamında tahmin edilen ve referans deneysel çalışmada [65] ölçülen sıcaklık değerleri karşılaştırılmıştır. Şekillerdeki sonuçlar genel olarak değerlendirildiğinde, yanma odası boyunca tahmin edilen radyal sıcaklık profillerinin deneysel çalışma sonuçları ile oldukça tutarlı bir yapıda olduğu gözlemlenmiştir. Sayısal çalışmalarda kullanılan üç farklı türbülans modelinin performansı değerlendirildiğinde ise, Standard k-ε türbülans modeli ile yapılan tahminlerin, deneysel çalışma sonuçları ile daha iyi bir uyum içerisinde olduğu söylenebilir. Bu durumun, kullanılan brülörün düşük bir türbülatör açısına (15°), dolayısıyla, düşük bir girdap sayısına sahip olması nedeniyle meydana geldiği düşünülmektedir. Sonuç olarak, çalışma kapsamındaki yakıtların yakılmasında kullanılan sayısal modellemelerin, ileriki hesaplamalar açısından kabul edilebilir olduğu ortaya konulmuş olup, bu sayısal modellemelerde türbülans modeli olarak Standard k-ε türbülans modeli kullanılmıştır.



Şekil 6.3. %100 NH_3 içeren yakıtın sayısal modelleme doğrulaması



Şekil 6.4. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının sayısal modelleme doğrulaması



Şekil 6.5. NH_3-HZKG yakıt karışımlarının sayısal modelleme doğrulaması

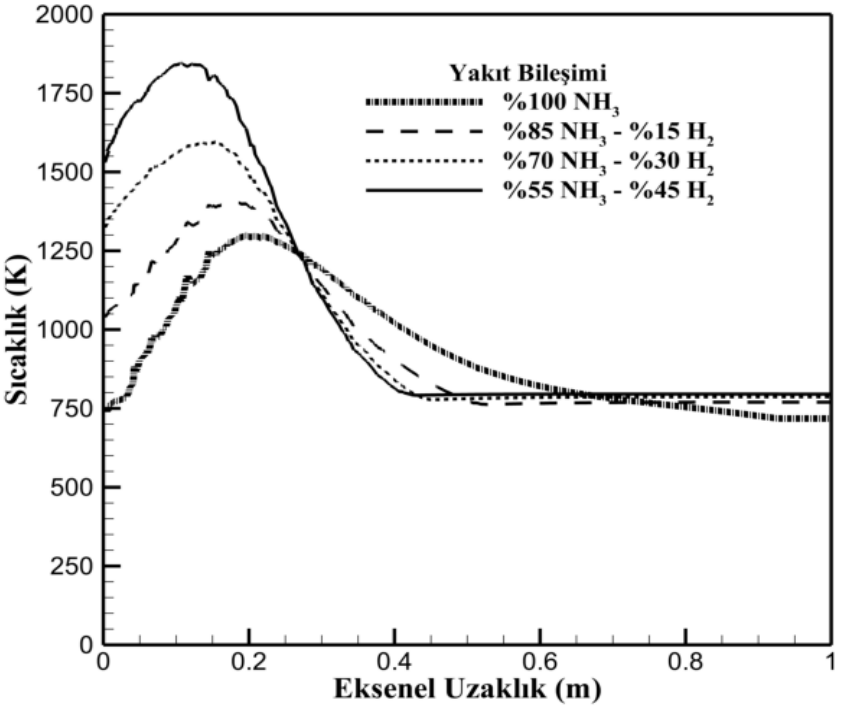
6.2.3. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının sayısal modelleme sonuçları

Tez çalışmasının bu bölümünde, NH_3-H_2 yakıt karışımları için gerçekleştirilen sayısal modelleme sonuçları sunulmuştur. Bu kapsamda, karışım içerisinde artan kütlesel hidrojen oranına (%15,%30,%45) bağlı olarak, ön karışımsız yanma şartları altında, yanma odası içerisinde meydana gelen sıcaklık dağılımları, hız profilleri ve NO emisyonları incelenmiştir. Ayrıca, NH_3-H_2 yakıt karışımlarının sayısal modelleme sonuçları ile %100 NH_3 içeren yakıt için gerçekleştirilen sayısal modelleme sonuçları karşılaştırılmış olup, H_2 ile karıştırmanın, NH_3-hava karışımının yanma ve emisyon parametreleri üzerindeki etkileri de tartışılmıştır.

Şekil 6.6'da yanma odası içerisinde meydana gelen eksenel sıcaklık dağılımları gösterilmiştir. Şekil 6.6 incelendiğinde, ilk olarak, alev bölgesinde meydana gelen eksenel sıcaklık profilleri dikkati çekmektedir. Yakıt karışımı içerisindeki artan hidrojen miktarı ile doğru orantılı olarak, alev bölgesinde meydana gelen sıcaklık değerleri önemli ölçüde artmıştır. Alev bölgesindeki en yüksek eksenel sıcaklık değerine %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımı ile ulaşılmış olup, bu değer 1846,36 K olarak tahmin edilmiştir. Yakıt içeriğinin %100 NH_3 olduğu durumda ise alev bölgesinde tahmin edilen en yüksek sıcaklık değeri 1296,82 K'dir. Bu noktadan hareketle, yakıt karışımı içerisindeki artan hidrojen miktarının, NH_3-hava karışımının reaktivitesini önemli ölçüde arttığı ve bunun sonucunda da alev sıcaklıklarında yükselme meydana getirdiği sonucuna varılabilir.

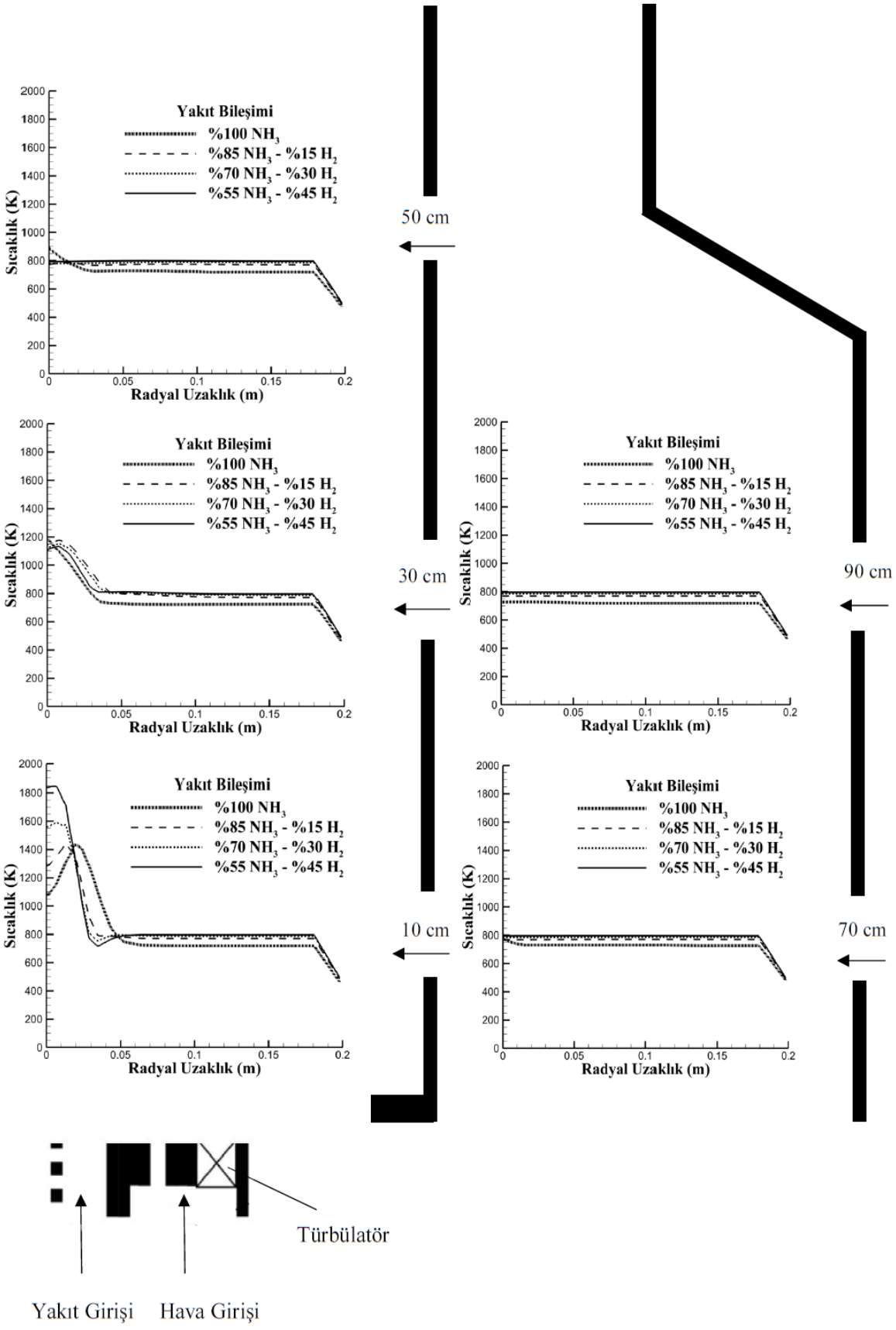
Yanma odası içerisinde meydana gelen eksenel sıcaklık dağılımları, yakıt karışımlarının yanma hızları hakkında da fikir verebilir. Şekil 6.6'da görüldüğü üzere, yakıt karışımı içerisindeki hidrojen miktarının artmasıyla, alev bölgesindeki en yüksek sıcaklık değerleri bir trend halinde yakıcı girişine doğru yaklaşma eğilimi göstermiştir. Bu durum, hidrojen ile karıştırmanın, NH_3-hava karışımlarının yanma hızları üzerinde pozitif anlamda bir etkisi olduğunun göstergesidir. Alev sonrası bölgedeki eksenel sıcaklık profilleri incelendiğinde ise, daha yüksek oranda hidrojen içeren yakıt karışımları için daha düşük eksenel sıcaklık değerlerinin meydana geldiği görülmektedir. Alev sonrası bölge için oluşan bu sıcaklık profili trendi, artan yanma hızlarının etkisiyle, alevin yakıcıya doğru yayılım göstermesi sonucunda meydana gelmiştir. Diğer taraftan, yanma odası çıkışına doğru olan bölge için tahmin edilen sıcaklık profilleri, yanma odasından çevreye olan ısı

transferi nedeniyle birbirlerine yaklaşmış olup, yanma odası çıkışındaki en yüksek sıcaklık değerine, H_2 oranının en yüksek olduğu yakıt karışımının yakılması ile ulaşılmıştır.



Şekil 6.6. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının eksenel sıcaklık profilleri

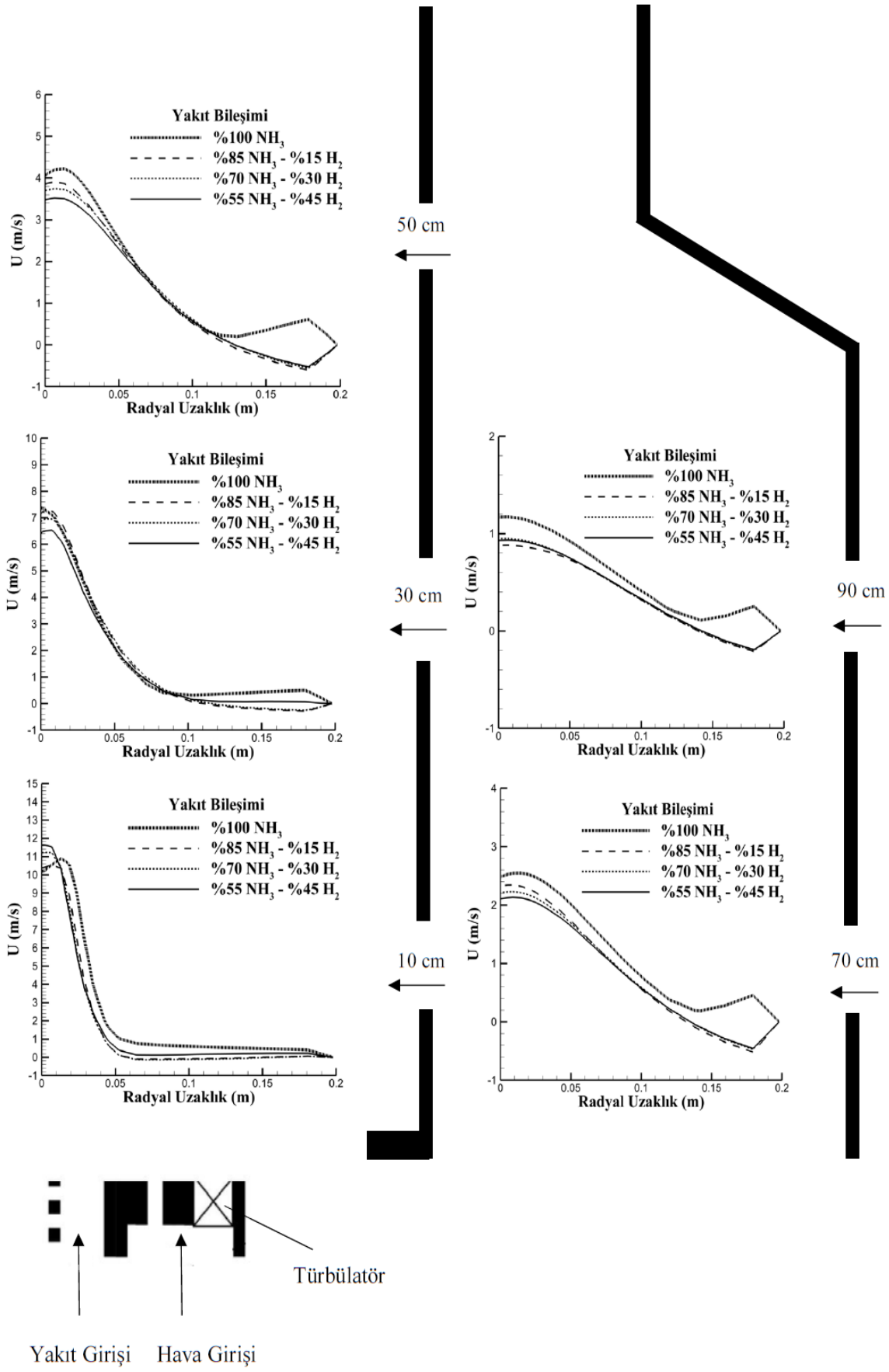
Şekil 6.7'de, yakıt karışımı içerisinde bulunan hidrojen miktarının yanma odası boyunca meydana gelen radyal sıcaklık dağılımlarına olan etkisi gösterilmiştir. Tahmin edilen radyal sıcaklık profilleri genel olarak incelendiğinde, en düşük sıcaklık değerlerinin, %100 NH_3 içeren yakıtın yakılması sonucunda meydana geldiği görülmektedir. Bununla birlikte, yakıt karışımı içerisindeki artan hidrojen miktarı, yanma odası içerisinde daha yüksek radyal sıcaklık değerlerine ulaşılmasını sağlamıştır. Yakıt karışımı içerisindeki hidrojen miktarının artmasıyla daha yüksek alev sıcaklıklarına ulaşıldığından, yanma odası içerisinde meydana gelen radyal sıcaklık değerlerinin, bu duruma bağlı olarak yükseldiği düşünülmektedir. Diğer taraftan, yanma odasının 10 cm eksenel mesafesindeki radyal sıcaklık değerleri, yanma odasının merkezinden duvarına doğru gidildikçe ani bir şekilde azalmıştır. Bu azalmanın temel nedeni, deneysel çalışma sonuçlarının tartışıldığı bölümde de belirtildiği gibi kullanılan yanma odasının ani genişlemeli bir tasarıma sahip olmasıdır. Buna karşın, yanma odası çıkışına yakın bölgelerde, yanma odası içerisindeki sıcaklık dağılımı homojen bir yapı sergilemiştir. Bu durum, yanma sonu gazlarının söz konusu bölgelerde daha homojen şekilde bir yayılım göstermesi ile açıklanabilir.



Şekil 6.7. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının radyal sıcaklık profilleri

Yanma odası içerisindeki hız dağılımlarının belirlenmesi, yanma sonu ürünlerinin yanma odası boyunca dağılım gösterdiği bölgeler ve alev karakteristikleri hakkında önemli bilgiler sağlamaktadır. Bu nedenle, Şekil 6.8'de, %100 NH_3 içeren yakıt ve NH_3-H_2 yakıt karışımları için tahmin edilen eksenel hız dağılımları gösterilmiştir. Şekil 6.8 genel olarak incelendiğinde, en yüksek eksenel hız değerlerinin alev bölgesinde meydana geldiği ve bu değerlerin yanma odası çıkışına doğru azaldığı görülmektedir. Yanma odasının geneli ile kıyaslandığında, alev bölgesi için tahmin edilen eksenel hız değerlerinin daha yüksek olması, bu bölgede meydana gelen yanma reaksiyonlarının etkisi ve yakıt ile havanın yanma odasına belirli bir hızla girmesi ile açıklanabilir. Ek olarak, yanma odasının 50 cm eksenel mesafesinden sonra, yanma odasının merkezi ile duvarları arasındaki eksenel hız değerleri arasındaki farkın oldukça azaldığı görülmektedir. Bu durum, yanma sonu ürünlerinin bu bölgelerde daha homojen bir şekilde yayıldığının göstergesidir. Ayrıca, yanma odası duvarlarına yakın bölgelerdeki eksenel hız değerlerinde bazı dalgalanmalar meydana geldiği gözlemlenmiştir. Bu noktadan hareketle, %100 NH_3 içeren yakıtın ve NH_3-H_2 yakıt karışımlarının yakılmasında, yanma odası duvarlarına yakın olan bölgelerde resirkülasyon alanlarının oluştuğu söylenebilir.

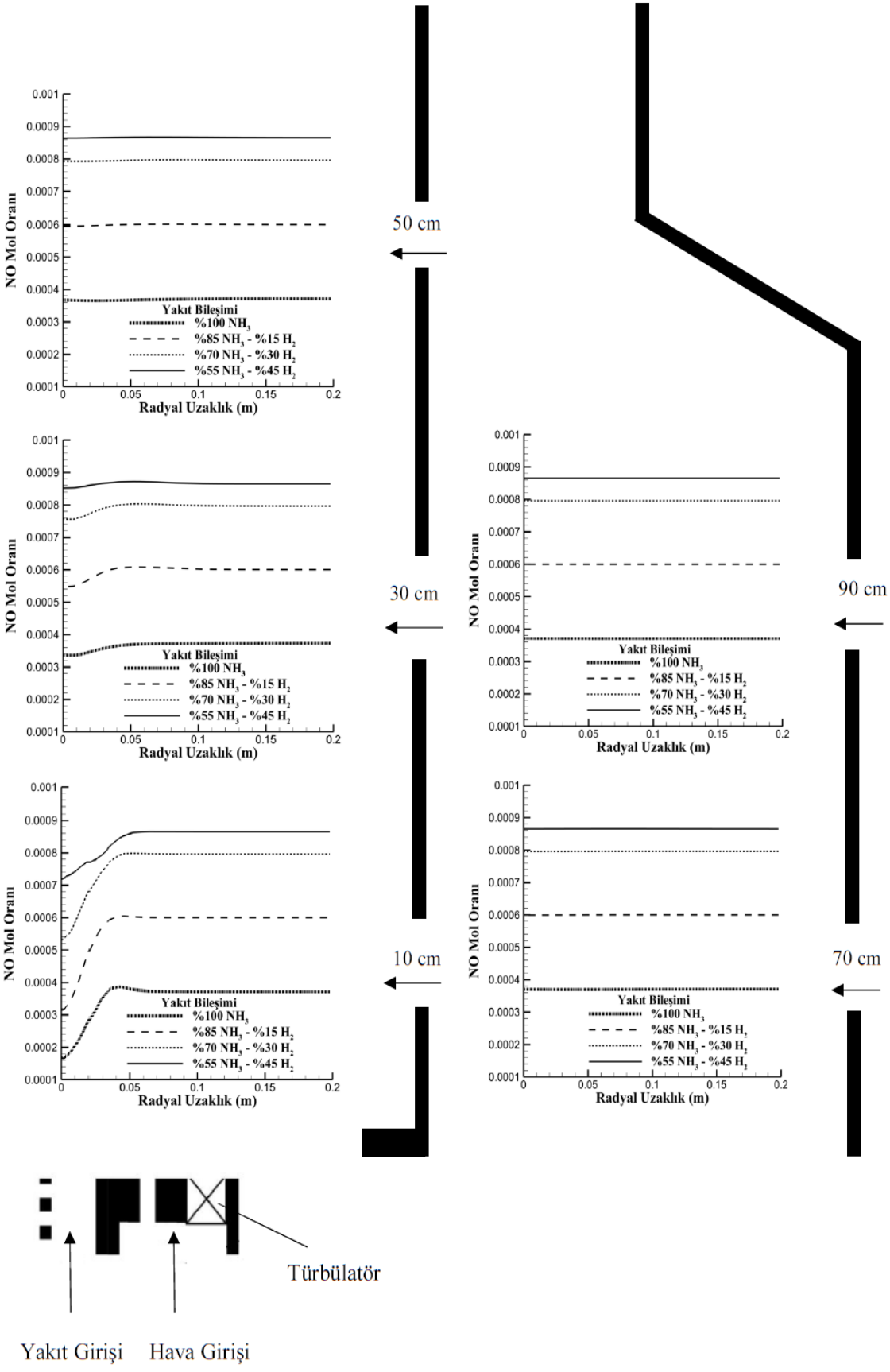
Yanma odası içerisinde meydana gelen eksenel hız dağılımları incelendiğinde, NH_3-H_2 yakıt karışımları için tahmin edilen eksenel hız profillerinin birbirlerine oldukça yakın olduğu söylenebilir. Bu durumun temel nedeni, NH_3-H_2 yakıt karışımlarının yakılmasında, yakıcıya eksenel yönde giren havanın giriş debilerinde çok fazla bir değişim olmamasıdır. Ek olarak, yanma odasının alev bölgesi için, Şekil 6.7 ve Şekil 6.8'de gösterilen sıcaklık ve eksenel hız dağılımları arasında bir trend uyumu olduğu da söylenebilir. Özellikle, alev bölgesinin 5 cm radyal mesafesine kadar tahmin edilen sıcaklık ve eksenel hız profilleri, oldukça tutarlı bir yapı sergilemiştir.



Şekil 6.8. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının eksenel hız profilleri

Şekil 6.9'da NH_3-H_2 yakıt karışımları için yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyon tahminleri sunulmuştur. Elde edilen sonuçlar incelendiğinde, yakıt karışımı içerisine hidrojen eklenmesinin, NO emisyonlarını önemli ölçüde arttırdığı kolaylıkla söylenebilir. Diğer taraftan, yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonlarındaki artış trendi, yakıt karışımı içerisindeki artan hidrojen miktarı ile tutarlı bir yapı sergilemiştir. Dolayısıyla, en yüksek NO emisyon değerleri, yakıt karışımının %55 NH_3-%45 H_2 olduğu durumda meydana gelmiştir. Şekil 6.9'daki sonuçlara göre, yanma odasının merkez ekseni boyunca alev bölgesinde hızla yükselen NO emisyonları, 50 cm eksenel mesafeden sonra dengeye ulaşarak yanma odası çıkışına doğru yayılmıştır. Bu durum, Şekil 6.9'da NO emisyonları sunulan tüm yakıtlar için geçerlidir. Bununla birlikte, yanma odasının 50 cm eksenel mesafesinden sonra, tüm yakıt karışımları için tahmin edilen NO emisyonları yanma odası içerisinde homojen bir yayılım göstermiştir. Ayrıca, %100 NH_3 içeren yakıtın yakılması sonucu meydana gelen NO emisyon seviyelerinden itibaren, yakıt karışımı içerisindeki kütlesel hidrojen miktarının her %15'lik artışı, %85 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımı için tahmin edilen NO emisyon değerlerine kadar birbirlerine yaklaşık seviyede bir yükseliş meydana getirmiştir. Yakıt karışımı içerisindeki kütlesel hidrojen miktarının %30'dan daha yüksek olduğu karıştırma oranında (kütlece %45) ise, NO emisyon seviyelerindeki artış miktarı önceki durumlara göre daha düşük olmuştur. Bu durum, yanma odası çıkışında tahmin edilen NO emisyonları açısından incelendiğinde, %100 NH_3 içeren yakıt, %85 NH_3-%15 H_2 ve %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımlarının meydana getirdiği NO emisyonları arasındaki farkın, yaklaşık olarak 0,0002 (mol oranı) seviyelerinde olduğu tespit edilmiştir. Diğer taraftan, %70 NH_3-%30 H_2 ve %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımlarının yakılması sonucunda meydana gelen NO emisyonları arasındaki fark ise, 0,0001 (mol oranı)'den daha düşük seviyededir.

Şekil 6.9'da gösterilen NO emisyon dağılımları, yakıt karışımı içerisindeki NH_3 miktarının azalmasına rağmen yükselmiştir. Diğer taraftan, yanma odasının alev bölgesi için tahmin edilen NO emisyonları ve bu bölgedeki sıcaklık dağılımlarının (Şekil 6.6 ve Şekil 6.7'de gösterilen) tutarlı bir yapıda olduğu dikkati çekmektedir. Dolayısıyla, çalışma kapsamındaki NH_3-H_2 yakıt karışımlarının yakılmasında, termal-NO oluşum mekanizmasının yakıt-NO oluşum mekanizmasına göre daha baskın olduğu sonucuna varılabilir.

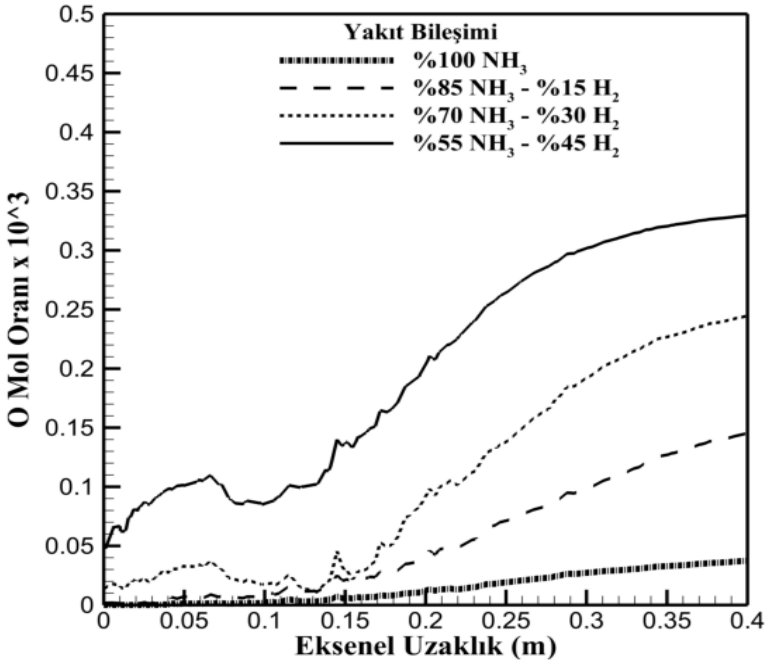


Şekil 6.9. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının NO emisyon profilleri

Çalışma kapsamındaki yanma şartları için NH_3-H_2 yakıt karışımlarının yanma odası boyunca meydana getirdiği NO emisyonları ile ilgili sonuçlar yukarıda tartışılmış olup, yakıt karışımı içerisinde artan H_2 miktarının, tahmin edilen NO emisyonlarını yükselttiği tespit edilmiştir. NH_3-H_2 yakıt karışımları ile ilgili olarak literatürde yapılan diğer çalışmalara [35,46,48] göre, karışım içerisindeki H_2 miktarının artması, adyabatik alev sıcaklıklarının, yanma hızlarının ve NO emisyonlarının yükselmesine neden olmaktadır. Böylece, bu tez çalışması kapsamındaki yanma şartları altında yakılan NH_3-H_2 yakıt karışımları için elde edilen sonuçların, literatürdeki diğer çalışma sonuçları ile uyumlu olduğu söylenebilir. Ek olarak, Şekil 6.9'da sunulan NO emisyonlarının oluşumunda, termal-NO mekanizmasının daha etkin olduğu sonucuna varılmıştır. Bu tip NO oluşum mekanizmasının esas nedeni, yanma sırasında oluşan oksijen (O) atomlarıdır. Alev bölgesindeki sıcaklık seviyelerinin yükselmesi, oksijenin (O_2) daha hızlı parçalanmasına neden olmaktadır. Dolayısıyla, O atomu konsantrasyonları önemli ölçüde artmakta ve buna bağlı olarak NO emisyon değerlerinde yükselmeler meydana gelmektedir [61]. Bu bilgiler ışığında, Şekil 6.10'da, yanma odasının alev bölgesinde meydana gelen "O" radikallerinin oluşum miktarları incelenmiştir. Böylece, yanma odası boyunca oluşan NO emisyonları üzerinde baskın bir rol oynayan termal-NO oluşum mekanizmasının etkisi daha detaylı olarak tartışılmıştır.

Şekil 6.10'da gösterilen O radikal profilleri incelendiğinde, en düşük değerlerin, %100 NH_3 içeren yakıtın yakılması durumunda meydana geldiği görülmektedir. Bununla birlikte, yakıt karışımı içerisinde artan H_2 miktarı, daha yüksek alev sıcaklıkları sağladığından, bu durum, alev bölgesindeki O radikal konsantrasyonlarını arttırmıştır. Dolayısıyla, daha fazla H_2 içeren yakıt karışımları, termal-NO mekanizmasının etkisiyle, daha yüksek NO emisyonları meydana getirmiştir.

Sonuç olarak, çalışmanın bu bölümü için gerçekleştirilen sayısal modellemelerden elde edilen tahmin sonuçlarına göre, yakıt karışımı bünyesindeki H_2 konsantrasyonlarındaki artış, NH_3-hava karışımının reaktivitesi, alev sıcaklığı ve yanma hızı gibi karakteristikleri üzerinde pozitif bir etki sağlamıştır. Buna karşın, H_2 ile karıştırma, yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonlarının yükselmesine neden olmuştur.



Şekil 6.10. NH_3-H_2 yakıt karışımlarının alev bölgesindeki O radikal profilleri

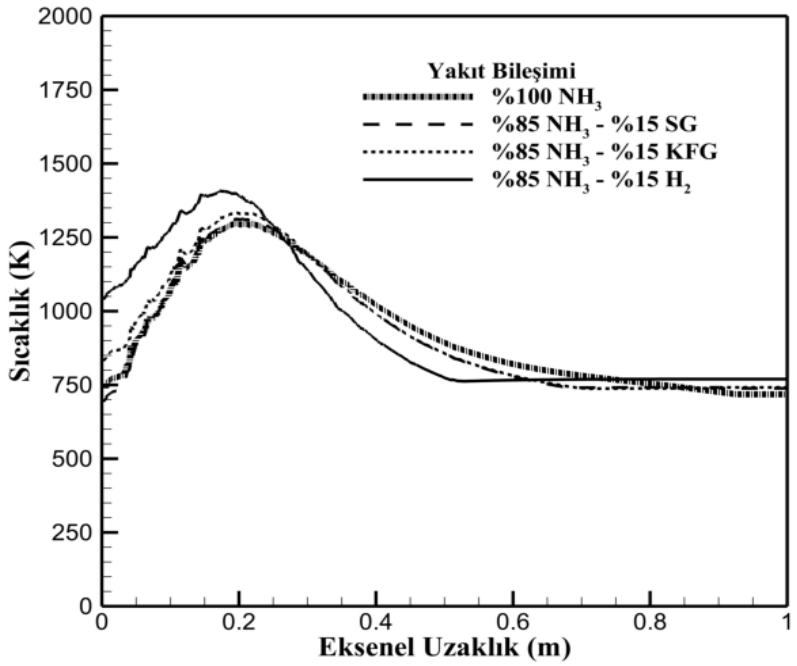
6.2.4. NH_3-HZKG yakıt karışımlarının sayısal modelleme sonuçları

Tez çalışmasının bu bölümünde, NH_3-HZKG yakıt karışımları için elde edilen sayısal modelleme sonuçları sunulmuş ve tartışılmıştır. Bu kapsamda, NH_3-KFG ve NH_3-SG yakıt karışımlarının yakılması sonucunda yanma odası içerisinde meydana gelen sıcaklık dağılımları, hız profilleri ve NO emisyonları incelenmiştir. Ayrıca, elde edilen sonuçlar, NH_3-H_2 yakıt karışımlarının ve %100 NH_3 içeren yakıtın yanma ve emisyon karakteristikleri ile karşılaştırılmıştır. Böylece, NH_3-hava karışımına yapılan HZKG ilavesinin, NH_3-hava karışımının yanma ve emisyon performansı üzerinde oluşturduğu etkiler detaylı olarak araştırılmıştır. Çalışmanın bu bölümündeki sonuçlar, %15, %30 ve %45 kütlesel HZKG karışım oranları için üç bölüm halinde verilmiştir.

%85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının sayısal modelleme sonuçları

Şekil 6.11'de, %85 NH_3-%15 KFG, %85 NH_3-%15 SG, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımlarının ve %100 NH_3 içeren yakıtın yanma odası boyunca tahmin edilen eksenel sıcaklık dağılımları verilmiştir. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının alev bölgesi için meydana getirdiği eksenel sıcaklık profilleri birbirleri ile karşılaştırıldığında, %85 NH_3-%15 KFG yakıt karışımının eksenel sıcaklık değerlerinin daha yüksek olduğu

görülmektedir. Bununla birlikte, alev bölgesi için, %100 NH_3 içeren yakıtın yakıldığı duruma kıyasla, %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının daha yüksek eksenel sıcaklık profilleri meydana getirdiği görülmüş olup, bu bölgedeki en yüksek eksenel sıcaklık değerlerine ise %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımının yakılması ile ulaşılmıştır. Yanma odasının merkez ekseni boyunca ulaşılan en yüksek eksenel sıcaklık değerleri alev bölgesinde meydana gelmiş olup, bu değerler, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı için 1407,52 K, %85 NH_3-%15 KFG yakıt karışımı için 1333,74 K, %85 NH_3-%15 SG yakıt karışımı için 1312,94 K ve %100 NH_3 içeren yakıt için 1296,82 K olarak tahmin edilmiştir.



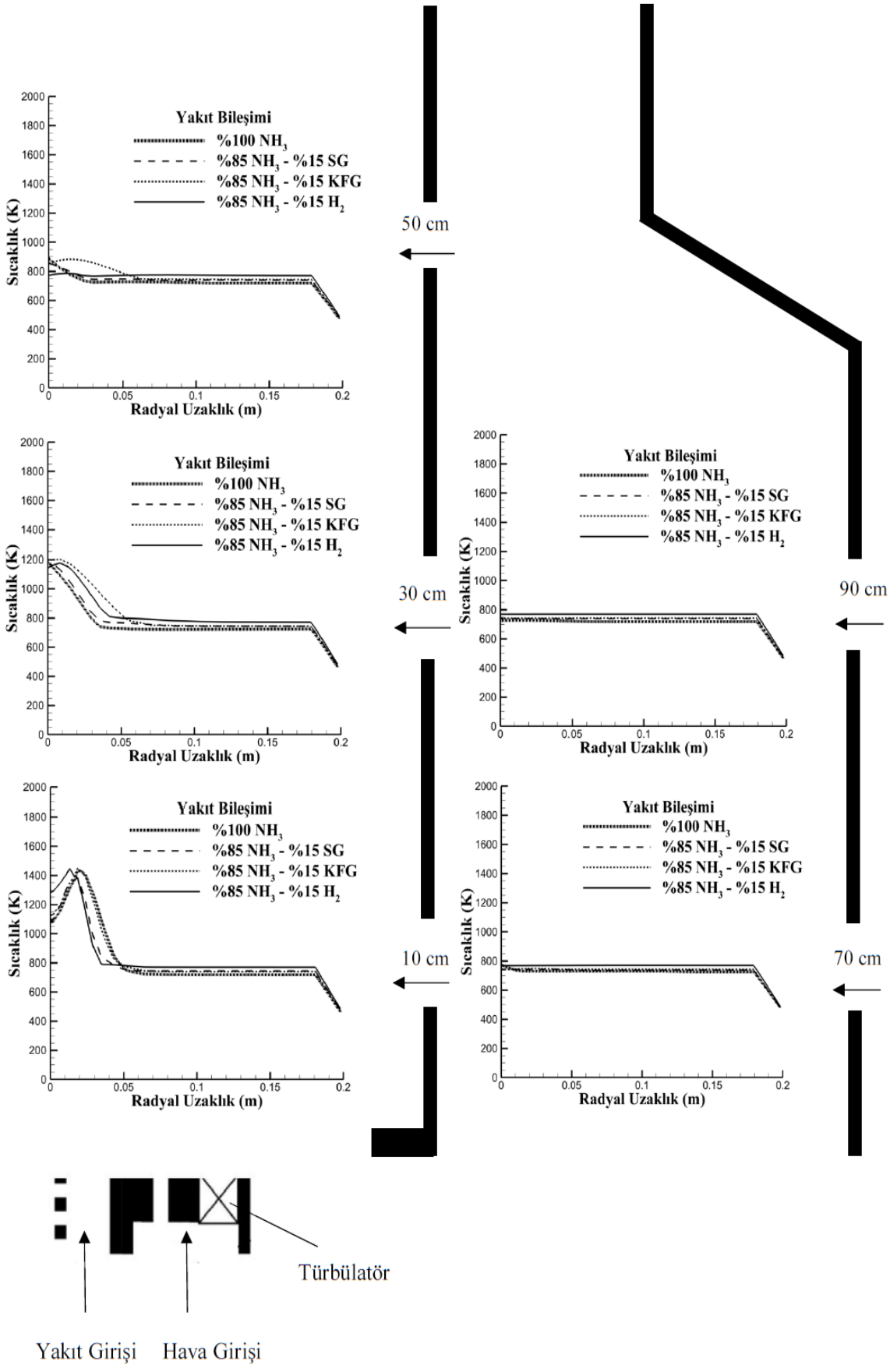
Şekil 6.11. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının eksenel sıcaklık profilleri

Şekil 6.12'de %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımları için yanma odası boyunca tahmin edilen radyal sıcaklık profilleri verilmiştir. Ek olarak, bu yakıt karışımları için elde edilen sonuçlar, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı ve %100 NH_3 içeren yakıtın yanma odası boyunca meydana getirdiği radyal sıcaklık dağılımları ile karşılaştırılmıştır. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının yanma odası içerisindeki radyal sıcaklık profilleri genel olarak incelendiğinde, %100 NH_3 içeren yakıtın yanma performansına göre daha iyi bir sonuç elde edildiği görülmektedir. Dolayısıyla, yakıt karışımı içerisinde kütlesel olarak %15 oranında KFG veya SG bulunmasının, NH_3-hava karışımının yanma performansını yükselttiği söylenebilir. KFG ve SG'nin bünyesinde bulunan CH_4, H_2 ve CO gibi yanabilir bileşenler, NH_3-hava alevinin yanma performansının yükselmesinde etkili olmuştur.

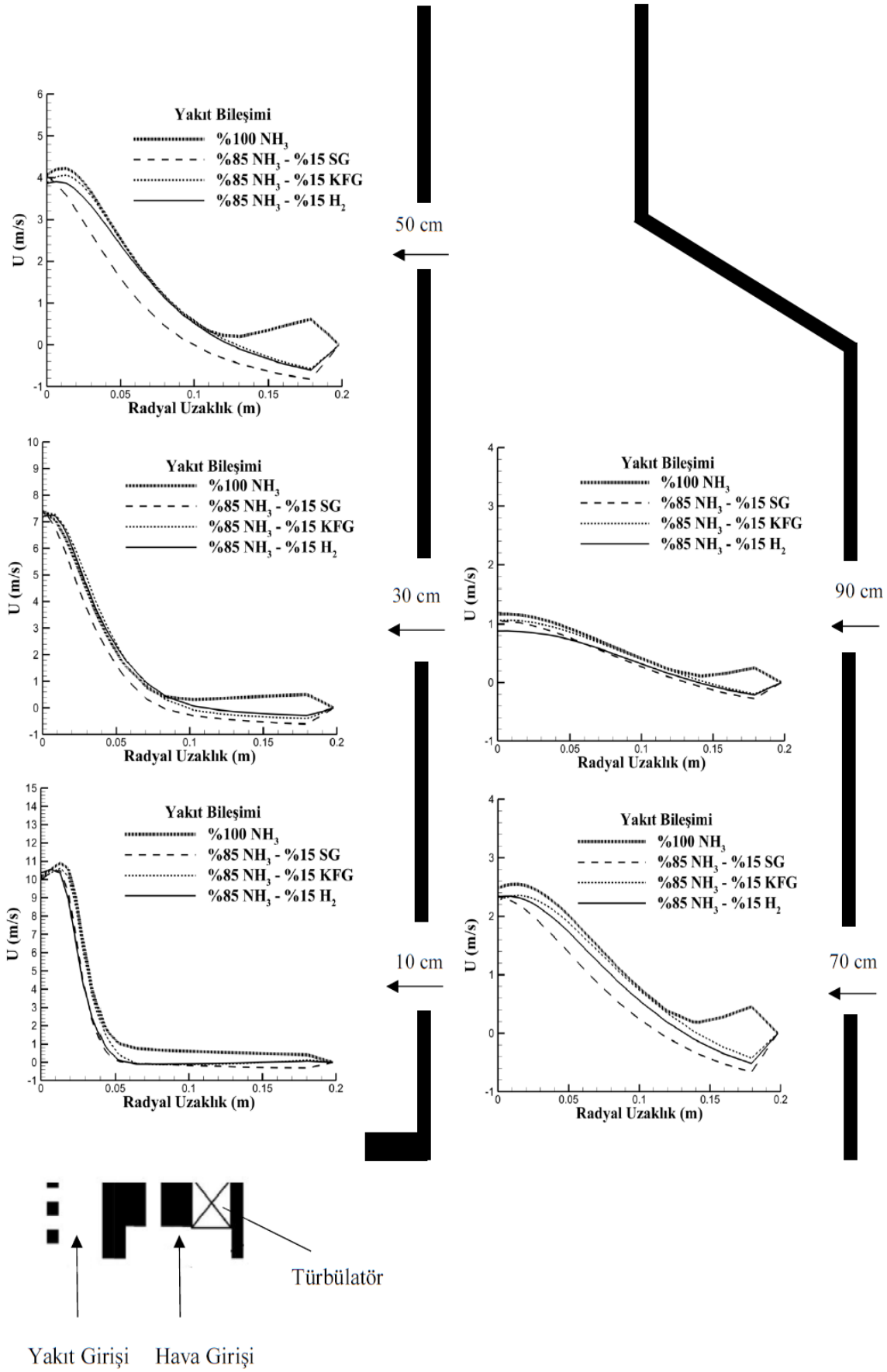
%85 NH_3-%15 KFG ve %85 NH_3-%15 SG yakıt karışımlarının yanma odası boyunca sergilediği yanma performansları genel olarak karşılaştırıldığında ise, %85 NH_3-%15 KFG yakıt karışımının yanma performansının daha iyi olduğu görülmektedir. Bu durumun esas nedeni, %85 NH_3-%15 KFG yakıt karışımının, bünyesinde bulundurduğu CH_4 ve H_2 oranının daha fazla olmasıdır. Diğer taraftan, yanma odasının 70 cm ve 90 cm eksenel mesafeleri için elde edilen radyal sıcaklık profillerinin birbirlerine yaklaştığı ve yanma odasının diğer bölgelerine kıyasla, daha homojen bir sıcaklık dağılımı meydana geldiği gözlemlenmiştir.

Şekil 6.12'de gösterilen tüm yakıtlar için tahmin edilen radyal sıcaklık dağılımları genel olarak değerlendirildiğinde, en iyi yanma performansına %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı ile ulaşıldığı söylenebilir. Diğer yakıt bileşimlerine kıyasla, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı içerisinde serbest azot ve CO gibi bileşenlerin bulunmaması ve bu yakıt karışımının daha yüksek ısıl değere sahip olması, yanma odası boyunca daha yüksek radyal sıcaklık değerleri elde edilmesini sağlamıştır.

Şekil 6.13'de, çalışmanın bu bölümüne konu olan yakıtlar için yanma odası boyunca tahmin edilen eksenel hız dağılımları sunulmuştur. Sonuçlar genel olarak incelendiğinde, yanma odası içerisindeki en yüksek eksenel hız değerlerinin alev bölgesinde meydana geldiği görülmektedir. Bu durum, alev bölgesinde meydana gelen reaksiyonlar ve yakıcıya beslenen hava ve yakıtın belirli bir hıza sahip olmalarından kaynaklanmaktadır. Alev bölgesinden yanma odası çıkışına doğru ilerledikçe, yanma odası merkezi ile duvarları arasındaki eksenel hız değerlerinin birbirlerine yaklaştığı görülmektedir. Bu noktadan hareketle, yanma odası çıkışına yakın bölgelerde yanma sonu ürünlerinin daha homojen bir yayılım gösterdiği söylenebilir. Diğer taraftan, tahmin edilen en düşük eksenel hız değerlerinin %85 NH_3-%15 SG yakıt karışımının, en yüksek değerlerin ise %100 NH_3 içeren yakıtın yakılması durumunda oluştuğu gözlemlenmiş olup, Şekil 6.13'deki tüm yakıtlar için tahmin edilen eksenel hız profilleri arasında değişkenlikler olduğu tespit edilmiştir. Söz konusu yakıtların farklı ısıl değere sahip olması, 10 kW ısıl güç ve 0,83 eşdeğerlik oranındaki yanma şartlarının sağlanmasında farklı yakıt ve hava giriş debileri gerektirmektedir. Dolayısıyla, yanma odası boyunca tahmin edilen eksenel hız profilleri arasındaki farklılıklar olağandır.



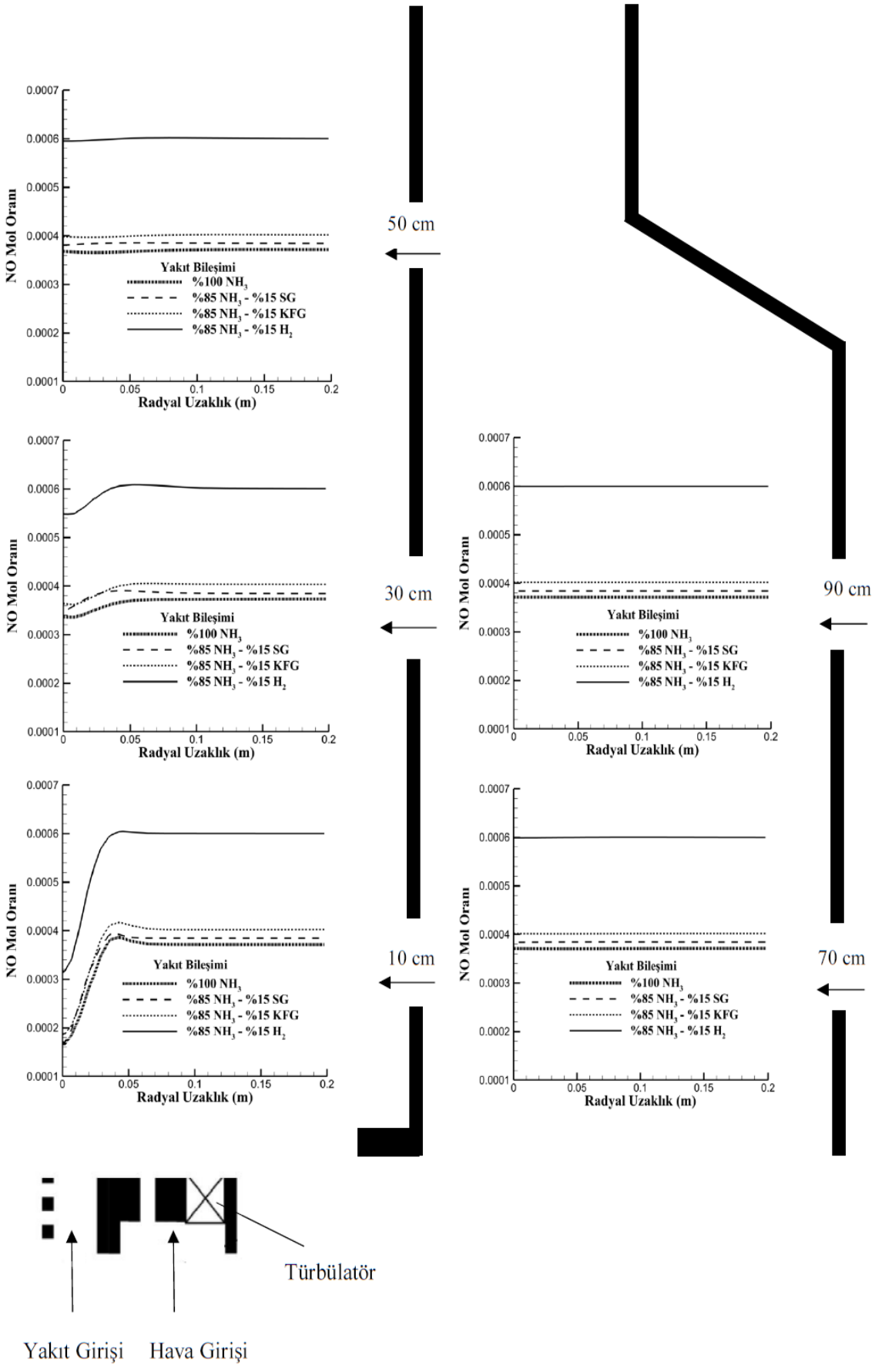
Şekil 6.12. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının radyal sıcaklık profilleri



Şekil 6.13. %85 NH_3-%15 HZGK yakıt karışımlarının eksenel hız profilleri

Şekil 6.14'te %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının yanması sonucunda meydana gelen NO emisyon dağılımları gösterilmiş olup, tahmin edilen sonuçlar, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımının ve %100 NH_3 içeren yakıtın NO emisyon profilleri ile karşılaştırılmıştır. Öncelikle, %100 NH_3 içeren yakıt içerisine yapılan HZKG ilavesinin yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonları üzerindeki etkileri incelendiğinde, hem KFG hem de SG ile karıştırmanın NO emisyonlarını arttırdığı Şekil 6.14'ten çıkarılabilir. %100 NH_3 içeren yakıta kıyasla, %85 NH_3-%15 KFG ve %85 NH_3-%15 SG yakıt karışımlarının bünyesinde bulunan NH_3 miktarı daha azdır. Buna rağmen, bahsi geçen yakıt karışımlarının daha yüksek NO emisyonları meydana getirmesi, termal-NO mekanizmasının daha baskın olduğuna işaret etmektedir. Ek olarak, NH_3-sentetik gaz yakıt karışımlarının yanma ve emisyon davranışları ile ilgili yapılan diğer çalışmalar [46,48] incelendiğinde, elde edilen bu sonucun, literatürdeki diğer sonuçlar ile uyumlu olduğu görülmüştür. Ayrıca, %85 NH_3-%15 KFG ve %85 NH_3-%15 SG yakıt karışımları, bünyelerinde serbest azot bulundurmaktadırlar. Dolayısıyla, söz konusu yakıt karışımlarının içerdikleri serbest azotun da yanma odası boyunca daha yüksek NO emisyonları oluşmasına katkı yaptığı düşünülmektedir.

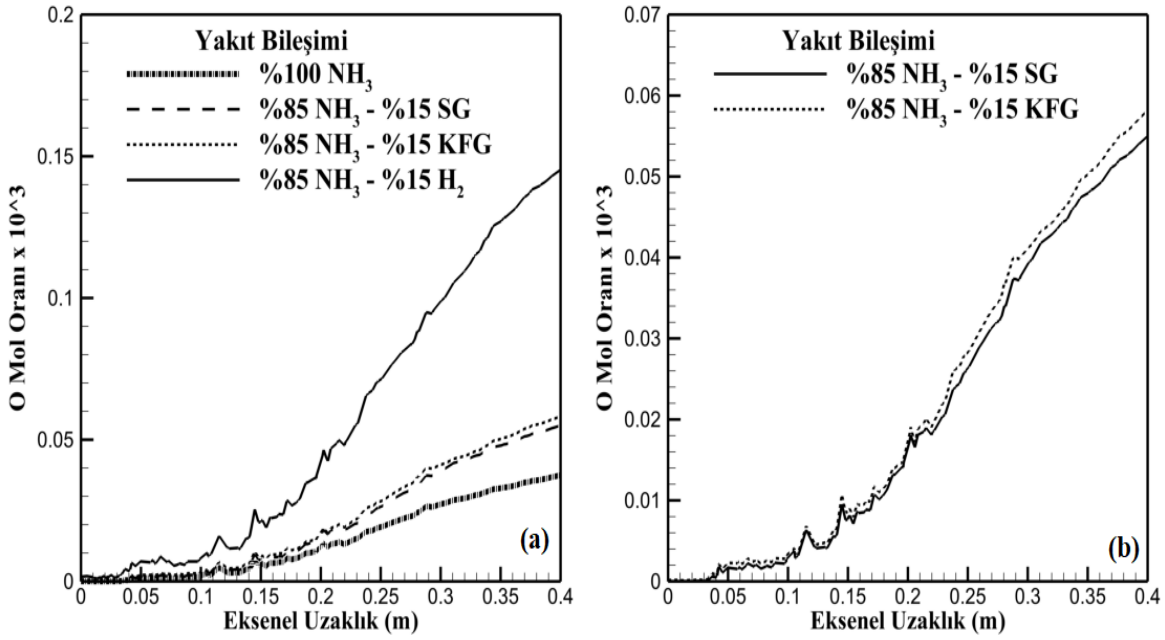
Şekil 6.14'te gösterilen tüm yakıtların NO emisyonları genel olarak karşılaştırıldığında, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımının çok daha yüksek oranda NO emisyonları meydana getirdiği görülmektedir. Bu durumun analizi için Şekil 6.11 ve Şekil 6.12'de sunulan sıcaklık dağılımlarına bakıldığında, her bir yakıt karışımının alev bölgesindeki sıcaklık profilleri ile Şekil 6.14'te gösterilen NO emisyon dağılımları arasında bir trend ilişkisi olduğu gözlemlenebilir. Böylece, bu bölümde, yanma ve emisyon davranışları tartışılan tüm yakıtların yanmasında, en etkili NO oluşum mekanizmasının termal-NO mekanizması olduğu ortaya konulmuştur.



Şekil 6.14. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının NO emisyon profilleri

Çalışmanın bu bölümünde ele alınan yakıt karışımlarının yanma odası boyunca oluşturdukları NO emisyonları üzerinde, temel olarak termal-NO mekanizmasının etkin olduğu yukarıda vurgulanmıştır. Bu sonuca, her bir yakıt karışımı için alev bölgesindeki sıcaklık ve NO emisyon profillerinin tutarlı bir yapıda olduğunun gözlemlenmesini müteakiben varılmıştır. Daha önceki bölümlerde belirtildiği gibi, termal-NO oluşum mekanizmasının esas nedeni, alev bölgesinde meydana gelen yüksek sıcaklık seviyeleri nedeniyle oksijenin parçalanma hızının artması ve O atomu konsantrasyonlarının yükselmesidir. Bu kapsamda, söz konusu yakıt karışımlarının NO emisyon oluşumları ile ilgili elde edilen sonuçların doğrulanması için, Şekil 6.15'te yanma odasının alev bölgesinde meydana gelen O radikal konsantrasyonları gösterilmiştir. Şekil 6.15a'da bu bölüme konu olan tüm yakıtlar için meydana gelen O radikal konsantrasyonları sunulurken, Şekil 6.15b'de ise sadece %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının O radikal oluşumları gösterilmiştir.

İlk olarak, Şekil 6.15a incelendiğinde, alev bölgesi için tahmin edilen sıcaklık değerleri ile O radikal profilleri arasında bir trend uyumu olduğu görülmektedir. Alev sıcaklıklarının yükselmesi, daha fazla oranda O radikali meydana gelmesine neden olmuştur. En düşük O radikal konsantrasyonları, %100 NH_3 içeren yakıtın yakılmasıyla meydana gelmiş olup, elde edilen sonuçlar, sırasıyla, %85 NH_3-%15 SG, %85 NH_3-%15 KFG ve %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımları için artan bir trend göstermiştir. Ek olarak, %85 NH_3-%15 KFG ve %85 NH_3-%15 SG yakıt karışımları için tahmin edilen O radikal profillerinin birbirlerine oldukça yakın olduğu görülmektedir. Bu nedenle, daha detaylı bir inceleme yapmak amacıyla, Şekil 6.15b'de sadece bu iki yakıt karışımı için alev bölgesinde ve sonrasında meydana gelen O radikal profilleri gösterilmiştir. Şekil 6.15b incelendiğinde, %85 NH_3-%15 KFG yakıt karışımı için tahmin edilen O radikal dağılımlarının biraz daha fazla olduğu rahatlıkla gözlemlenebilir. Dolayısıyla, elde edilen bu sonuçlar, yukarıda bahsi geçen tüm yakıtların yanma odası boyunca meydana getirdiği NO emisyon dağılımları üzerinde termal-NO mekanizmasının daha baskın olduğunu doğrular niteliktedir.



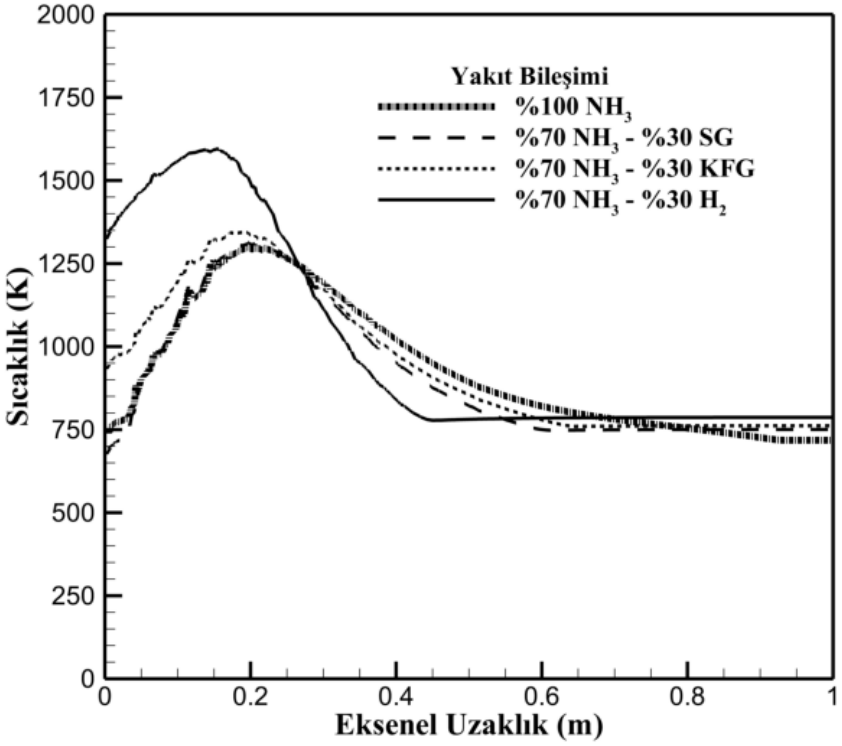
Şekil 6.15. %85 NH_3-%15 HZKG yakıt karışımlarının O radikal profilleri

%70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının sayısal modelleme sonuçları

Çalışmanın bu bölümünde, HZKG'nin kütlesel karıştırma oranları %30'a yükseltilmiştir. Böylece, %70 NH_3-%30 KFG ve %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımlarının yanma odası boyunca meydana getirdiği sıcaklık, hız ve NO emisyon dağılımları incelenmiştir. Diğer taraftan, söz konusu yakıt karışımlarının sayısal modelleme sonuçları, %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımı ve %100 NH_3 içeren yakıtın yakılması sonucu elde edilen tahmin sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Böylece, %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının yanma ve emisyon davranışlarının karşılaştırılmalı bir şekilde araştırılması amaçlanmıştır.

Şekil 6.16'da, yanma odası boyunca tahmin edilen eksenel sıcaklık profilleri sunulmuştur. Elde edilen sonuçlara göre, HZKG kütlesel karışım oranının %15'den %30'a çıkarılması, alev bölgesindeki maksimum eksenel sıcaklık değerlerinin NH_3-KFG yakıt karışımları için 1333,74 K'den 1343,53 K'e, NH_3-SG yakıt karışımları için 1312,94 K'den 1313,81 K'e yükselmesini sağlamıştır. Yukarıda verilen sıcaklık değerlerinden de anlaşılacağı gibi, yakıt karışımı içerisindeki KFG miktarındaki artış, SG miktarındaki artışa kıyasla, alev bölgesinde ulaşılan maksimum eksenel sıcaklık değerini yükseltmede daha etkilidir. Buna karşın, yakıt karışımı bünyesindeki SG miktarının yükselmesi, dikkate değer bir değişim meydana getirmemiştir. Ek olarak, Şekil 6.16'da gösterilen tüm yakıtlar için elde edilen

eksenel sıcaklık profilleri birbirleri ile karşılaştırıldığında, alev bölgesi için en yüksek eksenel sıcaklık değerlerine %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımı ile ulaşılmış olup, bunu, %70 NH_3-%30 HZKG ve %100 NH_3 içeren yakıt takip etmiştir. Alev sonrası bölgede, yanma odasından çevreye olan ısı kayıpları nedeniyle azalmaya başlayan sıcaklık değerleri, yanma odası çıkışına doğru birbirlerine yaklaşmıştır. Yanma odası çıkışı için ulaşılan sıcaklık değerleri ise, %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımı için 786,813 K, %70 NH_3-%30 KFG yakıt karışımı için 761,64 K, %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımı için 750,39 K ve %100 NH_3 içeren yakıt için 718,255 K olarak tahmin edilmiştir.



Şekil 6.16. %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının eksenel sıcaklık profilleri

Şekil 6.17'de, %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımları için yanma odası boyunca meydana gelen tahmini radyal sıcaklık profilleri sunulmuştur. Ayrıca, Şekil 6.17'ye, %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımı ve %100 NH_3 içeren yakıt için tahmin edilen radyal sıcaklık profilleri de dahil edilmiş olup, elde edilen sonuçlar birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Şekil 6.17'deki sonuçlara göre, HZKG kütlesel karışım oranının %30 olduğu durumda alevin iç bölgesi için tahmin edilen sıcaklık değerleri, %70 NH_3-%30 KFG yakıt karışımı için 1207,86 K, %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımı için ise 1105,75 K'dir. Diğer taraftan, HZKG kütlesel karışım oranının %15 olduğu durumda, bu sıcaklıklar, %85 NH_3-%15 KFG yakıt karışımı

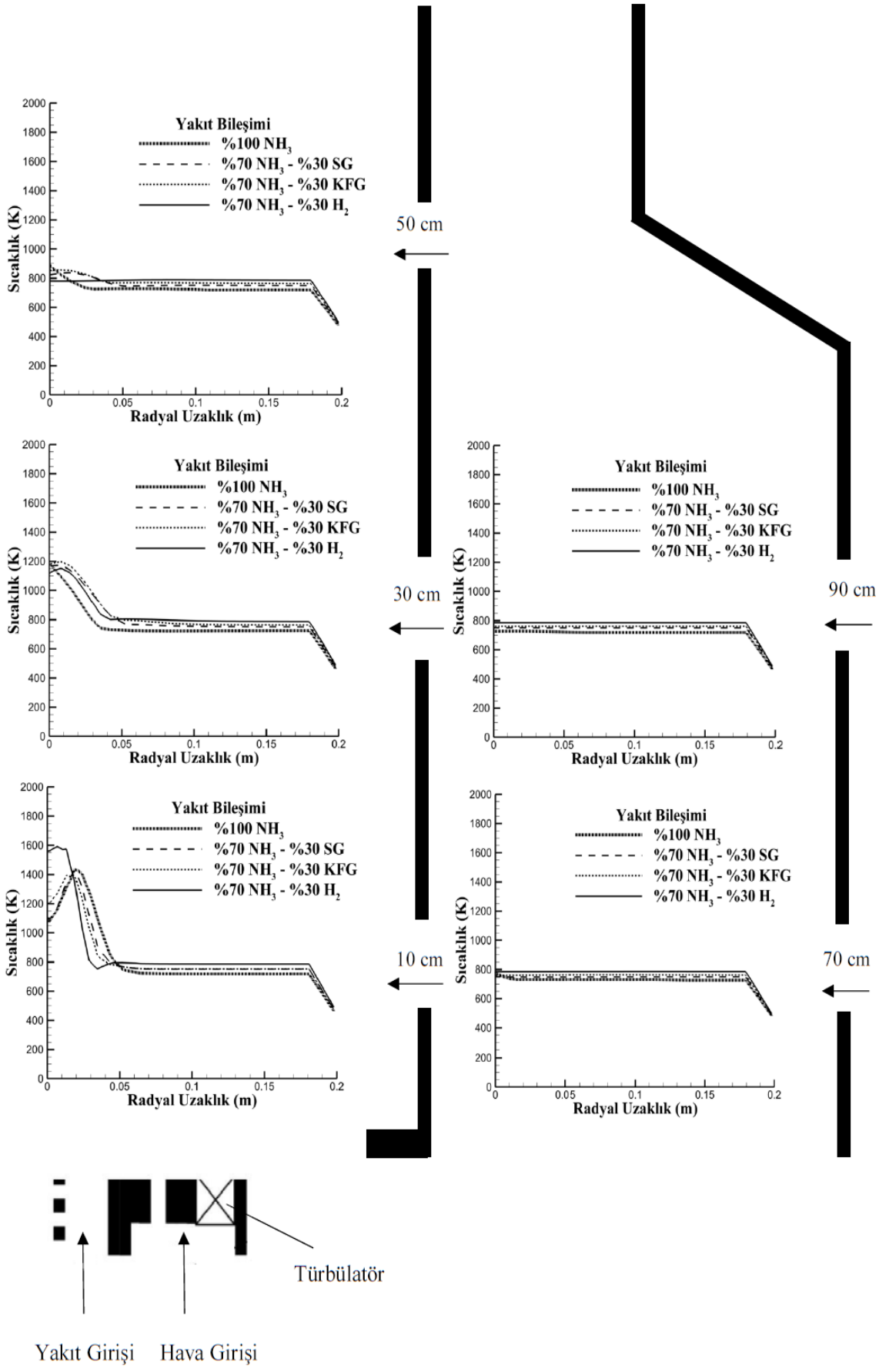
için 1137,79 K, %85 NH_3-%15 SG yakıt karışımı için ise 1100,8 K'dir. Dolayısıyla, HZKG kütlesel karıştırma oranının %15'den %30'a çıkarılmasının, alevin iç bölgesinde tahmin edilen sıcaklık değerlerinde yükselmeler meydana getirdiği söylenebilir. Sonuç olarak, yakıt karışımı içerisindeki HZKG konsantrasyonunun artması NH_3-hava karışımının alev sıcaklığını daha da arttırmıştır. Bu durum üzerindeki en etkili faktör, %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımları içerisinde bulunan H_2, CH_4 ve CO gibi yanabilir bileşenlerin kütlesel yüzde oranlarındaki yükselmedir.

%70 NH_3-%30 KFG ve %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımlarının radyal sıcaklık dağılımları kendi içlerinde değerlendirildiğinde, yanma odasının merkezi boyunca, 10 cm eksenel mesafede (yani alevin iç bölgesi), %70 NH_3-%30 KFG karışımının tahmin edilen sıcaklık değerinin daha yüksek olduğu gözlemlenmiştir. Bu durum, tıpkı daha önceki bölümlerde açıklandığı gibi, söz konusu yakıt karışımının bünyesinde bulundurduğu CH_4 ve H_2 miktarının daha yüksek olması nedeniyle meydana gelmiştir. Diğer taraftan, %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının yanma odası boyunca gösterdikleri yanma performansları genel olarak karşılaştırıldığında ise, %70 NH_3-%30 KFG yakıt karışımının göstermiş olduğu yanma performansının daha iyi olduğu söylenebilir. Fakat, her iki yakıt karşımı için yanma odasının alev bölgesi haricindeki diğer kısımlarında meydana gelen radyal sıcaklık profillerinin birbirlerine çok yakın olduğu görülmektedir.

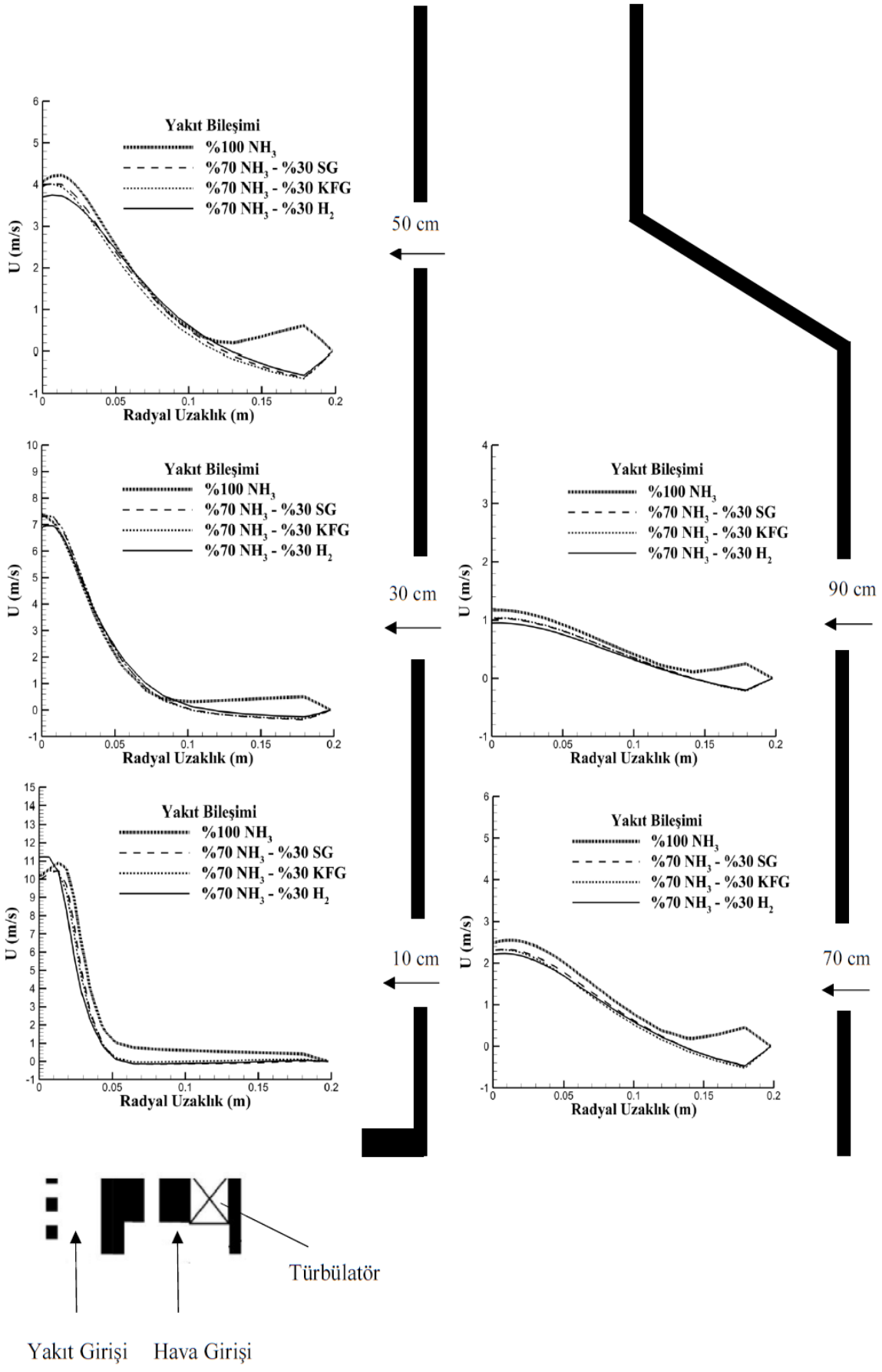
Son olarak, Şekil 6.17'de tahmini radyal sıcaklık profilleri gösterilen yakıtların hepsi dikkate alındığında, yanma odası boyunca en iyi yanma performansına %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımının yakılması ile ulaşıldığı sonucuna varılabilir. Bununla birlikte, yanma odasının 10 cm eksenel mesafesi dışındaki diğer bölgeler için tahmin edilen sıcaklık profilleri, birbirlerine oldukça yakın bir dağılım göstermişlerdir. Bu durumun, yanma odası içerisinden taşınım ve ışınım nedeniyle meydana gelen ısı transferi ve çeşitli yakıt bileşimlerinin yakılması sonucunda oluşan yanma sonu ürünlerinin absorbe ettiği farklı oranlardaki ısı miktarı ile bağlantılı olduğu düşünülmektedir. 10 cm eksenel mesafede, alevin iç bölgesi için tahmin edilen sıcaklık değerleri, %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımı için 1560,41 K, %70 NH_3-%30 KFG yakıt karışımı için 1207,86 K, %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımı için 1105,75 K ve %100 NH_3 içeren yakıt için 1091,37 K'dir. Alevin iç bölgesi için tahmin edilen bu sıcaklık değerleri, yanma odası duvarlarına doğru ilerledikçe bir miktar artmış olup, daha sonra 5 cm radyal mesafeye kadar hızlı bir düşüş eğilimi göstermişlerdir. Sıcaklık değerlerinde gözlemlenen bu ani azalma, daha önceki bölümlerde

de bahsedildiği gibi yanma odasının ani genişlemeli bir tasarıma sahip olmasından kaynaklanmaktadır. Her bir yakıt bileşiminin söz konusu bölgedeki (alevin içinden 5 cm radyal mesafeye kadar) göstermiş oldukları sıcaklık profilleri karşılaştırıldığında, %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımı için tahmin edilen sıcaklık profilinin çok daha hızlı bir şekilde azaldığı görülmektedir. Bu durum, yanma odası içerisinde meydana gelen yanma sonu ürünlerinin eksenel hız dağılımlarının incelenmesiyle analiz edilebilir.

Şekil 6.18'de, %100 NH_3 içeren yakıt, %70 NH_3-%30 HZKG ve %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımları için yanma odası boyunca tahmin edilen eksenel hız dağılımları verilmiştir. İlk olarak, alev bölgesi incelendiğinde, Şekil 6.17'de gösterilen radyal sıcaklık profilleri ile Şekil 6.18'de gösterilen eksenel hız profilleri arasında tutarlı bir yapı olduğu görülmektedir. Dolayısıyla, alev bölgesinde meydana gelen radyal sıcaklık profilleri ve yanma sonu ürünlerinin bu bölgedeki yayılımları arasında bir trend ilişkisi olduğu söylenebilir. Diğer taraftan, NH_3-HZKG yakıt karışımları için bir önceki bölümde (Şekil 6.13) tahmin edilen eksenel hız profilleri de dikkate alındığında, yakıt karışımı içerisindeki KFG veya SG oranının %15'den %30'a yükseltilmesinin, NH_3-HZKG yakıt karışımları için tahmin edilen eksenel hız profilleri üzerinde çok fazla bir değişim meydana getirmediği görülmüştür. Bu durumun, her bir kütlesel karıştırma oranı için yanma odasına eksenel yönde beslenen hava giriş debilerinin birbirlerine yakın değerlere sahip olması nedeniyle meydana geldiği düşünülmektedir. Ayrıca, söz konusu kütlesel karıştırma oranları için yanma odası içerisinde meydana gelen resirkülasyon bölgelerinin benzer şekilde konumlandıkları gözlemlenmiştir.



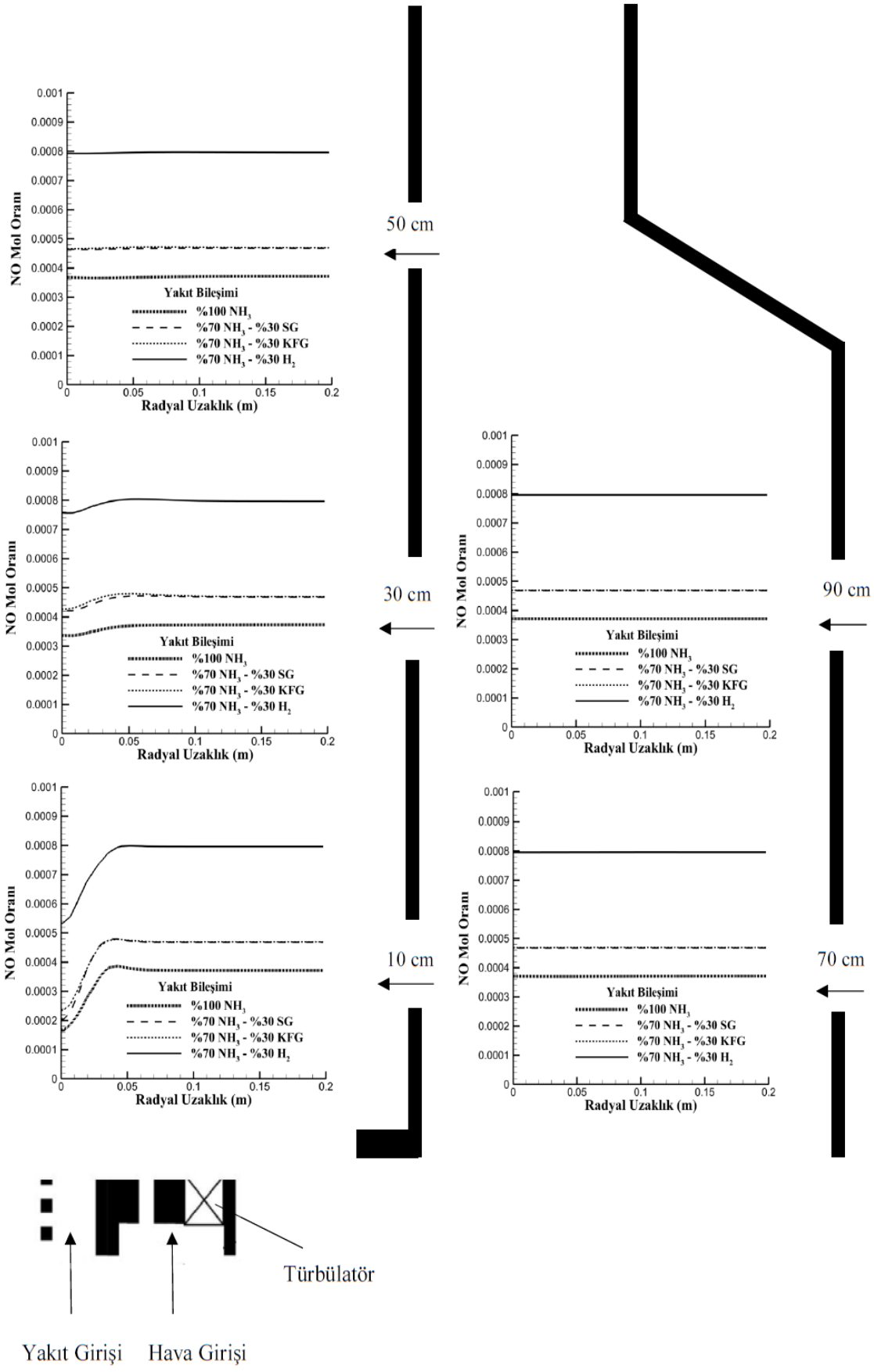
Şekil 6.17. %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının radyal sıcaklık profilleri



Şekil 6.18. %70 NH_3-%30 HZGK yakıt karışımlarının eksenel hız profilleri

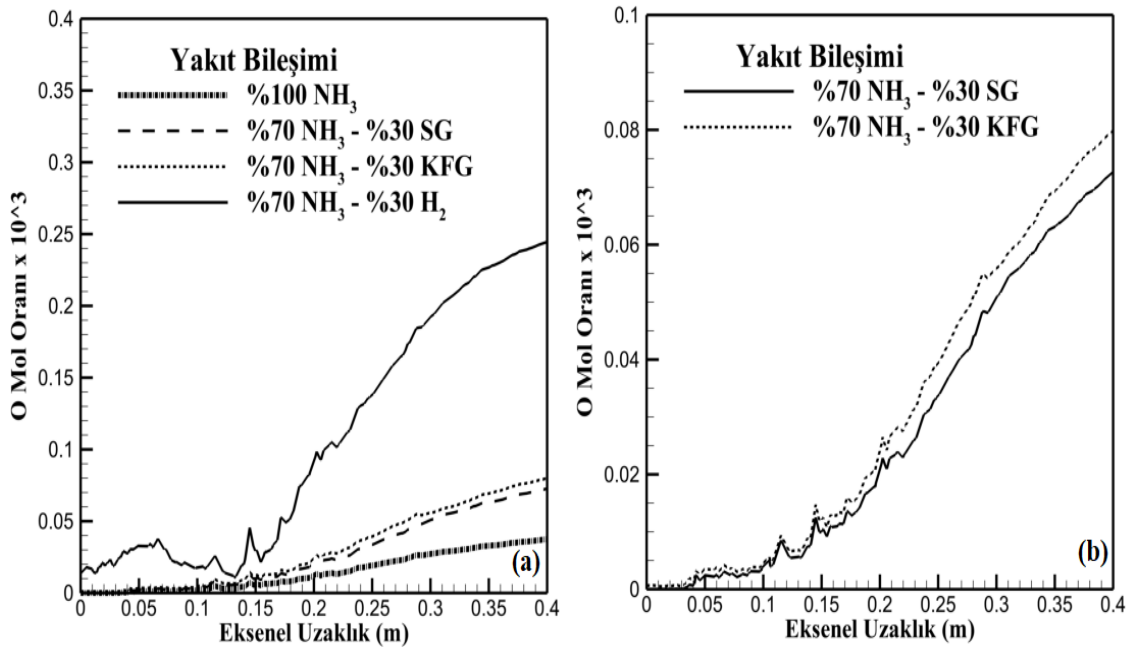
Şekil 6.19'da, çalışmanın bu bölümüne konu olan yakıt karışımlarının NO emisyon dağılımları gösterilmiştir. Şekil 6.19'daki sonuçlar genel olarak incelendiğinde, yanma odası boyunca tahmin edilen en yüksek NO emisyonlarının %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımının yakılması sonucunda meydana geldiği görülmektedir. Bununla birlikte, %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının NO emisyon performansının %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımının performansına kıyasla daha iyi olduğu tespit edilmiştir. %70 NH_3-%30 H_2 ve %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının alev bölgesindeki sıcaklık değerleri dikkate alındığında, alev sıcaklıklarındaki yükselme trendi ile yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyon seviyeleri arasında bir tutarlılık olduğu göze çarpmaktadır. Bu noktadan hareketle, bahsi geçen yakıt karışımlarının NO emisyonları üzerinde, termal-NO mekanizmasının daha baskın bir rol oynadığı söylenebilir.

%70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının NO emisyon profilleri kendi içlerinde değerlendirildiğinde ise, HZKG kütlesel karıştırma oranının %30'a yükseltilmesiyle, bileşiminde SG bulunduran yakıt karışımının NO emisyonlarının daha fazla oranda arttığı ve her iki yakıt karışımı için tahmin edilen sonuçların neredeyse eşit seviyelerde olduğu tespit edilmiştir. Bu durumun analiz edilmesi için alev sıcaklıkları incelendiğinde, %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımının alev sıcaklığının (1105,75 K) daha düşük olduğu görülmektedir. Dolayısıyla, %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımının yakılmasında, termal-NO haricinde başka bir oluşum mekanizmanın daha etkili olduğu sonucuna varılabilir. Yapılan bir çalışmada [46], yakıt karışımı içerisine yapılan H_2 veya CO eklentisinin, NH_3'ün ayrışma hızı üzerinde eşit derecede etkiye sahip olduğu belirtilmiştir. Bu bilgi ışığında, %70 NH_3-%30 SG ve %70 NH_3-%30 KFG yakıt karışımları içerisindeki kütlesel H_2 ve CO oranlarının incelenmesi doğru olacaktır. %70 NH_3-%30 KFG yakıt karışımı içerisindeki kütlesel hidrojen ve karbon monoksit oranları, sırasıyla, %3,08 ve %4,67'dir. Buna karşın, %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımı ise, kütlece %1,92 oranında H_2 ve %21,34 oranında CO içermektedir. Yakıt karışımları içerisindeki kütlesel H_2 ve CO oranları karşılaştırıldığında, H_2 miktarlarının birbirlerine yakın olduğu, fakat %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımının çok daha fazla oranda CO içerdiği görülmektedir. Dolayısıyla, daha düşük alev sıcaklığına sahip bu yakıt karışımının yakılması sırasında, içerdiği yüksek orandaki CO'nun etkisiyle NH_3'ün ayrışma hızı artmıştır. Sonuç olarak, HZKG kütlesel karıştırma oranının %30'a yükseltilmesi, %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımı için yakıt-NO mekanizmasını daha etkin hale getirdiğinden, yanma odası içerisinde meydana gelen NO emisyonları neredeyse eşit seviyelere ulaşmıştır.



Şekil 6.19. %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının NO emisyon profilleri

%70 NH_3-%30 HZKG, %70 NH_3-%30 H_2 yakıt karışımlarının ve %100 NH_3 içeren yakıtın NO emisyonları genel olarak karşılaştırıldığında, termal-NO mekanizmasının daha baskın olduğu yukarıda vurgulanmıştır. Bu durumun daha detaylı olarak incelenmesi amacıyla, Şekil 6.20'de, söz konusu yakıt karışımları için alev bölgesinde tahmin edilen O radikal konsantrasyonları gösterilmiştir. Şekil 6.20a incelendiğinde, yanma odası boyunca tahmin edilen NO emisyon dağılımları ile O radikal profillerinin uyumlu bir trend içinde olduğu tespit edilmiştir. Dolayısıyla, alev sıcaklıklarının artması, alev bölgesinde meydana gelen O radikali konsantrasyonlarını arttırmış ve bunun sonucunda da yanma odası içerisinde meydana gelen NO emisyonları yükselmiştir. Şekil 6.20b'de ise %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımları için tahmin edilen O radikal konsantrasyonları kendi içlerinde karşılaştırılmıştır. Şekil 6.20b'ye bakıldığında, %70 NH_3-%30 KFG yakıt karışımı için tahmin edilen O radikal konsantrasyonunun daha fazla olduğu görülmektedir. Dolayısıyla, termal-NO mekanizmasının etkisiyle %70 NH_3-%30 KFG yakıt karışımının daha yüksek NO emisyonları meydana getirmesi beklenebilir. Buna karşın, daha önce de belirtildiği gibi, %70 NH_3-%30 SG yakıt karışımının yakılmasında yakıt-NO mekanizması daha etkin olmuştur. Bu nedenle, bahsi geçen %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımları için yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonları neredeyse eşit seviyelerdedir.

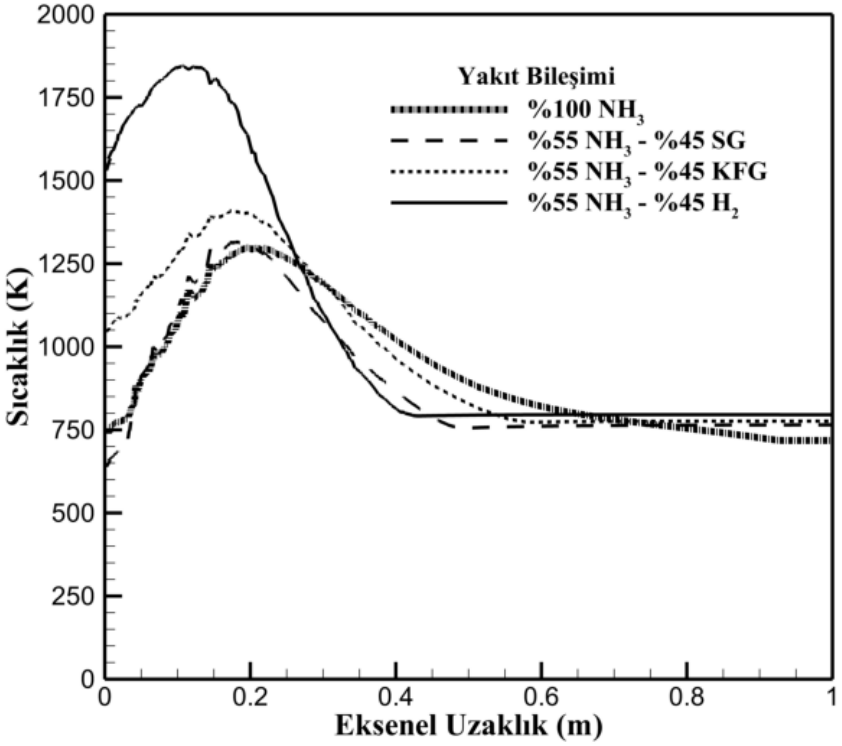


Şekil 6.20. %70 NH3-%30 HZKG yakıt karışımlarının O radikal profilleri

%55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının sayısal modelleme sonuçları

Tez çalışmasının bu bölümündeki sayısal modellemeler, yakıt karışımı içerisindeki HZKG kütlesel karıştırma oranlarının %45'e çıkarıldığı yanma şartları için gerçekleştirilmiştir. Bu kapsamda, yakıt karışımı içerisinde kütlece %45 oranında KFG veya SG bulunmasının, yanma odası boyunca meydana gelen sıcaklık ve NO emisyonları üzerindeki etkileri incelenmiştir. Ek olarak, %55 NH_3-%45 HZKG, %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıt için elde edilen sayısal modelleme sonuçları birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Böylece, yakıt karışımı içerisine yapılan kütlece %45 oranında H_2 veya HZKG eklentisinin, NH_3-hava alevinin yanma ve emisyon performansı üzerinde meydana getirdiği etkiler, karşılaştırmalı olarak incelenmiştir.

Şekil 6.21'de söz konusu yakıt karışımlarının yanma odası boyunca meydana getirdiği eksenel sıcaklık profilleri verilmiştir. Şekil 6.21 ve daha önceki bölümlerde sunulan sonuçlara göre, HZKG kütlesel karıştırma oranlarının %15, %30 ve %45 olduğu durumlar için, alev bölgesinde tahmin edilen maksimum eksenel sıcaklık değerleri, sırasıyla, NH_3-KFG yakıt karışımları için 1333,74 K, 1343,53 K ve 1408,98 K olup, NH_3-SG yakıt karışımları için ise, 1312,94 K, 1313,81 K ve 1314,89 K'dir. Verilen sıcaklık değerleri incelendiğinde, NH_3-KFG yakıt karışımları için alev bölgesinde ulaşılan maksimum eksenel sıcaklık değerlerinin çok daha yüksek oranda bir artış gösterdiği sonucuna varılabilir. Ayrıca, Şekil 6.21'de gösterilen tüm yakıt karışımları için alev bölgesinde tahmin edilen eksenel sıcaklık profilleri genel olarak değerlendirildiğinde ise, en yüksek sıcaklık değerlerine %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımı ile ulaşıldığı tespit edilmiştir. Bu durumun, söz konusu yakıt karışımının daha fazla oranda hidrojen gazı içermesi nedeniyle meydana geldiği düşünülmektedir. Dolayısıyla, yakıt karışımının bünyesinde bulunan daha yüksek miktardaki hidrojen konsantrasyonu sebebiyle, %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımının reaktivite özelliğinin, diğer yakıt karışımlarına kıyasla daha iyi olduğu söylenebilir.



Şekil 6.21. %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının eksenel sıcaklık profilleri

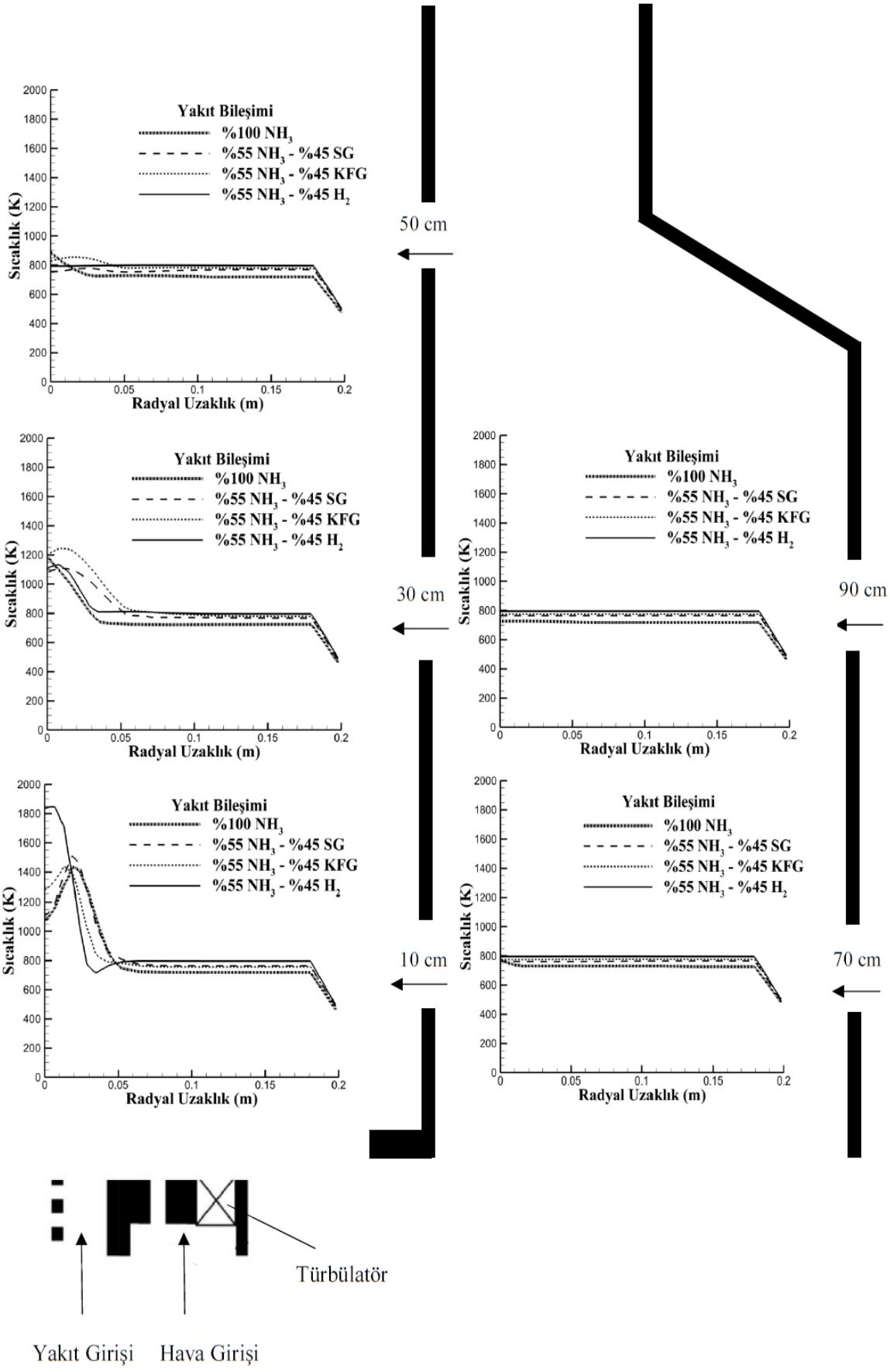
Şekil 6.22'de, %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımları için yanma odası boyunca tahmin edilen radyal sıcaklık profilleri sunulmuştur. Ayrıca, Şekil 6.22'ye, %55 NH_3-%45 H_2 ve %100 NH_3 içeren yakıt için tahmin edilen sonuçlar da eklenmiş olup, söz konusu yakıtlar için yanma odası boyunca meydana gelen radyal sıcaklık profilleri birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Öncelikle, NH_3-HZKG yakıt karışımları için daha önceki bölümlerde elde edilen sayısal modelleme sonuçları ile Şekil 6.22'de sunulan sonuçlar karşılaştırıldığında, HZKG kütlesel karıştırma oranlarının %15, %30 ve %45 olduğu şartlarda, alevin iç bölgesi için tahmin edilen sıcaklık değerlerinin, sırasıyla, NH_3-KFG yakıt karışımları için 1137,79 K, 1207,86 K ve 1287,35 K, NH_3-SG yakıt karışımları için ise, 1100,8 K, 1105,75 K ve 1125,26 K olduğu tespit edilmiştir. Yakıt karışımı içerisinde bulunan HZKG'nin %45'e yükseltilmesi, ortamdaki H_2, CH_4 ve CO gibi yanabilir bileşenlerin konsantrasyonlarını daha da arttırmıştır. Buna bağlı olarak da, alev sıcaklıkları yükselmiştir.

%55 NH_3-%45 KFG ve %55 NH_3-%45 SG yakıt karışımlarının radyal sıcaklık dağılımları kendi içlerinde değerlendirildiğinde, %55 NH_3-%45 KFG yakıt karışımı için alevin iç bölgesinde tahmin edilen sıcaklık değerinin daha yüksek olduğu tespit edilmiştir. Bu

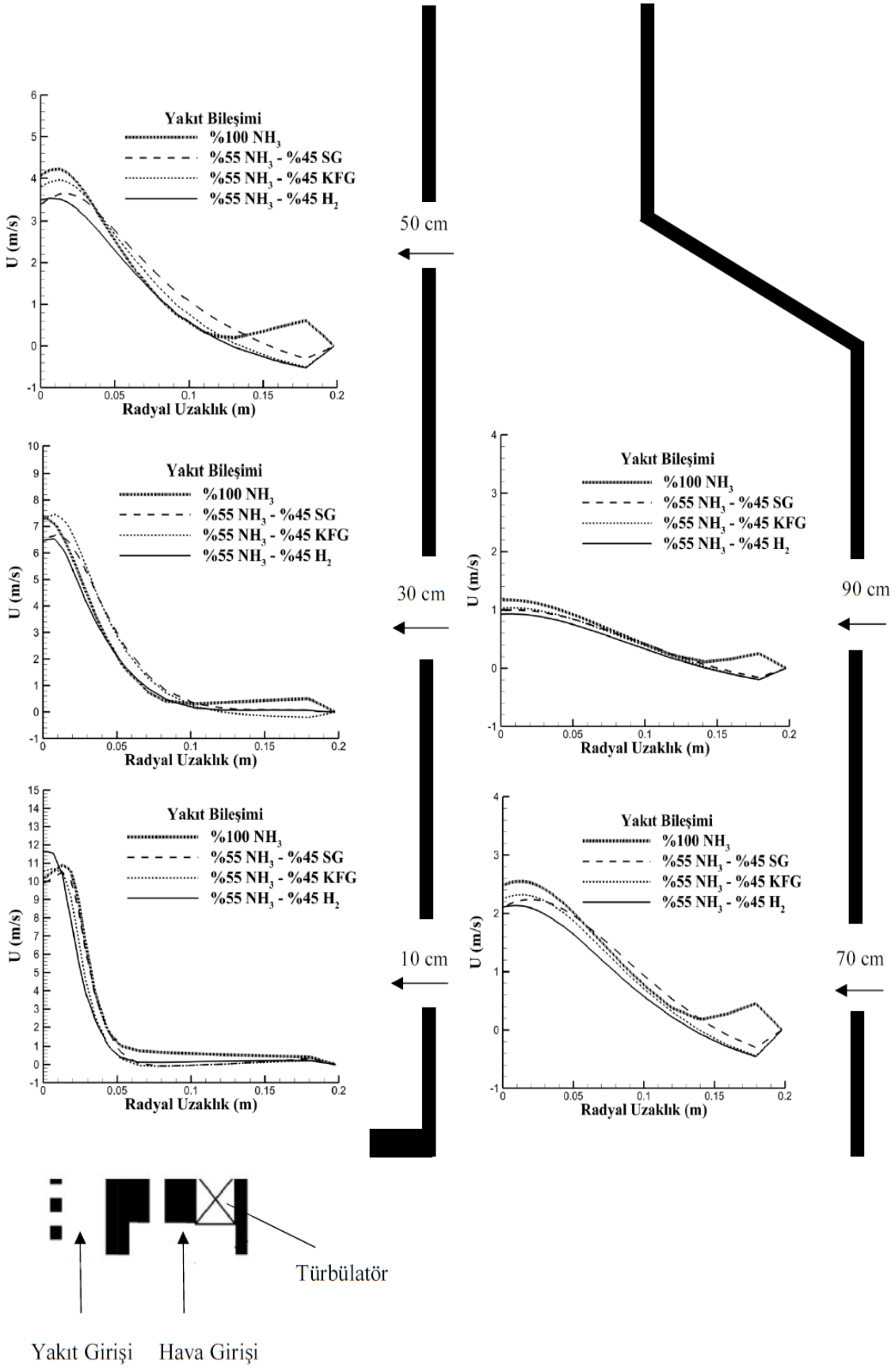
durum, %55 NH_3-%45 KFG yakıt karışımının daha fazla oranda CH_4 ve H_2 içermesi nedeniyle meydana gelmiştir. Diğer taraftan, yanma odasının çıkışına doğru ilerledikçe, söz konusu yakıt karışımları için tahmin edilen radyal sıcaklık profillerinin birbirlerine yaklaştığı ve yanma odasının diğer bölgelerine kıyasla, daha homojen bir sıcaklık dağılımı meydana geldiği gözlemlenmiştir. Bunun nedeni, daha önceki bölümlerde de bahsedildiği gibi, yanma sonu ürünlerinin, yanma odası çıkışına doğru ilerledikçe daha homojen bir yayılım göstermesidir.

Şekil 6.22'de sıcaklık dağılımları verilen tüm yakıt karışımları için yanma odası boyunca tahmin edilen radyal sıcaklık profilleri genel olarak karşılaştırıldığında, en iyi yanma performansına, %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımı ile ulaşıldığı görülmektedir. Bununla birlikte, yakıt karışımı içerisindeki HZKG kütlesel karıştırma oranının %45'e çıkarılması, NH_3-hava alevinin yanma performansını daha da iyileştirmiştir. Diğer taraftan, Şekil 6.22'deki tüm yakıt karışımları için alev bölgesinde tahmin edilen radyal sıcaklık profillerinin yanma odasının 5 cm radyal mesafesine kadar hızlı bir şekilde düşüş sergilediği gözlemlenmiştir. Bu durum, yanma sonu ürünlerinin alev bölgesindeki eksenel hız dağılımları ile alakalıdır.

Şekil 6.23'de, söz konusu yakıt karışımları için yanma odası boyunca tahmin edilen eksenel hız dağılımları verilmiştir. İlk olarak, alev bölgesi için tahmin edilen eksenel hız profilleri incelendiğinde, Şekil 6.22'deki sıcaklık profilleri ile Şekil 6.23'de sunulan eksenel hız profillerinin arasında bir tutarlılık olduğu kolayca görülebilir. Söz konusu bölge için tahmin edilen eksenel hız profilleri karşılaştırıldığında ise, %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımının yakılması sonucu meydana gelen yanma sonu ürünlerinin yanma odasının merkezine daha yakın bir şekilde hareket ettiği görülmektedir. Bu nedenle, %55 NH_3-%45 H_2 yakıt bileşimi için alev bölgesinde tahmin edilen radyal sıcaklık profili, çok daha hızlı bir düşüş gerçekleştirmiştir. Yanma odası boyunca tahmin edilen eksenel hız profillerine genel olarak bakıldığında ise, önceki bölümlerdekine benzer dağılımların meydana geldiği ve resirkülasyon bölgelerinin konumlarının çok fazla değişmediği tespit edilmiştir. Bu durumun bir nedeni de, tez çalışması kapsamındaki tüm yakıt karışımlarının yakılmasında, aynı yakıcının kullanılmış olmasıdır.



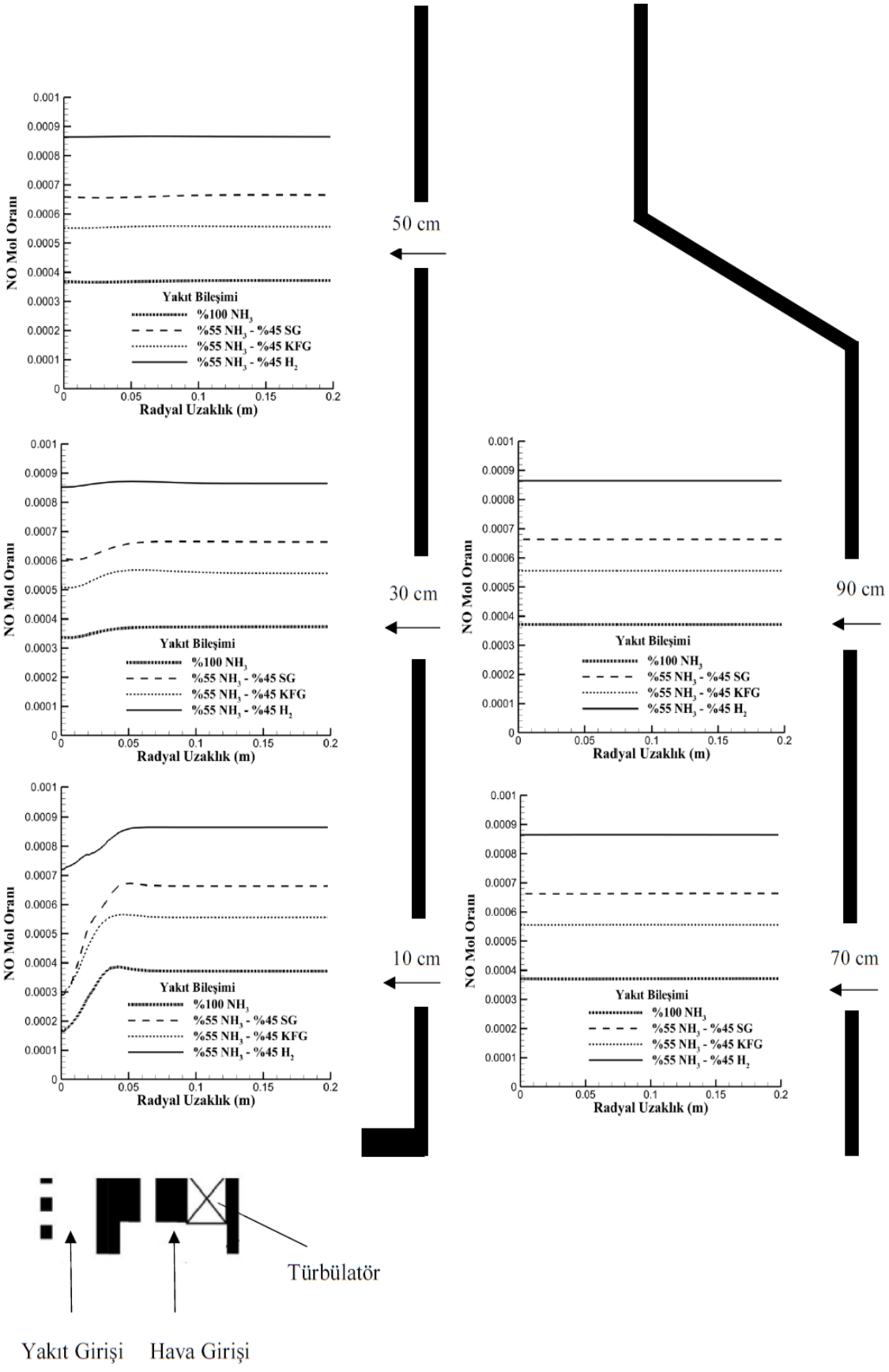
Şekil 6.22. %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının radyal sıcaklık profilleri



Şekil 6.23. %55 NH_3-%45 HZGK yakıt karışımlarının eksenel hız profilleri

Şekil 6.24'de, %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının yakılmasında yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyon profilleri gösterilmiştir. Ek olarak, söz konusu yakıt karışımı için elde edilen tahmini sonuçlar, %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımı ve %100 NH_3 içeren yakıtın NO emisyonları ile karşılaştırılmıştır. Yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonları genel olarak değerlendirildiğinde, en yüksek NO emisyon değerlerinin %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımının yakılması sonucunda oluştuğu kolaylıkla söylenebilir. Diğer taraftan, %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının NO emisyon performansının %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımının performansına göre daha iyi olduğu tespit edilmiş olup, yanma odası boyunca en düşük NO emisyonları ise %100 NH_3 içeren yakıtın yakılması sonucunda meydana gelmiştir. Bu durum, tıpkı daha önceki bölümlerde olduğu gibi termal-NO mekanizmasının daha baskın olması nedeniyle meydana gelmiştir.

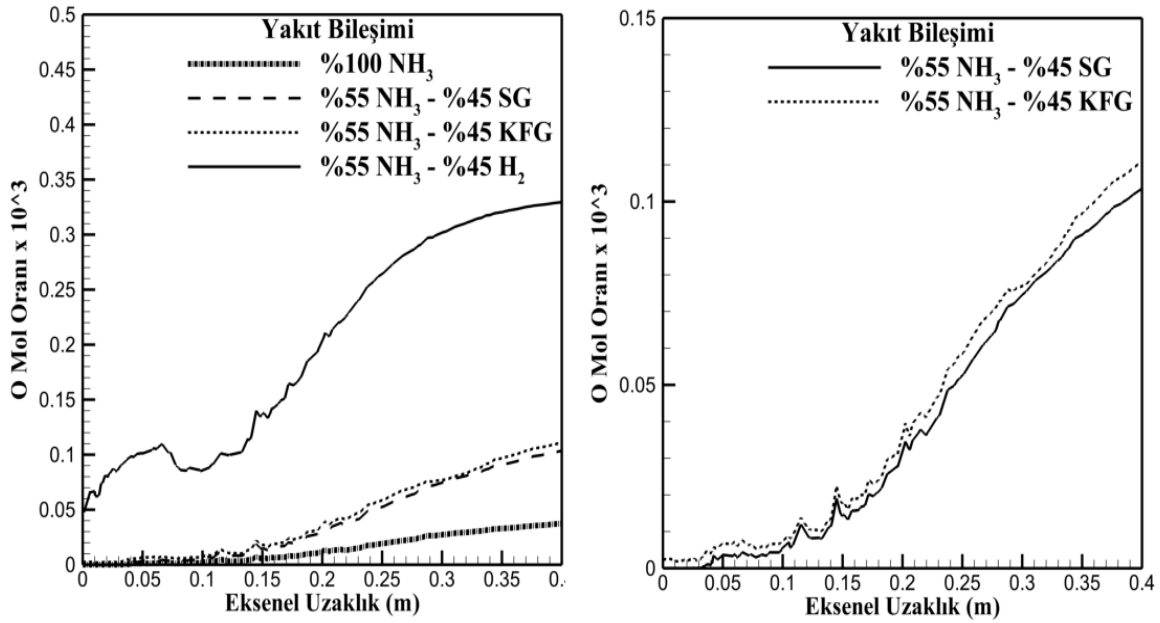
%55 NH_3-%45 KFG ve %55 NH_3-%45 SG yakıt karışımlarının NO emisyonları kendi içlerinde karşılaştırıldığında, %55 NH_3-%45 SG yakıt karışımının yanma odası boyunca meydana getirdiği NO emisyonlarının daha yüksek olduğu gözlemlenmiştir. Yakıt karışımı içerisindeki HZKG kütlesel karıştırma oranlarının %30 olduğu durumda, yanma odası içerisinde tahmin edilen NO emisyonları neredeyse aynı seviyedelerken, söz konusu kütlesel karıştırma oranlarının %45 seviyelerine çıkarılması, NH_3-SG yakıt karışımlarının yakılması sırasında meydana gelen NO emisyonları üzerinde daha etkili olmuştur. Dolayısıyla, %55 NH_3-%45 SG yakıt karışımının yanmasında, alev bölgesinde meydana gelen daha düşük sıcaklık değerlerine rağmen, yanma odası boyunca daha yüksek NO emisyonları meydana gelmiştir. Bu durumun, tıpkı %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının yanmasında olduğu gibi, yakıt karışımlarının içerdiği CO'nun, ortamda bulunan NH_3'ün ayrışma hızı üzerinde etkili olmasından kaynaklandığı düşünülmektedir. Yakıt karışımı içerisindeki HZKG kütlesel karıştırma oranlarının %30'dan %45'e yükseltilmesi, %55 NH_3-%45 KFG ve %55 NH_3-%45 SG yakıt karışımlarının bünyesinde bulunan CO oranlarını, sırasıyla, %7 ve %32 seviyelerine çıkarmıştır. Dolayısıyla, %55 NH_3-%45 SG yakıt karışımı bünyesinde bulunan CO oranının çok daha yüksek olması, bu yakıt karışımının içerisinde bulunan NH_3'ün ayrışma hızını yükseltmiş, buna bağlı olarak da, yanma odası boyunca daha yüksek NO emisyonları meydana gelmiştir.



Şekil 6.24. %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımlarının NO emisyon profilleri

%55 NH_3-%45 HZKG, %55 NH_3-%45 H_2 yakıt karışımlarının ve %100 NH_3 içeren yakıtın yanmasında, yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonları üzerinde genel olarak termal-NO mekanizmasının daha baskın olduğu yukarıda belirtilmiştir. Ulaşılan bu bulgu ile ilgili olarak daha detaylı bir inceleme yapmak amacıyla, Şekil 6.25'de yanma odasının alev bölgesinde meydana gelen O radikal konsantrasyonları sunulmuştur. Şekil 6.25a incelendiğinde, söz konusu yakıtlar için yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonları ile O radikal konsantrasyonları arasında tutarlı bir yapı olduğu görülmektedir.

Şekil 6.25b'de ise, %55 NH_3-%45 HZKG yakıt karışımları için tahmin edilen O radikal profilleri birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Alev bölgesinde elde edilen sıcaklık değerlerine bağlı olarak, en yüksek O radikal konsantrasyonları, %55 NH_3-%45 KFG yakıt karışımının yanması sonucunda meydana gelmiştir. İlk bakışta, %70 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımları için elde edilen sonuçlara benzer bir şekilde, termal-NO mekanizmasının etkisiyle, %55 NH_3-%45 KFG yakıt karışımının daha yüksek NO emisyonları meydana getirmesi beklenebilir. Buna karşın, Şekil 6.24'de %55 NH_3-%45 SG yakıt karışımın NO emisyonlarının daha yüksek olduğu tespit edilmiş olup, bu durumun yakıt karışımları içerisinde bulunan NH_3'ün ayrışma hızlarına bağlı olarak gerçekleştiği yukarıda vurgulanmıştır. Bu nedenle %55 NH_3-%45 SG yakıt karışımının NO emisyonları, yakıt-NO mekanizmasının etkisiyle, %55 NH_3-%45 KFG yakıt karışımının NO emisyonlarından daha yüksektir.



Şekil 6.25. %55 NH_3-%30 HZKG yakıt karışımlarının O radikal profilleri

7. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışması kapsamında, belirli karışım oranlarındaki NH_3-KFG, NH_3-SG, NH_3-H_2 yakıt karışımlarının ve %100 NH_3 içeren yakıtın yanma ve emisyon davranışları sayısal ve deneysel olarak araştırılmıştır. Deneysel çalışmalar, Gazi Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi tarafından "FDK-2021-6971" kodu ile destelenmiş olup, içerisinde kütlece %15 oranında hidrojen bulunan yakıt karışımı (%85 NH_3-%15 H_2) ve %100 NH_3 içeren yakıt için gerçekleştirilmiştir. Böylece, model bir yanma odasında, ön karışımsız yanma şartları altında, bahsi geçen iki yakıt bileşiminin alev yapıları ve yanma odası boyunca meydana gelen radyal sıcaklık dağılımları karşılaştırmalı olarak incelenmiştir. Diğer taraftan, elde edilen deneysel çalışma sonuçları, tez çalışması kapsamında gerçekleştirilen sayısal modellemelerin doğrulanması amacıyla da kullanılmıştır.

Sayısal çalışmalar ise, Gazi Üniversitesi Enerji Sistemleri Mühendisliği Anabilim Dalında mevcut olan ANSYS Fluent yazılımı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Sayısal modellemelerde, yanma modeli olarak The Mixture Fraction/PDF yanma modeli esasına dayanan kararlı yayılan alevcik modeli kullanılmıştır. NO emisyon tahminleri ise, kararsız laminer alevcik modelinin bir son işlemci olarak kullanılmasıyla hassaslaştırılmıştır. NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıt için gerçekleştirilen sayısal modellemeler, bu tez kapsamındaki deneysel çalışma sonuçları kullanılarak doğrulanmıştır. NH_3-HZKG yakıt karışımlarının sayısal modellemelerinin doğrulama işlemi ise, literatürde bulunan deneysel bir çalışmanın sonuçlarından faydalanılarak gerçekleştirilmiştir. Model doğrulama işlemleri kapsamında, farklı türbülans modelleri için elde edilen tahmin sonuçları ile deneysel çalışma sonuçları birbirleri karşılaştırılmıştır. Böylece, her bir yakıt karışımı ve %100 NH_3 içeren yakıt için en uygun türbülans modelinin seçilmesi de sağlanmıştır. Bu kapsamda, deneysel ve sayısal çalışma sonuçlarının oldukça tutarlı bir yapı içinde olduğu görülmüş olup, en uygun sonuçların Standard k-ε türbülans modeli ile elde edildiği belirlenmiştir.

Sonuç olarak, bu tez çalışmasında, ülkemizdeki mevcut durum itibariyle üretilmesi mümkün olan NH_3'ün yanma performansının iyileştirilmesi amaçlanmıştır. Bu amaçla, kömür gazları kullanılmış ve tamamen yerli kaynaklar ile elde edilebilen NH_3-HZGK yakıt karışımlarının yanma ve emisyon davranışları incelenmiştir. Böylece, farklı karıştırma oranlarındaki HZKG ilavesinin, NH_3-hava karışımının yanma odası içerisinde meydana

getirdiği sıcaklık, eksenel hız ve NO emisyon dağılımı üzerindeki etkileri araştırılmıştır. Ek olarak, HZKG ilavesinin etkilerinin daha detaylı olarak incelenmesi amacıyla, NH_3-H_2 yakıt karışımları için de çalışmalar yapılmış olup, NH_3-HZKG, NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıt için elde edilen sonuçlar birbirleri ile karşılaştırılmıştır. Bu tez çalışması vasıtasıyla, NH_3 gazının farklı yakma stratejileri veya kömür gazları ile karıştırılarak yanma sistemlerinde kullanılabileceği gösterilmeye çalışılmıştır. Çalışma, başarılı bir şekilde tamamlanmış olup, elde edilen önemli sonuçlar aşağıda sunulmuştur.

7.1. Sonuçlar

- Deneysel çalışmalarda, NH_3 gazının reaktivitesinin düşük olması ve yüksek ateşleme enerjisi gerektirmesi dolayısıyla, NH_3-hava karışımının ateşlenmesi sonucunda, kararlı bir alev elde edilememiştir. Bu durumda, brülöre kütlece %15 oranında H_2 beslemesi yapılmış, öncelikle pilot bir alev elde edilmiştir. %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı için kararlı bir alev elde edildikten sonra, H_2 beslemesi kademeli olarak düşürülmüş olup, bu işlem sonunda kararlı bir NH_3-hava alevinin oluşması sağlanmıştır. Dolayısıyla, bu tez çalışması kapsamında, NH_3 gazı başarılı bir şekilde yakılmıştır.

- Deneysel çalışmalar sırasında, her iki yakıt bileşimi (%85 NH_3-%15 H_2 ve %100 NH_3) alevinde de herhangi bir alev kopması veya geri tepme eğilimi görülmemiştir. Ek olarak, %85 NH_3-%15 H_2 yakıt karışımı alevinin brülöre daha yakın olarak konumlandığı gözlemlenmiştir. Bu durum, brülöre beslenen H_2'nin, NH_3-hava karışımının yanma hızını arttırması nedeniyle meydana gelmiştir. Diğer taraftan, bahsi geçen yakıt bileşimleri için elde edilen alev renginin turuncuya yakın olduğu gözlemlenmiştir. Bu alev rengi, $NH_2\alpha$ bandı ve aşırı sıcak olan H_2O spektrumumun etkisiyle meydana gelmiştir.

- Sayısal model doğrulama işlemlerinin tümünde, özellikle alev bölgesi için, farklı türbülans modellerinin birbirlerinden farklı sıcaklık profilleri sağladığı tespit edilmiştir. Bu durumun, alev bölgesinde mevcut olan yüksek türbülans şiddeti nedeniyle meydana geldiği düşünülmektedir. Ayrıca, yanma odası çıkışına doğru gidildikçe, her bir türbülans modeli için tahmin edilen sıcaklık profillerinin birbirlerine yaklaştığı gözlemlenmiştir. Diğer taraftan, model doğrulama işlemlerinde elde edilen tahmin sonuçları ve deneysel çalışma sonuçları birbirleri ile karşılaştırıldığında, en tutarlı

sonuçların Standard k-ε türbülans modeli ile elde edildiği görülmüştür. Bu sonucun, çalışma kapsamında kullanılan brülörün düşük bir türbülatör açısına (15°), başka bir deyişle, düşük bir girdap sayısına sahip olmasının etkisiyle meydana geldiği ileri sürülebilir.

- NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıt için yapılan sıcaklık tahminlerine göre, yakıt karışımı içerisindeki H_2 miktarının artmasıyla, alev bölgesinde ve yanma odası boyunca daha yüksek sıcaklık seviyelerine ulaşılmıştır. Ek olarak, tahmin edilen eksenel sıcaklık profilleri değerlendirildiğinde, daha yüksek oranda H_2 içeren yakıt karışımı alevinin, yanma odası girişine daha yakın olduğu söylenebilir. Bu durum, NH_3-hava karışımına yapılan H_2 ilavesinin, yanma hızlarında olumlu bir etki meydana getirdiğinin göstergesidir. Diğer taraftan, tez çalışması kapsamında gerçekleştirilen deneysel çalışma sonuçları, NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıt için elde edilen tahmin sonuçlarını (sıcaklık dağılımları açısından) doğrular niteliktedir.

- NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıt için tahmin edilen NO emisyonları değerlendirilecek olursa, NH_3-hava karışımına yapılan H_2 ilavesinin yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonlarını arttırdığı rahatlıkla söylenebilir. NO emisyonlarında gözlemlenen yükselme trendi, yakıt karışımı içerisindeki artan hidrojen miktarı ile tutarlı bir yapı sergilemiş olup, en düşük NO emisyonları %100 NH_3 içeren yakıtın yakılması ile meydana gelmiştir. Yakıt karışımı içerisindeki NH_3 miktarının azalmasına rağmen, NO emisyonlarında meydana gelen yükselme, NH_3-H_2 yakıt karışımları için termal-NO mekanizmasının daha baskın olmasının bir sonucudur.

- NH_3-hava karışımına yapılan H_2 ilavesinin etkileri genel olarak değerlendirildiğinde, yakıt karışımı içerisindeki H_2 konsantrasyonunun artması, NH_3-hava karışımının reaktivitesi, alev sıcaklığı ve yanma hızı gibi özellikleri üzerinde pozitif etkiler meydana getirmiştir. Buna karşın, H_2 miktarının artmasıyla, yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonları yükselmiştir.

- NH_3-HZGK yakıt karışımlarının ve %100 NH_3 içeren yakıtın yanma odası içerisinde meydana getirdiği sıcaklık dağılımları ile ilgili elde edilen tahmin sonuçları, NH_3-hava karışımına yapılan SG veya KFG ilavesiyle, yanma odası içerisinde daha yüksek

sıcaklık değerlerine ulaşıldığını göstermiştir. Dolayısıyla, HZKG ile karıştırma, NH_3-hava alevinin yanma performansı üzerinde pozitif bir etki yaratmıştır. NH_3-KFG ve NH_3-SG yakıt karışımlarının tüm karıştırma oranları için tahmin edilen sıcaklık dağılımları karşılaştırıldığında, KFG ile karıştırmanın, NH_3-hava karışımının yanma performansının iyileştirilmesi açısından daha fazla oranda bir etki meydana getirdiği görülmüştür. Bu durumun temel nedeni, NH_3-KFG yakıt karışımlarının içerdiği CH_4 ve H_2 gibi yanabilir bileşenlerin daha fazla olmasıdır.

- NH_3-hava karışımına yapılan HZKG ilavesi, yanma odası boyunca tahmin edilen NO emisyonlarının yükselmesine neden olmuştur. Bu durum, esas olarak, yakıt karışımına yapılan HZKG ilavesi sonucunda, artan alev sıcaklıklarına bağlı olarak, termal-NO mekanizmasının etkisiyle meydana gelmiştir. Ayrıca, hem KGF, hem de SG, bünyelerinde serbest azot bulundurmaktadırlar. Dolayısıyla, HZKG'nin içerdiği serbest azotun da yanma odası boyunca daha yüksek NO emisyonları oluşmasına katkı yaptığı düşünülmektedir. NH_3-hava karışımına yapılan KFG veya SG ilavesinin yanma odası içerisinde meydana gelen NO emisyonları üzerine etkileri irdelenecek olursa, HZKG kütlesel karıştırma oranının %15 olduğu durum için termal-NO mekanizmasının etkisiyle, KFG gazı ile karıştırmada daha yüksek NO emisyonları meydana gelmiştir. Bununla birlikte, HZKG kütlesel karıştırma oranının %30 ve %45'e yükseltildiği yanma şartları altında, bileşiminde SG bulunan yakıt karışımları için meydana gelen NO emisyonlarının daha fazla oranda bir artış gösterdiği tespit edilmiştir. Kütlece %30 oranında HZKG içeren yakıt karışımları için yanma odası boyunca meydana gelen NO emisyonları neredeyse eşit seviyelere ulaşmış olup, HZKG kütlesel karıştırma oranının %45 olduğu durumda ise, SG içeren yakıt karışımının NO emisyonlarının daha yüksek olduğu görülmüştür. Bu durumun temel sebebi, kütlece %30 ve %45 oranlarında SG içeren yakıt karışımlarının bünyesinde bulundurduğu çok daha yüksek orandaki CO'nun etkisiyle, yakıt karışımı içerisinde bulunan NH_3'ün ayrışma hızındaki yükselmedir. Dolayısıyla, kütlece %15 oranında HZKG içeren yakıt karışımları için termal-NO mekanizması daha baskınken, kütlece %30 ve %45 oranında HZKG içeren yakıt karışımları için yakıt-NO mekanizması daha etkin bir hale gelmiş ve bünyesinde kütlece %45 oranında SG bulunduran yakıt karışımının NO emisyonları daha yüksek olmuştur.

- Çalışma kapsamındaki tüm yakıt karıştırma oranları için, NH_3-H_2 ve NH_3-HZKG yakıt karışımlarının yakılması durumunda, en yüksek alev sıcaklıklarına NH_3-H_2 yakıt karışımları ile ulaşılmıştır. Bahsi geçen yakıt karışımları için yanma odası boyunca tahmin edilen sıcaklık profilleri karşılaştırıldığında, alev bölgesinden yanma odası duvarları ve çıkışına doğru ilerledikçe, tahmini sıcaklık profillerinin birbirlerine oldukça yaklaştığı gözlemlenmiştir. Ayrıca, NH_3-H_2 alevlerinin, NH_3-HZKG yakıt karışımı alevlerine kıyasla, yanma odası girişine daha yakın olduğu tespit edilmiştir. Dolayısıyla, NH_3-H_2 yakıt karışımlarının yanma hızlarının daha yüksek olduğu söylenebilir. Ek olarak, NH_3-H_2 yakıt karışımları alevleri, NH_3-HZKG yakıt karışımları alevlerine göre yanma odası boyunca çok daha yüksek oranda NO emisyonları meydana getirmiştir.

- Yanma odası boyunca tahmin edilen hız dağılımları, yanma odası içerisinde meydana gelen yanma sonu ürünlerinin dağılımları hakkında önemli bulgular sağlamıştır. Özellikle alev bölgesi için tahmin edilen sıcaklık profillerinin göstermiş olduğu ani düşüş trendi ile bu bölgedeki yanma sonu ürünlerinin hareketi arasında bir tutarlılık olduğu tespit edilmiştir. Yanma odası içerisindeki eksenel hız dağılımları genel olarak değerlendirilecek olursa, yanma odası çıkışına doğru, yanma odasının merkezi ve duvarları arasındaki eksenel hız değerleri arasındaki farkın oldukça azaldığı tespit edilmiştir. Bu noktadan hareketle, yanma odası çıkışına doğru, yanma sonu ürünlerinin daha homojen bir dağılım gösterdiği sonucuna varılabilir. Ayrıca, yanma odasının duvarlarına yakın olan kısımlarında, resirkülasyon bölgelerinin oluştuğu da gözlemlenmiştir.

Bu tez çalışması kapsamında elde edilen sonuçlar genel olarak değerlendirildiğinde, HZKG ilavesinin, NH_3-hava karışımının yanma performansını yükseltmede, özellikle yanma odası boyunca meydana gelen sıcaklık dağılımı ve NO emisyonları açısından H_2'ye karşı iyi bir alternatif olabileceği söylenebilir. Ayrıca, KFG veya SG ilavesinin, NH_3-hava karışımının yanma ve emisyon davranışları üzerinde meydana getirdiği etkiler karşılaştırıldığında, KFG ilavesinin daha olumlu sonuçlar sağladığı tespit edilmiştir.

7.2. Öneriler

Bu tez kapsamında gerçekleştirilen çalışmalar sonucunda elde edilen tecrübeler ışığında, aşağıda sunulan önerilerin, NH_3 gazının yanma performansının yükseltilmesi ve başarılı bir şekilde yakılmasına ilişkin gelecekte yapılacak çalışmalara katkı sağlayacağı düşünülmektedir.

- Çalışmada kullanılan yakıtların yakılması sonucunda meydana gelen NO emisyonlarının azaltılmasına yönelik deneysel ve sayısal çalışmalar yapılabilir. Bu kapsamda, kademeli yakma tekniğinin kullanılması önerilmektedir.

- Çalışma kapsamında kullanılan tüm yakıtlar, farklı türbülatör açılarına sahip brülörler ile yakılarak, yanma odası içerisinde meydana gelen sıcaklık ve emisyon dağılımları incelenebilir. Böylece, bahsi geçen yakıtları daha verimli bir şekilde yakabilecek brülörler tasarlanabilir.

- Çalışmada kullanılan yakıtlar, gaz türbini çalışma şartlarında yakılabilir. Böylece, söz konusu yakıtların yüksek basınç şartları altındaki yanma ve emisyon davranışları incelenebilir.

- Çalışma kapsamında kullanılan yakıtların yakılmasında, yanma odasında içerisinde meydana gelen akış alanının incelenmesi ile ilgili sayısal ve deneysel çalışmalar yapılabilir. Bu kapsamda, akış alanındaki hız vektörleri ve türbülans şiddeti gibi parametrelerin incelenmesiyle, söz konusu yakıtları daha verimli bir şekilde yakabilecek brülör ve yanma odalarına ilişkin tasarım çalışmalarına ışık tutan bilgiler sağlanabilir.

KAYNAKLAR

1. Kannan, N., and Vakeesan, D. (2016). Solar energy for future world: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 62, 1092–1105. doi: 10.1016/j.rser.2016.05.022

2. Martins, T., Barreto, A. C., Souza, F. M., Souza, A. M. (2021). Fossil fuels consumption and carbon dioxide emissions in G7 countries: Empirical evidence from ARDL bounds testing approach. *Environmental Pollution*, 291, 118093. doi: 10.1016/j.envpol.2021.118093

3. Hassan, A., Ilyas, S. Z., Jalil, A., Ullah, Z. (2021). Monetization of the environmental damage caused by fossil fuels. *Environmental Science and Pollution Research*, 28(17), 21204–21211. doi: 10.1007/s11356-020-12205-w

4. Arcuri, A. (2013). *The Rise of a New Superpower*. Italy: Springer International Publishing, 24. doi: 10.1007/978-3-319-00431-0

5. Es, H. A. (2021). Monthly natural gas demand forecasting by adjusted seasonal grey forecasting model. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 43(1), 54–69. doi: 10.1080/15567036.2020.1831656

6. Enerji Piyasası Düzenleme Kurumu. (2021) Turkish Natural Gas Market Report. Ankara: *EPDK*, 15.

7. Kobayashi, H., Hayakawa, A., Somarathne, K. D. K. A., and Okafor, E. C. (2019). Science and technology of ammonia combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(1), 109–133. doi: 10.1016/j.proci.2018.09.029

8. Cheng, H.M., Yang, Q.H., and Liu, C. (2001). Hydrogen storage in carbon nanotubes. *Carbon*, 39(10), 1447–1454. doi: 10.1016/S0008-6223(00)00306-7

9. Eberle, U., Felderhoff, M., and Schüth, F. (2009). Chemical and Physical Solutions for Hydrogen Storage. *Angewandte Chemie International Edition*, 48(36), 6608–6630. doi: 10.1002/anie.200806293

10. Zhou, L. (2005). Progress and problems in hydrogen storage methods. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 9(4), 395–408. doi: 10.1016/j.rser.2004.05.005

11. Wang, D., Ji, C., Wang, Z., Wang, S., Zhang, T., and Yang, J. (2020). Measurement of oxy-ammonia laminar burning velocity at normal and elevated temperatures. *Fuel*, 279, 118425. doi: 10.1016/j.fuel.2020.118425

12. Smil, V. (1991). Population Growth and Nitrogen: An Exploration of a Critical Existential Link. *Population and Development Review*, 17(4), 569–601. doi: 10.2307/1973598

13. Kurata, O., Iki, N., Matsunuma, T., Inoue, T., Tsujimura, T., Furutani, H., Kobayashi, and H., Hayakawa, A. (2017). Performances and emission characteristics of NH_3–air

and NH_3CH_4–air combustion gas-turbine power generations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(3), 3351–3359. doi: 10.1016/j.proci.2016.07.088

14. Chen, C. H., and Li, Y.H. (2021). Role of N_2O and equivalence ratio on NO_x formation of methane/nitrous oxide premixed flames. *Combustion and Flame*, 223, 42–54. doi: 10.1016/j.combustflame.2020.10.002

15. Valera-Medina, A., Pugh, D. G., Marsh, P., Bulat, G., and Bowen, P. (2017). Preliminary study on lean premixed combustion of ammonia-hydrogen for swirling gas turbine combustors. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(38), 24495–24503. doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.08.028

16. Okafor, E. C., Somarathne, K. D. K. A., Hayakawa, A., Kudo, T., Kurata, O., Iki, N., and Kobayashi, H. (2019). Towards the development of an efficient low-NO_x ammonia combustor for a micro gas turbine. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(4), 4597–4606. doi: 10.1016/j.proci.2018.07.083

17. Pugh, D., Bowen, P., Valera-Medina, A., Giles, A., Runyon, J., and Marsh, R. (2019). Influence of steam addition and elevated ambient conditions on NO_x reduction in a staged premixed swirling NH_3/H_2 flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(4), 5401–5409. doi: 10.1016/j.proci.2018.07.091

18. Kurata, O., Iki, N., Matsunuma, T., Inoue, T., Tsujimura, T., Furutani, H., Kobayashi, H., and Hayakawa, A. (2017). Performances and emission characteristics of NH_3-air and NH_3-CH_4-air combustion gas-turbine power generations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(3), 3351–3359. doi: 10.1016/j.proci.2016.07.088

19. Kurata, O., Iki, N., Inoue, T., Matsunuma, T., Tsujimura, T., Furutani, H., Kawano, M., Arai, K., Okafor, E. C., Hayakawa, A., and Kobayashi, H. (2019). Development of a wide range-operable, rich-lean low-NO_x combustor for NH_3 fuel gas-turbine power generation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(4), 4587–4595. doi: 10.1016/j.proci.2018.09.012

20. Han, X., Wang, Z., Costa, M., Sun, Z., He, Y., and Cen, K. (2019). Experimental and kinetic modeling study of laminar burning velocities of NH_3/air, NH_3/H_2/air, NH_3/CO/air and NH_3/CH_4/air premixed flames. *Combustion and Flame*, 206, 214–226. doi: 10.1016/j.combustflame.2019.05.003

21. Li, S., Zhang, S., Zhou, H., and Ren, Z. (2019). Analysis of air-staged combustion of NH_3/CH_4 mixture with low NO_x emission at gas turbine conditions in model combustors. *Fuel*, 237, 50–59. doi: 10.1016/j.fuel.2018.09.131

22. Guteša Božo, M., Vigueras-Zuniga, M. O., Buffi, M., Seljak, T., and Valera-Medina, A. (2019). Fuel rich ammonia-hydrogen injection for humidified gas turbines. *Applied Energy*, 251, 113334. doi: 10.1016/j.apenergy.2019.113334

23. Hussein, N. A., Valera-Medina, A., and Alsaegh, A. S. (2019). Ammonia- hydrogen combustion in a swirl burner with reduction of NO_x emissions. *Energy Procedia*, 158 (2018), 2305–2310. doi: 10.1016/j.egypro.2019.01.265

24. Pochet, M., Dias, V., Moreau, B., Foucher, F., Jeanmart, H., and Contino, F. (2019).

Experimental and numerical study, under LTC conditions, of ammonia ignition delay with and without hydrogen addition. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(1), 621–629. doi: 10.1016/j.proci.2018.05.138

25. Xiao, Hua, Valera-Medina, A., and Bowen, P. J. (2017). Modeling Combustion of ammonia/hydrogen fuel blends under gas turbine conditions. *Energy and Fuels*, 31(8), 8631–8642. doi: 10.1021/acs.energyfuels.7b00709

26. Xiao, H., Valera-Medina, A., Bowen, P., and Dooley, S. (2017). 3D Simulation of ammonia combustion in a lean premixed swirl burner. *Energy Procedia*, 142, 1294–1299. doi: 10.1016/j.egypro.2017.12.504

27. Valera-Medina, A., Pugh, D. G., Marsh, P., Bulat, G., and Bowen, P. (2017). Preliminary study on lean premixed combustion of ammonia-hydrogen for swirling gas turbine combustors. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(38), 24495–24503. doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.08.028

28. Mashruk, S., Xiao, H., and Valera-Medina, A. (2021). Rich-Quench-Lean model comparison for the clean use of humidified ammonia/hydrogen combustion systems. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(5), 4472–4484. doi: 10.1016/j.ijhydene.2020.10.204

29. Li, J., Huang, H., Kobayashi, N., He, Z., Osaka, Y., and Zeng, T. (2015). Numerical study on effect of oxygen content in combustion air on ammonia combustion. *Energy*, 93, 2053–2068. doi: 10.1016/j.energy.2015.10.060

30. Hua, X., Zhaolin, W., and Agustin, V. (2018). Study on Characteristics of Co-firing ammonia/methane fuels under oxygen enriched combustion conditions. *Journal of Thermal Science*, 27(3), 270–276.

31. Hayakawa, A., Goto, T., Mimoto, R., Kudo, T., and Kobayashi, H. (2015). NO formation/reduction mechanisms of ammonia/air premixed flames at various equivalence ratios and pressures. *Mechanical Engineering Journal*, 2(1), 14-00402-14–00402. doi: 10.1299/mej.14-00402

32. Li, J., Huang, H., Kobayashi, N., He, Z., and Nagai, Y. (2014). Study on using hydrogen and ammonia as fuels: Combustion characteristics and NO_x formation. *International Journal of Energy Research*, 38(9), 1214–1223. doi: 10.1002/er.3141

33. Cheng, M., Wang, H., Xiao, H., Luo, K., and Fan, J. (2021). Emission characteristics and heat release rate surrogates for ammonia premixed laminar flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(24), 13461–13470. doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.01.154

34. Cai, T., Zhao, D., Wang, B., Li, J., and Guan, Y. (2020). NO emission and thermal performances studies on premixed ammonia-oxygen combustion in a CO_2-free micro-planar combustor. *Fuel*, 280, 118554. doi: 10.1016/j.fuel.2020.118554

35. Franco, M. C., Rocha, R. C., Costa, M., and Yehia, M. (2021). Characteristics of NH_3/H_2/air flames in a combustor fired by a swirl and bluff-body stabilized burner.

Proceedings of the Combustion Institute, 38(4), 5129–5138. doi: 10.1016/j.proci.2020.06.141

36. Ariemma, G. B., Sabia, P., Sorrentino, G., Bozza, P., de Joannon, M., and Ragucci, R. (2021). Influence of water addition on MILD ammonia combustion performances and emissions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4), 5147–5154. doi: 10.1016/j.proci.2020.06.143

37. Mei, B., Zhang, J., Shi, X., Xi, Z., and Li, Y. (2021). Enhancement of ammonia combustion with partial fuel cracking strategy: Laminar flame propagation and kinetic modeling investigation of $NH_3/H_2/N_2$/air mixtures up to 10 atm. *Combustion and Flame*, 231, 111472. doi: 10.1016/j.combustflame.2021.111472

38. Zhang, F., Chen, G., Wu, D., Li, T., Zhang, Z., and Wang, N. (2020). Characteristics of ammonia/hydrogen premixed combustion in a novel linear engine generator. *Proceedings*, 58(1), 2. doi: 10.3390/WEF-06925

39. Kumar, P., and Meyer, T. R. (2013). Experimental and modeling study of chemical-kinetics mechanisms for H_2–NH_3–air mixtures in laminar premixed jet flames. *Fuel*, 108, 166–176. doi: 10.1016/j.fuel.2012.06.103

40. Nozari, H., and Karabeyoğlu, A. (2015). Numerical study of combustion characteristics of ammonia as a renewable fuel and establishment of reduced reaction mechanisms. *Fuel*, 159, 223–233. doi: 10.1016/j.fuel.2015.06.075

41. Ichikawa, A., Naito, Y., Hayakawa, A., Kudo, T., and Kobayashi, H. (2019). Burning velocity and flame structure of CH_4/NH_3/air turbulent premixed flames at high pressure. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(13), 6991–6999. doi: 10.1016/j.ijhydene.2019.01.193

42. Li, J., Huang, H., Kobayashi, N., Wang, C., and Yuan, H. (2017). Numerical study on laminar burning velocity and ignition delay time of ammonia flame with hydrogen addition. *Energy*, 126, 796–809. doi: 10.1016/j.energy.2017.03.085

43. Okafor, E. C., Naito, Y., Colson, S., Ichikawa, A., Kudo, T., Hayakawa, A., and Kobayashi, H. (2018). Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of CH_4–NH_3–air premixed flames. *Combustion and Flame*, 187, 185–198. doi: 10.1016/j.combustflame.2017.09.002

44. Han, X., Wang, Z., He, Y., Zhu, Y., and Cen, K. (2020). Experimental and kinetic modeling study of laminar burning velocities of NH_3/syngas/air premixed flames. *Combustion and Flame*, 213, 1–13. doi: 10.1016/j.combustflame.2019.11.032

45. Ding, C., Li, P., Wang, K., Shi, G., Wang, F., and Liu, Z. (2021). Experimental and kinetic study on the oxidation of syngas-ammonia under Both N_2 and CO_2 atmospheres in a jet-stirred reactor. *Energy & Fuels*, 35(14), 11445–11456. doi: 10.1021/acs.energyfuels.1c00647

46. Wang, S., Wang, Z., Elbaz, A. M., Han, X., He, Y., Costa, M., Konnov, A. A., and Roberts, W. L. (2020). Experimental study and kinetic analysis of the laminar burning

velocity of NH_3/syngas/air, NH_3/CO/air and NH_3/H_2/air premixed flames at elevated pressures. *Combustion and Flame*, 221, 270–287. doi: 10.1016/j.combustflame.2020.08.004

47. Zhou, S., Yang, W., Tan, H., An, Q., Wang, J., Dai, H., Wang, X., Wang, X., and Deng, S. (2021). Experimental and kinetic modeling study on NH_3/syngas/air and NH_3/bio-syngas/air premixed laminar flames at elevated temperature. *Combustion and Flame*, 233, 111594. doi: 10.1016/j.combustflame.2021.111594

48. Chen, Z., and Jiang, Y. (2021). Numerical investigation of the effects of H_2/CO/syngas additions on laminar premixed combustion characteristics of NH_3/air flame. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(21), 12016–12030. doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.01.054

49. Valera-Medina, Agustin, Marsh, R., Runyon, J., Pugh, D., Beasley, P., Hughes, T., and Bowen, P. (2017). Ammonia–methane combustion in tangential swirl burners for gas turbine power generation. *Applied Energy*, 185, 1362–1371. doi: 10.1016/j.apenergy.2016.02.073

50. Gupta, R. C. (2016). *Fuels, Furnaces and Refractories*. India: PHI Learning Private Limited, 1-30.

51. Sharma, S. P., and Mohan, C. (1984). *Fuels and Combustion*. New Delhi: Tata McGraw-Hill, 15-32.

52. Tillman, D. A. (1991). *The Combustion of Solid Fuels and Wastes. In The Combustion of Solid Fuels and Wastes*. The United States of America: Academic Press, 1-378.

53. Lackne, M., and Winter, F. (2010). *Handbook of Combustion: Gaseous and Liquid Fuels* (Third Edition). Wiley, 1-9, 265-304.

54. Wauquier, J.-P. (1995). *Petroleum Refining. In Petroleum Refining*. France: Editions Technip, 2-10.

55. Ragland, K. W., and Bryden, K. M. (2011). *Combustion Engineering*. (Secon Edition). The United States of America: CRC Press, 1-8.

56. Çengel, Y. A., Boles, M. A., and Kanoglu, M. (2019*). Thermodynamics An Engineering Approach. In Thermodynamics An Engineering Approach*. (Ninth Edition). The United States of America: Mc Graw Hill Education, 747-771.

57. Keszei, E. (2021). *Reaction Kinetics An Introduction*. Switzerland: Springer, 1-32. doi: 10.1007/978-3-030-68574-4

58. Saxena, P., and Naik, V. (2019). *Air pollution control: Sources,Impacts and Controls*. Boston: CABI, 1-5. doi: 10.1079/9781786393890.0198

59. Lieuwen, T. C., Yang, V., and Yetter, R. (2010). *Synthesis Gas Combustion: Fundamentals and Applications*. The United State of America: Taylor and Francis Group, 169-188.

60. Ilbaş, M. (1997). *Studies of Ultra Low NO_X Burners*. Phd Thesis, School of Engineering, University of Wales, Cardiff, UK, 10-28.

61. Baumbach, G. (1996). *Air Quality Control*. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 15-74. doi: 10.1007/978-3-642-79001-0

62. Lefebvre, A. H., and Ballal, D. R. (2010). *Gas Turbine Combustion: Alternatif Fuels and Emissions* (Third Edition). The United States of America: CRC Press, 359-441.

63. Miller, J. A., and Bowman, C. T. (1989). Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 15(4), 287–338. doi: 10.1016/0360-1285(89)90017-8

64. Flagan, R. C., and Seinfeld, J. H. (1988). *Fundamentals of Air Pollution Engineering*. The United States of America: Prentice Hall, 167-225.

65. Karyeyen, S. (2016). *Geliştirilen Bir Yakıcıda Kömür Gazlarının Yanma Karakteristiklerinin Deneysel ve Sayısal Olarak Araştırılması*. Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 112-114.

66. Vakkilainen, E. K. (2017). *Steam Generation From Biomass*. The United States of America: Elsevier, 18-56.

67. Tucker, M. (1995). Carbon dioxide emissions and global GDP. *Ecological Economics*, 15(3), 215–223. doi: 10.1016/0921-8009(95)00045-3

68. Cuoci, A. (2019). Numerical modelling of reacting systems with detailed kinetic mechanisms. *Computer Aided Chemical Engineering* (First Edition). Elsevier, 675-721. doi: 10.1016/B978-0-444-64087-1.00013-9

69. Appl, M. (1999). *Ammonia: Principles and Industrial Practise*. Germany: Wiley-Vch, 1-66.

70. Al-Aboosi, F. Y., El-Halwagi, M. M., Moore, M., and Nielsen, R. B. (2021). Renewable ammonia as an alternative fuel for the shipping industry. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 31, 100670. doi: 10.1016/j.coche.2021.100670

71. Christiansen, L. J. (1995). *Ammonia: Catalysis and Manufacture*. Berlin: Springer-Verlag, 199-327. doi: 10.1007/ 978-3-642-79197-0

72. Pattabathula, V., and Richardson, J. (2016). Introduction to ammonia production. *Chemical Engineering Progress*, 112(9), 69–75.

73. Higman, C., and van der Burgt, M. (2008). *Gasification* (Second Edition). The United States of America: Elsevier, 1-5. doi: 10.1016/B978-0-7506-8528-3.X0001-6

74. Sanchez-Hervas, J. M., Moya, G. M., and Ortiz-Gonzalez, I. (2019). *Current status of coal gasification. In New Trends in Coal Conversion: Combustion, Gasification, Emissions, and Coking*. United Kingtom: Woodhead Publishing, 175-202.

75. Liu, K., Song, C., and Subramani, V. (2010). *Hyrogen and Syngas Production and Purification Technologies*. New Jersey: Wiley-AIChE, 156-218.

76. Speight, J. G. (2008). *Synthetic Fuels Handbook: Properties, Process, and Performance*. The United States of America: The McGraw-Hill, 131-169. doi: 10.1036/007149023X

77. Baukal, C. E., Gershtein, V. Y., and Li, X. (2001). *Computational Fluid Dynamics in Industrial Combustion*. The United States of America: CRC Press, 19-21.

78. Kotake, S., Hijikata, K., Fusegi, T. (1993). Numerical Simulations of Heat Transfer and Fluid Flow on a Personal Computer. *European Journal of Engineering Education*, 18(2). doi: 10.1080/03043799308928350

79. Yeoh, G. H., and Yuen, K. K. (2009). *Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering*. United Kingtom: Butterworth-Heinemann, 29-133.

80. Versteeg, H. K., and Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. England: Pearson Education Limited, 24.

81. Poinsot, T., and Veynante, D. (2005). *Theoretical and Numerical Combustion*. The United States of America: Edwards, 125-182.

82. Thet, M. S., and San, Y. K. (2017). Comparison of Turbulence Models for Computational Fluid Dynamics Simulation of Wind Flow on Cluster of Buildings in Mandalay. *International Journal of Scientific and Research Publications*, 7(8), 337–350.

83. Gong, M., Li, C., and Li, Z. (2015). Numerical analysis of flow in a highly efficient flotation column. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 10(1), 84–95. doi: 10.1002/apj.1849

84. Galván, S., Reggio, M., Guibault, F. (2011). Assessment Study of K-ε Turbulence Models and Near-Wall Modeling for Steady State Swirling Flow Analysis in Draft Tube Using Fluent. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 5(4), 459–478. doi: 10.1080/19942060.2011.11015386

85. ANSYS, I. (2012). *ANSYS Fluent User's Guide*. ANSYS, Inc.

86. Ilbas, M., Bektas, A., and Karyeyen, S. (2019). A new burner for oxy-fuel combustion of hydrogen containing low-calorific value syngases: An experimental and numerical study. *Fuel*, 256, 115990. doi: 10.1016/j.fuel.2019.115990

87. Zheng, S., Sui, R., Sun, Y., Yang, Y., and Lu, Q. (2021). A Review on the Applications of Non-gray Gas Radiation Models in Multi-dimensional Systems. *ES Energy & Environment*, 49(4), 481–510. doi: 10.30919/esee8c423

88. Yılmaz, İ. (2006). *Model Bir Yakıcıda Hidrojen-Metan Karışımının Yanmasının Sayısal ve Deneysel İncelenmesi*. Doktora Tezi, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kayseri, 24-27, 60-65.

89. ANSYS, I. (2014). *ANSYS Fluent Theory Guide*. ANSYS, Inc.

90. Patankar, S. V. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, London: McGraw-Hill Book Company, 67-157.

91. Heitor, M. V., and Moreira, A. L. N. (1993). Thermocouples and sample probes for combustion studies. *Progress in Energy and Combustion Science*, 19(3), 259–278. doi: 10.1016/0360-1285(93)90017-9

92. Siegel, R., and Howell, J. (2002). *Thermal Radiation Heat Transfer* (Fourth Edition). Newyork: Taylor&Francis Group. 1-34, 241-273.

93. Vanoverberghe, K. (2004). *Flow, Turbulence and Combustion of Premixed Swirling Jet Flames*, Ph. D. Thesis, Katholieke University, Leuven, Belgium, 13-28.

EKLER

EK-1. Sayısal modellemelerde kullanılan reaksiyon mekanizmaları [11]

Çizelge 1.1. NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıtın reaksiyon mekanizması

Reaksiyon Numarası	Reaksiyon	Üstel Faktör	Aktivasyon Enerjisi
1	$H + O_2 + M = HO_2 + M$	2,8e+18	6260,0
2	$O + HO_2 = OH + O_2$	2e+13	0,0
3	$H + O_2 + M = HO_2 + M$	2,8e+18	0,0
4	$H + 2O_2 = HO_2 + O_2$	2,08e+19	0,0
5	$H + O_2 + H_2O = HO_2 + H_2O$	1,12e+19	0,0
6	$H + O_2 + N2 = HO_2 + N_2$	2,60e+19	0,0
7	$H + O_2 + AR = HO_2 + AR$	7e+17	0,0
8	$H + O_2 = O + OH$	1,04e+14	15286,0
9	$H + OH + M = H_2O + M$	2,2e+22	0,0
10	$H + HO_2 = O_2 + H2$	4,48e+13	1068,0
11	$H + HO_2 = 2\ OH$	8,4e+13	635.0
12	$OH + H_2 = H + H_2O$	2,160e+08	3430,0
13	$2\ OH\ (+ M) = H_2O_2\ (+ M)$	7,4e+13	1700,0
14	$2\ OH = O + H_2O$	3,57e+04	-2110,0
15	$OH + HO_2 = H_2O + O_2$	7e+12	-1092,96
16	$OH + HO_2 = H_2O + O_2$	4,5e+14	10929,6
17	$OH + H_2O_2 = HO_2 + H_2O$	1,7e+18	29410,0
18	$2\ HO_2 = O_2 + H_2O_2$	1,3e+11	-1630,0
19	$2\ HO_2 = O_2 + H_2O_2$	4,2e+14	12000,0
20	$N + NO = N_2 + O$	2,7e+13	355,0
21	$N + O_2 = NO + O$	9e+09	6500,0
22	$N + OH = NO + H$	3,36e+13	385,0
23	$N2O + O = N_2 + O_2$	1,4e+12	10810,0
24	$N_2O + H = N_2 + OH$	3.87e+14	18880,0
25	$N_2O + OH = N_2 + HO_2$	2e+12	21060,0
26	$N_2O\ (+ M) = N_2 + O\ (+ M)$	7,91e+10	56020,0
27	$HO_2 + NO = NO_2 + OH$	2,11e+12	-480,0
28	$NO + O + M = NO_2 + M$	1.06e+20	0,0
29	$NO_2 + O = NO + O_2$	3,9e+12	-240,0
30	$NO_2 + H = NO + OH$	1.32e+14	360,0
31	$NH + H = N + H_2$	3e+13	0,0
32	$NH + O = NO + H$	9,2e+13	0,0
33	$NH + OH = HNO + H$	2e+13	0,0
34	$NH + OH = N + H_2O$	5e+11	2000,0
35	$NH + O_2 = HNO + O$	4,6e+05	6500,0
36	$NH + O_2 = NO + OH$	1,3e+06	100,0
37	$NH + NO = N_2O + H$	1,8e+14	-244,0
38	$NH + NO = N_2 + OH$	2,2e+13	0,0
39	$NH_2 + H = NH + H_2$	7.2e+05	799,0
40	$NH_2 + O = HNO + H$	6,6e+13	0,0
41	$NH_2 + OH = NH + H_2O$	4e+06	1000,0
42	$NH_2 + HO_2 = NH_3 + O_2$	9,2e+05	-1152,0
43	$2NH_2 = NH_3 + NH$	5e+13	10000,0
44	$NH_2 + NH = N_2H_2 + H$	5e+13	0,0

Çizelge 1.1. (devam) NH_3-H_2 yakıt karışımları ve %100 NH_3 içeren yakıtın reaksiyon mekanizması

Reaksiyon Numarası	Reaksiyon	Üstel Faktör	Aktivasyon Enerjisi
45	$NH_2 + N = N_2 + 2\ H$	7e+13	0,0
46	$NH_2 + NO = N_2 + H_2O$	2,8e+20	258,0
47	$NH_2 + NO = NNH + OH$	2,3e+10	-814,0
48	$NH2 + NO_2 = N_2O + H_2O$	1,6e+16	268,0
49	$NNH = N_2 + H$	6,5e+07	0,0
50	$NNH + O = N_2O + H$	1e+14	0,0
51	$NNH + O = NH + NO$	5e+13	0,0
52	$NNH + O_2 = N_2 + HO_2$	2e+14	0,0
53	$NNH + O_2 = N_2 + H + O_2$	5e+13	0,0
54	$H + NO + M = HNO + M$	4,48e+19	740,0
55	$HNO + H = H_2 + NO$	9e+11	660,0
56	$HNO + OH = NO + H2O$	1,3e+07	-950,0
57	$HNO + O_2 = HO_2 + NO$	1e+13	13000,0
58	$NH_3 + H = NH_2 + H_2$	5,4e+05	9915,0
59	$NH_3 + M = NH_2 + H + M$	6,6e+17	97300,0
60	$NH_3 + OH = NH_2 + H_2O$	2e+06	566,0
61	$NH_3 + O = NH_2 + OH$	9,4e+06	6460,0
62	$N_2H_3 + M = N_2H_2 + H + M$	2e+16	37000,0
63	$N_2H_3 + H = N_2H_2 + H_2$	2,4e+08	-10,0
64	$N_2H_3 + HO_2 = N_2H_2 + H_2O_2$	1,4e+04	-1600,0
65	$N_2H_2 + H = NNH + H_2$	8,5e+04	230,0
66	$N_2H_2 + O = NNH + OH$	3,3e+08	497,0
67	$N_2H_2 + OH = NNH + H_2O$	5,9e+01	1360,0

Çizelge 1.2. NH_3-HZKG yakıt karışımlarının reaksiyon mekanizması

Reaksiyon Numarası	Reaksiyon	Üstel Faktör	Aktivasyon Enerjisi
1	$O + H_2 = H + OH$	3,87e+04	6260,0
2	$O + HO_2 = OH + O_2$	2e+13	0,0
3	$O + CH_3 = H + CH_2O$	5,54e+13	-136,0
4	$O + CH_4 = OH + CH_3$	1,02e+09	8600,0
5	$O + CH_2O = OH + HCO$	6,26e+09	2260,0
6	$O + CH_3O = OH + CH_2O$	1e+13	0,0
7	$O + C_2H_2 = H + HCCO$	1,35e+07	1900,0
8	$H + O_2 + M = HO_2 + M$	2,8e+18	0,0
9	$H + 2O_2 = HO_2 + O_2$	2,08e+19	0,0
10	$H + O_2 + H_2O = HO_2 + H_2O$	1,126e+19	0,0
11	$H + O_2 + N2 = HO_2 + N_2$	2,6e+19	0,0
12	$H + O_2 + AR = HO_2 + AR$	7e+17	0,0
13	$H + O_2 = O + OH$	1,04e+14	15286.0
14	$H + OH + M = H_2O + M$	2,2e+22	0,0
15	$H + HO_2 = O_2 + H_2$	4,48e+13	1068.0
16	$H + HO_2 = 2\ OH$	8,4e+13	635.0
17	$H + CH = C + H_2$	1,65e+14	0,0
18	$2\ CH_3 = C_2H_5 + H$	3,16e+13	14698,85
19	$H + CH_3 (+ M) = CH_4 (+ M)$	2,47e+33	2440,01
20	$H + CH_4 = CH_3 + H_2$	6,6e+08	10840,0

Çizelge 1.2. (devam) NH_3-HZKG yakıt karışımlarının reaksiyon mekanizması

Reaksiyon Numarası	Reaksiyon	Üstel Faktör	Aktivasyon Enerjisi
21	H + HCO = H_2 + CO	1,21e+14	0,0
22	H + CH_2O (+ M) = CH_3O (+ M)	2,20e+30	5560,0
23	H + CH_2O = HCO + H_2	5,74e+07	2742,0
24	H + CH_2OH = OH + CH_3	1,65e+11	-284,0
25	H + CH_2OH = CH_2(S) + H_2O	3,28e+13	610,0
26	H + CH_3O = OH + CH_3	1,50e+12	-110,0
27	H + CH_3O = CH_2(S) + H_2O	2,62e+14	1070,0
28	H + CH_3OH = CH_3O + H_2	4,20e+06	4870,0
29	H + C_2H_2 (+ M) = C_2H_3 (+ M)	3,80e+40	7220,0
30	H + C_2H_3 = H_2 + C_2H_2	3,00e+13	0,0
31	H + C_2H_4 (+ M) = C_2H_5 (+ M)	6,00e+41	6970,0
32	H + C_2H_4 = C_2H_3 + H_2	1,325000e+06	12240,0
33	OH + H_2 = H + H_2O	2,16e+08	3430,0
34	2 OH (+ M) = H_2O_2 (+ M)	2,30e+18	-1700,0
35	2 OH = O + H_2O	3,57e+04	-2110,0
36	OH + HO_2 = H_2O + O_2	7,00e+12	-1092,96
37	OH + HO_2 = H_2O + O_2	4,50e+14	10929,6
38	OH + H_2O_2 = HO_2 + H_2O	1,70e+18	29410,0
39	OH + CH_3 (+M) = CH_3OH (M)	4,00e+36	3140,0
40	OH + CH_3 = CH_2 + H_2O	5,60e+07	5420,0
41	OH + CH_3 = CH_2(S) + H_2O	6,44e+17	1417,0
42	OH + CH_4 = CH_3 + H_2O	1,00e+08	3120,0
43	CO + OH = CO_2 + H	7,015e+04	-355,7
44	CO + OH = CO_2 + H	5,757e+12	331,8
45	OH + HCO = H_2O + CO	5e+13	0,0
46	OH + CH_2O = HCO + H_2O	3,43e+09	-447,0
47	OH + C_2H_4 = C_2H_3 + H_2O	3,60e+06	2500,0
48	OH + C_2H_6 = C_2H_5 + H_2O	3,54e+06	870,0
49	2 HO_2 = O_2 + H_2O_2	1,3e+11	-1630,0
50	2 HO_2 = O_2 + H_2O_2	4,2e+14	12000,0
51	HO_2 + CH_3 = O_2 + CH_4	1e+12	0,0
52	HO_2 + CH_3 = OH + CH_3O	3,87e+13	0,0
53	HO_2 + CO = OH + CO_2	1,5e+14	23600,0
54	CH + O_2 = O + HCO	6,71e+13	0,0
55	CH + H_2 = H + CH_2	1,08e+14	3110,0
56	CH + H_2O = H + CH_2O	5,71e+12	-755,0
57	CH_2 + O_2 = OH + H + CO	5e+12	1500,0
58	CH2(S) + N_2 = CH_2 + N_2	1,5e+13	600,0
59	H2(S) + O_2 = H + OH + CO	2,8e+13	0,0
60	CH2(S) + O_2 = CO + H2O	1,2e+13	0,0
61	CH2(S) + H_2 = CH_3 + H	7e+13	0,0
62	CH_2(S) + H_2O (+M) = CH_3OH	1,88e+38	5040,0
63	CH_2(S) + H_2O = CH_2 + H_2O	3,00e+13	0,0
64	CH_2(S) + CO_2 = CO + CH_2O	1,40e+13	0,0
65	CH_3 + O_2 = O + CH_3O	3,56e+13	30480,0
66	CH_3 + O_2 = OH + CH_2O	2,31e+12	20315,0
67	2 CH_3 (+ M) = C_2H_6 (+ M)	3,40e+41	2762,0
68	CH_3 + HCO = CH_4 + CO	2,648e+13	0,0
69	HCO + H_2O = H + CO + H_2O	1,5e+18	17000,0
70	HCO + M = H + CO + M	1,87e+17	17000,0
71	HCO + O_2 = HO_2 + CO	1,34e+13	400,0
72	C_2H_3 + O_2 = HCO + CH_2O	4,58e+16	1015,0
73	HCCO + O_2 = OH + 2 CO	3,2e+12	854,0

Çizelge 1.2. (devam) NH_3-HZKG yakıt karışımlarının reaksiyon mekanizması

Reaksiyon Numarası	Reaksiyon	Üstel Faktör	Aktivasyon Enerjisi
74	$O + C_2H_4 = H + CH_2CHO$	6,7e+06	220,0
75	$CH_2 + O_2 = 2\ H + CO_2$	5,8e+12	1500,0
76	$CH_2 + O_2 = O + CH_2O$	2,4e+12	1500,0
77	$C_2H_3 + O_2 = O + CH_2CHO$	3,03e+11	11,0
78	$N + NO = N_2 + O$	2,7e+13	355,0
79	$N + O_2 = NO + O$	9e+09	6500,0
80	$N + OH = NO + H$	3,36e+13	385,0
81	$N_2O + O = N_2 + O_2$	1,4e+12	10810,0
82	$N_2O + H = N_2 + OH$	3,87e+14	18880,0
83	$N_2O + OH = N_2 + HO_2$	2e+12	21060,0
84	$N_2O\ (+ M) = N_2 + O\ (+ M)$	6,37e+14	56640,0
85	$HO_2 + NO = NO_2 + OH$	2,11e+12	-480,0
86	$NO + O + M = NO_2 + M$	1,06e+20	0,0
87	$NO_2 + O = NO + O_2$	3,9e+12	-240,0
88	$NO_2 + H = NO + OH$	1,32e+14	360,0
89	$NH + H = N + H_2$	3e+13	0,0
90	$NH + O = NO + H$	9,2e+13	0,0
91	$NH + OH = HNO + H$	2e+13	0,0
92	$NH + OH = N + H_2O$	5e+11	2000,0
93	$NH + O_2 = HNO + O$	4,6e+05	6500,0
94	$NH + O_2 = NO + OH$	1,3e+06	100,0
95	$NH + NO = N_2O + H$	1,8e+14	-244,0
96	$NH + NO = N_2 + OH$	2,2e+13	0,0
97	$NH_2 + H = NH + H_2$	7,2e+05	799,0
98	$NH_2 + O = HNO + H$	6,6e+13	0,0
99	$NH_2 + OH = NH + H_2O$	4e+06	1000,0
100	$NH_2 + HO_2 = NH_3 + O_2$	9,2e+05	-1152,0
101	$NH_2 + NH_2 = NH_3 + NH$	5e+13	10000,0
102	$NH_2 + NH = N_2H_2 + H$	5e+13	0,0
103	$NH_2 + N = N_2 + H + H$	7e+13	0,0
104	$NH_2 + NO = N_2 + H_2O$	2,8e+20	1258,0
105	$NH_2 + NO = NNH + OH$	2,3e+10	-814,0
106	$NH_2 + NO_2 = N_2O + H_2O$	1,6e+16	268,0
107	$NNH = N_2 + H$	6,5e+07	0,0
108	$NNH + O = N_2O + H$	1e+14	0,0
109	$NNH + O = NH + NO$	5e+13	0,0
110	$NNH + O_2 = N_2 + HO_2$	2e+14	0,0
111	$NNH + O_2 = N_2 + H + O_2$	5e+13	0,0
112	$H + NO + M = HNO + M$	4,48e+19	740,0
113	$HNO + H = H_2 + NO$	9e+11	660,0
114	$HNO + OH = NO + H_2O$	1,3e+07	-950,0
115	$HNO + O_2 = HO_2 + NO$	1e+13	13000,0
116	$NH_3 + H = NH_2 + H_2$	5,4e+05	9915,0
117	$NH_3 + M = NH_2 + H + M$	6,6e+17	97300,0
118	$NH_3 + OH = NH_2 + H_2O$	2e+06	566,0
119	$NH_3 + O = NH_2 + OH$	9,4e+06	6460,0
120	$NH + CO_2 = HNO + CO$	1e+13	14350,0
121	$N_2H_3 + M = N_2H_2 + H + M$	2e+16	37000,0
122	$N_2H_3 + H = N_2H_2 + H_2$	2,4e+08	-10,0
123	$N_2H_3 + HO_2 = N_2H_2 + H_2O_2$	1,4e+04	-1600,0
124	$N_2H_2 + H = NNH + H_2$	8,5e+04	230,0
125	$N_2H_2 + O = NNH + OH$	3,30+08	497,0
126	$N_2H_2 + OH = NNH + H_2O$	5,9e+01	1360,0

Çizelge 1.2. (devam) NH_3-HZKG yakıt karışımlarının reaksiyon mekanizması

Reaksiyon Numarası	Reaksiyon	Üstel Faktör	Aktivasyon Enerjisi
127	HCN + O = NH + CO	5,07e+03	4980,0
128	CH + N_2 = HCN + N	3,12e+09	20130,0
129	CH + NO = HCN + O	4,1e+13	0,0
130	CH_3 + NO = HCN + H_2O	9,6e+13	28800,0



Gazili olmak ayrıcalıktır