

**ZONGULDAK BÜLENT ECEVİT ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ÖN KARIŞIMLI ALEVLERİN MODELLENMESİ VE İS OLUŞUMUNUN**  
**İNCELENMESİ**

**MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

**DOKTORA TEZİ**

**NURİ ÖZGÜR AYDIN**

**HAZİRAN 2022**

**ZONGULDAK BÜLENT ECEVİT ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ÖN KARIŞIMLI ALEVLERİN MODELLENMESİ VE İS OLUŞUMUNUN**  
**İNCELENMESİ**

**MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

**DOKTORA TEZİ**

**Nuri Özgür AYDIN**

**DANIŞMAN: Prof. Dr. Mehmet KOPAÇ**

**ZONGULDAK**

**Haziran 2022**

**KABUL:**

Nuri Özgür AYDIN tarafından hazırlanan “Ön Karışım Alevlerin Modellenmesi ve İş Oluşumunun İncelenmesi” başlıklı bu çalışma jürimiz tarafından değerlendirilerek Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Makine Mühendisliği Anabilim Dalında Doktora Tezi olarak oybirliğiyle kabul edilmiştir. 08/06/2022

**Danışman:** Prof. Dr. Mehmet KOPAÇ

Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü

**Üye:** Prof. Dr. Hasan HEPERKAN

İstanbul Aydın Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü

**Üye:** Prof. Dr. Ebru MANÇUHAN

Marmara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü

**Üye:** Prof. Dr. Adnan TOPUZ

Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü

**Üye:** Dr. Öğr. Üyesi Jülide YENER DİBEK

Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü

---

**ONAY:**

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

....../....../2022

Prof. Dr. Ahmet ÖZARSLAN  
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü



*“Bu tezdeki tüm bilgilerin akademik kurallara ve etik ilkelere uygun olarak elde edildiğini ve sunulduğunu; ayrıca bu kuralların ve ilkelerin gerektirdiği şekilde, bu çalışmadan kaynaklanmayan bütün atıfları yaptığımı beyan ederim.”*

Nuri Özgür AYDIN

## **ÖZET**

**Doktora Tezi**

### **ÖN KARIŞIMLI ALEVLERİN MODELLENMESİ VE İS OLUŞUMUNUN İNCELENMESİ**

**Nuri Özgür AYDIN**

**Zonguldak Bülent Ecevit Üniversitesi**

**Fen Bilimleri Enstitüsü**

**Makine Mühendisliği Anabilim Dalı**

**Tez Danışmanı: Prof. Dr. Mehmet KOPAC**

**Haziran 2022, 113 sayfa**

Yanma olaylarının daha iyi anlaşılabilmesi, deneysel verilerin doğrulanması ve yeniden üretilmesi, tepkime mekanizması geliştirilmesi ve doğrulanması, çok boyutlu ve türbülanslı akışlı modellemelerin temelini oluşturması açılarından bir boyutlu laminar ön karışımli alevlerin sayısal çözümü önem taşır. Bu çalışmada bahsedilen alev modelinin sayısal analizini ve istenildiği takdirde is analizi de gerçekleştiren bir bilgisayar programı geliştirilmiştir.

Ön karışımli laminar alevin bir boyutlu olarak sayısal çözümünün yapılması için, gaz karışımlarının termodinamik ve taşınım özelliklerinin hesaplanmasına, adyabatik alev sıcaklığı hesabına, gaz karışımlarının termodinamik denge çözümüne, kimyasal kinetik mekanizmaların kullanılmasına, kütle ve enerji korunum denklemlerinin ve is oluşumunun modelinin çözülmesine gereksinim duyulur. Bunlar gibi ihtiyaç duyulan tüm denklem setleri programın kendisi ve/veya kendisine ait alt programlar tarafından gerçekleştirilmektedir. Bu çalışma kapsamında geliştirilen program kendi bünyesi dışında sadece açık kaynak kodlu veya özgür lisanslı matematik kütüphaneleri kullanmaktadır.

## ÖZET (devam ediyor)

Yapılan modellemelerde yakıt olarak metan – asetilen – etilen – propan – hidrojen gibi birbirinden farklı yakıtlar/karışımları kullanılmış, karışım olarak ise yakıt-hava, yakıt-oksijen, yakıt-oksijen-argon gibi farklı alevler seçilmiştir. Modellenen alevler için çoğu zaman farklı tepkime mekanizmaları seçilmeye çalışılmıştır. Bu farklılıklar ile yazılan programın farklı yakıt, yakıt karışımları, farklı karışımlar veya mekanizmalarla da uyumlu olduğu vurgulanmıştır.

Yazılan program sonucu elde edilen veriler ile literatürde bulunan deneysel ve/veya modelleme sonuçları karşılaştırılmış ve sunulmuştur. Adyabatik alev sıcaklığı, denge çözümleri, alev boyunca bileşen dağılımı ve is oluşumu verileri farklı yakıtlar, yakıt-hava eşdeğer oranları ve soğuk karışım giriş hızlarında denenmiştir. Elde edilen sonuçların literatür verileri ile uyumlu olduğu gözlenmiştir.

**Anahtar Kelimeler:** Yanma analizi, bir boyutlu modelleme, is oluşumu, taşınım özellikleri, laminar ön karışım alevler.

**Bilim Kodu:** 625.04.04

## **ABSTRACT**

**Ph. D. Thesis**

# **MODELING OF PREMIXED FLAMES AND INVESTIGATION OF SOOT FORMATION**

**Nuri Özgür AYDIN**

**Zonguldak Bülent Ecevit University  
Graduate School of Natural and Applied Sciences  
Department of Mechanical Engineering**

**Thesis Advisor: Prof. Dr. Mehmet KOPAC  
June 2022, 113 pages**

The numerical solution of one dimensional laminar premixed flames is important for a better understanding of combustion phenomena, validation and reproduction of experimental data, generation and verification of reaction mechanisms, and forming the basis of multidimensional and/or turbulent flames. In this study, a computer program has been developed that performs numerical analysis of the flame model and, if desired, with the soot analysis.

For one dimensional numerical solution of laminar premixed flames, it is necessary to calculate the thermodynamic and the transport properties of gas mixtures and the adiabatic flame temperature, to use chemical kinetic mechanisms, to solve mass and energy conservation equations, the thermodynamic equilibrium solution of gas mixtures and the soot formation model. All these needed equation sets are handled by program itself/subroutines. The program developed within the scope of this study uses only open source/free licensed math libraries outside of its own body.

## **ABSTRACT (continued)**

Different flames were modeled with several mixtures methane/ethylene/propane/ hydrogen and their combinations with different oxidizer streams like oxygen/air/oxygen-argon. Different reaction mechanisms tried to be selected for the modeled flames. With these differences, it is emphasized that the written code is compatible with different fuels or fuel mixtures and different oxidizers or reaction mechanisms.

The obtained data with the written code and some experimental and/or modeling results in the literature are compared and presented. The adiabatic flame temperature, the equilibrium compositions, the species profiles within the flame and the soot formation data were simulated with different fuels, different equivalence ratios and cold mixture inlet velocities. It was observed that the results were in a good agreement with the literature data.

**Keywords:** Combustion analysis, one dimensional modeling, soot formation, transport properties, laminar premixed flames.

**Science Code:** 625.04.04

## TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın başlamasında, yürütülmesinde ve sonuçlanmasına az bir süre kalana kadar danışmanlığımı yürüten, bu tez çalışması üzerinde büyük emekleri olan, sadece akademik kimliğiyle değil hayata bakışı ve duruşuyla birçok kişiye ve bana örnek olan, vakitsizce aramızdan ayrılan fakat desteklerini hala hissettiğim çok değerli hocam Dr. Öğr. Üyesi Mustafa EYRİBOYUN'a sonsuz saygı ve teşekkürlerimi sunarım ve özlemle anarım.

Tez izleme komitemde bulunan ve sonrasında danışmanlığımı üstlenerek bu çalışmayı bilgi birikimi, öneri ve destekleriyle tamamlamamı sağlayan tez danışmanım Prof. Dr. Mehmet KOPAÇ'a şükranlarımı sunarım.

Bu çalışmanın sürdürülmesinde değerlendirmeleri ve yapıcı önerileriyle emekleri bulunan tez izleme komitesi üyeleri Prof. Dr. Adnan TOPUZ'a ve Dr. Öğr. Üyesi Jülide YENER DİBEK'e teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarım sırasında türlü kolaylıklar gösteren ZBEÜ Makine Mühendisliği Öğretim Üyelerine ve iş yoğunluğumu azaltmada her daim yardımcı olan Araştırma Görevlisi arkadaşlarıma teşekkürlerimi sunarım.

Hayatım boyunca benden desteklerini esirgemeyen kıymetli varlıklarım anneme ve babama ve büyük aileme çok teşekkür ederim.

Yanlarında huzur bulduğum, desteklerini her zaman hissettiğim, bana inanan ve sabır gösteren biricik kızım Umay Defne'ye ve hayat ışığım Seda TIĞLI AYDIN'a en içten minnetlerimi sunarım

.



## İÇİNDEKİLER

|                                                                | <u>Sayfa</u> |
|----------------------------------------------------------------|--------------|
| KABUL: .....                                                   | ii           |
| ÖZET .....                                                     | iii          |
| ABSTRACT .....                                                 | v            |
| TEŞEKKÜR .....                                                 | vii          |
| İÇİNDEKİLER.....                                               | ix           |
| ŞEKİLLER DİZİNİ.....                                           | xiii         |
| ÇİZELGELER DİZİNİ .....                                        | xvii         |
| EK AÇIKLAMALAR DİZİNİ.....                                     | xix          |
| SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....                            | xxi          |
| <br>BÖLÜM 1 GİRİŞ .....                                        | <br>1        |
| 1.1 ÇALIŞMANIN AMACI .....                                     | 1            |
| 1.2 KONU İLE İLGİLİ DAHA ÖNCE YAPILMIŞ ÇALIŞMALAR.....         | 2            |
| 1.3 ÇALIŞMANIN İÇERİĞİ.....                                    | 4            |
| <br>BÖLÜM 2 YANMA .....                                        | <br>7        |
| 2.1 GAZLARIN TERMODİNAMİKSEL ÖZELLİKLERİNİN HESAPLANMASI ..... | 7            |
| 2.1.1 Yedi Katsayılı NASA Polinomları.....                     | 8            |
| 2.1.2 Dokuz Katsayılı NASA Polinomları.....                    | 8            |
| 2.2 SAF GAZLAR İÇİN TAŞINIM BÜYÜKLÜKLERİ.....                  | 9            |
| 2.2.1 Taşınım Özellikleri.....                                 | 9            |
| 2.2.2 Viskozite .....                                          | 10           |
| 2.2.3 Isı İletim Katsayısı .....                               | 10           |
| 2.2.4 İkili Difüzyon Katsayısı .....                           | 12           |
| 2.3 GAZ KARIŞIMLARI İÇİN TAŞINIM BÜYÜKLÜKLERİ.....             | 13           |
| 2.3.1 Viskozite .....                                          | 13           |

## İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

|                                                              | <u>Sayfa</u> |
|--------------------------------------------------------------|--------------|
| 2.3.2 Isı İletim Katsayısı .....                             | 14           |
| 2.3.3 Difüzyon Katsayısı.....                                | 14           |
| 2.4 TERMOKİMYASAL DENGİ .....                                | 15           |
| 2.4.1 Lagrange Çarpanı Yöntemi ile Gibbs Minimizasyonu ..... | 15           |
| 2.4.2 Element Potansiyel Yöntemi.....                        | 16           |
| 2.5 ADYABATİK ALEV SICAKLIĞI .....                           | 17           |
| 2.6 KİMYASAL KİNİTİK .....                                   | 18           |
| 2.6.1 Stokiyometri.....                                      | 18           |
| 2.6.2 Denge Sabitleri ve Tepkime Mekanizmaları.....          | 18           |
| 2.6.2.1 Standart Tepkimeler .....                            | 20           |
| 2.6.2.2 Üçüncü Kütle Tepkimeleri .....                       | 20           |
| 2.6.2.3 Basınç Bağımlı Tepkimeler.....                       | 21           |
| 2.7 İS OLUŞUMU .....                                         | 23           |
| BÖLÜM 3 MATEMATİKSEL MODELLEME.....                          | 25           |
| 3.1 TEMEL EŞİTLİKLER.....                                    | 26           |
| 3.1.1 Yanma Modellemesi .....                                | 26           |
| 3.1.2 İS Modellemesi .....                                   | 28           |
| 3.1.3 Isıl Işınım Modellemesi.....                           | 31           |
| 3.2 SONLU FARKLAR YÖNTEMİ .....                              | 33           |
| 3.2.1 Sonlu Farklar Denklikleri.....                         | 33           |
| 3.2.2 Sınır Koşulları .....                                  | 34           |
| 3.2.3 Doğrusal Olmayan Denklem Sistemlerinin Çözümü .....    | 35           |
| 3.2.4 Adaptif Düğüm Noktaları .....                          | 36           |
| BÖLÜM 4 PROGRAMLAMA VE ALGORİTMA.....                        | 39           |
| 4.1 DENGİ ÇÖZÜMÜ.....                                        | 39           |
| 4.2 GAZLARIN TAŞINIM BÜYÜKLÜKLERİNİN HESAPLANMASI .....      | 40           |
| 4.3 YANMA OLAYI VE İS OLUŞUMU .....                          | 41           |

## İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

|                                                                   | <u>Sayfa</u> |
|-------------------------------------------------------------------|--------------|
| BÖLÜM 5 HESAPLAMALAR VE SONUÇLAR .....                            | 45           |
| 5.1 SAF GAZLARIN VE GAZ KARIŞIMLARININ TAŞINIM BÜYÜKLÜKLERİ ..... | 45           |
| 5.2 DENGE ÇÖZÜMÜ VE ADYABATİK ALEV SICAKLIĞI .....                | 49           |
| 5.3 AKIŞ ALANI İÇİNDE YANMA ÇÖZÜMÜ .....                          | 53           |
| 5.4 İS OLUŞUMUNUN İNCELENMESİ .....                               | 68           |
| BÖLÜM 6 SONUÇLAR VE ÖNERİLER .....                                | 89           |
| 6.1 ÖNERİLER .....                                                | 92           |
| KAYNAKLAR .....                                                   | 93           |
| EK AÇIKLAMALAR .....                                              | 107          |
| ÖZGEÇMİŞ .....                                                    | 113          |



## ŞEKİLLER DİZİNİ

| <u>No</u>                                                                                                                                                                | <u>Sayfa</u> |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| Şekil 2.1 İs oluşumunun homojen karışımlar (ön karışımli alevler) için şematik gösterimi .....                                                                           | 23           |
| Şekil 2.2 İs oluşumu için gaz fazından katı is yığımına geçiş sürecinin şematik gösterimi .....                                                                          | 24           |
| Şekil 3.1 Bir boyutlu ön karışımli sabit bir alev için sıcaklık, konsantrasyon ve hız profilleri .....                                                                   | 25           |
| Şekil 3.2 Çözüm yapılacak bölgenin akış ekseninde bir boyutlu eşit olmayan aralıklı düğüm noktalarının gösterimi.....                                                    | 33           |
| Şekil 4.1 Denge çözümü için program akış diyagramı. ....                                                                                                                 | 40           |
| Şekil 4.2 Gaz karışımlarının taşınım büyüklüklerini hesaplamak için yazılan alt programın akış diyagramı.....                                                            | 41           |
| Şekil 4.3 Jacobi matrisinin sahip olduđu blok tridiagonal formun şematik gösterimi.....                                                                                  | 42           |
| Şekil 4.4 Ana programın akış diyagramı. ....                                                                                                                             | 43           |
| Şekil 5.1 Propan-hava karışımının farklı yakıt-hava eşdeğer oranları için adyabatik alev sıcaklıkları ( $P=1$ atm, $T_{giriş}=298$ K). ....                              | 50           |
| Şekil 5.2 Propan-hava karışımının farklı yakıt-hava eşdeğer oranları için bazı bileşenlerin mol oranları ( $P=1$ atm, $T_{giriş}=298$ K).....                            | 51           |
| Şekil 5.3 Propan-hava karışımının farklı yakıt-hava eşdeğer oranları için bazı bileşenlerin mol oranları ( $P=1$ atm, $T_{giriş}=298$ K).....                            | 51           |
| Şekil 5.4 Değişik hava yakıt oranları ve yakıt katılan hacimsel hidrojen oranlarına karşılık adyabatik alev sıcaklığı değerlerinin literatür ile karşılaştırılması ..... | 52           |
| Şekil 5.5 Metan-hava karışımının stokiyometrik miktarda yanma için ( $\Phi=1$ ) farklı oranlarda hidrojen gazı eklenmesinin adyabatik alev sıcaklığına etkisi.....       | 53           |
| Şekil 5.6 Stokiyometrik metan yanması için yazılan programdan elde edilen değer ile literatür karşılaştırması .....                                                      | 54           |
| Şekil 5.7 Stokiyometrik metan yanması için yazılan programdan elde edilen değer ile literatür karşılaştırması .....                                                      | 55           |

## ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

| No                                                                                                                                     | Sayfa |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| Şekil 5.8 Stokiyometrik metan yanması için yazılan programdan elde edilen değer ile literatür karşılaştırması .....                    | 55    |
| Şekil 5.9 Stokiyometrik metan-hava yanması adaptif düğüm noktası oluşturma ve sıcaklık dağılımı gösterimi. ....                        | 56    |
| Şekil 5.10 Stokiyometrik metan-hava yanması adaptif düğüm noktası oluşturma ve karbon monoksit mol oranı dağılımı gösterimi. ....      | 56    |
| Şekil 5.11 Etilen-hava yanması modellemesinin bulunan sıcaklık değerlerinin literatür ile karşılaştırılması. ....                      | 57    |
| Şekil 5.12 Karbon monoksit ve karbon dioksit mol oranları .....                                                                        | 58    |
| Şekil 5.13 Su buharı (ölçeklendirilmiş) ve asetilen mol oranları. ....                                                                 | 58    |
| Şekil 5.14 Yazılan program ile elde edilen normalize edilmiş $CH^*$ mol oranının deneysel sonuçlar ile karşılaştırılması .....         | 59    |
| Şekil 5.15 Shmakov-1 alevinin, enerji denklemiyle beraber çözülerek, sıcaklık dağılımı oksijen ve su buharı için mol oranları. ....    | 60    |
| Şekil 5.16 Shmakov-1 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, sıcaklık dağılımı, oksijen ve su buharı için mol oranları. ....  | 61    |
| Şekil 5.17 Shmakov-1 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, sıcaklık dağılımı, oksijen ve su buharı için mol oranları. ....  | 61    |
| Şekil 5.18 Shmakov-2 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, sıcaklık dağılımı, yanma ana bileşenleri için mol oranları. .... | 62    |
| Şekil 5.19 Shmakov-1 ve Shmakov-2 alevlerinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, etan ve formaldehit toplam mol oranları .....    | 62    |
| Şekil 5.20 Shmakov-1 ve Shmakov-2 alevlerinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, etilen mol oranları. ....                        | 63    |
| Şekil 5.21 Shmakov-1 ve Shmakov-2 alevlerinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, asetilen mol oranları .....                      | 63    |
| Şekil 5.22 Shmakov-3 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, genel yanma bileşenleri mol oranları .....                       | 64    |
| Şekil 5.23 Shmakov-3 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, genel yanma bileşenleri mol oranları. ....                       | 64    |
| Şekil 5.24 Shmakov-3 ve Shmakov-4 alevleri için hidrojen atomunun mol oranı .....                                                      | 65    |

## ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

| <u>No</u>                                                                                                                                                       | <u>Sayfa</u> |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| Şekil 5.25 Shmakov-3 ve Shmakov-4 alevleri için hidroksil molekülünün mol oranı .....                                                                           | 66           |
| Şekil 5.26 Novo-1 alevinin deneysel sıcaklık verileri ile modelleme sonuçlarının karşılaştırılması.....                                                         | 67           |
| Şekil 5.27 Novo-1 alevinin modellenmesi ile elde edilen ana bileşenlerin, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi.....                                         | 67           |
| Şekil 5.28 Novo-1 alevinin yakıtı oluşturan bileşenlerin mol dağılımlarının gösterimi .....                                                                     | 68           |
| Şekil 5.29 Slav-1 alevinin modellenmesi ile elde edilen ana bileşenlerin, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi.....                                         | 69           |
| Şekil 5.30 Slav-1 alevinin modellenmesi ile elde edilen bazı bileşenlerin mol oranlarının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi .....                       | 70           |
| Şekil 5.31 Slav-1 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki hacimsel is oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi.....                  | 70           |
| Şekil 5.32 Slav-2 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki bazı bileşenlerin mol oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi.....        | 71           |
| Şekil 5.33 Slav-2 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki bazı bileşenlerin mol oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi.....        | 72           |
| Şekil 5.34 Slav-2 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki hacimsel is oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi.....                  | 72           |
| Şekil 5.35 Slav-3 alevinin modellenmesi ile elde edilen bazı bileşenlerin mol oranlarının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi .....                       | 73           |
| Şekil 5.36 Slav-3 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki hacimsel is oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi.....                  | 73           |
| Şekil 5.37 Wu et al. (2017) tarafından deneysel olarak çalışılan alevlerin.....                                                                                 | 74           |
| Şekil 5.38 Düşük giriş hızındaki (4.4 cm/s), farklı yakıt eşdeğer oranına sahip alevlerin hacimsel is miktarlarının deneysel veriler ile karşılaştırılması..... | 75           |
| Şekil 5.39 Düşük giriş hızındaki (5.9 cm/s), farklı yakıt eşdeğer oranına sahip alevlerin hacimsel is miktarlarının deneysel veriler ile karşılaştırılması..... | 75           |
| Şekil 5.40 Park-1, Park-2 ve Park-3 adı verilen alevlerin sıcaklık dağılımlarının karşılaştırılması.....                                                        | 77           |
| Şekil 5.41 Park-1, Park-2 ve Park-3 adı verilen alevlerin asetilen mol oranlarının karşılaştırılması .....                                                      | 78           |

## ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

| <u>No</u>                                                                                                                   | <u>Sayfa</u> |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| Şekil 5.42 Park-1, Park-2 ve Park-3 adı verilen alevlerin hidroksil mol oranlarının karşılaştırılması.....                  | 78           |
| Şekil 5.43 Park-1, Park-2 ve Park-3 adı verilen alevlerin hacimsel is oranlarının karşılaştırılması.....                    | 79           |
| Şekil 5.44 ISF4-2a alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması                                 | 80           |
| Şekil 5.45 ISF4-2a alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması                                 | 80           |
| Şekil 5.46 ISF4-2b alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması                                 | 81           |
| Şekil 5.47 ISF4-2b alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması                                 | 81           |
| Şekil 5.48 ISF4-2c alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması                                 | 82           |
| Şekil 5.49 ISF4-2c alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması                                 | 82           |
| Şekil 5.50 ISF4-3a alevi için modelleme sonucu elde edilen hacimsel is oranı ile deneysel değerlerin karşılaştırılması..... | 83           |
| Şekil 5.51 ISF4-3b alevi için modelleme sonucu elde edilen hacimsel is oranı ile deneysel değerlerin karşılaştırılması..... | 84           |
| Şekil 5.52 ISF4-5a-4cm alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin bazı bileşenler için karşılaştırılması .....  | 85           |
| Şekil 5.53 ISF4-5a-4cm alevi için modelleme sonuçları ile deneysel is konsantrasyonlarının karşılaştırılması.....           | 85           |
| Şekil 5.54 ISF4-5a-2cm alevi için modelleme sonuçları ile deneysel is konsantrasyonlarının karşılaştırılması.....           | 86           |
| Şekil 5.55 ISF4-5a-6cm alevi için modelleme sonuçları ile deneysel is konsantrasyonlarının karşılaştırılması.....           | 86           |

## ÇİZELGELER DİZİNİ

| <u>No</u>                                                                                                                                                    | <u>Sayfa</u> |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| Çizelge 3.1 İs kütle oranı taşınım denkleminin kaynak terim bileşenleri. ....                                                                                | 29           |
| Çizelge 3.2 Hidroksil için sıcaklık bağımlı düzeltme faktörü hesabı. ....                                                                                    | 30           |
| Çizelge 3.3 Hız sabitleri, $k_i T = A \exp(-E/RT)$ ....                                                                                                      | 31           |
| Çizelge 3.4 Denklem (3.35) için katsayılar.....                                                                                                              | 32           |
| Çizelge 5.1 Bazı saf gazların yazılan program ile elde edilen ısı iletim katsayısı ve viskozite değerlerinin literatür değerleri ile karşılaştırılması. .... | 46           |
| Çizelge 5.2 Havanın ısı iletim katsayısı ve viskozite değerlerinin program sonuçları ve literatür değerleri ile karşılaştırılması. ....                      | 46           |
| Çizelge 5.3 Karşılaştırması yapılan üç farklı gaz içeren karışımların bileşenleri ve mol oranları. ....                                                      | 47           |
| Çizelge 5.4 Farklı gaz karışımları için deneysel viskozite değerleri ile yazılan program ile elde edilen değerlerin karşılaştırması.....                     | 47           |
| Çizelge 5.5 Yazılan programla elde edilen viskozite ve ısı iletim katsayısı değerlerinin literatürden alınan değerler ile karşılaştırılması.....             | 48           |
| Çizelge 5.6 İkili Difüzyon sayıları için program sonuçları ve literatür karşılaştırması. ....                                                                | 48           |
| Çizelge 5.7 Propan-hava yanmasının değişik yakıt-hava eşdeğer oranları için program sonuçları ile literatür değerleri ....                                   | 49           |
| Çizelge 5.8 Farklı yakıtlar için stokiyometrik yakıt hava karışımı için adyabatik alev sıcaklıkları.....                                                     | 50           |
| Çizelge 5.9 Modellenen alevin ilgili parametreleri.....                                                                                                      | 57           |
| Çizelge 5.10 Literatürden deneysel ve modelleme sonuçları karşılaştırılan alevlerin parametreleri .....                                                      | 60           |
| Çizelge 5.11 Analizi yapılan alevin parametreleri.....                                                                                                       | 66           |
| Çizelge 5.12 İncelenen alevlerin parametreleri.....                                                                                                          | 69           |
| Çizelge 5.13 Modellenen alevlerin parametreleri.....                                                                                                         | 76           |

## ÇİZELGELER DİZİNİ (devam ediyor)

No

Sayfa

Çizelge 5.14 Bu çalışma kapsamında çalışılan ISF alevlerinin modelleme parametreleri . .... 79

Çizelge E.1 Bu çalışmada kapsamında kullanılan tepkime mekanizmaları. .... 111



## EK AÇIKLAMALAR DİZİNİ

|                                                                      | <u>Sayfa</u> |
|----------------------------------------------------------------------|--------------|
| EK A Yedi Katsayılı NASA Polinomları Örnekleri .....                 | 107          |
| EK B Dokuz Katsayılı NASA Polinomları Örnekleri.....                 | 108          |
| EK C Bileşen Potansiyel Parametreleri Örnekleri .....                | 109          |
| EK D Yazılan Programda Kullanılan Tepkime Çeşitlerine Örnekler ..... | 110          |
| EK E Bu Çalışma Kapsamında Kullanılan Tepkime Mekanizmaları .....    | 111          |



## SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

### SİMGELER

|                       |                                                                                           |
|-----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\sigma$              | : Çarpışma çapı [ $\text{\AA}$ ]                                                          |
| $\Omega$              | : Çarpışma integrali                                                                      |
| $\varphi$             | : Çarpışma verimi                                                                         |
| $\kappa$              | : Gaz karışımının Planck ortalama absorpsiyon katsayısı [ $1/\text{m}$ ]                  |
| $\kappa_i$            | : $i$ bileşeninin Planck ortalama absorpsiyon katsayısı [ $1/(\text{atm}\cdot\text{m})$ ] |
| $\varepsilon/k^\circ$ | : Lennard-Jones potansiyel kuyu derinliği [K]                                             |
| $\epsilon_k$          | : $k$ bileşeninin giriş kütle oranı                                                       |
| $\dot{Q}_{rad}$       | : Işınlama ile gerçekleşen ısı transferi [ $\text{ergs}/\text{cm}^2$ ]                    |
| $\dot{\omega}_j$      | : $j$ bileşeni için net üretim hızı [ $\text{mol}/(\text{cm}^3\cdot\text{s})$ ]           |
| $A_j$                 | : $j$ elementinin tepkimeye giren toplam atom sayısı                                      |
| $C_p^\circ$           | : Sabit basınç için standart halde özgül ısı [ $\text{ergs}/(\text{mol}\cdot\text{K})$ ]  |
| $D_{ii}$              | : $i$ bileşeni için özdiffüzyon katsayısı [ $\text{cm}^2/\text{s}$ ]                      |
| $D_{ij}$              | : $i$ ve $j$ bileşeni için ikili difüzyon katsayısı [ $\text{cm}^2/\text{s}$ ]            |
| $G^\circ$             | : Standart hal için Gibbs serbest enerjisi [ $\text{ergs}/\text{mol}$ ]                   |
| $H^\circ$             | : Standart hal için entalpi [ $\text{ergs}/\text{mol}$ ]                                  |
| $\mathbf{J}$          | : Jacobi matrisi                                                                          |
| $N_k$                 | : $k$ bileşeninin mol sayısı [mol]                                                        |
| $P_r$                 | : İndirgenmiş basınç                                                                      |
| $R_u$                 | : Evrensel gaz sabiti [ $\text{ergs}/(\text{mol}\cdot\text{K})$ ]                         |
| $S^\circ$             | : Standart hal için entropi [ $\text{ergs}/(\text{mol}\cdot\text{K})$ ]                   |
| $T^*$                 | : İndirgenmiş sıcaklık                                                                    |
| $W_i$                 | : $i$ bileşeninin moleküler ağırlığı [ $\text{gr}/\text{mol}$ ]                           |
| $a_{ji}$              | : $i$ tepkimesi için $j$ bileşeninin üçüncü kütle verimi                                  |
| $a_n$                 | : NASA polinom sabitleri                                                                  |
| $c_v$                 | : Sabit hacimde özgül ısı [ $\text{ergs}/(\text{gr}\cdot\text{K})$ ]                      |

## SİMGELER VE KISALTMALAR (devam ediyor)

|               |                                                                                                                                   |
|---------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $f_v$         | : Hacimsel is oranı                                                                                                               |
| $j_k$         | : k bileşeni için difüzyon kütle akısı [ $\text{gr}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$ ]                                               |
| $k^\circ$     | : Boltzmann sabiti [ $\text{ergs}/\text{K}$ ]                                                                                     |
| $k_{fi}$      | : i tepkimesinin ileri tepkime hızı [tepkime bağımlı]                                                                             |
| $k_{ri}$      | : i tepkimesinin geri tepkime hızı [tepkime bağımlı]                                                                              |
| $k_i$         | : i bileşeninin ısı iletim katsayısı [ $\text{ergs}/(\text{cm} \cdot \text{s} \cdot \text{K})$ ]                                  |
| $\dot{m}$     | : Kütleli debi [ $\text{gr}/\text{s}$ ]                                                                                           |
| $\beta_i$     | : i tepkimesi için sıcaklık üssü                                                                                                  |
| $\delta^*$    | : İndirgenmiş dipol moment                                                                                                        |
| $\lambda_d$   | : Sönümlenme katsayısı                                                                                                            |
| $\lambda_j$   | : j elementi için Lagrange çarpanı                                                                                                |
| $\mu_k$       | : k bileşeninin kimyasal potansiyel [ $\text{ergs}/\text{mol}$ ]                                                                  |
| $\nu'_{ji}$   | : i tepkimesinde bulunan j bileşeninin reaktantlar için stokiometrik katsayısı                                                    |
| $\nu''_{ji}$  | : i tepkimesinde bulunan j bileşeninin ürünler için stokiometrik katsayısı                                                        |
| $\sigma_{sb}$ | : Stefan Boltzmann sabiti [ $\text{ergs}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K}^4)$ ]                                         |
| $\omega_g$    | : İs yüzey büyümesi                                                                                                               |
| $\omega_n$    | : İs çekirdeklenmesi                                                                                                              |
| $\omega_o$    | : İsin oksitlenmesi                                                                                                               |
| $[X_j]$       | : j bileşeninin konsantrasyonu [ $\text{mol}/\text{cm}^3$ ]                                                                       |
| $A_i$         | : i tepkimesi için üstel faktör [tepkime bağımlı]                                                                                 |
| $C_A$         | : Topaklaşma hız sabiti                                                                                                           |
| $C_{\min}$    | : İs parçacığının başlangıcındaki karbon atom sayısı                                                                              |
| $d$           | : Dipol moment [Debye]                                                                                                            |
| $E_{Ai}$      | : i tepkimesi için aktivasyon enerjisi (tepkime mekanizmasına bağımlı [ $\text{cal}/\text{mol}$ ] veya [ $\text{J}/\text{mol}$ ]) |
| $g_k$         | : k bileşeni için molar Gibbs enerjisi [ $\text{ergs}/\text{mol}$ ]                                                               |
| $K_c$         | : Kısmi konsantrasyona bağlı denge sabiti [tepkime bağımlı]                                                                       |
| $K_p$         | : Kısmi basınca bağlı denge sabiti [tepkime bağımlı]                                                                              |
| $N_A$         | : Avogadro sayısı                                                                                                                 |
| $P$           | : Basınç [ $\text{atm}$ ]                                                                                                         |
| $T$           | : Sıcaklık [ $\text{K}$ ]                                                                                                         |

## SİMGELER VE KISALTMALAR (devam ediyor)

|          |                                                             |
|----------|-------------------------------------------------------------|
| $T_{ad}$ | : Adyabatik alev sıcaklığı [K]                              |
| $u$      | : Hız [cm/s]                                                |
| $q_i$    | : $i$ tepkimesinin ilerleme hızı [mol/(cm <sup>2</sup> ·s)] |
| $V_c$    | : Düzeltme hızı [cm/s]                                      |
| $V_k$    | : Basit difüzyon hızı [cm/s]                                |
| $V_k$    | : Difüzyon hızı [cm/s]                                      |
| $V_T$    | : Termoforetik hız [cm/s]                                   |
| $X_i$    | : $i$ bileşenin mol oranı                                   |
| $Y_i$    | : $i$ bileşenin kütle oranı                                 |
| $Z$      | : Dönel gevşeme sayısı                                      |
| $\alpha$ | : Konaklama katsayısı                                       |
| $\Phi$   | : Yakıt-hava eşdeğer oranı                                  |
| $\alpha$ | : Kutuplanabilirlik [Å <sup>3</sup> ]                       |
| $\mu$    | : Viskozite [gr/(cm·s)]                                     |
| $\rho$   | : Yoğunluk [gr/cm <sup>3</sup> ]                            |

## KISALTMALAR

|          |                                                                                                                   |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| CFD      | : Computational Fluid Dynamics                                                                                    |
| Chemkin  | : A General-Purpose, Problem-Independent, Transportable, Fortran Chemical Kinetics Code Package                   |
| CREK     | : A Computer Program for Calculation of Combustion Reaction Equilibrium and Kinetics in Laminar or Turbulent Flow |
| FFCM-1   | : Foundational Fuel Chemistry Model version 1.0                                                                   |
| GRI-Mech | : Gas Research Institute Mechanism                                                                                |
| ISF      | : International Sooting Flame                                                                                     |
| NASA     | : National Aeronautics and Space Administration                                                                   |
| NNES     | : Nonmonotonic Nonlinear Equation Solver                                                                          |
| NSC      | : Nagle and Strickland-Constable                                                                                  |
| OpenFOAM | : Open-source Field Operation And Manipulation                                                                    |
| PAH      | : Polisiklik aromatik hidrokarbon                                                                                 |
| SRI      | : Stanford Research Institute                                                                                     |



## BÖLÜM 1

### GİRİŞ

Ateşin istenildiği zaman elde edilmesi ve kontrol altında tutulması kuşkusuz ki insanı diğer canlı türlerinden ayıran ilk en büyük özelliktir ve tarihsel anlamda ısınma, korunma görevleri üstlenen bu olgu insanın beslenme şeklini de değiştirmesiyle dünya tarihi açısından eşsiz bir yere sahiptir [1]. Yanma olayı özellikle sanayi devrimi ve sonrasında ısınma, ulaşım, sanayi kullanımı, elektrik üretimi ve savunma sanayi gibi bugün vazgeçilmez olan temel alanlarda hayatımızda yer almaktadır [2, 3]. Yanmanın kontrol altına alınamadığı zamanlarda ölümcül olmasının yanı sıra (büyük Roma yangını, 2021 Türkiye orman yangınları vb.), yanma kontrollü bile olsa canlılar için zararlı olan kirleticilerin ve zehirli gazların salınması nedeniyle birçok yönden hayatımızı etkilemektedir. Yanma olayı ve yakıcı sistemler, özellikle geçtiğimiz yüzyılın ortalarında ulaşım, ısınma ve elektrik üretimi kaynaklı fosil yakıtların tüketilmesinin etkisiyle meydana gelen Londra ve Los Angeles'ta yaşanan ileri dereceli hava kirlilikleri, soğuk savaş yıllarında ortaya çıkan silahlanma yarışı ve uzay rekabeti sonucu ülkelerin ve dolayısıyla bilim insanlarının önemli bir araştırma-geliştirme ve çalışma konusu haline gelmiştir [3-8].

#### 1.1 ÇALIŞMANIN AMACI

Law (2006) yanma araştırmaları konusunu enerji ve yakma cihazları, yakıtlar, kirlilik (kirleticiler) ve sağlık, güvenlik, savunma (sistemleri) ve uzay çalışmaları gibi beş ana başlık altında toplamıştır [3]. Bu tez kapsamında yapılan çalışmalar beş ana başlığın ikisine (yakıtlar, kirlilik ve sağlık) doğrudan katkı sağlamak amacıyla.

2021 yılı dünya geneli birincil enerji tüketim verine göre yaklaşık % 83 oranında fosil yakıtlardan elde edilen enerjinin tüketildiği görülmektedir [9]. Ülkemiz için ise bu oran 2018 yılı için yaklaşık % 73'tür [10]. Günümüzde fosil yakıtların ana enerji kaynağı olması ve birkaç on yıl içinde bu olgunun değişmeyeceği varsayımı ile yanma ve yakıtlar konusu güncelliğini sürdürmektedir.

Gelişen optik ve lazer teknolojisi sayesinde alev yapılarını incelemek geçmiş yıllara göre daha hassas ve doğru bir şekilde yapılırken, bu deneylerin yapılabilmesi için laboratuvar yatırım maliyetleri yüksektir. Var olan bir laboratuvar da deneyleri sürdürmenin maliyeti olduğundan, daha önceden deneysel anlamda incelenen alevlerin sonuçları da kullanılarak alevleri modelleme yolu ile incelemek, alevlerin analizlerinde sıkça başvurulan bir yöntemdir. Bilgisayar teknolojisinin de gelişmesiyle bu tarz modellemelerin yapıldığı programlar kişisel bilgisayarlarda da çalışabilir durumdadır. Yanma modellemesini yapabilmek için kimyasal termodinamik, korunum denklemleri, akışkanlar dinamiği, taşınım özellikleri ve kimyasal kinetik içeren durumlar matematiksel olarak ifade edilmeli, elde edilecek denklem setleri sayısal yöntemler ile çözülmelidir. Bu tez çalışmasının da temel amacı bir boyutlu laminar ön karışım alevler için modelleme yapan bir program yazmaktır. Program sonuçlarını literatür ile kıyaslayarak uyumlu sonuçlar elde edildiğinin gösterilmesi ve programa is oluşumu ile ilgili alt programlar eklenerek is hesaplamalarını da içermesi düşünülmüştür.

## **1.2 KONU İLE İLGİLİ DAHA ÖNCE YAPILMIŞ ÇALIŞMALAR**

Konuyla ilgili daha önce yapılmış çalışmalar çok daha fazla da olsa, bu bölümde bu tez çalışmasının değindiği (adyabatik alev sıcaklığı, gaz karışımlarının denge karışımları, bir boyutlu ön karışım alevler, is oluşumu) ve literatür açısından önemli görülen çalışmalara yer verilmiştir.

Çalışılan konuyla ilgili daha önceki çalışmalar incelendiğinde, adyabatik alev sıcaklığı ve denge bileşen oranları için kullanılan yazılımlar STANJAN ve Gaseq programları olarak öne çıkmaktadır [11-19].

Glaude et al. (2010) yaptıkları çalışmada biyoyakıtlar ve fosil yakıtların adyabatik alev sıcaklıklarını ve bu sıcaklıkların azot oksit salınımlarına etkisi incelemişlerdir [13]. de Moura et al. (2016) peletleme fırınının yanma verimliliği analizlerinde denge sıcaklığı ve bu sıcaklıkta bulunan karışımın Termofiziksel özelliklerinin hesaplanmasında Gaseq ile incelemişlerdir [14]. Valera-Medina et al. (2015, 2017) gaz türbinlerinde amonyak, metan ve hidrojen karışımlarının yanmasını deneysel olarak incelemiş ve Gaseq programından elde ettikleri denge çözümleri ile karşılaştırmışlardır [15, 16].

Bishnu et al. (2001) STANJAN yazılımına eklemeler yaparak programın iyileştirilmesini önermişlerdir [17]. Chaimanatsakun et al. (2022) etanol-benzin karışımlarından hidrojen üretimini STANJAN programı ile denge analizi yaparak sunmuşlardır [18]. Mahishi and Goswami (2007) biyokütle gazlaştırma yoluyla hidrojen üretiminin sıcaklık, basınç vb. değişkenlerin etkilerini incelemişler ve denge çözümlerini STANJAN programı ile hesaplamışlardır [19].

Akış içinde alev ile ilgili çözümler ile ilgili olarak literatüre hakim olan ve yıllar içinde güncellenerek şuan ticari bir yazılım olan Chemkin programıdır. Eski sürümleri Chemkin II adıyla, sonraları Chemkin-Pro ve Chemkin CFD olarak bu yazılımlar PREMIX paketi ile beraber literatürde en çok kullanılan ve günümüzde ANSYS paketinin parçası olan programlardır [20-37]. Bunun dışında OpenFOAM, Chem1D, Kiva-3, OpenSMOKE++, Cantera, NGA gibi programlar da literatürde kullanılmaktadır [38-45].

Mze Ahmed et al. (2016) yaptıkları çalışmada iki farklı laminar ön karışımli alev için oluşumunu ve hidrojen eklenmesinin is oluşumuna etkisini deneysel ve modelleme yöntemi sonuçları ile sunmuşlardır [24]. Knyazkov et al. (2017) ise hidrojen ve düşük karbon sayılı hidrokarbonların üçlü karışımlarını deneysel olarak incelemiş ve PREMIX ile modelleyerek karşılaştırmalı olarak sunmuşlardır. Liu and Gülder (2008) serbest yayılan yakıtça zengin ön karışımli metan/hava alevlerini farklı ön ısıtma ve basınç değerlerinde CHEMKIN ile modelleyerek süper-adyabatik alev sıcaklığına etkilerini incelemişlerdir. Marinov et al. (1997) ön karışımli propan alevlerinde aromatik ve polisiklik aromatik hidrokarbonların oluşumlarını deneysel olarak inceleyerek, PREMIX yazılımı ile elde ettiği sonuçlar ile beraber yayınlamışlardır. Mehta et al. (2009) hem ön karışımli hem de zıt akışli difüzyon alevleri için PREMIX ve Chemkin II ile bulunan is oluşumlarını literatürdeki veriler ile karşılaştırmışlardır. Menon et al. (2007) iki farklı yakıt eşdeğer oranı için laminar ön karışımli etilen/hava karışımı için karışıma azot dioksit eklenmesinin is oluşumuna etkileri deneysel olarak incelemiş, PREMIX yazılımı ile deneysel sonuçlarını desteklemiştir. Sentko et al. (2021) yakıtça zengin laminar ön karışımli metan/oksijen alevleri için basınç etkisini deneysel ve sayısal olarak incelemiş, sayısal modellemesini de ANSYS-Chemkin Pro ile gerçekleştirmiştir. Tang et al. (2019) etilen, propan ve etilen/toluen ve oksijenden oluşan laminar ön karışımli alevleri incelemiş, Chemkin-Pro ile kinetik model oluşturarak alevi ve is öncüllerini modellemişlerdir.

Ülkemizde yapılan tez çalışmalarında ise ANSYS kullanımının çoğunluğu göze çarpmakla beraber CREK, OpenFOAM, Cantera gibi yazılımların da kullanıldığı görülmüştür.

Eyriboyun (1997) yaptığı çalışmada geliştirdiği alt programlar ile bir boyutlu akış geometrisinde, CREK yazılımının kimyasal kinetik çözümleri ile is öncülü olarak asetileni, is miktarını laminar ön karışimli alevler için modellemiş, metan yanması için literatür değerleri ile karşılaştırmıştır [46]. Tarhan (2004) tez çalışmasında metan-hava difüzyon alevini iki boyutlu olarak modelleyen program yazmıştır, modellemede en fazla on adımlı indirgenmiş tepkime mekanizması kullanmış ve kimyasal tepkime hızları, termodinamik ve taşınım özellikleri için Chemkin program paketini kullanmıştır [47]. Öztürk (2008) farklı içerikli doğal gaz yanması sonucu azot oksit oluşumlarını CREK programı ile incelemiştir [48]. Yılmaz (2010) metan/hava ön karışimli alevlerini ve hidrojen zenginleştirmesinin ön karışimli alevlerde etkisini deneysel ve ANSYS-Fluent yazılımı ile modelleyerek incelemiştir. Öztürkmen (2014) metan yanmasını, Özdemir (2014) ise hidrojen yanmasını türbülans akışlı difüzyon ve ön karışimli alevler için ANSYS-Fluent ile modellemişlerdir [49, 50]. Özsarı (2015) metan, etan ve propan gazlarının farklı yakıt/hava eşdeğer oranlarında yanmasını ANSYS ile modelleyerek sıcaklık dağılımlarını, azot oksit ve karbon monoksit salınımlarını incelemiştir [51]. Öztarlık (2016) metan/hava laminar ön karışimli alevlerini OpenFOAM ve Cantera programları ile inceleyerek deneysel yaptığı çalışmalar ile uyumunu incelemiştir [52].

### 1.3 ÇALIŞMANIN İÇERİĞİ

Bu tez çalışması altı bölümden oluşmaktadır. Birinci bölümde çalışmanın amacı, çalışmayla alakalı literatür özeti ve çalışmanın içeriği özetlenmiştir. İkinci bölümde çalışmanın omurgasını oluşturan temel kavramların açıklaması ve hesaplanması yer almaktadır. Üçüncü bölümde ise yazılan programın matematiksel altyapısı ve formülasyonundan bahsedilmiştir. Dördüncü bölümde programın algoritmasından ve program tarafından kullanılan açık kaynak kodlu matematik kütüphanelerinden söz edilmiştir. Beşinci bölümde ise öncelikle saf ve karışım halinde bulunan gazların taşınım büyüklükleri sonuçları literatür verileri ile karşılaştırılmış, ardından yazılan program tarafından hesaplanan denge çözümlerinin ve adyabatik alev sıcaklıklarının literatür ile tam uyumu gösterilmiştir. Tanımlanan bir boyutlu akış alanı içinde alev boyunca bileşenlerin mol dağılımları ve sıcaklık değerleri literatür değerleri ile birlikte sunulmuş, sonrasında is oluşumu için yapılan çözümlerle beraber literatürden alınan deneysel

ve modelleme sonuçları verilmiştir. Son bölümde ise çalışmanın temel sonuçları özetlenerek, gelecekte yapılması düşünülen çalışmalara dair öneriler sunulmuştur.





## BÖLÜM 2

### YANMA

Yanma, kütle ve ısı transferinin eşlik ettiği kimyasal tepkimelerde ısı yayma sürecidir. Bu süreçte yakıt ve yakıcı tepkimeye girerek ısı enerjisinin yanında ürün olarak adlandırılan kimyasal bileşenleri oluştururlar. En bilinen yakıtlar, hidrokarbonlar adlandırılır ve  $C_nH_m$  olarak ifade edilirler. Yakıt olarak maddenin üç hali de kullanılabilir (ör. kömür, benzin, doğalgaz). Yakıcı olarak ise  $O_2$  veya hava kullanılır. Bu çalışmada yakıt olarak gaz formundaki çeşitli yakıtlar kullanılmıştır. İdeal koşullarda hidrokarbon yakıtların tam yanması sonucu karbon dioksit ve su açığa çıkar. Fakat endüstriyel fırınlar, gaz türbinleri, içten yanmalı motorlar vb. pratik uygulamalarda ideal durumdan sapmalar gözükür. Bunun sonucu olarak karbon dioksit ve suyun yanı sıra karbon monoksit, hidrojen, bazı hidrokarbonlar, azot oksitler ve is gibi tamamlanmamış yanma sonu ürünler açığa çıkar [46, 53-55].

Yanma uygulamaları aynı anda güvenli, verimli ve temiz olmalıdır [56]. Yanma; ulaşım, enerji üretimi ve endüstriyel süreçler açısından önemli bir uygulamalı bilimdir. Aynı zamanda disiplinler arası bir konudur ve bu nedenle akışkanlar dinamiği, kimyasal kinetik, termodinamik, istatistiksel fizik ve kinetik teori gibi farklı alanların birleştirilmesini gerektirir [55]. Teorik analizi veya modellenmesi amaçlanan yanma olayları, öncelikle yayılan ve tepkimeye giren gazların akışı ile ilgilidir. Dolayısı ile yanma konusunun analizi kimyasal termodinamiğe ve korunum denklemlerine ek olarak akışkanlar dinamiği, taşınım özellikleri ve kimyasal kinetik konularını içermektedir [57].

#### 2.1 GAZLARIN TERMODİNAMİKSEL ÖZELLİKLERİNİN HESAPLANMASI

Yanma modelleme çalışmalarında her bir bileşenin termodinamiksel özelliklerinin (özellik ısı, entropi, entalpi vs.) hem karışım durumu hem de saf halleri için farklı sıcaklıklarda hesaplanması gerekmektedir. Bu özelliklerin hesaplanması için literatürde eğri uydurma yöntemleri ile elde edilen farklı polinomlar kullanılmıştır. En bilinenleri NASA polinomları, Wilhoit polinomları ve Shomate polinomlarıdır. Günümüzde yanma analizi programlarında en

yaygın olarak kullanılan ve veri tabanı en geniş olan NASA polinomlarıdır [58]. Bu çalışmada da NASA polinomları kullanılmıştır.

### 2.1.1 Yedi Katsayılı NASA Polinomları

Yedi katsayılı NASA polinomları iki sıcaklık aralığında verilmek üzere, her bir sıcaklık aralığı yedi adet polinom katsayısı ile ifade edilir. Polinom katsayılarının sıcaklık üst sınırı 6000 K'dir. Verilen sıcaklık aralığına göre ilk yedi katsayı yüksek sıcaklık aralığı için, sonraki yedi katsayı ise düşük sıcaklık aralığı için kullanılır. Katsayıların literatürde veriliş formatları EK – A'da gösterilmiştir.  $C_p^\circ$  sabit basınç için standart halde özgül ısıyı,  $H^\circ$  standart hal için entalpiyi,  $S^\circ$  standart hal için entropiyi,  $G^\circ$  standart hal için Gibbs serbest enerjisini,  $R_u$  evrensel gaz sabitini,  $T$  sıcaklığı ve  $a_n$  değerleri polinom sabitlerini göstermektedir [58, 59].

$$\frac{C_p^\circ}{R_u} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (2.1)$$

$$\frac{H^\circ}{R_uT} = a_1 + \frac{a_2T}{2} + \frac{a_3T^2}{3} + \frac{a_4T^3}{4} + \frac{a_5T^4}{5} + \frac{a_6}{T} \quad (2.2)$$

$$\frac{S^\circ}{R_u} = a_1 \ln(T) + a_2T + \frac{a_3T^2}{2} + \frac{a_4T^3}{3} + \frac{a_5T^4}{4} + a_7 \quad (2.3)$$

$$\frac{G^\circ}{R_uT} = \frac{H^\circ}{R_uT} - \frac{S^\circ}{R_u} \quad (2.4)$$

### 2.1.2 Dokuz Katsayılı NASA Polinomları

NASA'nın ihtiyaçları (6000 K üzerinde sıcaklıklar için analiz yapabilme) doğrultusunda 1987 yılında dokuz katsayılı polinomlar da kullanılmaya başlanmıştır. Bileşenler için iki sıcaklık aralığı yerine üç sıcaklık aralığı tanımlanabilir hale gelmiştir. Yedi katsayılı polinomlarda hata oranı %0.1 – %1.0 aralığında iken, dokuz katsayılı polinomlarda hata oranı %0.001 – %0.01 aralığındadır [58, 60]. Katsayıların veri tabanlarındaki biçimi EK – B'de verilmiştir.

$$\frac{C_p^\circ}{R_u} = a_1T^{-2} + a_2T^{-1} + a_3 + a_4T + a_5T^2 + a_6T^3 + a_7T^4 \quad (2.5)$$

$$\frac{H^\circ}{R_u T} = -a_1 T^{-2} + \frac{a_2 \ln(T)}{T} + a_3 + \frac{a_4 T}{2} + \frac{a_5 T^2}{3} + \frac{a_6 T^3}{4} + \frac{a_7 T^4}{5} + \frac{a_8}{T} \quad (2.6)$$

$$\frac{S^\circ}{R_u} = -\frac{a_1 T^{-2}}{2} - a_2 T^{-1} + a_3 \ln(T) + a_4 T + \frac{a_5 T^2}{2} + \frac{a_6 T^3}{3} + \frac{a_7 T^4}{4} + a_9 \quad (2.7)$$

Denklem (2.4) ile verilen Gibbs serbest enerjisi, diğer termodinamiksel özelliklerin fonksiyonu olduğu için hesaplanma metodu yedi katsayılı NASA polinomları ile aynıdır.

## 2.2 SAF GAZLAR İÇİN TAŞINIM BÜYÜKLÜKLERİ

Yanma analizi sırasında gaz karışımının taşınım özelliklerinin de sıcaklık, basınç ve karışım bileşen oranlarına göre hesaplanması gerekmektedir. Bu özellikler viskozite, ısı iletim katsayısı ve difüzyon katsayılarıdır. Gaz karışımında bulunan her bir gaz için hesaplanan bu özellikler daha sonra karışımdaki bileşen oranlarına göre karışımın kendisinin özellikleri bulunabilir.

### 2.2.1 Taşınım Özellikleri

Bileşenlerin ve/veya karışımın taşınım büyüklüklerini hesaplamak için Gazların Kinetik Teorisi ile elde edilen çarpışma integrallerini ve bileşenler için potansiyel parametreleri barındıran tablolardır. Bileşenlerin potansiyel parametreleri; molekül yapısını, potansiyel kuyu derinliğini, çarpışma çapını, dipol moment, kutuplanabilirliği ve dönel gevşeme sayısını gösterir tablolardır. Potansiyel parametreleri içeren tablo örneği EK – C’de sunulmuştur.  $\Omega^{(1,1)*}$  ile gösterilen çarpışma integrali değeri difüzyon katsayısı ve ısı iletim katsayısı hesabında,  $\Omega^{(2,2)*}$  ise viskozite hesabında kullanılmıştır. Çarpışma integralleri  $T^*$  ve  $\delta^*$  ile gösterilen, sırasıyla indirgenmiş sıcaklık ve indirgenmiş dipol moment fonksiyonlarıdır [3]:

$$T^* = \frac{k^\circ T}{\varepsilon_{i,j}} \quad (2.8)$$

$$\delta^* = \frac{1}{2} \frac{d^2}{\varepsilon \sigma^3} \quad (2.9)$$

Burada  $(k^\circ / \varepsilon)$  potansiyel kuyu derinliğini,  $d$  dipol moment,  $k^\circ$  Boltzmann sabitini,  $\sigma$  ise çarpışma çapını temsil etmektedir. Polar olmayan gazlar için  $\delta^* = 0$  olarak alınır.

Denklem (2.8)'de bulunan  $i$  ve  $j$  indisleri birbirinden farklı moleküller söz konusu olduğunda efektif değişkenleri tanımlamak için kullanılmıştır. (Polar – polar) veya (polar olmayan – polar olmayan) etkileşim söz konusu olduğunda efektif değişkenler:

$$\sigma_{i,j} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j), \quad \varepsilon_{i,j} = \sqrt{\varepsilon_i \cdot \varepsilon_j}, \quad d_{i,j} = \sqrt{d_i \cdot d_j} \quad (2.10)$$

şeklinde olurken, polar – polar olmayan gazların etkileşimlerinde  $n$  indisi polar olmayan,  $p$  indisi polar gazları göstermek üzere [3, 61]:

$$\varepsilon_{n,p} = \left( \sqrt{\varepsilon_n \cdot \varepsilon_p} \right) \xi^2, \quad \sigma_{n,p} = \left( \frac{\sigma_n + \sigma_p}{2} \right) \xi^{-\frac{1}{6}}, \quad \delta^* = \frac{1}{2} (d_p^*)^2 \quad (2.11)$$

burada,

$$\xi = 1 + \frac{1}{4} \cdot \alpha_n^* \cdot (d_p^*)^2 \cdot \sqrt{\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_n}}, \quad \alpha_n^* = \frac{\alpha_n}{\sigma_n^3}, \quad d_p^* = \frac{d_p}{\sqrt{\varepsilon_p \cdot \sigma_p^3}} \quad (2.12)$$

şeklinde ifade edilir.

## 2.2.2 Viskozite

Çarpışma integrali değerleri ve taşınım özellikleri bilinen bir saf gaz için viskozite ( $\mu$ ) [gr/cm·s] değeri [3];

$$\mu_i = 2.6693 \times 10^{-5} \frac{\sqrt{(W_i T)}}{\sigma_i^2 \Omega_{i,i}^{(2,2)*}(T^*; \delta^*)} \quad (2.13)$$

ifadesi ile elde edilebilir. Burada  $W_i$  ilgili bileşenin mol ağırlığıdır.

## 2.2.3 Isı İletim Katsayısı

Her bir bileşen için ısı iletim katsayısının öteleme, dönme ve titreşimden kaynaklı katkıların olduğu kabulü ve  $k$  ısı iletim katsayısı,  $C_v$  sabit hacimde özgül ısı olmak üzere şöyle ifade edilir [21];

$$k_i = \frac{\mu_i}{W_i} (f_{öte.} \cdot C_{v,öte.} + f_{dönme} \cdot C_{v,dönme} + f_{tit.} \cdot C_{v,tit.}) \quad (2.14)$$

Burada;

$$f_{öte.} = \frac{5}{2} \left( 1 - \frac{2}{\pi} \frac{C_{v,dönme}}{C_{v,tit.}} \frac{A}{B} \right) \quad (2.15)$$

$$f_{dönme} = \frac{\rho D_{ii}}{\mu_i} \left( 1 + \frac{2}{\pi} \frac{A}{B} \right) \quad (2.16)$$

$$f_{tit.} = \frac{\rho D_{ii}}{\mu_i} \quad (2.17)$$

olarak verilmiştir.  $D_{ii}$ ,  $i$  bileşeni için özyayınım katsayısıdır ve aşağıdaki şekilde hesaplanır, burada  $P_{bar}$  [bar] biriminde basıncı temsil etmek üzere [62];

$$D_{ii} = \frac{0.00266T^{1.5}}{P_{bar} \sqrt{W_i} \sigma_i^2 \left[ \Omega^{(1,1)*}(T^*; \delta^*) \right]} \quad (2.18)$$

$\rho$  ise yoğunluk değeridir ve ideal gazların hal denkleminde bulunur.

$$\rho = \frac{PW_i}{R_u T} \quad (2.19)$$

Denklem (2.15) ve (2.16)'da yer alan  $A$  ve  $B$  değerleri;

$$A = \frac{5}{2} - \frac{\rho D_{ii}}{\mu_i}, \quad B = Z_{dönme} + \frac{2}{\pi} \left( \frac{5}{3} \frac{C_{v,dönme}}{R_u} + \frac{\rho D_{ii}}{\mu_i} \right) \quad (2.20)$$

$Z_{dönme}$  ise 298 K'de dönel gevşeme sayısı olarak taşıyım özellikleri verilerinde bilinen bir değer olduğu bilgisi ile [21];

$$Z_{dönme}(T) = Z_{dönme}(298) \frac{F(298)}{F(T)} \quad (2.21)$$

$$F(T) = 1 + \frac{\pi^{1.5}}{2} \left( \frac{\varepsilon / k^\circ}{T} \right)^{0.5} + \left( \frac{\pi^2}{4} + 2 \right) \left( \frac{\varepsilon / k^\circ}{T} \right) + \pi^{1.5} \left( \frac{\varepsilon / k^\circ}{T} \right)^{1.5} \quad (2.22)$$

eşitlikleri ile bulunabilir. Denklem (2.14)'te bulunan özgül ısı ilişkileri ise, ilgili bileşenin tek atom ya da molekül şeklinde bulunmasına, molekül ise lineer olup olmamasına göre değişiklik gösterir. Bileşen tek atom ise;

$$C_{v,\text{öte.}} = \frac{3}{2} R_u, \quad C_{v,\text{dönme}} = 0, \quad C_{v,\text{tit.}} = 0 \quad (2.23)$$

Bileşen lineer molekül ise;

$$C_{v,\text{öte.}} = \frac{3}{2} R_u, \quad C_{v,\text{dönme}} = R_u, \quad C_{v,\text{tit.}} = C_v - \frac{5}{2} R_u \quad (2.24)$$

Bileşen lineer olmayan molekül ise;

$$C_{v,\text{öte.}} = \frac{3}{2} R_u, \quad C_{v,\text{dönme}} = \frac{3}{2} R_u, \quad C_{v,\text{tit.}} = C_v - 3R_u \quad (2.25)$$

## 2.2.4 İkili Difüzyon Katsayısı

Denklem (2.18)'de verilen eşitliğin iki farklı bileşen olan formülü ile bulunur [62].

$$D_{ij} = \frac{0.00266T^{1.5}}{P_{bar} \sqrt{W_{ij}} \sigma_{i,j}^2 \left[ \Omega^{(1,1)*} (T^*; \delta_{i,j}^*) \right]} \quad (2.26)$$

Burada  $P$  basınç,  $M_i$  ve  $M_j$   $i$  ve  $j$  bileşenlerinin moleküler ağırlığı olmak üzere,

$$W_{ij} = 2 \left[ \left( \frac{1}{W_i} \right) + \left( \frac{1}{W_j} \right) \right]^{-1} \quad (2.27)$$

eşitliği kullanılır. Burada önemli bir nokta, denklem (2.26) ile ikili difüzyon katsayısını hesaplarken, (2.8) – (2.12) denklem takımını efektif değişkenleri de dikkate alarak kullanmaktır.

## 2.3 GAZ KARIŞIMLARI İÇİN TAŞINIM BÜYÜKLÜKLERİ

Bu bölümde her bir bileşen için belirli bir sıcaklıkta hesaplanan taşınım büyüklükleri (viskozite, ısı iletim katsayısı, ikili difüzyon katsayısı) kullanılarak karışım ortalama taşınım büyüklüklerinin hesaplanma yöntemleri verilmiştir.

### 2.3.1 Viskozite

$N$  bileşenden oluşan bir karışımın viskozitesinin hesaplanması için kullanılan eşitlik aşağıdadır [63];

$$\mu_{karışım} = \sum_{i=1}^N \mu_i \left( 1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N A_{ij} \frac{X_j}{X_i} \right)^{-1} \quad (2.28)$$

Burada  $X_i$  ve  $X_j$  ilgili bileşenin mol oranını temsil etmektedir.  $A_{ij}$  ise şöyle ifade edilir;

$$A_{ij} = \frac{L}{K} \left( \frac{\mu_i W_j}{\mu_j W_i} \right)^{0.5} \left\{ 1 + \frac{\frac{W_i}{W_j} - \left( \frac{\mu_j W_i}{\mu_i W_j} \right)^{0.5}}{2 \left( 1 + \frac{W_i}{W_j} \right) + \frac{1 + \left( \frac{\mu_j W_i}{\mu_i W_j} \right)^{0.5}}{K + L} L} \right\} \quad (2.29)$$

$W_i$  ve  $W_j$  ilgili bileşenin mol ağırlığı,  $\mu_i$  ve  $\mu_j$  ile ilgili bileşenin viskozitesi gösterilmiştir.

Denklem (2.29)'un hesaplamasında kullanılan diğer değişkenler aşağıda verilmiştir.

$$L = \left\{ \frac{4 W_i W_j}{(W_i + W_j)^2} \right\}^{0.25} \quad (2.30)$$

$W_i > W_{He}$  ise,

$$K_1 = 1 + 0.0138 \left( \frac{W_j}{W_i} - 1.4 \right), \quad K = K_1 \exp \left( -0.0066 \frac{\alpha}{L} \right) \quad (2.31)$$

$$W_i \leq W_{He} \text{ ise,} \\ K_1 = 2 - \exp \left\{ -0.00011 \left( \frac{W_j}{W_i} \right)^{1.5} \right\} , \quad K = K_1 \exp \left( -0.00975 \frac{\sqrt{\alpha}}{L} (1 - \beta) \right) \quad (2.32)$$

Bu denklkler için tamamlayıcı eşitlikler ise;

$$\alpha = \frac{W_j}{W_i} \left( \frac{T}{T_0} - 1 \right), \quad \beta = \exp \left( 5 - \frac{W_j}{W_i} \right), \quad T_0 = 298 K \quad (2.33)$$

şeklindedir.

### 2.3.2 Isı İletim Katsayısı

$N$  bileşenden oluşan bir karışım için  $X$  mol oranı,  $k$  saf bileşenin ısı iletim katsayısı olmak üzere aşağıda verilen denklem ile bulunur [64].

$$k_{karışım} = \frac{\sum_{i=1}^N X_i k_i}{\sum_{j=1}^N X_j \Phi_{ij}} \quad (2.34)$$

Burada  $\Phi_{ij}$  için eşitlik şu şekildedir;

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left( 1 + \frac{W_i}{W_j} \right)^{-0.5} \left[ 1 + \left( \frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{0.5} \left( \frac{W_j}{W_i} \right)^{0.25} \right]^2 \quad (2.35)$$

### 2.3.3 Difüzyon Katsayısı

$N$  bileşenden oluşan bir karışım için  $i$  bileşenine ait karışım ortalamalı difüzyon katsayısını hesaplamak için [21];

$$D_{i,karışım} = \frac{1 - \frac{X_i W_i}{W}}{\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^N \frac{X_j}{D_{ij}}} \quad (2.36)$$

formülü kullanılır.

## 2.4 TERMOKİMYASAL DENGİ

Kimyasal termodinamik, tepkimeye giren çok bileşenli bir sistemin denge durumunu tanımlamak ile ilgilendir [3]. Denge durumu, tepkimeye giren (yakıt ve yakıcı) ve tepkimeden çıkan (ürün) bileşenler için, belirli bir basınç ve sıcaklıkta, konsantrasyon değişimi olmaması ile tanımlanabilir.

### 2.4.1 Lagrange Çarpanı Yöntemi ile Gibbs Minimizasyonu

$K$  adet bileşenin bulunduğu herhangi bir sistem için belirli basınç ve sıcaklıkta denge şartı;

$$(dG)_{T,P} = \sum_{k=1}^K \mu_k dN_k \leq 0 \quad (2.37)$$

eşitliğinin sağlanması ile gerçekleşir [53, 65, 66]. Burada  $G$  Gibbs fonksiyonunu,  $\mu$  kimyasal potansiyelini,  $N_k$  ise  $k$  bileşeninin mol sayısını temsil etmektedir.  $G = G(T, P, N_1, N_2, \dots)$  olduğu için Gibbs fonksiyonunun minimizasyon şartı aşağıdaki şekilde ifade edilebilir [65];

$$(dG)_{T,P} = 0 \quad \text{ve} \quad (d^2G)_{T,P} > 0 \quad (2.38)$$

Her bir  $k$  bileşeninde bulunan  $j$  elementini  $d_{jk}$  ile göstermek üzere, bütün  $j$  elementleri için atom denkliklerini;

$$\sum_{k=1}^K d_{jk} N_k = A_j, \quad j = 1, \dots, J, \quad k = 1, \dots, K \quad (2.39)$$

ile gösterilir. Burada  $j$  elementinin tepkimeye giren toplam atom sayısı  $A_j$  ile ifade edilmiştir. Denklem (2.39)'u Lagrange çarpanı metodu ile gösterilirse;

$$\lambda_j \left( \sum_{k=1}^K d_{jk} N_k - A_j \right), \quad j = 1, \dots, J, \quad k = 1, \dots, K \quad (2.40)$$

denklemini elde edilir. Burada  $\lambda_j$ ,  $j$  elementi için Lagrange çarpanıdır.  $F$  fonksiyonu tanımlanırsa;

$$F = G + \sum_{j=1}^J \lambda_j \left( \sum_{k=1}^K d_{jk} N_k - A_j \right), \quad j = 1, \dots, J \quad k = 1, \dots, K \quad (2.41)$$

burada  $F$  fonksiyonu  $N_k$  'ya göre minimize edildiğinde ve sadeleştirmeler yapıldığında;

$$\mu_k + \sum_{j=1}^J \lambda_j d_{jk} = 0, \quad j = 1, \dots, J, \quad k = 1, \dots, K \quad (2.42)$$

eşitliği elde edilir. Denklem takımında  $K$  adet bileşen mol sayısı,  $J$  adet Lagrange çarpanı bulunmaktadır. Denklem (2.42)'dan  $K$  adet, denklem (2.39)'den ise  $J$  adet denklem elde edilerek denklem takımı çözülebilir.

#### 2.4.2 Element Potansiyel Yöntemi

Denge bileşenlerinin bulunmasında kullanılan bir diğer yöntem ise element potansiyel metodudur [12, 67, 68]. Sistemin Gibbs enerjisi [68];

$$G(T, P, N_1, \dots, N_K) = R_u T \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^J N_k \lambda_j d_{jk} \quad (2.43)$$

olarak verildiğinde, gaz karışımında bulunan her atomun hangi bileşen içinde bulunduğundan bağımsız şekilde sistemin Gibbs enerjisine katkı sağladığı görülebilir.  $k$  bileşeni için molar Gibbs enerjisi;

$$g_k(T, P) = g_k^\circ(T) + R_u T \ln(x_k) + R_u T \ln\left(\frac{P}{P^\circ}\right) \quad (2.44)$$

aşağıdaki denklem elde edilir.

$$\frac{g_k^\circ(T)}{R_u T} + \ln(x_k) + \ln\left(\frac{P}{P^\circ}\right) = \sum_{j=1}^J \lambda_j d_{jk} \quad (2.45)$$

Daha sonra çeşitli sadeleştirmeler ile her bir  $j$  elementi için aşağıdaki denklem elde edilir.

$$A_j = N_{toplam} \sum_{k=1}^K d_{jk} \exp \left\{ -\frac{g_k^\circ(T)}{R_u T} - \ln\left(\frac{P}{P^\circ}\right) + \sum_{j=1}^J \lambda_j d_{jk} \right\}, \quad j = 1, \dots, J \quad (2.46)$$

Denklem setini daha rahat ifade etmek ve çözmek için  $B_i$  fonksiyonu ve  $y_j$  tanımlanırsa;

$$B_k(T) \equiv \exp \left\{ -\frac{g_k^\circ(T)}{R_u T} \right\}, \quad y_j = \exp(\lambda_j) \quad (2.47)$$

çözülmesi gereken denklemler şu şekilde bulunur [68];

$$\left( \frac{P^\circ}{P} \right) N \sum_{k=1}^K d_{jk} B_k \prod_{j_1=1}^J (y_{j_1})^{d_{kj_1}} = A_j, \quad j = 1, \dots, J \quad (2.48)$$

$$\left( \frac{P^\circ}{P} \right) \sum_{k=1}^K B_k \prod_{j=1}^J (y_j)^{d_{jk}} = 1 \quad (2.49)$$

Böylece sistemde bilinmeyenler olarak sadece her bir  $j$  elementine karşılık gelen Lagrange çarpanı ve toplam mol sayısı olmaktadır. Cantwell [68], denklemlerin çözümünden önce, ilgilenilen ürünlerin mol oranları arasında mertebe farkının çoğu zaman çok büyük olması dolayısıyla denklem takımı için ölçeklendirme yapılmasını tavsiye etmiştir. Bu yöntemin 2.4.1'te anlatılan yöntemle göre en üstün tarafı, bilinmeyen sayısının bileşen sayısı değil, element sayısı ile sınırlı olmasıdır.

## 2.5 ADYABATİK ALEV SICAKLIĞI

Başlangıç sıcaklığı ve bileşimi belli olan bir gaz karışımı, adyabatik ve izobarik bir süreç ile kimyasal dengeye ulaştığında, ulaşılan sıcaklık adyabatik alev sıcaklığı olarak adlandırılır ve  $T_{ad}$  ile gösterilir. Bu değer, karışımın dengeye ulaştığında elde edilebilecek en yüksek sıcaklığı göstermenin yanı sıra kirleticilerin ( $NO_x$ , is vb.) oluşumunu da etkileyen çeşitli kimyasal işlemlerin reaktivitesini de doğrudan etkiler. Adyabatik alev sıcaklığını hesaplayabilmek için yanma sonu ürünlerin bileşen dağılımlarının bilinmesi gerekir [2, 3]. Fakat tepkime hızları dolayısıyla bileşenlerin dağılımı da sıcaklıkla değişmektedir. Sonuç olarak adyabatik alev sıcaklığı hesapları iteratif hesaplamalar sonucu bulunur ve en kısa haliyle;

$$H_{giren}(T_i, P) = H_{ürün}(T_{ad}, P) \quad (2.50)$$

denklemleri ile ifade edilebilir.

## 2.6 KİMYASAL KİNETİK

Yanma olayının anlaşılması ve analiz edilmesi için kimyasal kinetik konusu önemlidir. Termodinamiksel yaklaşım giriş ve çıkış koşullarının çözümlenmesinde, denge koşullarının açıklanmasında yeterli olsa da aradaki süreci açıklayamaz. Yanma sonu ürünlerin (veya ara ürünlerin) oluşma ve yok olma sürelerini, hangi aşamalardan geçtiklerini fiziksel kimyanın özel bir alanı olan kimyasal kinetik ile tanımlanır [2, 3].

### 2.6.1 Stokiyometri

Yakıcı maddenin (genelde hava veya saf oksijen) stokiyometrik miktarı yakıtın tam yanması için gereken miktara denir. Eğer karışımda, yakıcının miktarı, stokiyometrik miktardan fazla ise karışıma yakıtça fakir, stokiyometrik miktardan az ise yakıtça zengin karışım olarak adlandırılır. Stokiyometrik hava-yakıt oranı (kütlese),  $m$  kütleyi göstermek üzere;

$$(A/F)_{sto} = \left( \frac{m_{hava}}{m_{yakıt}} \right)_{sto} \quad (2.51)$$

şeklinde gösterilebilir.  $A$  havayı,  $F$  ise yakıtı sembolize eder. Yakıt-hava eşdeğer oranı ( $\Phi$ ) ise karışımın zengin, fakir ya da stokiyometrik olduğunu belirtmek için kullanılır;

$$\Phi = \frac{(A/F)_{sto}}{(A/F)} = \frac{(F/A)}{(F/A)_{sto}} \quad (2.52)$$

Yakıtça fakir karışımlar için,  $\Phi < 1$ , yakıtça zengin karışımlar için,  $\Phi > 1$ , stokiyometrik karışımlar için ise,  $\Phi = 1$ , değerini alır [2].

### 2.6.2 Denge Sabitleri ve Tepkime Mekanizmaları

Yanma olayı birçok tepkime ve çok sayıda bileşen içeren mekanizmalar olarak ifade edilebilir. Yanma mekanizmaları içinde bulunan tepkimelerin kısaca gösterimi [2];

$$\sum_{j=1}^N v'_{ji} X_j \xrightleftharpoons[k_{ri}]{k_{fi}} \sum_{j=1}^N v''_{ji} X_j, \quad i = 1, \dots, R \quad (2.53)$$

şeklindedir. Burada  $v'_{ji}$  ve  $v''_{ji}$ ,  $i$  tepkimesinde bulunan  $j$  bileşenin, reaktantlar ve ürünler için stokiyometrik katsayılarıdır.  $N$  toplam bileşen sayısını,  $R$  ise toplam tepkime sayısını göstermektedir.  $k_{fi}$  ve  $k_{ri}$  ise  $i$  tepkimesi için sırasıyla ileri ve geri tepkime hızlarıdır.

Her bir bileşen için net üretim oranları ise aşağıdaki üç eşitlik ile tanımlanır.

$$\dot{\omega}_j = \sum_{i=1}^R v_{ji} q_i, \quad j = 1, \dots, N \quad (2.54)$$

$$v_{ji} = (v''_{ji} - v'_{ji}) \quad (2.55)$$

$$q_i = k_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v'_{ji}} - k_{ri} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v''_{ji}} \quad (2.56)$$

$\dot{\omega}_j$ ,  $j$  bileşeni için net üretim hızını,  $[X_j]$   $j$  bileşenin konsantrasyonunu,  $q_i$  ise  $i$  tepkimesinin ilerleme hızını göstermektedir [2]. Kimyasal kinetik hesaplamalarında kullanılan konsantrasyona bağlı denge sabiti ( $K_c$ ), kısmi basınçlara bağlı denge sabiti ( $K_p$ ), bu denge sabitlerinin kendi aralarında ve ileri – geri tepkime hızları ile olan bağıntıları şöyledir [2, 3];

$$K_p(T) = \prod_{j=1}^N p_j^{(v''_j - v'_j)} \quad (2.57)$$

$$K_c(T) = \frac{\prod_{ürün} [X_j]^{v'_j}}{\prod_{reaktant} [X_j]^{v''_j}} \quad (2.58)$$

$$K_p = K_c (R_u T / P^\circ)^{\sum v'' - \sum v'} \quad (2.59)$$

$$\frac{k_f(T)}{k_r(T)} = K_c(T) \quad (2.60)$$

Literatürde yakıt çeşitlerine, ilgilenilen yanma sonu ürünlere ve yanma koşullarına göre hazırlanmış birçok tepkime mekanizması mevcuttur. Bu mekanizmalar genellikle mekanizmayı

geliştiren kişi – kişiler veya geliştirildikleri kurum – üniversite adları ile isimlendirilirler. Örneğin GRI-Mech (Gas Research Institute), WD1 (Westbrook, Dryer) vb. [69-71].

Tepkime mekanizmalarında yer alan her bir tepkimenin hız katsayıları, modifiye edilmiş Arrhenius denklemi ile tanımlanabilir;

$$k_{fi} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{E_{A_i}}{R_u T}\right) \quad (2.61)$$

Arrhenius denklemindeki parametreler deneysel sonuçlardan elde edilir. Burada  $E_{A_i}$ ,  $A_i$ ,  $\beta_i$  değerleri  $i$  tepkimesi için sırasıyla aktivasyon enerjisi, üstel faktör veya frekans faktörü, sıcaklık üssü olarak adlandırılır.  $R_u$  ile gösterilen evrensel gaz sabitinin birimi, kullanılan tepkime setinde verilen aktivasyon enerjisi birimi ile uyumlu olmalıdır, yanma için kullanılan veri tabanlarında genelde aktivasyon enerjisi birimi [cal/mol] veya [J/mol] olarak verilmektedir. Literatürde başka veriliş biçimleri mevcut olsa da bu çalışmada tepkimelerin üç farklı biçimlendirme kullanılmıştır. Literatürdeki veriliş şekli örnekleri EK – D’de gösterilmiştir.

### 2.6.2.1 Standart Tepkimeler

Literatürde en fazla karşılaşılan tepkime tipidir. Denklem (2.53)’ü sembolik olarak gösterirsek;



$A$  ve  $B$  tepkimeye girenler,  $C$  ve  $D$  ürünler olmak üzere, ileri tepkime hızı denklem (2.61) ile bulunur. Bu çalışmada denklem (2.62) ile gösterilen tepkime tipi, en fazla üç adet reaktant ve üç adet ürün için geçerlidir. Hesaplamalar için sonrasında (2.54) – (2.60) denklemleri kullanılarak gerekli hesaplamalar yapılabilir.

### 2.6.2.2 Üçüncü Kütle Tepkimeleri

Bazı tepkimeler, izomerleşme veya ayrışma gibi, tek bir bileşenin yeniden düzenlenmesini ifade ederler [2, 21]. Tepkimenin gerçekleşebilmesi için de üçüncü kütleye ihtiyaç duyulur.



Bu tip tepkimelerde üçüncü kütlenin konsantrasyonu da tepkime ilerleme hızının hesaplandığı (2.56) numaralı denklemde şu şekilde yer alır;

$$q_i = \left( \sum_{j=1}^N (a_{ji}) [X_j] \right) \left( k_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v'_{ji}} - k_{ri} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v''_{ji}} \right) \quad (2.64)$$

Bu ifadede ilk terim üçüncü kütlelerin etkisini göstermektedir. Eğer karışımdaki bütün bileşenler aynı oranda üçüncü kütle verimi gösteriyorsa, bütün  $j$  bileşenleri için  $a_{ji} = 1$  alınır. Genelde bazı bileşenler diğerlerine göre daha farklı verimde olabilirler. Bu farklı etkiden dolayı verim katsayıları değişik olabilir, bu katsayılar tepkimenin tanımlandığı girdi dosyasında belirtilir [21].

### 2.6.2.3 Basınç Bağımlı Tepkimeler

Bazı tepkimeler için tepkime hızları sıcaklığın yanı sıra basınca da bağlı olabilir. Bu tip tepkimeler için düşük ya da yüksek basınç için tepkime hızı limit değerleri de girdi dosyasında belirtilir. Bu tip tepkimelerin genel adı Lindemann yaklaşımı tepkimelerdir. Bu çalışmada sadece Troe ve SRI formunda bulunan basınç bağımlı tepkimeler dikkate alınmıştır. Bu tip tepkimelerin sembolik gösterimi [21];



Yüksek basınç tepkime hız limiti  $k_\infty$  ve düşük basınç tepkime hız limiti  $k_0$  olmak üzere,

$$k_\infty = A_\infty T^{\beta_\infty} \exp(-E_\infty / R_u T) , \quad k_0 = A_0 T^{\beta_0} \exp(-E_0 / R_u T) \quad (2.66)$$

olarak verilir. Herhangi bir basınçta hız sabiti;

$$k = k_\infty \left( \frac{P_r}{1 + P_r} \right) F \quad (2.67)$$

$P_r$  indirgenmiş basınç terimidir. Eğer verilen tepkime altında Troe ve SRI anahtar kelimeleri bulunmuyorsa denklem (2.67)'de bulunan  $F$  katsayısı 1 değerine eşit olur.

$$P_r = \frac{k_0 [M]}{k_\infty} \quad (2.68)$$

Burada  $[M]$  karışımın konsantrasyonudur ve eğer verilmiş ise üçüncü kütle verimlerini de içerir.

Eğer Lindemann formunda bulunan tepkime *Troe* anahtar kelimesi ile verilmiş ise denklem (2.67)'de yer alan  $F$  ise *Troe* formu olarak adlandırılan bir fonksiyondur ve aşağıda verilen eşitlikler ile hesaplanır [21].

$$\log F = \left[ 1 + \left[ \frac{\log P_r + c}{n - d (\log P_r + c)} \right]^2 \right]^{-1} \log F_{cent} \quad (2.69)$$

$$c = -0.4 - 0.67 \log F_{cent} \quad (2.70)$$

$$n = 0.75 - 1.27 \log F_{cent} \quad (2.71)$$

$$d = 0.14 \quad (2.72)$$

$$F_{cent} = (1 - \alpha) \exp(-T / T^{***}) + \alpha \exp(-T / T^*) + \exp(-T / T^{**}) \quad (2.73)$$

Burada  $\alpha, T^*, T^{**}$  ve  $T^{***}$  tepkime girdi dosyasında verilen parametrelerdir.

Eğer Lindemann formunda bulunan tepkime *SRI* anahtar kelimesi ile verilmişse denklem (2.67)'de yer alan  $F$  değerini hesaplamak için beş parametrenin ( $a, b, c, d, e$ ) tanımlanmış olması gerekir (eğer üç değer var ise  $d$  ve  $e$  parametrelerinin ön tanımlı değerleri sırası ile 1 ve 0 olur) ve  $F$  değeri aşağıdaki şekilde hesaplanır.

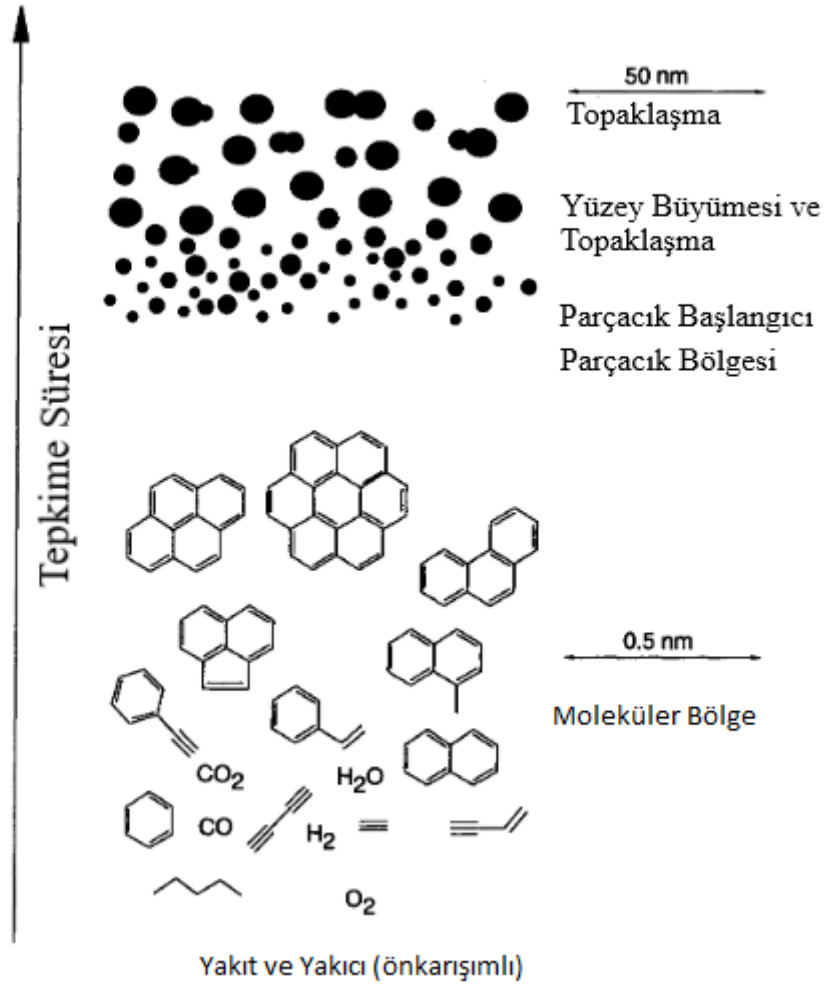
$$F = d \left[ a \exp\left(-\frac{b}{T}\right) + \exp\left(-\frac{T}{c}\right) \right]^X T^e \quad (2.74)$$

$$X = \frac{1}{1 + \log^2 Pr} \quad (2.75)$$

Bu çalışma kapsamında kullanılan tepkime mekanizmaları EK – E'de verilmiştir.

## 2.7 İS OLUŞUMU

İs oluşumu, genel olarak hidrokarbonların yanması ve/veya pirolizi sonucunda ortaya çıkan istenmeyen bir yan etkidir. İnsan sağlığına, küresel ısınma ve soğumaya olan etkilerinin yanı sıra gaz türbinleri ve geleneksel motorlarda birikmeleri sonucu sistemlerin yapısal bütünlüklerinde sıkıntı oluştururlar ve bakım ihtiyacını arttırarak ekonomik kayıplara sebep olurlar. Bununla beraber endüstriyel fırınlarda ve kazanlarda ısınlımla olan ısı transferini artırıcı etkisi nedeniyle ara ürün olarak istenir. Fakat sistemi terk etmeden önce yanması arzu edilir. Ayrıca kimyasal endüstride (araç lastikleri, yazıcı tonerleri vb.) hammadde olarak kullanılmak üzere de üretimi istenebilir [46, 54, 72, 73].

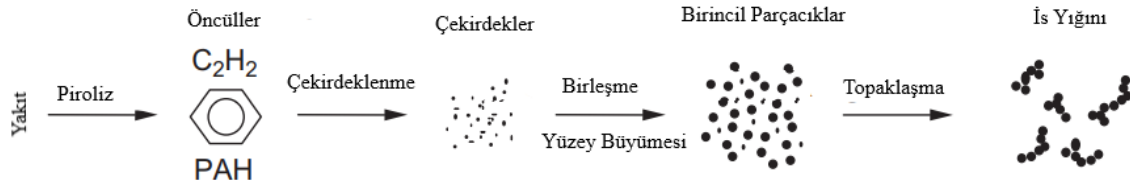


**Şekil 2.1** İs oluşumunun homojen karışımlar (ön karışimli alevler) için şematik gösterimi ([54]'den değiştirilerek).

İs oluşumunun ön karışimli alevler için kabaca şematik gösterimi Şekil 2.1'de verilmiştir. Asetilen ( $C_2H_2$ ) ve polisiklik aromatik hidrokarbonların (PAH) is oluşumuna öncül oldukları

bilinmektedir [74, 75]. Tree and Svensson [76], is oluşumunu is öncüllerini de şematik gösterimin içine dahil ederek Şekil 2.2'deki biçimde vermiştir.

İs öncüllerinin oluşumlarından sonrası ele alındığında, is oluşumu dört ana süreçten oluşmaktadır. Bunlar is parçacıklarının çekirdeklenmesi, parçacık birleşmesi, yüzey tepkimeleri (yüzey büyümesi ve oksitlenme) ve topaklaşmadır [77].



**Şekil 2.2** İs oluşumu için gaz fazından katı is yığına geçiş sürecinin şematik gösterimi ([76]'den değiştirilerek).

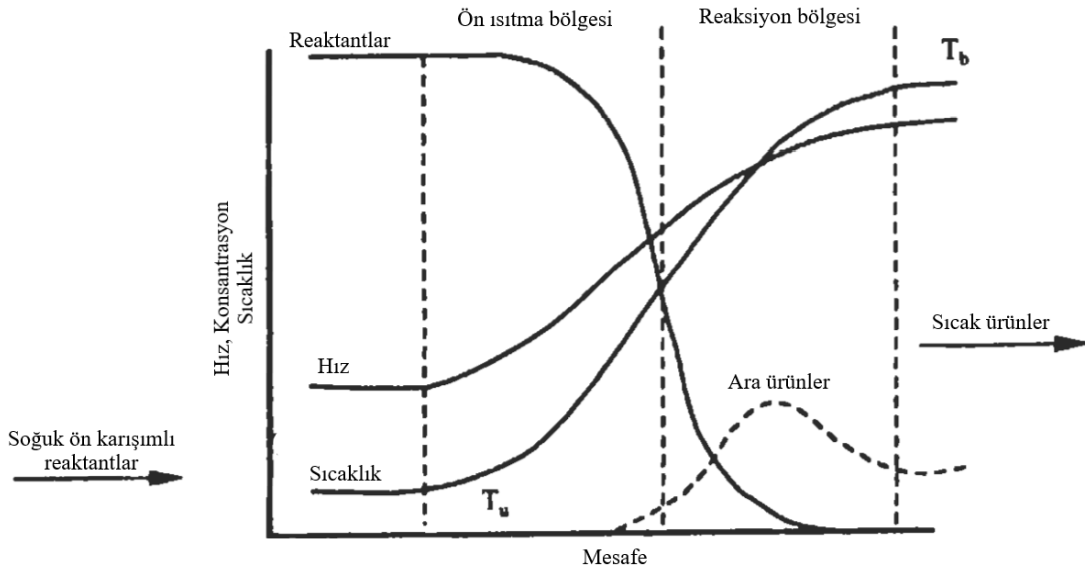
Kennedy [75], is oluşumunun modellenmesini üç ana başlıkta açıklamıştır. Bunlar; ampirik model, yarı ampirik model ve detaylı modeldir. Ampirik model, deneysel sonuçlardan elde edilen, deneyin uygulandığı koşullar için geçerli, korelasyonlar olarak tanımlanır. Tanımı gereği modelin geliştirildiği temel koşullar değiştirildiğinde geçerliliklerini yitirirler. Genelde hesaplama maliyetleri azdır, uygulanmaları ve çalıştırılmaları hızlıdır. Detaylı is modelleri ise temel yanma kimyasına dayanır, genelde is öncülü olarak PAH kabulü yapılır ve dolayısı ile bileşen sayısının ve denklem sayılarının artması sonucu hesaplama maliyetleri yüksektir. Bu çalışmada kullanılan yarı ampirik model ise ampirik model ile detaylı modelin arasında (hem hesaplama maliyeti hem de is oluşumunu modelleme kapasitesi açısından) yer alır. Farklı is oluşumu mekanizmalarını kapsar ve ilgili kimyasal mekanizmayı basitleştirerek hesaplama kolaylığı sağlar [75, 78-80].

## BÖLÜM 3

### MATEMATİKSEL MODELLEME

Bu bölümde, bu tez çalışması kapsamında yazılan laminar ön karışımli alevlerde bir boyutlu akış ve is oluşumunu hesaplayan programın detaylarına yer verilmiştir. Kullanılan sonlu farklar metodu, Bölüm 2’de verilen teorik eşitliklerin bilgisayar programına işlenmesi, modelleme esnasında çözülmesi gereken doğrusal olmayan denklem takımlarının oluşturulması ve çözümü, kullanılan sayısal analiz yöntemleri anlatılmıştır.

Bir boyutlu laminar ön karışımli alevlerin sayısal çözümü; deneysel, teorik ve hesaplama yapılan değerler arasında karşılaştırma yapma olanağını sağlamasının yanında, tepkime mekanizmalarının doğrulanmasında, çok boyutlu ve/veya türbülanslı yanma gibi daha karmaşık modellemelerin de temelini oluşturur [81, 82]. Adyabatik bir boyutlu ön karışımli bir alevin şematik yapısı Şekil 3.1’de verilmiştir.



**Şekil 3.1** Bir boyutlu ön karışımli sabit bir alev için sıcaklık, konsantrasyon ve hız profilleri ([83]’den değiştirilerek).

### 3.1 TEMEL EŞİTLİKLER

Bu tez kapsamında yapılan modelleme çalışmalarında kullanılan temel eşitlikler bu bölümde sunulmuştur. Yazılan program ile yapılan bir boyutlu laminar ön karışımli alev çözümünün ardından kullanıcının isteği doğrultusunda is hesabı yapılabilmektedir. Gene kullanıcının isteği ile alev çözümünde ve is hesabında ışınlımla olan ısı transferi de hesaplamalara katılabilir.

#### 3.1.1 Yanma Modellemesi

Bu çalışmada bir boyutlu laminar ön karışımli alevler için kullanılan temel eşitlikler şöyledir [84];

Genel hal denklemi:

$$\rho = \frac{P\bar{W}}{R_u T} \quad (3.1)$$

Kütle süreklilik denklemi:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \quad (3.2)$$

Bileşen süreklilik denklemleri:

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} = -\frac{\partial j_{k,x}}{\partial x} + \dot{\omega}_k W_k, \quad k = 1, \dots, K \quad (3.3)$$

Enerji denklemi:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \sum_{k=1}^K c_{pk} j_{k,x} \frac{\partial T}{\partial x} - \sum_{k=1}^K h_k \dot{\omega}_k W_k - \dot{Q}_{rad} \quad (3.4)$$

$\dot{Q}_{rad}$ , gaz ve is partikülleri vasıtası ile olan ışınlımla ısı kaybını temsil etmektedir. Denklem (3.3) ve (3.4) yer alan  $j_k$ ,  $k$  bileşeni için difüzyif kütle akısı vektörü ve ifadesi;

$$j_k = \rho Y_k V_k \quad (3.5)$$

şeklinde. Termal difüzyonun (Soret etkisi) ihmal edildiği kabulüyle difüzyon hızı ( $V_k$ ) aşağıdaki şekilde hesaplanır [21, 84];

$$V_k = V_k + V_c \quad (3.6)$$

Burada  $V_k$  basit difüzyon hızı,  $V_c$  ise düzeltme hızıdır ve;

$$V_k = -\frac{1}{X_k} D_{k,karışım} \nabla X_k, \quad V_c = -\sum_{k=1}^K Y_k V_k \quad (3.7)$$

denklemleri ile hesaplanır.  $D_{k,karışım}$  denklem (2.36) ile verilmiştir. Her ne kadar çözümler sürekli rejimde yapılacak olsa da denklem (3.2) – (3.4)’de bulunan zamana bağlı geçici rejim ifadeleri daha sonra verilecek olan çözüm algoritması için gereklidir. Çözümde basınç değişimlerinin, basıncın kendisinin büyüklüğü yanında ihmal edilebilecek kadar küçük olduğu kabulü ile momentum denkleminde gerek duyulmamıştır [84].

Bir boyutlu sürekli akış için kütle süreklilik denklemi (3.2), aşağıdaki gibi ifade edilebilir;

$$\dot{m}'' = \rho u \quad (3.8)$$

Bu eşitlikle beraber, sürekli rejim için denklem (3.3) ve (3.4) tekrar yazılırsa;

$$\dot{m}'' \frac{dY_k}{dx} = -\frac{d(\rho Y_k V_k)}{dx} + \dot{\omega}_k W_k \quad (3.9)$$

$$\dot{m}'' c_p \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left( \lambda \frac{dT}{dx} \right) - \sum_{k=1}^K c_{pk} (\rho Y_k V_k) \frac{dT}{dx} - \sum_{k=1}^K h_k \dot{\omega}_k W_k - \dot{Q}_{rad} \quad (3.10)$$

denklemleri elde edilir. Elde edilen bu denklemler, sınır değerlere sahip adi diferansiyel denklem sistemidir, denklem (3.3) ve (3.4)’den oluşan sistem ise parabolik kısmi diferansiyel denklem takımıdır.

Denklem (3.9) ve denklem (3.10) için giriş sınır koşulları sırasıyla şöyledir;

$$\epsilon_k = Y_k + \frac{j_{k,x}}{\dot{m}''} \quad (3.11)$$

$$T_1 = T_{giriş} \quad (3.12)$$

Burada  $\in_k$ ,  $k$  bileşeninin girişteki kütle oranını göstermektedir. Enerji denklemi için sıcaklık giriş sınır koşulu karışımın giriş sıcaklığıdır. Denklem (3.9) ve (3.10) için çıkış sınır koşulu ise hem bileşenlerin kütle oranları hem de sıcaklık için değişimlerin sıfır olmasıdır ve aşağıdaki denklemler ile ifade edilirler.

$$\frac{Y_{k,J} - Y_{k,J-1}}{X_J - X_{J-1}} = 0 \quad (3.13)$$

$$\frac{T_J - T_{J-1}}{X_J - X_{J-1}} = 0 \quad (3.14)$$

Çözüm yapılan bölgenin belirlenmesi önemlidir. Eğer çözüm bölgesi çok büyük seçilirse gereksiz işlem fazlalığına neden olur, eğer çok küçük seçilirse çıkış sınır koşulu sağlanamayacağından çözüm hatalı olur veya çözüme ulaşamaz [84].

### 3.1.2 İs Modellemesi

Bu çalışmada kullanılan is oluşumu için kullanılan yarı ampirik modelin iki taşınım denklemi, sürekli rejim için aşağıda verilmiştir [79].

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u Y_s) = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho V_T Y_s) + S_m \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u N_s) = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho V_T N_s) + S_N \quad (3.16)$$

Bu denklemlerde  $\rho$  yoğunluğu,  $u$  akışkanın hızını,  $V_T$  ise termoforetik (Soret etkisi) hızı ifade eder.  $Y_s$  ve  $N_s$  isin kütle oranını ve isin kütle tabanlı sayısal yoğunluğunu,  $S_m$  ve  $S_N$  ise kaynak terimlerini göstermektedir. Termoforetik hız;

$$V_T = -\frac{3}{4} \left( 1 + \frac{\pi \alpha}{8} \right)^{-1} \left( \frac{\mu}{\rho} \right) \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x} \quad (3.17)$$

şeklinde verilmiştir. Burada  $\mu$  gaz karışımının viskozitesi,  $\alpha$  ise konaklama katsayısıdır (accommodation coefficient) [85]. Literatürde konaklama katsayısının değişik değerlerine göre termoforetik hız aşağıdaki şekilde de ifade edilmiştir [86];

$$V_T = -C_i \frac{\mu}{\rho} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x} \quad (3.18)$$

$C_i$  değeri için literatürde bulunan farklı çalışmalarda 0.50 – 0.67 arasında farklı değerler kullanıldığı görülmüştür [40, 73, 79, 85-89]. Bu çalışmada  $C_i = 0.54$  değeri kullanılmıştır [73, 79].

Denklem (3.15)'te verilen  $S_m$  kaynak terimi, çekirdeklenme ( $\omega_n$ ), yüzey büyümesi ( $\omega_g$ ) ve oksitlenme ( $\omega_o$ ) bileşenlerinden oluşmaktadır ve aşağıdaki şekilde ifade edilebilir [79];

$$S_m = \omega_n + \omega_g - \omega_o \quad (3.19)$$

Denklem (3.19)'de bulunan terimlerin kimyasal tepkimeleri ve tepkime hızlarının bağıntıları Çizelge 3.1'de verilmiştir. İs oksitlenmesi esas olarak oksijen molekülü ( $O_2$ ) ve  $OH$  radikali ile tepkimesi sonucu olmasının yanı sıra bazı tepkime bölgelerinde oksijen radikali ( $O$ ) de oksitlenmeye katkıda bulunur [79, 90].

**Çizelge 3.1** İs kütle oranı taşınım denkleminin kaynak terim bileşenleri.

| Kaynak Terim Bileşeni         | Tepkime No | Kimyasal Tepkime                             | Tepkime Hızı Bağıntısı                                 |
|-------------------------------|------------|----------------------------------------------|--------------------------------------------------------|
| Çekirdeklenme ( $\omega_n$ )  | R1         | $C_2H_2 \rightarrow 2C(S) + H_2$             | $r_1 = k_1(T)[C_2H_2]$                                 |
| Yüzey Büyümesi ( $\omega_g$ ) | R2         | $C_2H_2 + nC(S) \rightarrow (n+2)C(S) + H_2$ | $r_2 = k_2(T) f(A_s)[C_2H_2]$                          |
| Oksitlenme ( $\omega_o$ )     | R3         | $0.5O_2 + C(S) \rightarrow CO$               | NSC Modeli                                             |
|                               | R4         | $OH + C(S) \rightarrow CO + H$               | $r_4 = \varphi_{OH} k_4(T) T^{-0.5} A_s X_{OH} f_{OH}$ |
|                               | R5         | $O + C(S) \rightarrow CO$                    | $r_5 = \varphi_O k_5(T) T^{-0.5} A_s X_O$              |

Çizelge 3.1'de yer alan tepkime hızı bağıntılarında,  $A_s$ , is parçacıklarının toplam yüzey alanını,  $f(A_s)$  ise yüzey alanına bağlı bir fonksiyonu göstermektedir. Bu çalışmada söz konusu fonksiyon,  $f(A_s) = \sqrt{A_s}$ , olarak kullanılmıştır [73, 80, 85]. İs parçacıklarının toplam yüzey alanı ise  $d_p$  ortalama is çapı,  $\rho_s$  is parçacıklarının yoğunluğu,  $\rho$  karışım yoğunluğu olmak üzere;

$$d_p = \left( \frac{6Y_s}{\pi \rho_s N_s} \right)^{1/3} \quad (3.20)$$

$$A_s = \pi d_p^2 \rho N_s \quad (3.21)$$

olarak hesaplanır [85].

Çizelge 3.1’de görülen NSC (Nagle and Strickland-Constable) modeli ile R3 tepkimesinin tepkime hızı ve hız sabiti aşağıdaki denklemler ile bulunur [40, 44, 87, 91].  $P_{O_2}$  oksijen molekülünün atm biriminden kısmi basıncını ifade etmektedir.

$$R_3 = k_3 A_s \quad (3.22)$$

$$k_3 = \left( \frac{k_A P_{O_2}}{1 + k_z P_{O_2}} \right) x_A + k_B P_{O_2} (1 - x_A) \quad (3.23)$$

$$k_A = 200 \exp(-15098/T) \quad (3.24)$$

$$k_z = 21.3 \exp(2063/T) \quad (3.25)$$

$$k_B = 4.46 \times 10^{-2} \exp(-7650/T) \quad (3.26)$$

$$k_T = 1.51 \times 10^6 \exp(-48817/T) \quad (3.27)$$

$$x_A = \left( 1 + \frac{k_T}{k_B P_{O_2}} \right)^{-1} \quad (3.28)$$

Çizelge 3.1’de R4 ve R5 numaralı tepkimelerde bulunan  $\varphi_{OH}$  ve  $\varphi_O$  ise OH ve O radikalleri ile is parçacıklarının çarpışma verimleridir ve her ikisi için 0.20 değeri kullanılmış [90],  $f_{OH}$  ise OH için sıcaklık bağımlı düzeltme faktörüdür ve Çizelge 3.2’de verilen fonksiyonlar ile programa tanımlanmıştır [87].

**Çizelge 3.2** Hidroksil için sıcaklık bağımlı düzeltme faktörü hesabı.

| Sıcaklık aralığı        | $f_{OH}$ değeri                               |
|-------------------------|-----------------------------------------------|
| $T \leq 1600$ K         | $0.1824 \times (1 + \exp(-(T-1600)/85))^{-1}$ |
| $1600$ K < $T < 1675$ K | $(1 + \exp(-(T-1675)/50))^{-1}$               |
| $T \geq 1675$ K         | $(1 + \exp[-(T-1675)/70])^{-1}$               |

Tepkime hız bağıntıları için kullanılan hız sabitlerinin Arrhenius formunda kullanılan değerleri Çizelge 3.3’de verilmiştir.

**Çizelge 3.3** Hız sabitleri,  $k_i(T) = A \exp(-E/RT)$  (birimler kg, m, s, kmol ve K) ([90]’den değiştirilerek).

| $k_i$ | $A$     | $E/R$   |
|-------|---------|---------|
| $k_1$ | 10000.0 | 21100.0 |
| $k_2$ | 6000.0  | 12100.0 |
| $k_4$ | 1270.0  | 0.0     |
| $k_5$ | 55.4    | 0.0     |

Denklem (3.16)’te verilen  $S_N$  kaynak terimi ise çekirdeklenmeyi ve topaklaşmayı hesaba katarak aşağıdaki formül ile hesaplanır [73, 79, 87].

$$S_N = \frac{2}{C_{min}} N_A r_1 - 2C_A \left( \frac{6M_s}{\pi\rho_s} \right)^{1/6} \left( \frac{6k^\circ T}{\rho_s} \right)^{1/2} \left( \frac{\rho Y_s}{M_s} \right)^{1/6} (\rho N_s)^{11/6} \quad (3.29)$$

Denklem (3.29)’da  $N_A$  Avogadro sayısını,  $k^\circ$  Boltzmann sabitini,  $M_s$  isin molekül ağırlığını (12.01115 g/mol),  $C_{min}$  is parçacığının başlangıcındaki karbon atom sayısını (90000),  $\rho_s$  is parçacıklarının yoğunluğunu (2000 kg/m<sup>3</sup>),  $C_A$  topaklaşma hız sabitini ( $C_A = 9$ ) ifade etmektedir [73, 78, 79, 92, 93].

### 3.1.3 Isıl Işınım Modellemesi

Yazılan programda Denklem (3.10)’da yer alan ışıınım teriminin hesaplanmasında gaz karışımının ve is parçacıklarının optik olarak ince yaklaşımı (Optically Thin Approximation) kullanılmıştır. Gaz karışımında, is parçacıkları dışında  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$  ve (eğer bileşenler arasında var ise)  $NO$  bileşenlerinin ışıınıma katkı verdiği kabul edilmiştir [86, 92-94]. Bu kabuller sonucunda ışıınım terimi aşağıdaki şekilde ifade edilir;

$$\dot{Q}_{rad} = \dot{Q}_{rad,gas} + \dot{Q}_{rad,is} \quad (3.30)$$

$$\dot{Q}_{rad,gas} = -4\sigma_{sb}\kappa(T^4 - T_\infty^4) \quad (3.31)$$

$$\dot{Q}_{rad,is} = -C_f T^5 \quad (3.32)$$

Denklem (3.31)'de  $T_\infty$  çevre sıcaklığını,  $\sigma_{sb}$  Stefan-Boltzmann sabitini,  $C$  ise literatürden alınan bir sabiti ( $C = 3.337 \times 10^{-4} W \cdot m^{-3} \cdot K^{-5}$ ) göstermektedir [86].  $f_v$  is için hacim oranını temsil eder ve denklem (3.15) ve (3.16)'ün çözülmesi sonrası aşağıdaki şekilde hesaplanır;

$$f_v = \frac{\rho Y_s}{\rho_s} \quad (3.33)$$

Denklem (3.31)'de bulunan  $\kappa$  gaz karışımının Planck ortalama absorpsiyon katsayısıdır ( $m^{-1}$ ).

$$\kappa = \sum_{i=1}^I P_{i,atm} \cdot \kappa_i \quad (3.34)$$

$$\kappa_i(T) = \sum_{j=1}^n \alpha_j \exp\left(-\left(\frac{T - \beta_j}{\gamma_j}\right)^2\right) \quad (3.35)$$

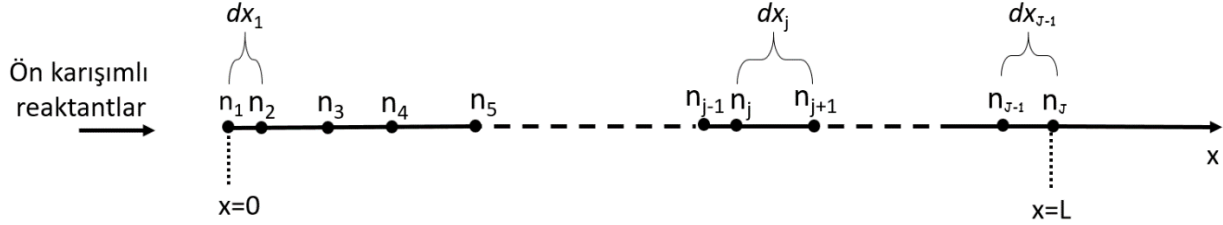
Burada  $p_{i,atm}$  ve  $\kappa_i$ , sırasıyla ilgilenilen  $i$  bileşenin kısmi basıncı (atm) ve Planck ortalama absorpsiyon ( $atm^{-1} m^{-1}$ ) katsayısıdır [86]. Planck ortalama absorpsiyon katsayısı sıcaklığa bağlı bir özellik olmakla beraber, literatürde Denklem (3.35)'te verildiği gibi Gauss dağılımı şeklinde bir eğri ile tanımlanmış ve bu eğrinin katsayıları Çizelge 3.4'te verilmiştir [95].

**Çizelge 3.4** Denklem (3.35) için katsayılar ([95]'dan değiştirilerek).

|            | $H_2O$     | $CO_2$     | $CO$      | $NO$      |
|------------|------------|------------|-----------|-----------|
| $\alpha_1$ | 6.387E+01  | 3.457E+01  | 9.245E-01 | 7.796E-01 |
| $\alpha_2$ | 2.629E+00  | 1.220E+00  | 1.510E+00 | 1.020E+00 |
| $\alpha_3$ | 2.229E+02  | -2.232E+01 | 4.082E-01 | 3.197E-01 |
| $\alpha_4$ | 9.910E-01  | 1.714E+01  | 1.571E+00 | 7.930E-01 |
| $\alpha_5$ | —          | —          | 9.400E-01 | 4.517E-01 |
| $\beta_1$  | 1.495E+02  | 4.532E+01  | 5.031E+02 | 4.870E+02 |
| $\beta_2$  | 4.936E+02  | 9.302E+02  | 6.309E+02 | 6.302E+02 |
| $\beta_3$  | -2.110E+03 | 3.239E+02  | 4.180E+02 | 4.113E+02 |
| $\beta_4$  | 1.700E+03  | 9.298E+01  | 8.454E+02 | 8.345E+02 |
| $\beta_5$  | —          | —          | 1.139E+03 | 1.091E+03 |
| $\gamma_1$ | 1.743E+02  | 8.384E+02  | 1.063E+02 | 1.466E+02 |
| $\gamma_2$ | 1.111E+02  | 1.849E+02  | 2.003E+02 | 2.313E+02 |
| $\gamma_3$ | 1.592E+03  | 2.179E+02  | 4.418E+01 | 4.563E+01 |
| $\gamma_4$ | 6.192E+02  | 1.657E+03  | 3.718E+02 | 4.253E+02 |
| $\gamma_5$ | —          | —          | 9.592E+02 | 1.044E+03 |

### 3.2 SONLU FARKLAR YÖNTEMİ

Sonlu farklar yöntemi temel olarak diferansiyel denklemleri cebirsel ifadelere dönüştürerek analitik çözümlere yakınsamak için kullanılır. Bunun için sırasıyla, fiziksel bölgeyi düğüm noktaları şeklinde bölme, diferansiyel denklemlerdeki türevleri ve sınır koşullarını sonlu fark yaklaşımları ile ifade ederek cebirsel ifadeler elde etme ve elde edilen cebirsel ifadeleri çözme adımları takip edilir [96]. Bu çalışmada da bu adımlar takip edilmiştir. Öncelikle çözüm yapılacak akış bölgesi bir boyutlu ve eşit olmayan aralıklara bölünmüştür (Şekil 3.2). Eşit olmayan aralıkların kullanılma nedeni akış alanı boyunca kimyasal tepkimelerin hızlı bir şekilde gerçekleşmesinden ötürü hem sıcaklığın hem de bileşenlerin mol oranlarının tepkime bölgesinde çok hızlı değişmesidir. Sonlu farklar yöntemi ile elde edilecek çözümün anlamlı olması için keskin değişimlerin olduğu bölgelerde fazla sayıda düğüm noktası olması gerekirken, bahsedilen fonksiyonların (sıcaklık, bileşen mol oranı vb.) daha az değişim gösterdikleri bölgelerde daha az sayıda düğüm noktası yeterli olmaktadır. Bunu sağlayabilmek için adaptif ağ oluşturma yöntemi kullanılmıştır. Bunun sonucu olarak hesaplama maliyeti (süresi) kısalmaktadır [97].



**Şekil 3.2** Çözüm yapılacak bölgenin akış ekseninde bir boyutlu eşit olmayan aralıklı düğüm noktalarının gösterimi.

#### 3.2.1 Sonlu Farklar Denklikleri

Çözülecek denklemlerdeki konvektif terimlerdeki türevler geri farklar ile hesaplanır,  $F$  ilgilenilen fonksiyonu,  $C$  ise herhangi bir katsayıyı ifade etmek üzere [22, 84, 98];

$$C \frac{dF}{dx} \Big|_j \approx C_j \left( \frac{F_j - F_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \right) \quad (3.36)$$

ile hesaplanır.

Enerji denklemindeki (Denklem (3.10)) toplam teriminin içinde bulunan türev ise merkezi farklar ile hesaplanır [21, 22];

$$\left(\frac{dT}{dx}\right)_j \approx \frac{x_j - x_{j-1}}{(x_{j+1} - x_j)(x_{j+1} - x_{j-1})} T_{j+1} + \frac{x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1}}{(x_{j+1} - x_j)(x_j - x_{j-1})} T_j - \frac{x_{j+1} - x_j}{(x_j - x_{j-1})(x_{j+1} - x_{j-1})} T_{j-1} \quad (3.37)$$

Difüzyon terimleri,  $C$ ; sıcaklık ve kütle oranlarının bir fonksiyonu olmak üzere;

$$\frac{d}{dx} \left( C \frac{dF}{dx} \right) \approx \frac{2}{x_{j+1} - x_{j-1}} \left( C_{j+\frac{1}{2}} \frac{F_{j+1} - F_j}{x_{j+1} - x_j} - C_{j-\frac{1}{2}} \frac{F_j - F_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \right) \quad (3.38)$$

merkezi farklar ile hesaplanır. Bağımlı değişken  $C$ , hesaplama yapılan düğüm noktalarında ilgili değişkenlerin ortalaması ile hesaplanır [84].

$$C_{j+\frac{1}{2}} = C \left( \frac{T_{j+1} + T_j}{2}, \frac{Y_{k,j+1} + Y_{k,j}}{2} \right) \quad (3.39)$$

Her ne kadar çözülmek istenilen problem sürekli rejimde olsa da, iteratif çözümünden dolayı bazen zaman adımlarına da ihtiyaç duyulur. Bu durumda denklem (3.3) ve (3.4)'te bulunan zaman türevi içeren terimler geriye doğru Euler metodu ile hesaplanır [21];

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} \approx \rho_j^{n+1} \left( \frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} \right) \quad (3.40)$$

Burada  $n$  indisi zaman düzeyini,  $\Delta t$  ise zaman adımının büyüklüğünü göstermektedir. Sonlu farklar metodu ile ifade edilen denklemler sıfıra eşitlenerek artakalan formunda yazılarak her bir düğüm noktası için  $K$  bileşen için, enerji denklemi de eklenince  $K+1$  adet denklem elde edilir.

### 3.2.2 Sınır Koşulları

Denklem (3.11) ve sonrasında açıklaması verilen sınır koşullarının da sonlu farklar ile ifade edilmesi gerekir. Sınır koşulları artakalan formunda yazılırsa aşağıdaki denklemler elde edilir.

Giriş için;

$$\epsilon_k - Y_k - \left( \frac{\rho Y_k V_k}{\dot{m}''} \right)_{j=1\frac{1}{2}} = 0 \quad , \quad T_1 - T_g = 0 \quad (3.41)$$

Çıkış için;

$$Y_{k,J} - Y_{k,J-1} = 0 \quad , \quad T_J - T_{J-1} = 0 \quad (3.42)$$

### 3.2.3 Doğrusal Olmayan Denklem Sistemlerinin Çözümü

Bölüm 3.1’de verilen temel eşitlikler, Bölüm 3.2’de verilen sonlu farklar yaklaşımı ifadeleri ile tekrar elde edildiğinde ortaya doğrusal olmayan denklem sistemi çıkar. Bu çalışmada söz konusu denklem takımı değiştirilmiş sönümlü Newton metodu kullanılarak çözülmüştür. Bahsedilen denklem takımı artakalan formunda yazılarak ve  $\mathbf{F}$ , başlangıç tahminleri için, artakalan değerleri gösterir vektör olmak üzere [81, 84];

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}) = 0 \quad (3.43)$$

sonucu hedeflenmektedir. Burada  $\mathbf{y}$ , çözüm kümesini içeren vektördür ve aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$\mathbf{y} = (T_1, Y_{1,1}, \dots, Y_{K,1}, \dots, T_j, Y_{1,j}, \dots, Y_{K,j}, \dots, T_J, Y_{1,J}, \dots, Y_{K,J})^T \quad (3.44)$$

Bu denklem takımının çözümünde [81, 99]’da kullanılan değiştirilmiş sönümlü Newton metodu kullanılmıştır.  $n$  iterasyon adımını ve  $\lambda_d$  sönümleme katsayısını göstermek üzere;

$$\phi^{(n+1)} = \phi^{(n)} - \lambda_d \left( \frac{d\mathbf{F}}{d\phi} \right)_{\phi^{(n)}}^{-1} \mathbf{F}(\phi^{(n)}) = \phi^{(n)} - \lambda_d \mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}(\phi^{(n)}) \quad , \quad 0 < \lambda_d \leq 1 \quad (3.45)$$

iteratif yöntemi ile bulunur. Burada  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{F}(\phi^{(n)})$ ’nin Jacobi matrisidir. Denklem (3.45) Jacobi matrisinin tersini hesaplamamak ve sistemi doğrusal olarak ifade etmek istenildiğinde;

$$\mathbf{J} \Delta \phi^{(n)} = \mathbf{F}(\phi^{(n)}) \quad (3.46)$$

şeklinde verilir [22, 81]. Jacobi matrisinin oluşturulması ve çözümü, yapılan alev hesaplarının toplam hesaplama yükünün yaklaşık %90’ını oluşturur [98, 99]. Bu oluşan iş yükünü azaltmak

için Jacobi matrisini her iterasyonda hesaplamak yerine daha önce hesaplanan Jacobi matrisi kullanılır. Ancak doğrusal olmayan sistemler için sürekli aynı Jacobi matrisi kullanılamaz. Söz konusu matrisin yenilenme sıklığına karşılık hesaplama maliyeti göz önüne alınmalıdır [81, 84]. Bu noktada, iterasyonun bir sonraki adımda devam edebilmesinin koşulu,  $n$  iterasyon sayısını göstermek üzere ve sönümlleme katsayısı olmadan, şöyledir;

$$\left| \left( \mathbf{J}^{(n)} \right)^{-1} \mathbf{F} \left( \phi^{(n+1)} \right) \right| < \left| \left( \mathbf{J}^{(n)} \right)^{-1} \mathbf{F} \left( \phi^{(n)} \right) \right| \quad (3.47)$$

Böylece iterasyonun çözümden uzaklaşması engellenir. Eğer sönümlleme katsayısı kullanılarak uygun bir çözüm elde edilemez ise, Jacobi hesabı yenilenir, eğer bu şekilde de çözüm bulunamazsa Denklem (3.3) ve (3.4)'te bulunan zaman terimleri, Denklem (3.40) ile sonlu farklar açılımı yapılarak çözüm yapılan denklemler içine yerleştirilir ve sistemi çözmek için zaman adımları uygulanır. Başarıya ulaşılamazsa, zaman adımları küçültülür, buna rağmen uygun çözüm bulunamazsa başlangıç çözüm tahminleri gözden geçirilmelidir.

Newton iterasyonları, bağıl ( $R$ ) ve mutlak ( $A$ ) hatalar için tanımlanan değerler ile aşağıdaki ifadeyi sağlayana kadar devam eder.

$$(\Delta \phi) \leq \max \left( A, R \times |\phi| \right) \quad (3.48)$$

Mutlak hata ( $A$ ) değerinin ilgilenilen herhangi bir bileşenin en yüksek kütle oranından daha düşük olmalı, bağıl hata ( $R$ ) ise üç ila dört basamak hassasiyet için  $10^{-3}$  ila  $10^{-4}$  aralığında olmalıdır [22].

### 3.2.4 Adaptif Düğüm Noktaları

Ön karışımli laminer alevlerin modellenmesinde başlangıç düğüm noktalarının başlangıçta az sayıda olmasının çözümün daha az sayıda iterasyon ile yakınmasına fayda sağladığı bilinmektedir. Bununla beraber sıcaklığın ve/veya bileşen dağılımlarının hızlı değiştiği bölgelerde düğüm noktalarının fazla olması gerekmektedir [22, 84, 98-100]. Giriş koşulları ve denge çözümü temel alınarak yapılan ilk çözümün ardından her iki düğüm noktasının ( $j, j-1$ ) arasında eğim ve eğrilik değerlerine göre söz konusu iki düğüm noktasının arasında bir düğüm noktası daha eklenerek yeni bir çözüm elde edilir. Bir iterasyonda eklenecek olan düğüm noktası sayısı yakınsama sorunu ile karşılaşmamak için yazılan program içinde

sınırlandırılabilir. Düğüm noktası ekleme işlemi aşağıda verilen denklemlerin sağlandığı noktaya kadar tekrar edilir.

$$|y_{n,j} - y_{n,j-1}| \leq \delta (\max(y_n) - \min(y_n)) \quad (3.49)$$

$$\left| \left( \frac{dy_n}{dx} \right)_j - \left( \frac{dy_n}{dx} \right)_{j-1} \right| \leq \gamma \left( \max \left( \frac{dy_n}{dx} \right) - \min \left( \frac{dy_n}{dx} \right) \right) \quad (3.50)$$

Denklem (3.49) ve (3.50)'da  $y_n$  çözüm vektöründeki bir elemanı (sıcaklık veya bir bileşen için mol oranı) ifade etmektedir.  $\delta$  ve  $\gamma$  ise tanımlanabilir sabitleri göstermektedir. Yazılan programda bu sabitlerin değerleri kullanıcı tarafından değiştirilebilmektedir veya ön tanımlı olarak sırası ile 0.2 ve 0.5 değerlerini kullanabilir [84].



## BÖLÜM 4

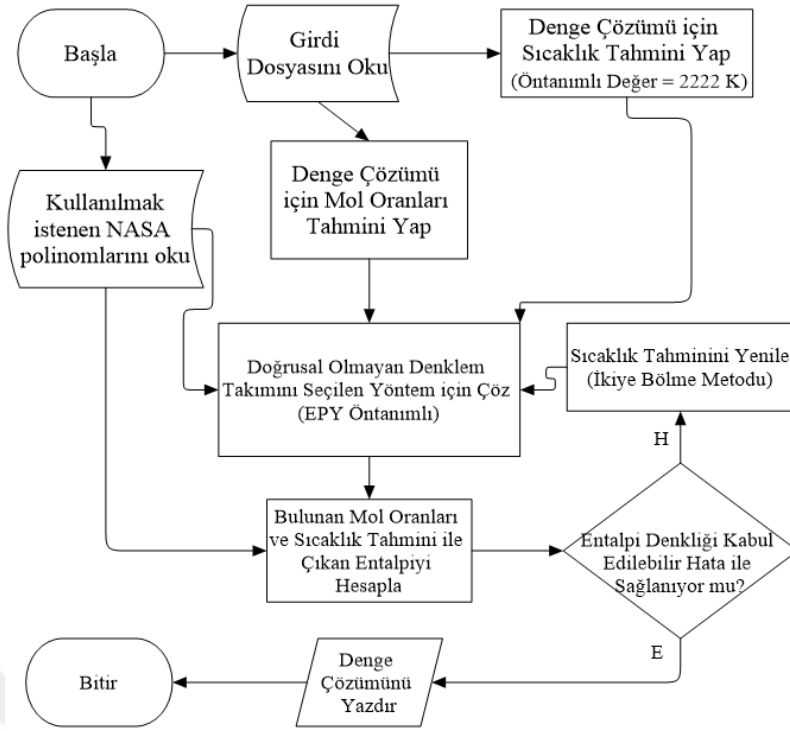
### PROGRAMLAMA VE ALGORİTMA

Bu tez kapsamında gaz yakıtlar için ön karışımli laminar alevlerin yapısının ve is oluşumunun analizi için bir bilgisayar programı geliştirilmiştir. Bilgisayar programı Fortran dilinde yazılmış ve derleyici olarak GNU Fortran (GFortran 9.3.0) kullanılmıştır. Bu bölümde yazılan programı oluşturan alt programlar ve bunların algoritması anlatılmıştır.

#### 4.1 DENGİ ÇÖZÜMÜ

Yazılan iki farklı alt program ile giriş koşulları ve ilgilenilen bileşenlerin girdi dosyasından okunması ile Bölüm 2.4.1 ve 2.4.2’de anlatılan iki yöntem ile denge çözümü elde edilebilmektedir. Denge çözümünün hangi alt program ile hesaplanacağını, program kullanıcısı değiştirebilmektedir. Bölüm 2.4.2’de de belirtildiği üzere Element Potansiyel Yönteminde (EPY) doğrusal olmayan denklem sayısı toplam element sayısına bağlı olduğu için (özellikle çok sayıda bileşen içeren sistemlerde) daha hızlı sonuç vermektedir.

Elde edilen denklem takımları her iki alt programda da, özgün sürümü Fortran 90’a uyarlanmış hali ile [101], Levenberg-Marquardt yöntemini kullanan ve *MINPACK* kütüphanesinde bulunan *lmdif* alt programı kullanarak veya kullanıcının tercihine göre *NNES* alt programı ile çözülmüştür [102-104]. Doğrusal olmayan denklemlerin çözümlerinde ilk tahmin değerlerinin iyi olması, çözüme ulaşılması açısından oldukça önemlidir [96]. Bölüm 2.4.1’de anlatılan yöntemin kullanıldığı alt programda ilk tahminler literatürde bulunan programdan uyarlanmıştır [105]. Bölüm 2.4.2’de bahsedilen yöntemde kullanıldığında ise, eğer varsa sadece nitrojen için bir ilk tahmin olarak havadaki nitrojen oranı kullanılmış, diğer bütün elementler için 1.0 olarak verilmiştir. Daha önce bahsedildiği üzere bu yöntemde doğrusal olmayan denklem sayısı, Bölüm 2.4.1’de verilen yöntemle göre, görece az olduğundan çözümü elde etmek başlangıç tahmin değerlerine daha az bağımlıdır. Denge durumu çözümü için akış diyagramı Şekil 4.1’de gösterilmiştir.

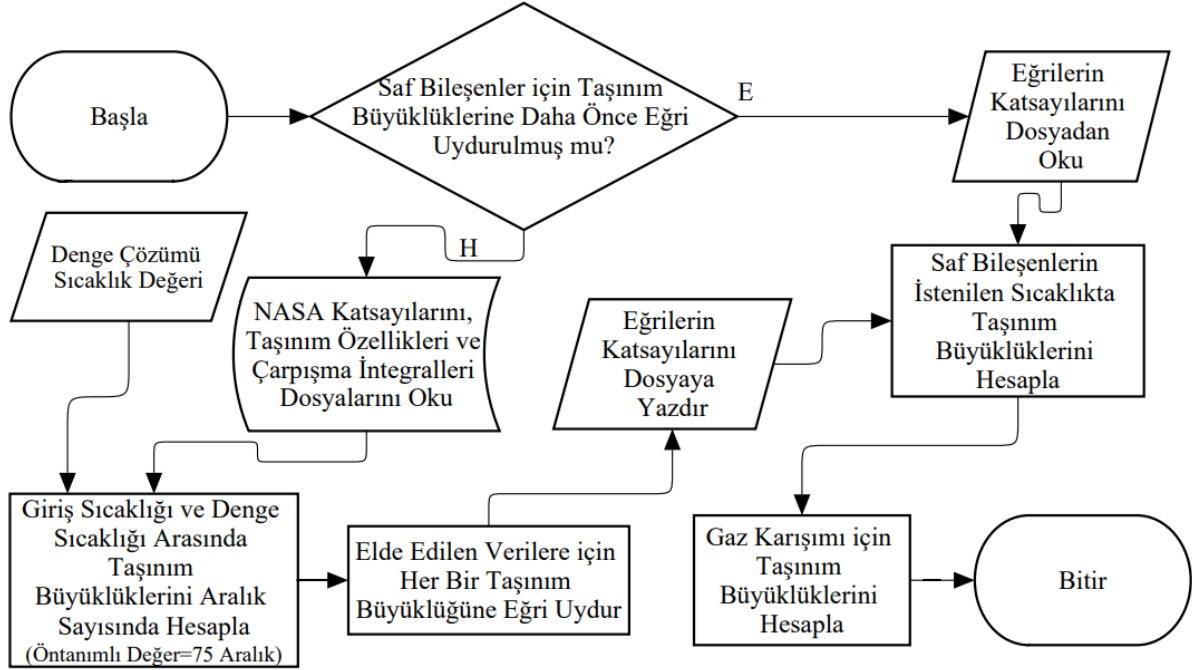


Şekil 4.1 Denge çözümü için program akış diyagramı.

## 4.2 GAZLARIN TAŞINIM BÜYÜKLÜKLERİNİN HESAPLANMASI

Saf gazların ve karışımlarının taşınım büyüklüklerinin hesaplaması için *thermophy* isimli bir alt program yazılmıştır. Yazılan alt programın ilk sürümlerinde akış alanında iteratif çözüm yapılırken saf gazların taşınım özellikleri her sıcaklık değişiminde tekrar hesaplanmıştır. Bölüm 2.2.2 - 2.2.4'te verilen ve taşınım büyüklüklerinin hesaplanması için kullanılan denklemlerin her bir iterasyonda tekrarlanması, Bölüm 2.2.1'de bahsedilen taşınım özelliklerinin tablo değerleri için hem doğrusal aradeğerleme hem de çift doğrusal aradeğerleme işlemlerinin tekrarlanması işlem yüküne sebep olduğu gözlenerek değişikliğe gidilmiştir. Bölüm 4.1'de bahsedilen denge çözümü sonrasında elde edilen sıcaklığın, adyabatik bir sistemin teorik olarak en yüksek sıcaklığı olduğu ve giriş sıcaklığının ise en düşük sıcaklığı olduğu bilinmektedir. Bu iki sıcaklık arasında kullanıcının belirlediği miktar kadar noktada (sıcaklıkta) taşınım büyüklükleri hesaplanarak, gene kullanıcı tarafından değiştirilebilen dereceden Chebyshev polinomları kullanılarak her taşınım büyüklüğü için ayrı bir eğri uydurulmuştur. Saf gazların taşınım büyüklükleri, alt programın ilk çalışmasında hesaplanmış ve bir dosyaya yazdırılmıştır. Bu yöntem ile hem ana programın devamında yapılan iterasyonlarda hem de yazdırılan dosya sayesinde daha sonraki çalıştırmalarda veya aynı bileşenler kullanılarak yapılacak başka analizlerde kullanılarak, kullanıcıya zaman

kazandırması amaçlanmıştır. Yazılan alt programın akış diyagramı Şekil 4.2’de verilmiştir. Eğri uydurma için ve uydurulan eğrilerin katsayılarla tekrar hesaplanması için literatürde bulunan ve Fortran dilinde yazılmış alt programlar kullanılmıştır [106, 107].

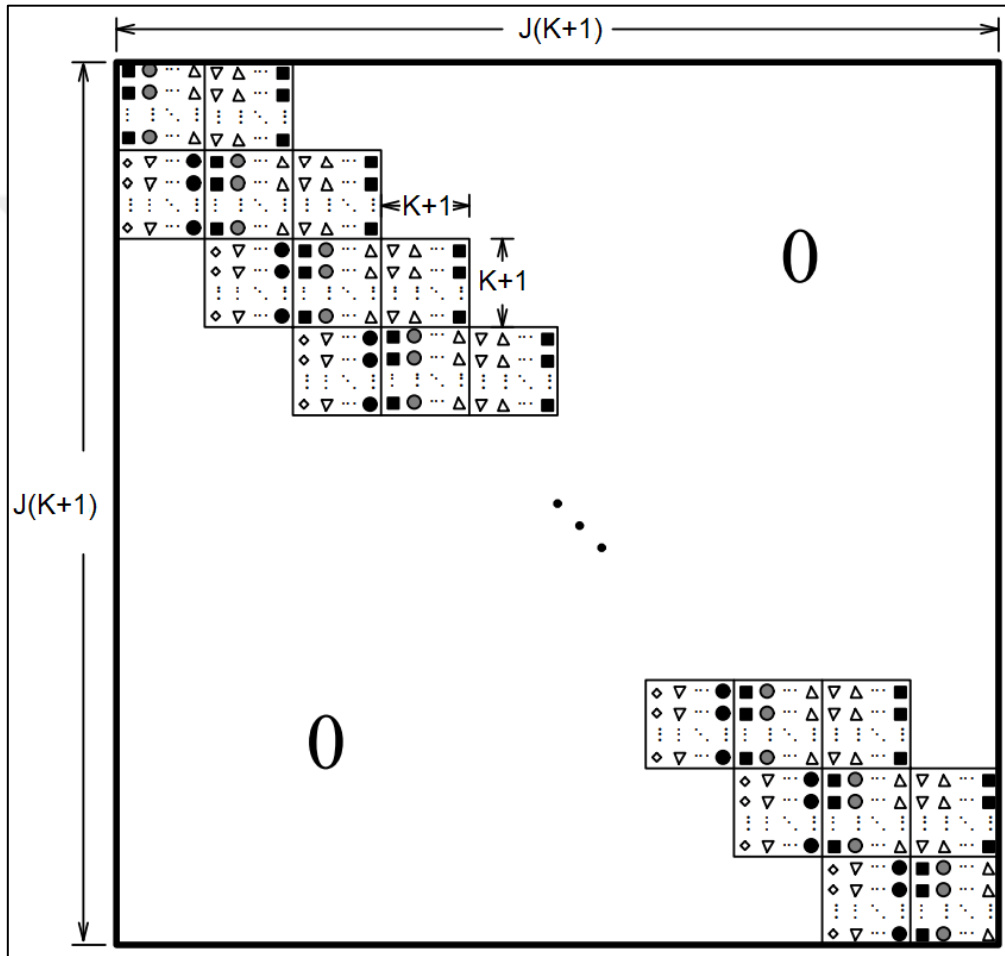


Şekil 4.2 Gaz karışımlarının taşınım büyüklüklerini hesaplamak için yazılan alt programın akış diyagramı

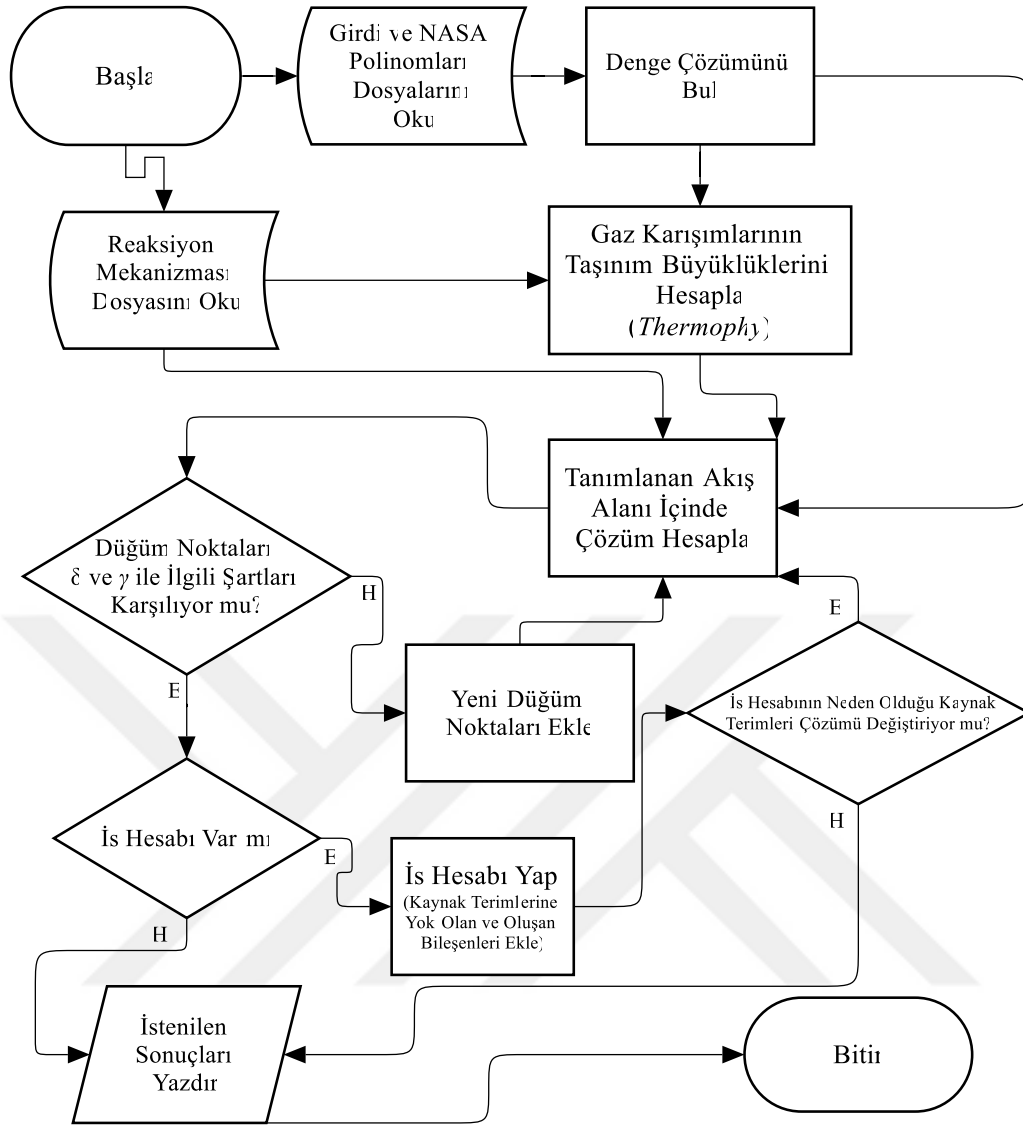
### 4.3 YANMA OLAYI VE İS OLUŞUMU

Yapılan bu çalışma kapsamında yazılan bilgisayar programı ile bir boyutta laminar ön karışımli alevler için sayısal çözümleme ve is oluşumu incelenmiştir. Yanma olayı, tanımlanan bir boyutlu geometri boyunca bileşen dağılımları ve sıcaklık değerleri için Bölüm 3.1.1 ve 3.1.3’de verilen temel eşitlikler, Bölüm 3.2’de verilen sonlu farklar denklikleri ile ifade edilerek, elde edilen doğrusal olmayan denklem sistemi çözülmüştür. Yazılımın bu kısmında matris işlemleri için, programın ilk denemelerinde özgür yazılım lisanslı *LAPACK* kütüphanesinden *dgesv* alt programı kullanılmış, daha sonra ise Skinner’ın (1994) gösterdiği gibi (Şekil 4.3) hesaplanan jacobı matrisinin blok tridiagonal olması dolayısı ile işlemlerin daha hızlı gerçekleşmesi için *dgbsv* alt programı kullanılmıştır [108, 109]. Kalan tüm alt programlar ve algoritma ise bu çalışma kapsamında geliştirilmiştir. Doğrusal olmayan denklem sisteminin çözümünde ilk değer olarak, çıkış bölgesi için kullanıcı tarafından belirlenen kısmı için Bölüm 4.1’de elde edilen denge çözümü sonuçları kullanılmıştır. Giriş koşulları ise, verilen geometrinin yine kullanıcı tarafından belirlenen bir kısmı için uygulanmıştır. İlk tahmin için arada kalan bölgede

ise doğrusal davranış (rampa fonksiyonu) gösterdiği kabul edilmiştir. Yanma analizinin sonunda elde edilen veriler, Bölüm 3.1.2’de sunulan ile is modellemesi için girdi verileri olarak kullanılarak is analizi yapılmıştır. Bu noktada is oluşumunun, yanma olayındaki bileşen dağılımını etkilemesi dolayısı ile bu veriler döngüye sokularak sonuçlar elde edilmektedir. İs hesabı yapan alt programda elde edilen doğrusal olmayan denklem sistemi, özgün hali Fortran 90’a uyarlanmış *NNES* alt programını kullanarak çözülmüştür [103, 104]. Yazılan ana programın akış diyagramı Şekil 4.4’te verilmiştir.



**Şekil 4.3** Jacobi matrisinin sahip olduğu blok tridiagonal formun şematik gösterimi (J harfi düğüm noktalarını, K harfi bileşen sayısını göstermektedir, [109]’dan değiştirilerek).



Şekil 4.4 Ana programın akış diyagramı.



## BÖLÜM 5

### HESAPLAMALAR VE SONUÇLAR

Yapılan çalışmanın sonuçları dört ana başlıkta sunulmuştur. Yazılan alt programlar ve ana programın doğrulanması amacı sırasıyla gaz karışımlarının taşınım büyüklükleri, denge çözümü, yanma ve is analizi ile elde edilen sonuçlar, literatürde bulunan deneysel sonuçlar ve modelleme verileri ile karşılaştırılmıştır. Yazılan programlar vasıtası ile elde edilen sonuçların literatür ile uyumu ortaya konmuştur.

#### 5.1 SAF GAZLARIN VE GAZ KARIŞIMLARININ TAŞINIM BÜYÜKLÜKLERİ

Yanma modellemesi yapılırken gazların saf hallerinin ve bunların oluşturduğu karışımların taşınım büyüklüklerinin hesaplanması gerektiği Bölüm 3'te verilen denklemlerden görülmektedir. Bu bağlamda yazılan programlar vasıtası ile elde edilen değerler ile literatürde elde edilen değerlerin karşılaştırılması sunulmuştur. Taşınım büyüklüklerinin hesaplanmasında kullanılan taşınım özellikleri literatürden alınmıştır [70, 110, 111].

Çizelge 5.1'te saf halde bulunan bazı gazların ısı iletim katsayıları ve viskoziteleri literatürden alınan değerler ile karşılaştırılmıştır. Sonuçlar genel olarak literatür değerleri ile uyumlu çıkmıştır.

Çizelge 5.2'te ise havanın ısı iletim katsayısı ve viskozitesi hesaplanarak literatür ile karşılaştırılmıştır. Hava için yapılan hesaplamalarda hata %4'ün üzerine çıkmamıştır, bu hata değerlerinin mühendislik hesaplamaları için yeterli olduğu söylenebilir [46]. Hem literatürdeki değerler için hem de yapılan çalışmada havanın içeriğinin  $N_2$ ,  $O_2$  ve Ar'dan oluştuğu ve mol oranlarının sırası ile 0.7812, 0.2096 ve 0.0092 olduğu kabul edilmiştir [112].

**Çizelge 5.1** Bazı saf gazların yazılan program ile elde edilen ısı iletim katsayısı ve viskozite değerlerinin literatür değerleri [112] ile karşılaştırılması.

| Bileşen                       | Sıcaklık [K] | Literatür [112]                 |                   | Yazılan programdan elde edilen değerler |                   | Yüzde Hata [%] |      |
|-------------------------------|--------------|---------------------------------|-------------------|-----------------------------------------|-------------------|----------------|------|
|                               |              | Isı İletim Katsayısı [mW/(m·K)] | Viskozite [μPa·s] | Isı İletim Katsayısı [mW/(m·K)]         | Viskozite [μPa·s] |                |      |
| C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> | 300          | 21.218                          | 9.408             | 21.982                                  | 9.366             | 3.60           | 0.45 |
|                               | 400          | 35.965                          | 12.213            | 35.723                                  | 12.305            | 0.67           | 0.75 |
|                               | 500          | 53.769                          | 14.778            | 51.669                                  | 14.988            | 3.91           | 1.42 |
|                               | 600          | 73.338                          | 17.135            | 68.576                                  | 17.400            | 6.49           | 1.55 |
| CH <sub>4</sub>               | 300          | 34.552                          | 11.245            | 35.642                                  | 11.419            | 3.16           | 1.55 |
|                               | 400          | 50.127                          | 14.272            | 50.797                                  | 14.410            | 1.34           | 0.97 |
|                               | 500          | 68.564                          | 16.976            | 68.667                                  | 17.080            | 0.15           | 0.61 |
|                               | 600          | 88.921                          | 19.431            | 88.098                                  | 19.453            | 0.93           | 0.11 |
| CO <sub>2</sub>               | 250          | 12.950                          | 12.565            | 13.633                                  | 12.547            | 5.28           | 0.15 |
|                               | 450          | 29.346                          | 21.901            | 29.270                                  | 21.894            | 0.26           | 0.03 |
|                               | 650          | 45.466                          | 29.873            | 44.566                                  | 29.647            | 1.98           | 0.76 |
|                               | 850          | 60.295                          | 36.707            | 59.016                                  | 36.426            | 2.12           | 0.76 |
|                               | 1050         | 73.843                          | 42.692            | 72.163                                  | 42.352            | 2.28           | 0.80 |
| He                            | 350          | 173.530                         | 22.154            | 170.573                                 | 21.897            | 1.70           | 1.16 |
|                               | 600          | 252.400                         | 32.215            | 240.717                                 | 30.902            | 4.63           | 4.08 |
|                               | 850          | 321.870                         | 41.153            | 301.830                                 | 38.747            | 6.23           | 5.85 |
|                               | 1100         | 385.470                         | 49.382            | 358.006                                 | 45.959            | 7.12           | 6.93 |
|                               | 1350         | 444.910                         | 57.105            | 414.280                                 | 53.183            | 6.88           | 6.87 |

**Çizelge 5.2** Havanın ısı iletim katsayısı ve viskozite değerlerinin program sonuçları ve literatür değerleri ile karşılaştırılması.

| Bileşen | Sıcaklık [K] | Literatür [112]                 |                   | Yazılan programdan elde edilen değerler |                   | Yüzde Hata [%] |      |
|---------|--------------|---------------------------------|-------------------|-----------------------------------------|-------------------|----------------|------|
|         |              | Isı İletim Katsayısı [mW/(m·K)] | Viskozite [μPa·s] | Isı İletim Katsayısı [mW/(m·K)]         | Viskozite [μPa·s] |                |      |
| Hava    | 300          | 26.384                          | 18.537            | 26.165                                  | 18.609            | 0.83           | 0.39 |
|         | 500          | 39.944                          | 27.090            | 39.028                                  | 26.894            | 2.29           | 0.72 |
|         | 700          | 51.755                          | 34.176            | 51.295                                  | 33.755            | 0.89           | 1.23 |
|         | 900          | 62.543                          | 40.394            | 63.207                                  | 39.807            | 1.06           | 1.45 |
|         | 1100         | 72.680                          | 46.051            | 74.511                                  | 45.301            | 2.52           | 1.63 |
|         | 1300         | 82.381                          | 51.325            | 85.209                                  | 50.432            | 3.43           | 1.74 |
|         | 1500         | 91.781                          | 56.325            | 95.319                                  | 55.253            | 3.85           | 1.90 |
|         | 1700         | 100.970                         | 61.127            | 104.939                                 | 59.822            | 3.93           | 2.14 |
|         | 1900         | 110.010                         | 65.783            | 114.151                                 | 64.181            | 3.76           | 2.44 |

Üç adet gazdan oluşan beş ayrı karışımın mol oranları Çizelge 5.3'te verilmiştir. Çizelge 5.4'de ise bu karışımlar için elde edilen deneysel olarak bulunmuş viskozite sonuçları [113] ile yazılan program ile hesaplanan sonuçlar karşılaştırılmıştır. Hesaplanan değerlerin deneysel değerlere göre farkların %3'ü geçmediği görülmüştür.

**Çizelge 5.3** Karşılaştırması yapılan üç farklı gaz içeren karışımların bileşenleri ve mol oranları.

| Karışım No.      | Karışım bileşenleri ve mol oranları |        |                 |                 |
|------------------|-------------------------------------|--------|-----------------|-----------------|
|                  | N <sub>2</sub>                      | Ar     | CO <sub>2</sub> | CH <sub>4</sub> |
| <i>Karışım 1</i> | 0.1869                              | 0.2842 | 0.5289          | -               |
| <i>Karışım 2</i> | 0.4535                              | 0.2049 | 0.3416          | -               |
| <i>Karışım 3</i> | 0.2002                              | -      | 0.2713          | 0.5285          |
| <i>Karışım 4</i> | 0.2654                              | -      | 0.5588          | 0.1758          |
| <i>Karışım 5</i> | 0.3429                              | -      | 0.3456          | 0.3115          |

**Çizelge 5.4** Farklı gaz karışımları için deneysel viskozite değerleri ile yazılan program ile elde edilen değerlerin karşılaştırması.

| Sıcaklık<br>[K] | Literatür<br>(Deneysel Viskozite) [113]<br>[μP] |              |              | Yazılan programdan elde<br>edilen viskozite sonuçları<br>[μP] |              |              | Yüzde Fark<br>[%] |              |              |
|-----------------|-------------------------------------------------|--------------|--------------|---------------------------------------------------------------|--------------|--------------|-------------------|--------------|--------------|
|                 | Karışım 1                                       |              | Karışım 2    | Karışım 1                                                     |              | Karışım 2    | Karışım 1         |              | Karışım 2    |
| 298             | 173.61                                          |              | 176.71       | 177.13                                                        |              | 179.71       | 1.99              |              | 1.67         |
| 373             | 211.08                                          |              | 212.79       | 217.13                                                        |              | 218.36       | 2.79              |              | 2.55         |
| 473             | 256.62                                          |              | 256.33       | 263.73                                                        |              | 263.19       | 2.70              |              | 2.61         |
| 673             | 335.09                                          |              | 331.54       | 342.62                                                        |              | 339.23       | 2.20              |              | 2.27         |
| 873             | 403.35                                          |              | 396.96       | 411.99                                                        |              | 404.80       | 2.10              |              | 1.94         |
|                 | Karışım<br>3                                    | Karışım<br>4 | Karışım<br>5 | Karışım<br>3                                                  | Karışım<br>4 | Karışım<br>5 | Karışım<br>3      | Karışım<br>4 | Karışım<br>5 |
| 298             | 139.19                                          | 152.02       | 150.04       | 140.32                                                        | 154.04       | 151.93       | 0.80              | 1.31         | 1.25         |
| 373             | 168.04                                          | 184.95       | 181.09       | 171.12                                                        | 189.25       | 185.13       | 1.80              | 2.27         | 2.18         |
| 473             | 202.75                                          | 225.00       | 218.56       | 206.68                                                        | 230.49       | 223.69       | 1.90              | 2.38         | 2.30         |

Çizelge 5.5'te literatürde eğri uydurma yöntemi ile hesaplanan viskozite ve ısı iletkenlik katsayıları [114] ile bu çalışma kapsamında yazılan programdan elde edilen değerlerin karşılaştırması yapılmıştır. Hesaplanan değerlerle literatürden alınan değerlerin yüzde farklarının kabul edilebilir düzeyde olduğu görülmüştür.

**Çizelge 5.5** Yazılan programla elde edilen viskozite ve ısı iletim katsayısı değerlerinin literatürden alınan değerler ile karşılaştırılması.

| Gaz karışımı mol oranları                          | Sıcaklık [K] | Literatür [114]             |                                                              | Yazılan Program             |                                                              | Yüzde Fark [%] |      |
|----------------------------------------------------|--------------|-----------------------------|--------------------------------------------------------------|-----------------------------|--------------------------------------------------------------|----------------|------|
|                                                    |              | Viskozite [ $\mu\text{P}$ ] | Isı İletim Katsayısı [ $\text{mW}/(\text{m}\cdot\text{K})$ ] | Viskozite [ $\mu\text{P}$ ] | Isı İletim Katsayısı [ $\text{mW}/(\text{m}\cdot\text{K})$ ] |                |      |
| $X_{\text{Xe}}: 0.1271$<br>$X_{\text{He}}: 0.8729$ | 400          | 315.84                      | 121.84                                                       | 325.42                      | 124.68                                                       | 3.03           | 2.33 |
|                                                    | 500          | 369.25                      | 141.00                                                       | 375.44                      | 145.05                                                       | 1.68           | 2.87 |
|                                                    | 600          | 418.69                      | 158.84                                                       | 419.00                      | 163.62                                                       | 0.07           | 3.01 |
|                                                    | 700          | 464.93                      | 175.64                                                       | 457.84                      | 181.45                                                       | 1.52           | 3.31 |
|                                                    | 800          | 508.53                      | 191.60                                                       | 492.13                      | 198.49                                                       | 3.22           | 3.60 |
|                                                    | 900          | 549.96                      | 206.84                                                       | 521.39                      | 214.36                                                       | 5.19           | 3.64 |
| $X_{\text{Xe}}: 0.6269$<br>$X_{\text{He}}: 0.3731$ | 400          | 318.62                      | 32.36                                                        | 330.48                      | 32.73                                                        | 3.72           | 5.39 |
|                                                    | 500          | 381.67                      | 37.90                                                        | 389.99                      | 38.62                                                        | 2.18           | 1.91 |
|                                                    | 600          | 439.70                      | 42.88                                                        | 444.11                      | 44.07                                                        | 1.00           | 6.93 |
|                                                    | 700          | 493.65                      | 47.60                                                        | 492.90                      | 49.19                                                        | 0.15           | 7.33 |
|                                                    | 800          | 543.59                      | 52.10                                                        | 537.47                      | 54.03                                                        | 1.13           | 7.62 |
|                                                    | 900          | 591.35                      | 56.41                                                        | 578.26                      | 58.54                                                        | 2.21           | 7.69 |

Çizelge 5.6'da farklı gazlar için değişik sıcaklıklarda ikili difüzyon katsayıları literatürden bulunan deneysel veriler ile yazılan programdan elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır. Deneysel sonuçlara göre bulunan yüzde sapma değerlerinin yanma analizi için yeterli olduğu gözlenmiştir [46].

**Çizelge 5.6** İkili Difüzyon sayıları için program sonuçları ve literatür karşılaştırması.

| İkili Gaz Çifti                   | Referans | Sıcaklık [K] | Deneysel $D_{AB}$ [ $\text{cm}^2/\text{s}$ ] | Yazılan program $D_{AB}$ [ $\text{cm}^2/\text{s}$ ] | Yüzde Fark [%] |
|-----------------------------------|----------|--------------|----------------------------------------------|-----------------------------------------------------|----------------|
| Ar-CH <sub>4</sub>                | [115]    | 298          | 0.205                                        | 0.214                                               | 4.39           |
| Ar-H <sub>2</sub>                 | [115]    | 295          | 0.840                                        | 0.790                                               | 5.95           |
| Ar-He                             | [115]    | 276          | 0.655                                        | 0.654                                               | 0.15           |
| Ar-Xe                             | [115]    | 378          | 0.180                                        | 0.173                                               | 3.89           |
| CO <sub>2</sub> -He               | [115]    | 298          | 0.620                                        | 0.610                                               | 1.61           |
| CO <sub>2</sub> -He               | [115]    | 498          | 1.433                                        | 1.446                                               | 0.91           |
| CO-N <sub>2</sub>                 | [115]    | 373          | 0.322                                        | 0.302                                               | 6.21           |
| H <sub>2</sub> -N <sub>2</sub>    | [115]    | 294          | 0.773                                        | 0.751                                               | 2.85           |
| H <sub>2</sub> -N <sub>2</sub>    | [115]    | 573          | 2.449                                        | 2.317                                               | 5.39           |
| He-H <sub>2</sub> O               | [115]    | 352          | 1.136                                        | 1.176                                               | 3.52           |
| He-N <sub>2</sub>                 | [115]    | 298          | 0.696                                        | 0.709                                               | 1.87           |
| CH <sub>4</sub> -He               | [116]    | 273.15       | 0.618                                        | 0.596                                               | 3.56           |
| C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -He | [116]    | 273.15       | 0.497                                        | 0.498                                               | 0.20           |
| NO <sub>2</sub> -N <sub>2</sub>   | [116]    | 273.15       | 0.145                                        | 0.146                                               | 0.69           |
| NO-He                             | [116]    | 273.15       | 0.662                                        | 0.611                                               | 7.70           |

## 5.2 DENGİ ÇÖZÜMÜ VE ADYABATİK ALEV SICAKLIĞI

Bu bölümde yazılan programın ilgili alt programları kullanılarak elde edilen denge çözümleri ve adyabatik alev sıcaklık değerleri literatürle karşılaştırılmıştır.

Çizelge 5.7’te değişik yakıt-hava eşdeğer oranları için propan ( $C_3H_8$ ) – hava yanması durumunda yakıt dahil 11 bileşen için denge çözümü yapılarak bileşenlerin mol oranları ve adyabatik alev sıcaklıkları, literatür değerleri ile beraber verilmiştir. Görüleceği üzere hesaplanan değerler ve literatürden alınan değerler uyumludur.

**Çizelge 5.7** Propan-hava yanmasının değişik yakıt-hava eşdeğer oranları için program sonuçları ile literatür değerleri ( $P=1$  atm,  $T_{giriş}=298$  K).

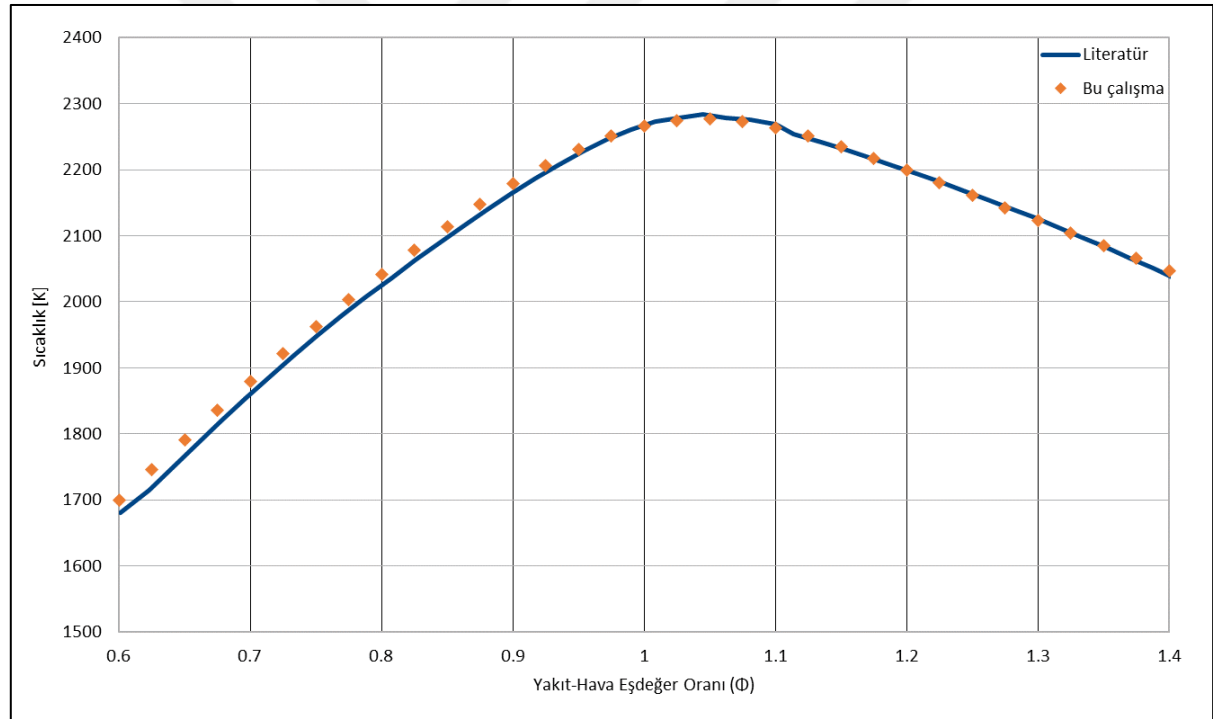
| $\Phi$                       | 0.6                    |                              | 1.0                    |                              | 1.5                    |                              |
|------------------------------|------------------------|------------------------------|------------------------|------------------------------|------------------------|------------------------------|
| Bileşenler                   | Literatür değeri [117] | Programdan elde edilen değer | Literatür değeri [117] | Programdan elde edilen değer | Literatür değeri [117] | Programdan elde edilen değer |
| CO                           | 0.000E+00              | 1.760E-05                    | 1.250E-02              | 1.249E-02                    | 1.042E-01              | 1.045E-01                    |
| CO <sub>2</sub>              | 7.200E-02              | 7.195E-02                    | 1.027E-01              | 1.027E-01                    | 4.940E-02              | 4.902E-02                    |
| H                            | 0.000E+00              | 3.870E-07                    | 4.000E-04              | 4.636E-04                    | 3.000E-04              | 3.452E-04                    |
| H <sub>2</sub>               | 0.000E+00              | 6.863E-06                    | 3.400E-03              | 3.289E-03                    | 6.630E-02              | 6.595E-02                    |
| H <sub>2</sub> O             | 9.600E-02              | 9.581E-02                    | 1.483E-01              | 1.484E-01                    | 1.382E-01              | 1.385E-01                    |
| NO                           | 2.000E-03              | 1.738E-03                    | 2.300E-03              | 2.334E-03                    | 0.000E+00              | 6.841E-06                    |
| N <sub>2</sub>               | 7.510E-01              | 7.512E-01                    | 7.208E-01              | 7.209E-01                    | 6.415E-01              | 6.416E-01                    |
| O                            | 0.000E+00              | 1.259E-05                    | 3.000E-04              | 3.107E-04                    | 0.000E+00              | 2.643E-07                    |
| OH                           | 3.000E-04              | 2.790E-04                    | 3.300E-03              | 3.209E-03                    | 1.000E-04              | 6.864E-05                    |
| O <sub>2</sub>               | 7.900E-02              | 7.903E-02                    | 5.900E-03              | 5.880E-03                    | 0.000E+00              | 2.404E-07                    |
| Adyabatik Alev Sıcaklığı [K] | 1701                   | 1700.2                       | 2267                   | 2265.6                       | 1974                   | 1972.3                       |

Çizelge 5.8’de farklı yakıtların stokiyometrik miktarda hava ile yanması sonucu, literatür değerleri ve programdan elde edilen adyabatik alev sıcaklıkları ve yüzde farkları sunulmuştur. Yüzde fark değerlerinden de görüleceği üzere program değerleri son derece hassastır.

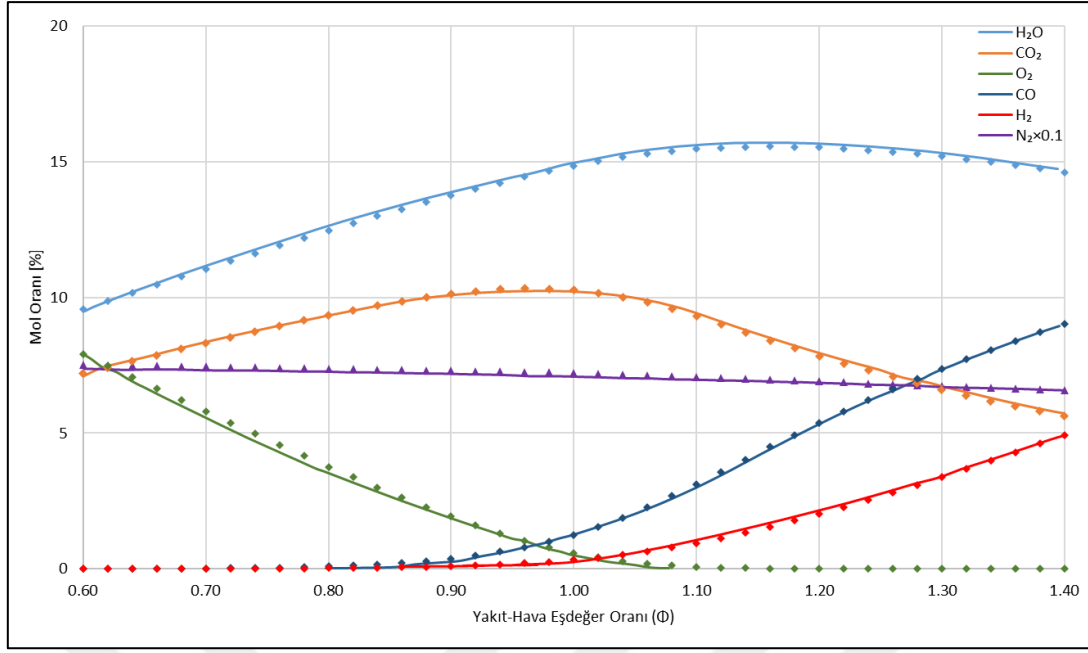
Şekil 5.1, Şekil 5.2 ve Şekil 5.3’te ise yazılan programla propan ( $C_3H_8$ ) için farklı yakıt-hava eşdeğer oranları için elde edilen denge çözümleri sonucu adyabatik alev sıcaklıkları ve bileşen mol oranları literatürdeki değerler ile birlikte sunulmuştur.

**Çizelge 5.8** Farklı yakıtlar için stokiyometrik yakıt hava karışımı için adyabatik alev sıcaklıkları ( $P=1$  atm,  $T_{giriş}=298$  K).

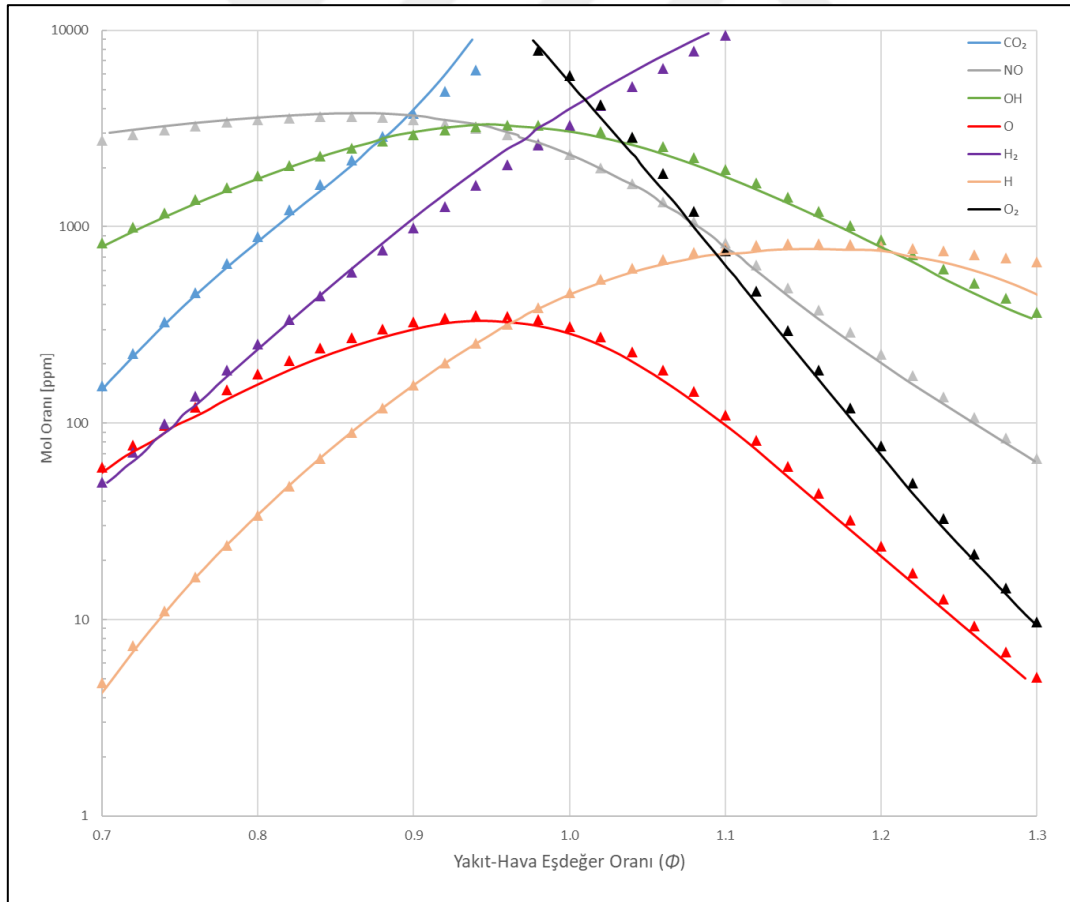
| Yakıt                          |          | Adyabatik alev sıcaklığı [K] |                        | Yüzde fark [%] |
|--------------------------------|----------|------------------------------|------------------------|----------------|
| Formülü                        | Adı      | Literatür [2]                | Programdan elde edilen |                |
| CH <sub>4</sub>                | Metan    | 2226                         | 2224.56                | 0.065          |
| C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>  | Asetilen | 2539                         | 2539.49                | 0.019          |
| C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>  | Etilen   | 2369                         | 2368.52                | 0.020          |
| C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>  | Etan     | 2259                         | 2258.66                | 0.015          |
| C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>  | Propilen | 2334                         | 2337.41                | 0.146          |
| C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>  | Propan   | 2267                         | 2265.62                | 0.061          |
| C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>  | 1-Bütan  | 2322                         | 2324.47                | 0.106          |
| C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> | N-Bütan  | 2270                         | 2270.86                | 0.038          |
| C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> | 1-Penten | 2314                         | 2315.85                | 0.080          |
| C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> | N-Pentan | 2272                         | 2272.07                | 0.003          |



**Şekil 5.1** Propan-hava karışımının farklı yakıt-hava eşdeğer oranları için adyabatik alev sıcaklıkları ( $P=1$  atm,  $T_{giriş}=298$  K, referans değerleri [2]'den alınmıştır).

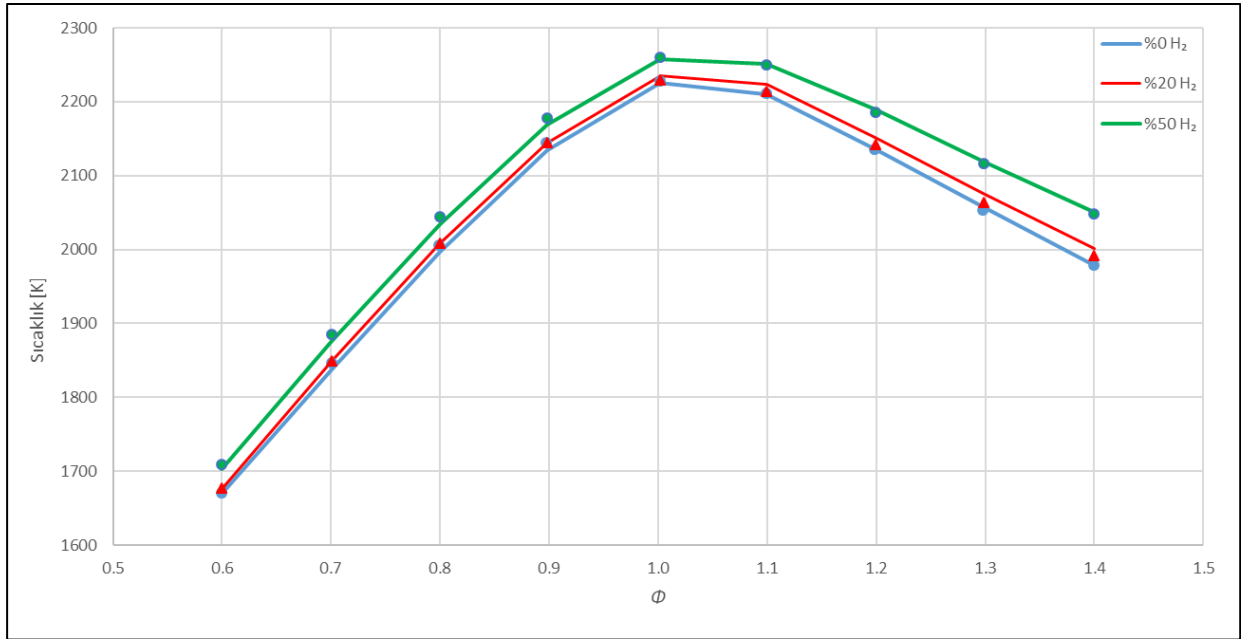


**Şekil 5.2** Propan-hava karışımının farklı yakıt-hava eşdeğer oranları için bazı bileşenlerin mol oranları ( $P=1$  atm,  $T_{giriş}=298$  K) (Düz çizgiler [2]'den alınmıştır, semboller ise yazılan program sonuçlarıdır).



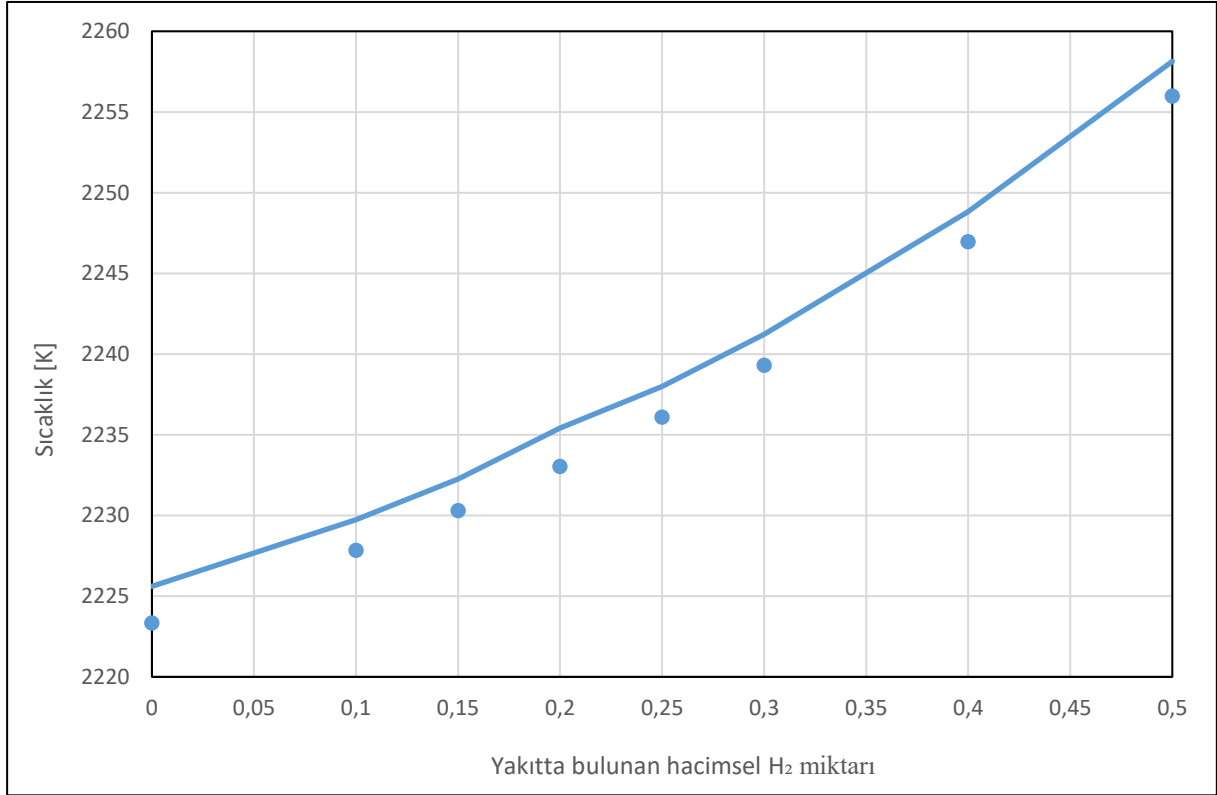
**Şekil 5.3** Propan-hava karışımının farklı yakıt-hava eşdeğer oranları için bazı bileşenlerin mol oranları ( $P=1$  atm,  $T_{giriş}=298$  K) (Düz çizgiler [2]'den alınmıştır, semboller ise yazılan program sonuçlarıdır).

Şekil 5.4'te metan-hava karışımına hidrojen eklemesinin adyabatik alev sıcaklığına olan etkisi hem farklı stokiyometrik oranlar hem de değişik hacimsel oranlarda hidrojen eklenmesi durumlarında incelenmiş, literatürde bulunan ve ticari bir yazılımla elde edilen sonuçlarla beraber gösterilmiştir [118]. Hesaplamalarda GRI-Mech 3.0 [70] mekanizmasında yer alan argon gazı hariç 52 bileşen kullanılmıştır. Yazılan programla elde edilen sonuçlar literatür ile tamamen uyumludur. Yapılan hesaplamalarda elde edilen sıcaklıklar ile bahsedilen yayında verilen değerler arasındaki fark % 0.6'yı geçmemektedir.



**Şekil 5.4** Değişik yakıt-hava eşdeğer oranları ve yakıtta katılan hacimsel hidrojen oranlarına karşılık adyabatik alev sıcaklığı değerlerinin literatür ile karşılaştırılması (Düz çizgiler bu çalışmada elde edilen sonuçları, semboller literatür değerlerini [118] göstermektedir).

Şekil 5.5'te ise stokiyometrik yanma durumunda yakıtta bulunan hidrojen gazının hacimsel oranına karşılık adyabatik alev sıcaklığı verilmiştir. Literatür değerleri ile bulunan değerler arasındaki fark 2.5 K'nin altındadır ve % 0.12'yi geçmemektedir.



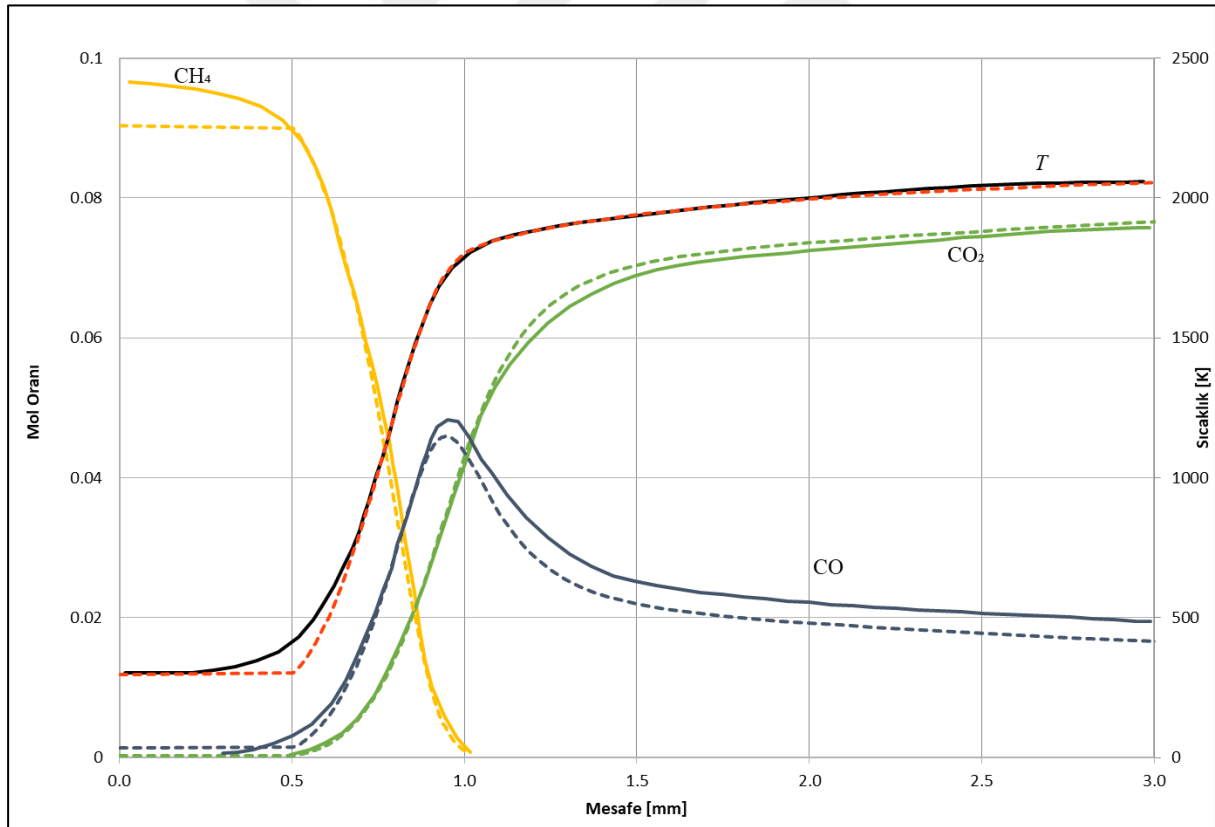
**Şekil 5.5** Metan-hava karışımının stokiyometrik miktarda yanma için ( $\Phi=1$ ) farklı oranlarda hidrojen gazı eklenmesinin adyabatik alev sıcaklığına etkisi (Semboller literatür değerlerini [118], düz çizgi bu çalışmayı göstermektedir).

### 5.3 AKIŞ ALANI İÇİNDE YANMA ÇÖZÜMÜ

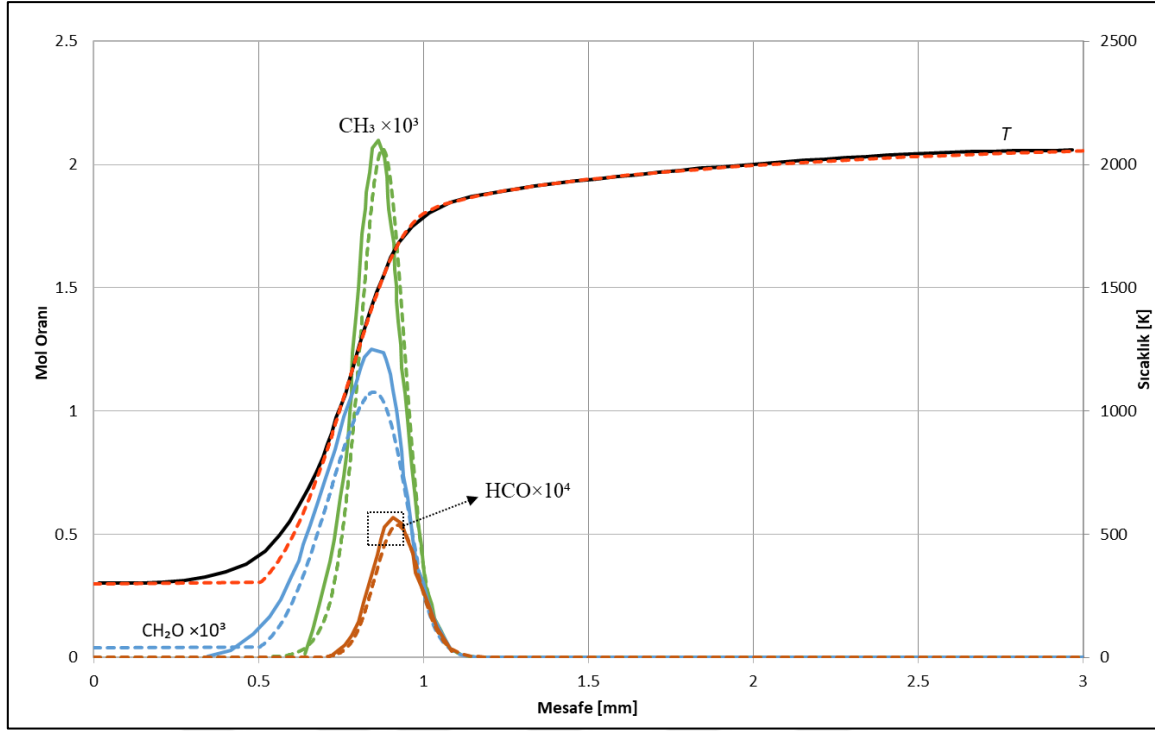
Yapılan çalışmada bu noktaya kadar olan kısımda akış alanı içinde yapılacak yanma modellemesi için gerekli olan taşınım büyüklükleri ve analizde kullanılacak denge durumu çözümü sunulmuştur. Bu bölümde ise verilen bir akış alanı içinde yapılacak çözüm sonuçları verilmiştir. Şekil 5.6 – 5.8’de stokiyometrik metan-hava yanması analizinden elde edilen sıcaklık değerleri ve çeşitli bileşenler için mesafeye göre mol oranları ve literatürden alınan ve ticari bir program ile elde edilen sonuçlar birlikte verilmiştir fakat belirtilen kaynakta kullanılan ticari programın ayar ayrıntılarından bahsedilmemiştir [69]. Yazılan programdan elde edilen sonuçlar bahsi geçen şekillerde 0.5 mm kaydırılmıştır. Bundan dolayı sıcaklık ve bileşen mol oranlarında 0.5 mm öncesinde farklı davranışlar gösterebilirler de sonrasında üst üste oturmuşlardır. Sonuçlar birbirleri ile uyum içerisindedir. Dağılım davranışları aynı olmakla beraber OH, CO ve CH<sub>2</sub>O mol oranları için literatür değerlerine göre tepe noktası ihmal edilebilir ölçüde az olarak elde edilmiş, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> için ise tam tersi olarak mol oranı tepe noktası daha yüksek bir değer bulunmuştur. Elde edilen sonuçlarda az da olsa görülen bu farklılıkların

temel sebebi kullanılan kimyasal tepkime mekanizmalarının farklı oluşu olarak yorumlanabilir. Bahsedilen kaynakta GRI-Mech 2.11 tepkime seti kullanılırken [2, 69], yapılan çalışma için yazılan programda DRM22 tepkime mekanizması kullanılmıştır [119].

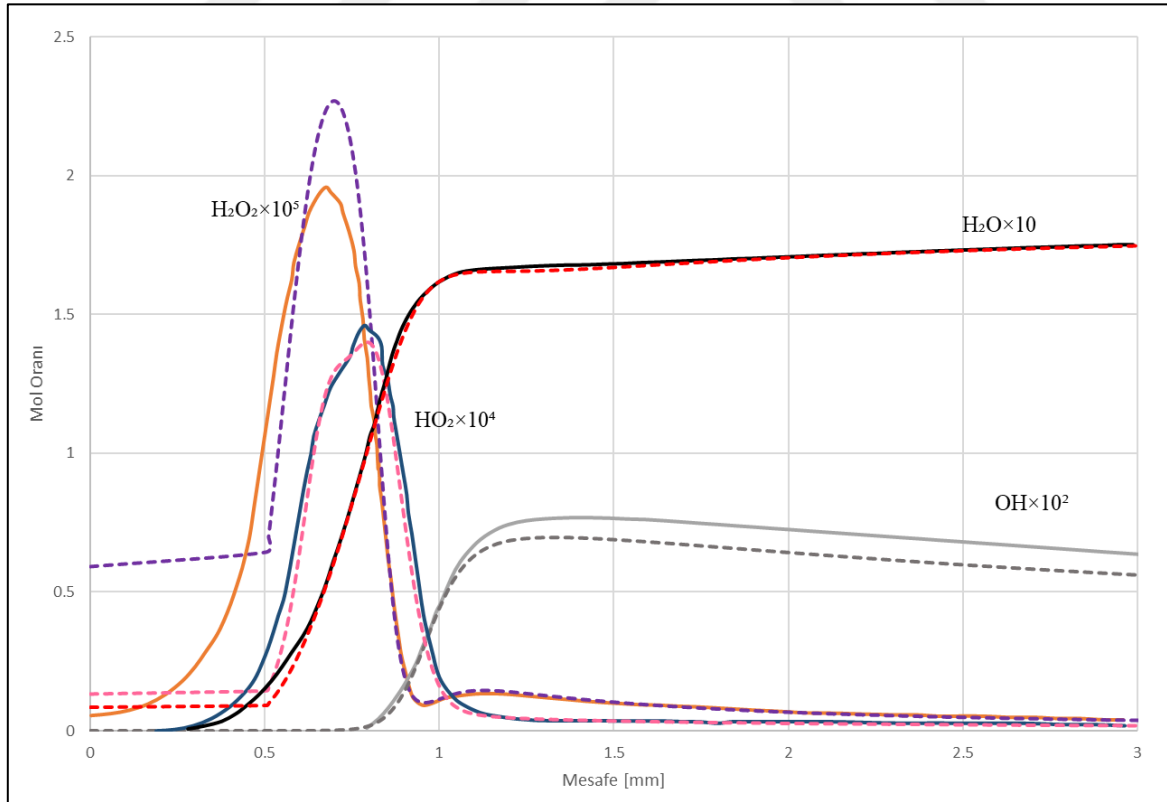
Şekil 5.9 Stokiyometrik metan-hava yanması adaptif düğüm noktası oluşturma ve sıcaklık dağılımı gösterimi. Şekil 5.9 ve Şekil 5.10'de ise Bölüm 3.2.4'de anlatılan adaptif düğüm noktalarının kullanımı sırasıyla sıcaklık ve karbon monoksit bileşeni için verilmiştir. Akış alanı çözümüne geçmeden elde edilen denge çözümü, alev sonu bölgede ilk tahmin olurken, tepkime bölgesinin öncesinde ise giriş koşulları bu tahmini oluşturur. Program kullanıcısının değiştirebildiği ara bölge içinse değişkenlerin doğrusal değiştikleri kabulü ile yaklaşmıştır. Şekillerden de belli olduğu üzere düğüm sayısı arttıkça ilk (kaba) çözümlerde var olan keskin eğriler yerlerini daha köşesiz eğrilere bırakmakla beraber sonlu farklar metodunda kullanılan düğüm sayısı arttıkça beklenen bir ölçüde analitik çözüme de yakınsadığı görülmektedir.



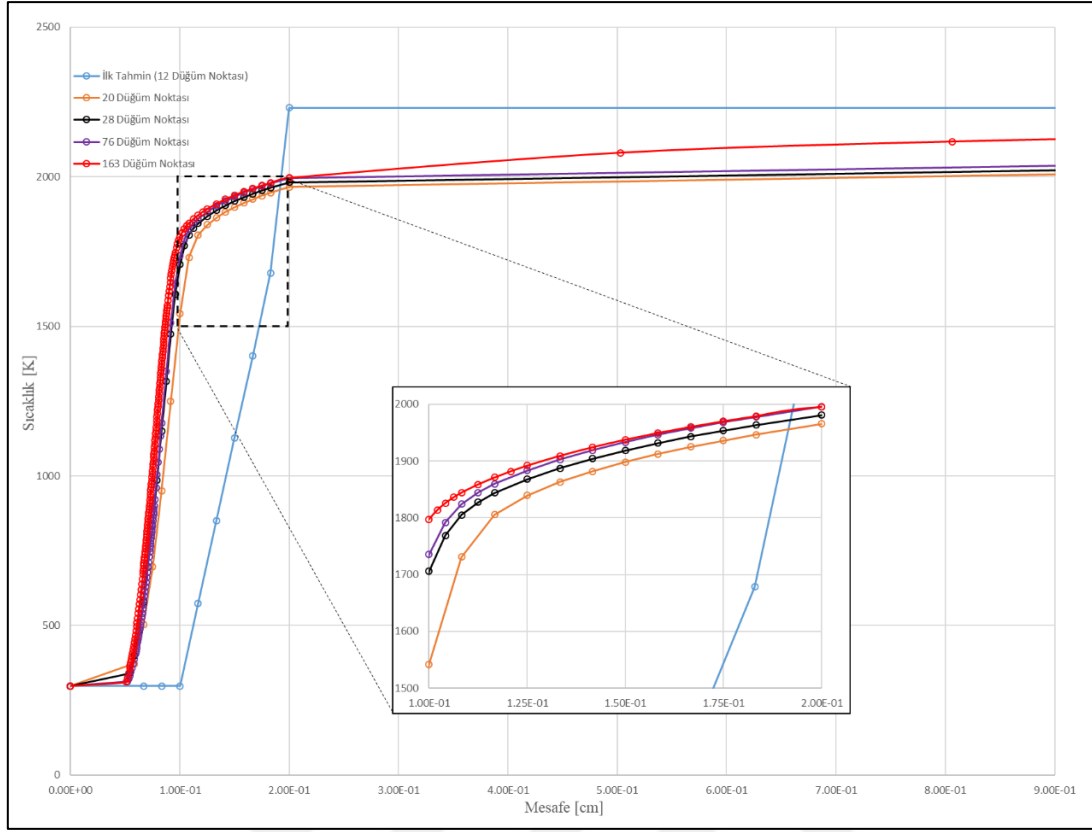
**Şekil 5.6** Stokiyometrik metan yanması için yazılan programdan elde edilen değer ile literatür karşılaştırması (sürekli çizgiler literatür [2], kesikli çizgiler programdan elde edilen sonuçlar).



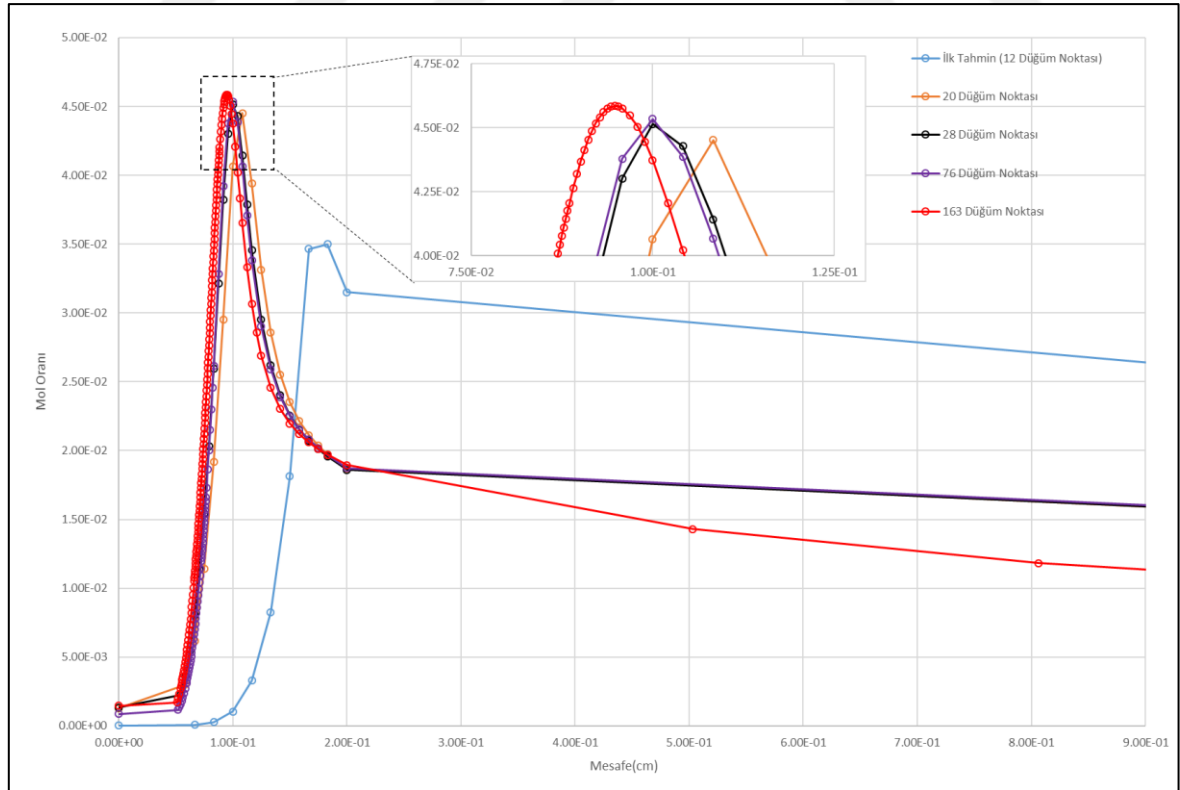
**Şekil 5.7** Stokiyometrik metan yanması için yazılan programdan elde edilen değer ile literatür karşılaştırması (sürekli çizgiler literatür [2], kesikli çizgiler programdan elde edilen sonuçlar).



**Şekil 5.8** Stokiyometrik metan yanması için yazılan programdan elde edilen değer ile literatür karşılaştırması (sürekli çizgiler literatür [2], kesikli çizgiler programdan elde edilen sonuçlar).



Şekil 5.9 Stokiyometrik metan-hava yanması adaptif düğüm noktası oluşturma ve sıcaklık dağılımı gösterimi.



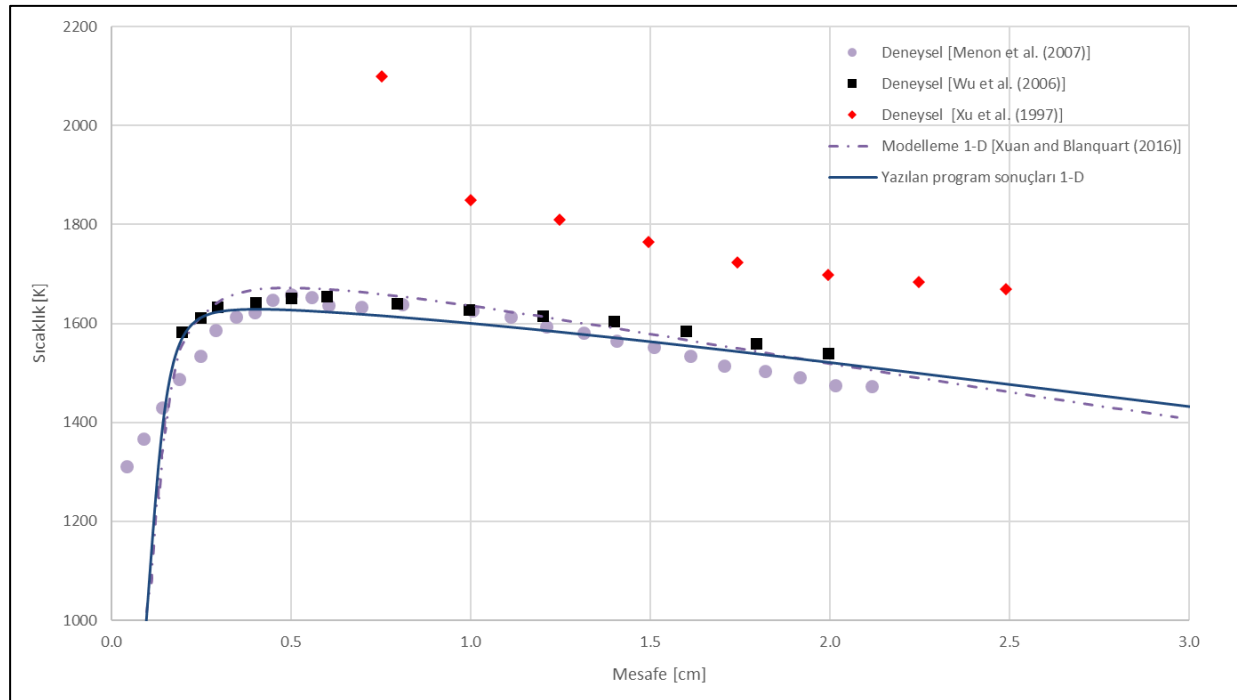
Şekil 5.10 Stokiyometrik metan-hava yanması adaptif düğüm noktası oluşturma ve karbon monoksit mol oranı dağılımı gösterimi.

Şekil 5.11 – Şekil 5.14’de ise Çizelge 5.9’da tanımlanan ön karışımli etilen-hava yanmasının sonuçları literatürden alınan deneysel veriler ve modelleme sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Modellemesi yapılan alev, literatürde hem deneysel sonuçlar hem de modelleme sonuçları için sıkça kullanılan standart bir alevdir [29, 35, 45, 85, 120-122].

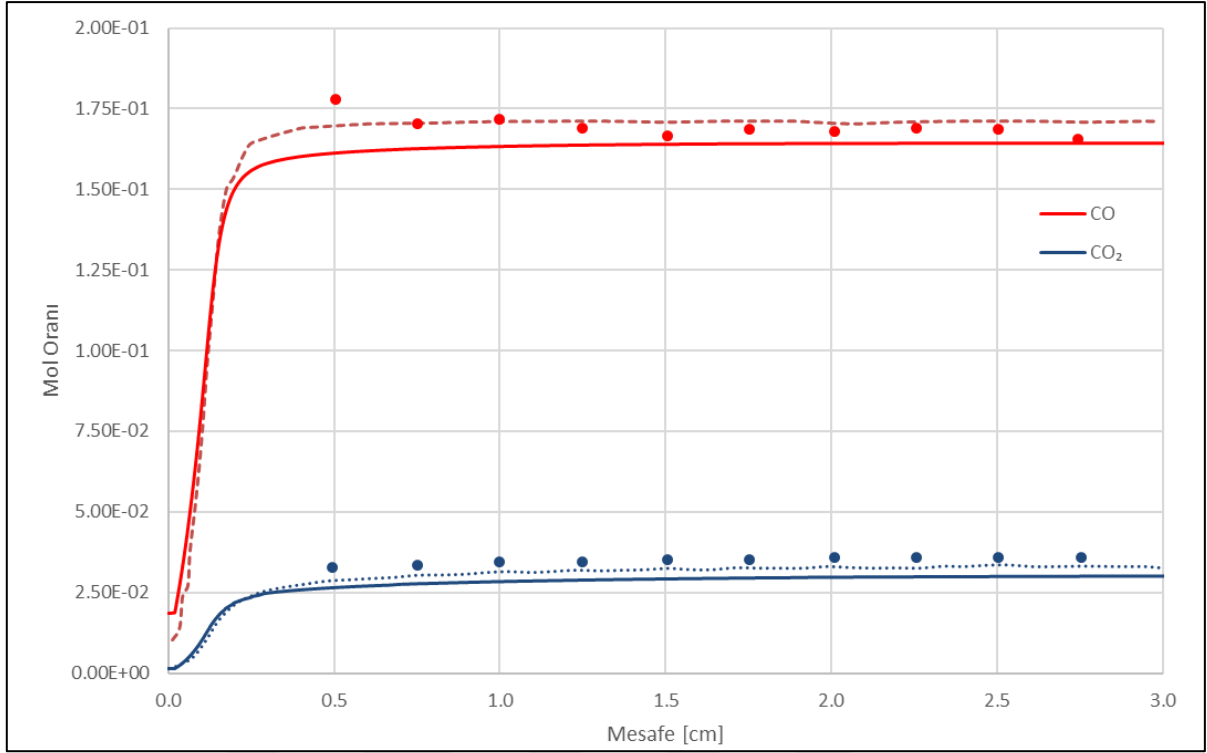
**Çizelge 5.9** Modellenen alevin ilgili parametreleri.

| Karışım                             | Yakıt-hava Eşdeğer Oranı | C/O oranı | Yanmamış Karışım Hızı | Giriş Sıcaklığı | Programda kullanılan mekanizma |
|-------------------------------------|--------------------------|-----------|-----------------------|-----------------|--------------------------------|
| C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> /Hava | 2.34                     | 0.78      | 6.73 cm/s             | 320 K           | San Diego [123]                |

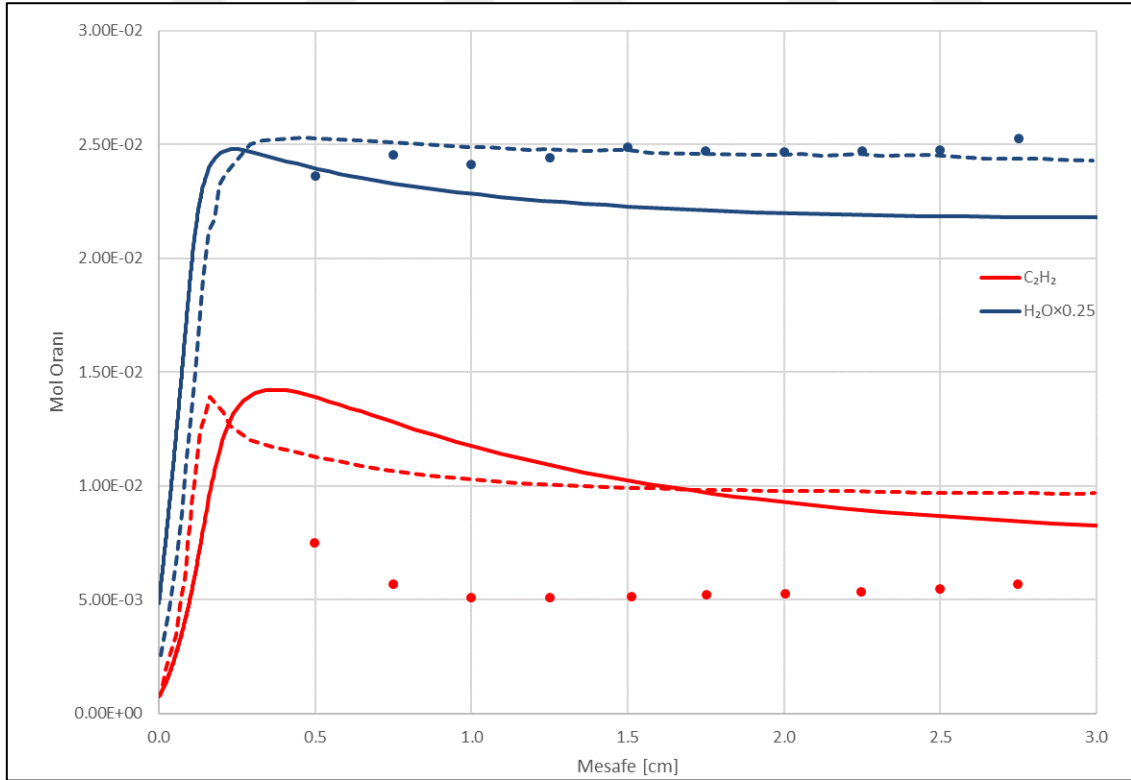
Şekil 5.11’de, etilen-hava karışımının modellemesi sonucunda bulunan sıcaklık dağılımının literatür ile karşılaştırılması sunulmuştur. Yazılan program ile bulunan sıcaklık dağılımı, literatürde bulunan deneysel ve modelleme sonuçları ile uyum içindedir. Sıcaklık dağılımının tepe noktası bir miktar az bulunmuş olsa da (verilen diğer modelleme sonucu ile tepe noktası farkı 44.1 K’dir), özellikle deneysel sonuçların kendi aralarındaki farka oranla kabul edilebilir seviyede kaldığı görülmüştür. Şekil 5.11 – Şekil 5.14’te yanma ana bileşenleri ve is öncülü olarak değerlendirilen asetilen bileşeninin alev boyunca dağılımları literatür değerleri ile birlikte verilmiştir. Görüldüğü üzere sonuçlar birbirleri ile uyumludur.



**Şekil 5.11** Etilen-hava yanması modellemesinin bulunan sıcaklık değerlerinin literatür ile karşılaştırılması.

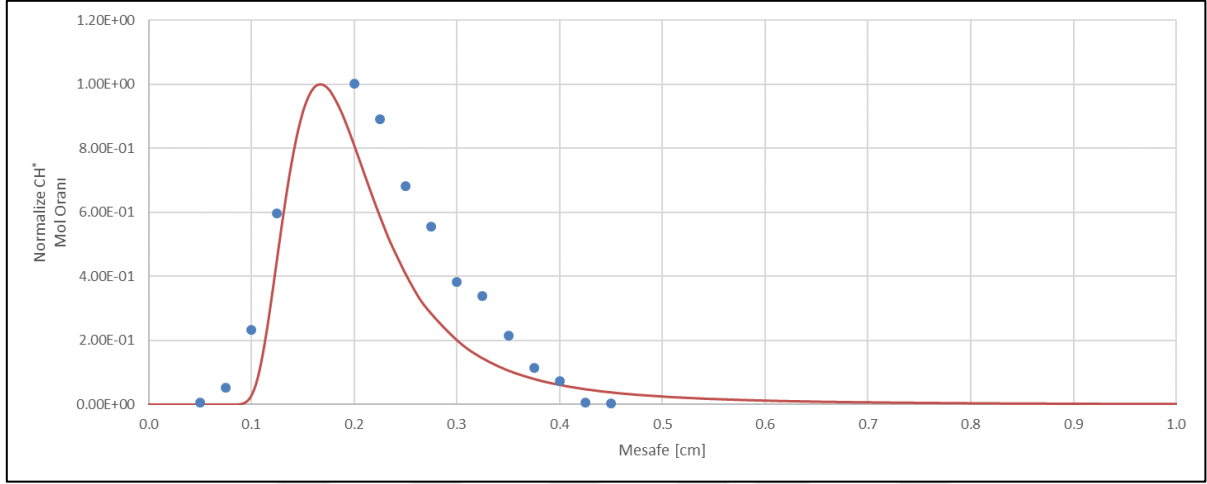


**Şekil 5.12** Karbon monoksit ve karbon dioksit mol oranları (Semboller deneysel [74], kesikli çizgiler modelleme [72], düz çizgiler ise bu çalışmadan elde edilen sonuçları göstermektedir).



**Şekil 5.13** Su buharı (ölçeklendirilmiş) ve asetilen mol oranları (Semboller deneysel [74], kesikli çizgiler modelleme [72], düz çizgiler ise bu çalışmadan elde edilen sonuçları göstermektedir).

CH\* bileşenin akış alanında kimyasal ışıltama (chemiluminescence) yolu ile tespit edilmesi, tepkime bölgesinin tespiti için geçerli bir yöntemdir [124, 125]. Tepkime bölgesi dışında bulunmadığından ve tepkime bölgesinde konsantrasyonunun çok küçük olmasından dolayı şekil gösterimlerinde normalize edilerek gösterilir. Yazılan program ile elde edilen CH\* miktarı da deneysel veriler ile Şekil 5.14'te bu yöntem ile kıyaslanmıştır. Program sonucu elde edilen sonuçlardan reaksiyon bölgesinin de iyi bir şekilde modellendiği görülmüştür.

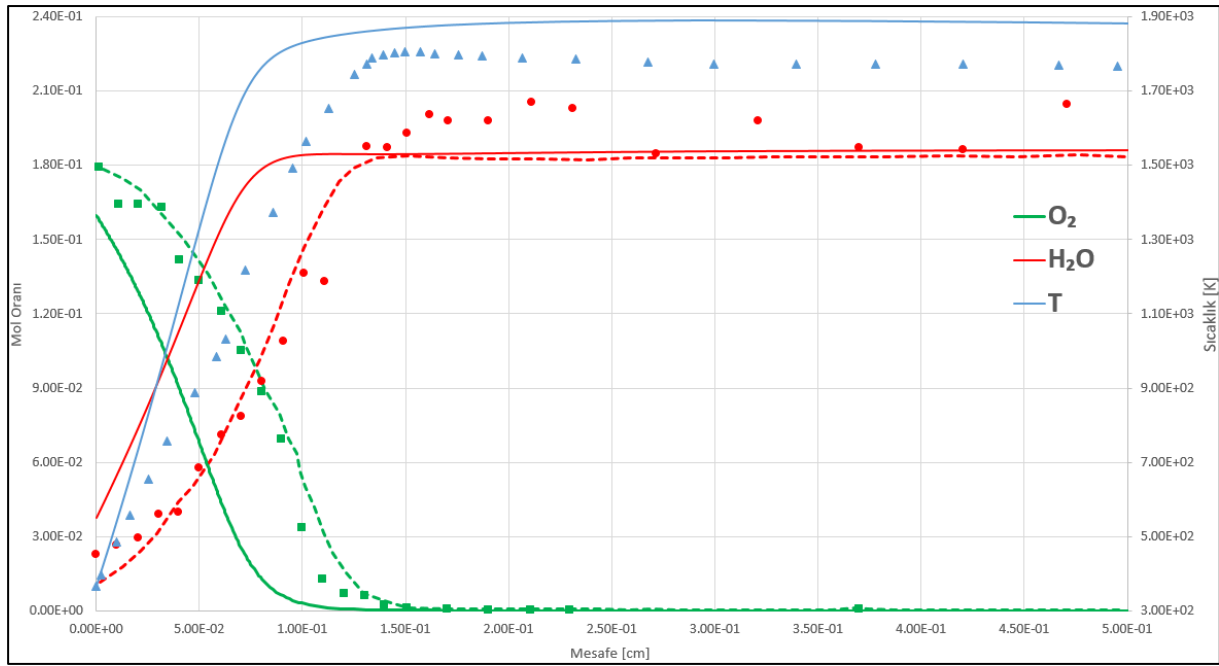


**Şekil 5.14** Yazılan program ile elde edilen normalize edilmiş CH\* mol oranının deneysel sonuçlar ile karşılaştırılması (Noktalar literatürden deneysel verileri [29], düz çizgiler program sonuçlarını göstermektedir).

Çizelge 5.10'da verilen hem deneysel hem de modelleme sonuçları bulunan, farklı yakıtlar ve karışıma eklenen CO<sub>2</sub> miktarları içeren alevler yazılan program ile denenmiştir. Referans kaynakta bulunan modelleme mekanizmalarından farklı bir mekanizma (San Diego mekanizması [123]) kullanılmıştır [126]. Modelleme esnasında iki farklı yöntemle sıcaklık dağılımı kullanılmıştır. İlk kullanılan yöntemde enerji denklemi de çözülürken (sıcaklık dağılımı program tarafından değişken olarak hesaplanırken), ikinci yöntemde ise, kaynakta da olduğu gibi, sıcaklıklar düzeltilmiş deneysel veriler temel alınarak kullanılmıştır. Şekil 5.15'te görüldüğü üzere enerji denklemi çözülerek akış alanında çözüm yapıldığında reaksiyon bölgesi daha kısa mesafede yer almakta olup, ilgilenilen ana bileşenler için deneysel sonuçlara göre sapmalar büyüktür. Fakat Şekil 5.16'da deneysel sıcaklıklar programa girdi olarak verildiğinde bileşen dağılımlarının deneysel sonuçları çok daha iyi gösterdiği gözlenmiştir. Modelleme esnasında eğer varsa ölçülen sıcaklık dağılımlarının kullanılması önerilmekle beraber, çeşitli fiziksel ve deneysel kısıtlar ve belirsizlikler ölçülen sıcaklıklar için (özellikle tepe noktalarda) 200 K'e varan düzeltmeler gerektiğini göstermektedir [24, 32, 127-130].

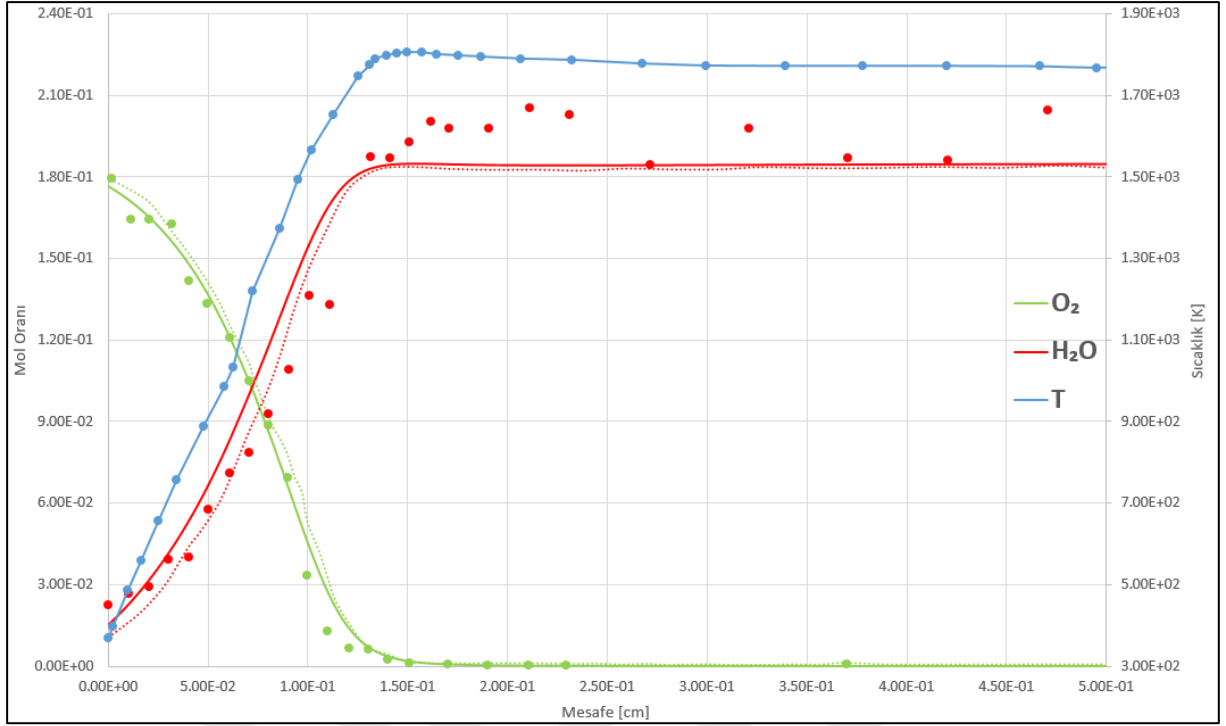
**Çizelge 5.10** Literatürden deneysel ve modelleme sonuçları karşılaştırılan alevlerin parametreleri [126].

| Alev Adı  | Giriş koşulları bileşen mol oranları |                               |                 |                |                | Giriş Hızı<br>(cm/s) | Yakıt-hava eşdeğer oranı ( $\Phi$ ) |
|-----------|--------------------------------------|-------------------------------|-----------------|----------------|----------------|----------------------|-------------------------------------|
|           | CH <sub>4</sub>                      | C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> | CO <sub>2</sub> | O <sub>2</sub> | N <sub>2</sub> |                      |                                     |
| Shmakov-1 | 0.111                                | -                             | -               | 0.186          | 0.703          | 16.0                 | 1.2                                 |
| Shmakov-2 | 0.111                                | -                             | 0.15            | 0.186          | 0.553          | 7.25                 |                                     |
| Shmakov-3 | -                                    | 0.048                         | -               | 0.2            | 0.752          | 40.2                 |                                     |
| Shmakov-4 | -                                    | 0.048                         | 0.15            | 0.2            | 0.602          | 20.1                 |                                     |

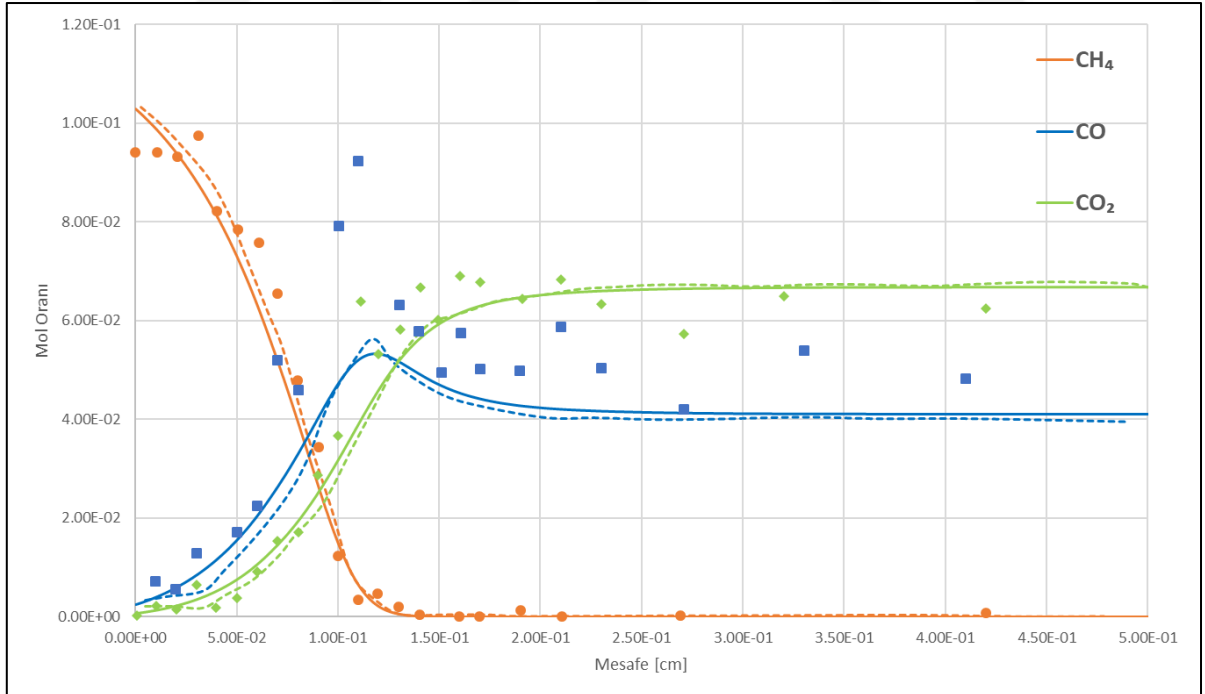


**Şekil 5.15** Shmakov-1 alevinin, enerji denklemiyle beraber çözülerek, sıcaklık dağılımı, oksijen ve su buharı için mol oranları (Semboller ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [126] alınan deneysel ve modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

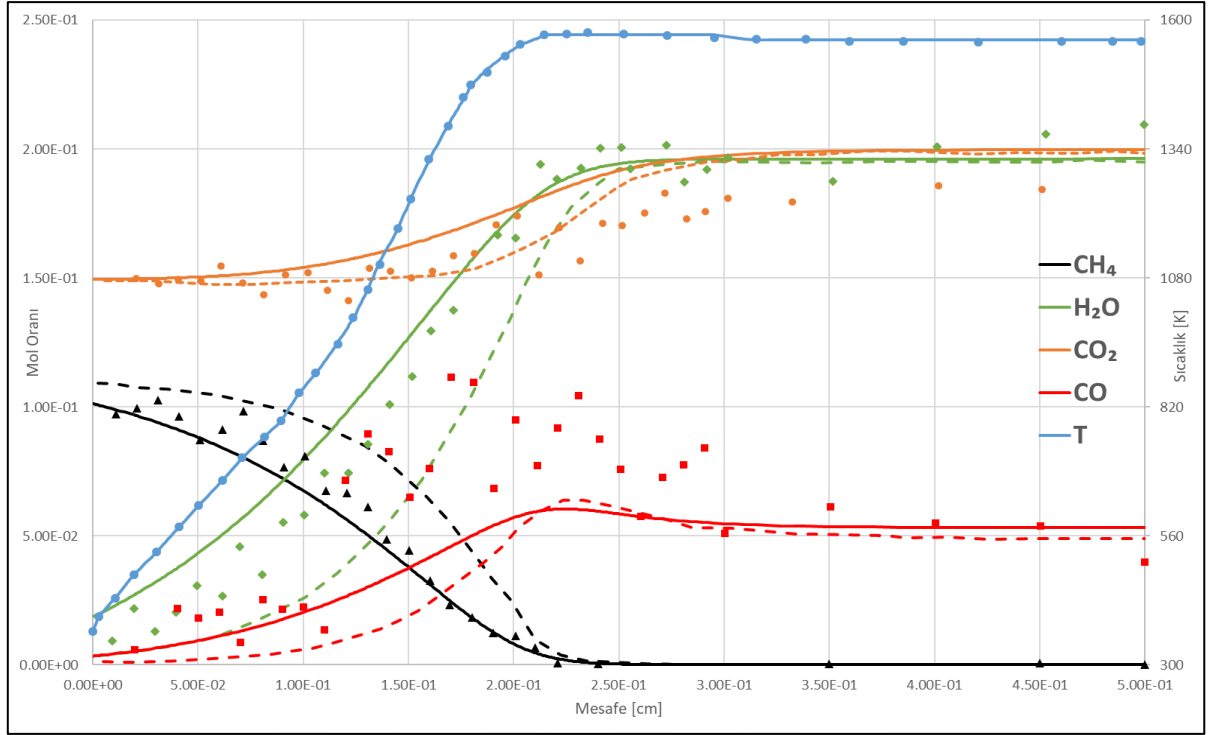
Şekil 5.16'da elde edilen modelleme sonuçları neticesinde Çizelge 5.10'da verilen Shmakov-1 ve Shmakov-2 alevleri için modellemeler deneysel sıcaklık dağılımları programa girdi olarak verilerek, sonuçları Şekil 5.17 –Şekil 5.21'de sunulmuştur. Kaynak referanstan alınan modelleme sonuçları GRI-Mech 3.0 ile yapılan analiz sonuçlarıdır [126]. Bu çalışma kapsamında yazılan program ile elde edilen sonuçlar genel olarak deneysel ve kaynaktaki referans modelleme sonuçları ile örtüşmektedir. Şekil 5.22 ve Şekil 5.23'te Shmakov-3 alevinin modelleme sonuçlarının literatür ile karşılaştırılması verilmiştir.



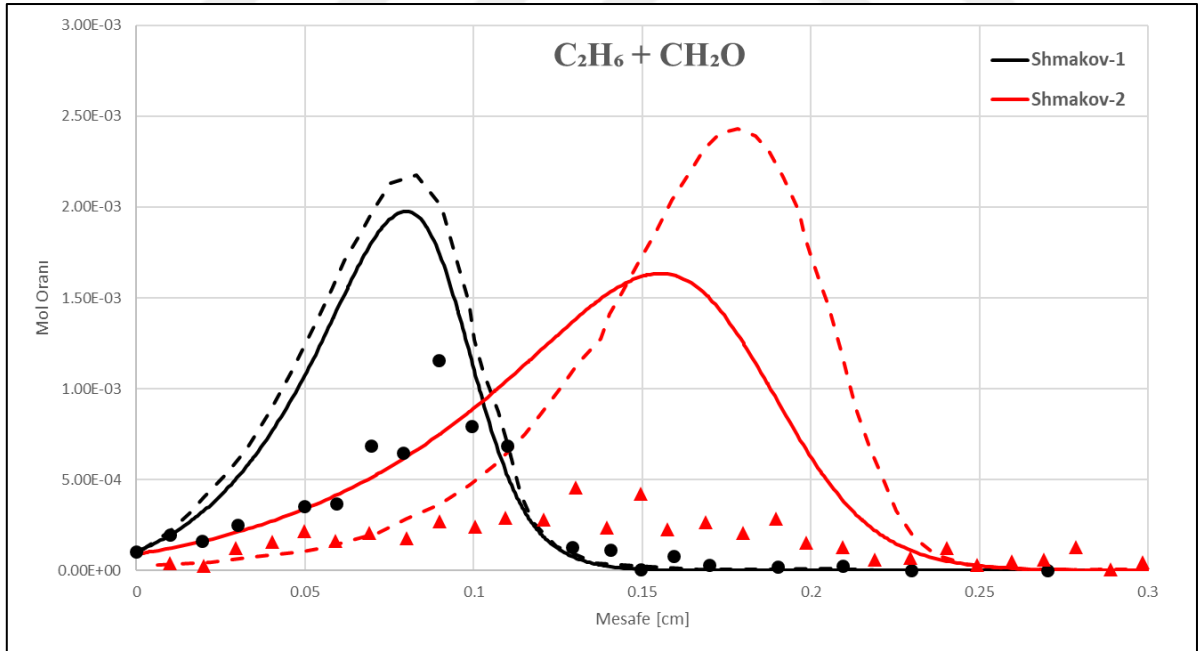
**Şekil 5.16** Shmakov-1 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, sıcaklık dağılımı, oksijen ve su buharı için mol oranları (Semboller ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [126] alınan deneysel ve modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).



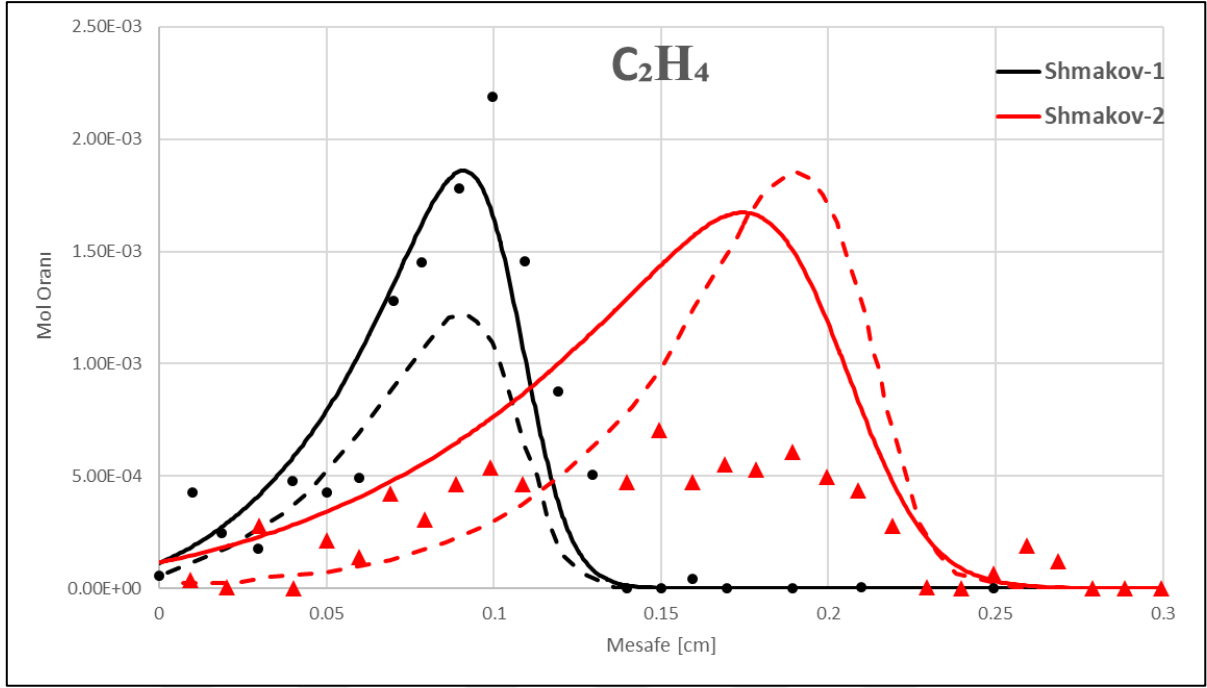
**Şekil 5.17** Shmakov-1 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, sıcaklık dağılımı, oksijen ve su buharı için mol oranları (Semboller ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [126] alınan deneysel ve modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).



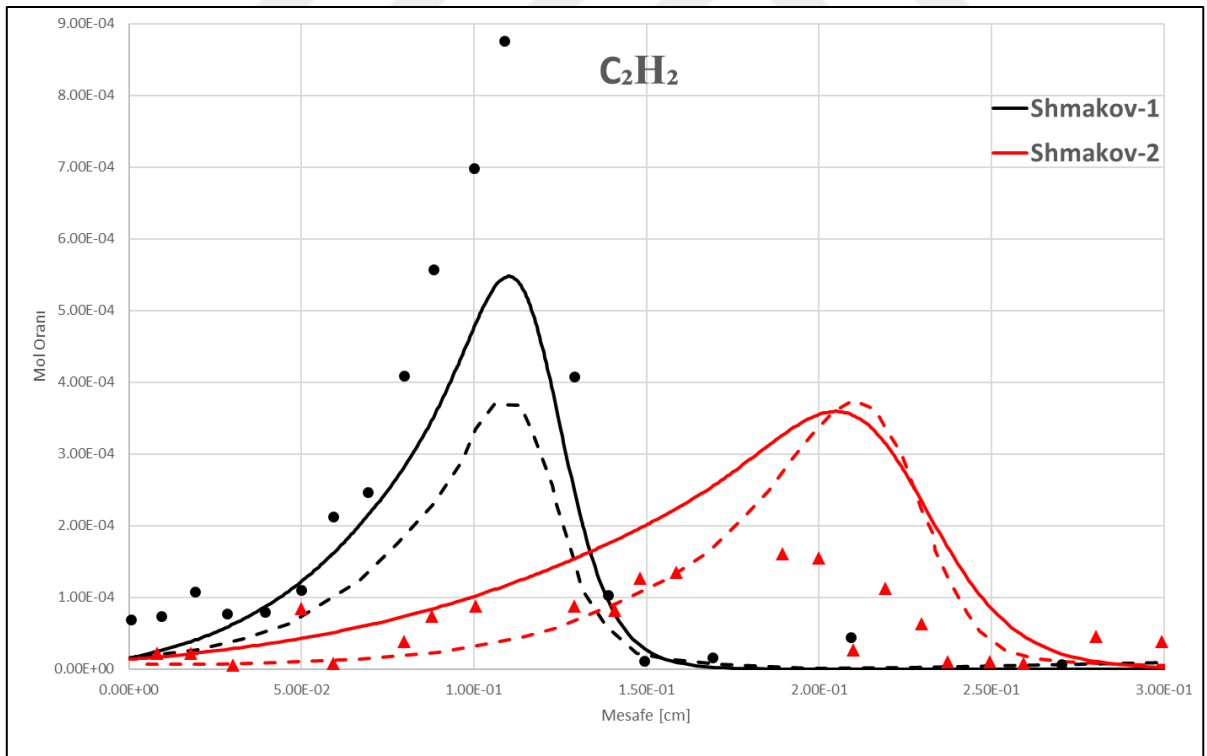
**Şekil 5.18** Shmakov-2 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, sıcaklık dağılımı, yanma ana bileşenleri için mol oranları (Semboller ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [126] alınan deneysel ve modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).



**Şekil 5.19** Shmakov-1 ve Shmakov-2 alevlerinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, etan ve formaldehit toplam mol oranları (Semboller ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [126] alınan deneysel ve modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

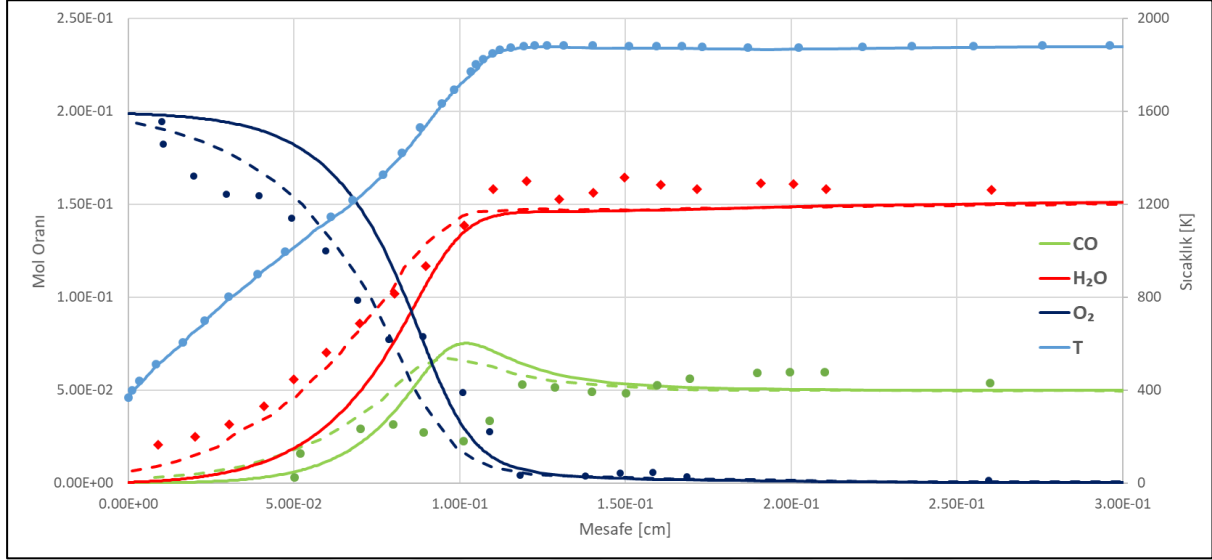


**Şekil 5.20** Shmakov-1 ve Shmakov-2 alevlerinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, etilen mol oranları (Semboller ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [126] alınan deneysel ve modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

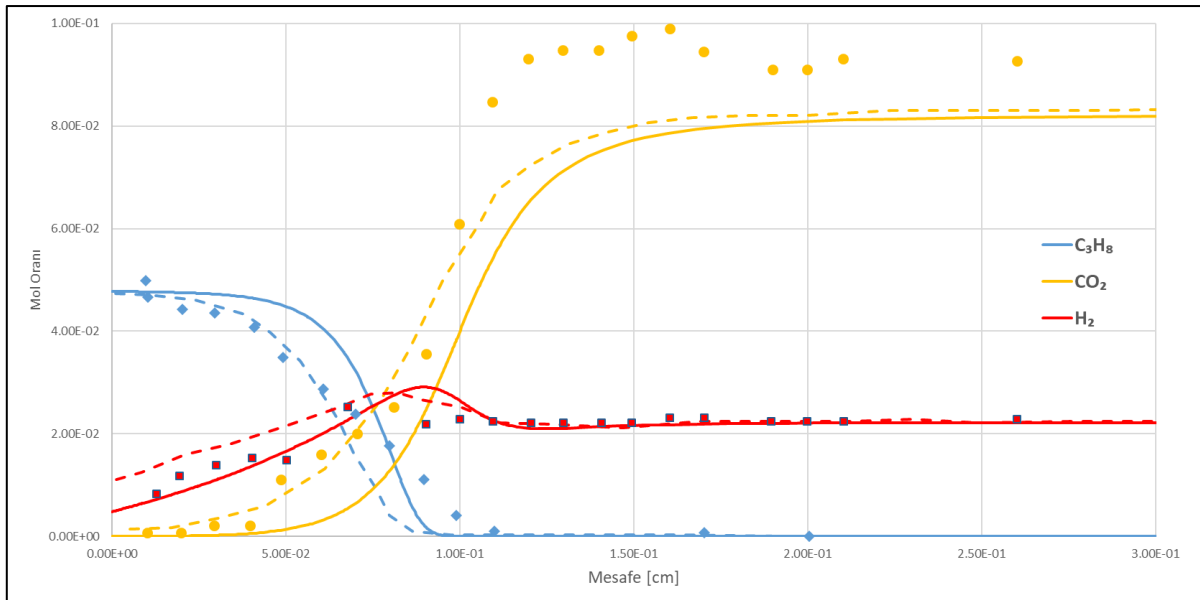


**Şekil 5.21** Shmakov-1 ve Shmakov-2 alevlerinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, asetilen mol oranları (Semboller ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [126] alınan deneysel ve modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

Shmakov-3 alevi için karşılaştırmalarda yer verilen literatür modellemesinde kullanılan mekanizma, Konnov mekanizmasıdır [126, 131]. Bu çalışmaya özgün olarak ise San Diego [123] mekanizması kullanılmıştır. Şekillerden görüldüğü üzere, Konnov mekanizması ile propan ( $C_3H_8$ ) yanmasının modellemesi San Diego mekanizmasına göre deneysel verileri daha iyi ifade etmiştir.

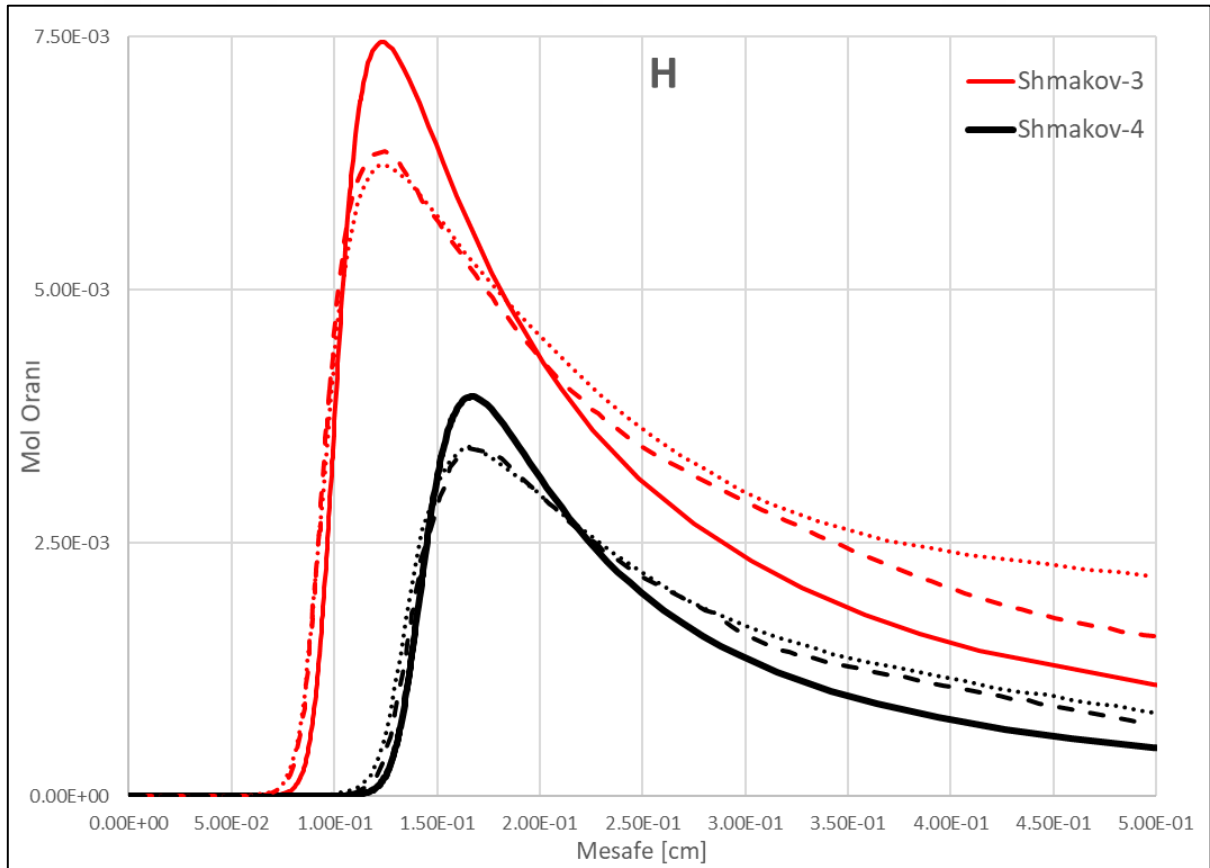


**Şekil 5.22** Shmakov-3 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, genel yanma bileşenleri mol oranları (Semboller ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [126] alınan deneysel ve modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

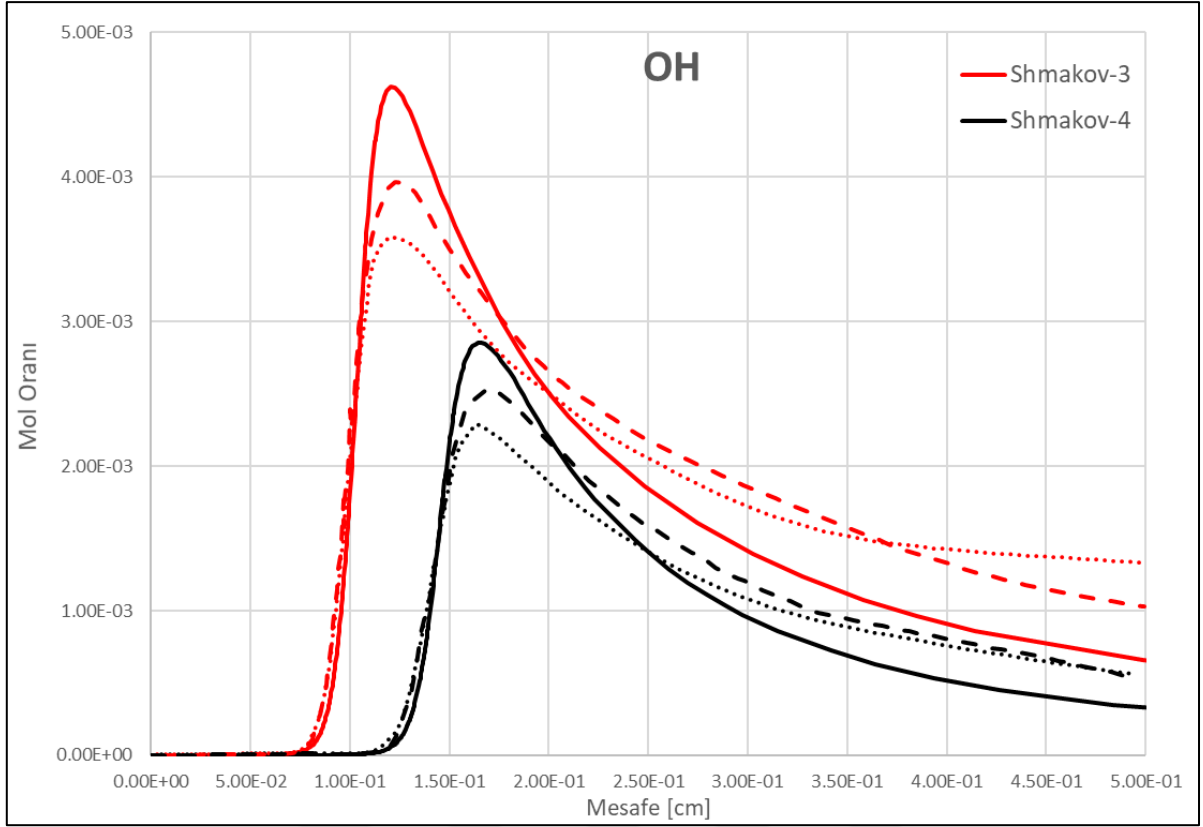


**Şekil 5.23** Shmakov-3 alevinin, deneysel sıcaklık verileri girdisiyle, genel yanma bileşenleri mol oranları (Semboller ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [126] alınan deneysel ve modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

Şekil 5.24 ve Şekil 5.25’de ise Shmakov-3 ve Shmakov-4 alevlerinde hidrojen atomu ve hidroksil molekülünün alev içindeki mol dağılımları literatürden alınan modelleme sonuçları ile birlikte verilmiştir. Her ne kadar bu çalışmada yapılan modelleme sonuçlarının tepe noktaları diğer verilen sonuçlardan bir miktar fazla olsa da, bahsi geçen bileşenlerin alev içindeki dağılımları çok benzer çıkmıştır. Tepe noktalarının farklı olmasının ana sebebi ise kullanılan yanma mekanizmalarının farklarıdır. Referans alınan kaynakta Shmakov-3 ve Shmakov-4 alevleri için kullanılan mekanizmalar AramcoMech 1.3 (253 bileşen, 155 tersinmez – 1444 tersinir tepkime) ve Konnov v0.5 (127 bileşen, 49 tersinmez – 1158 tersinir tepkime) mekanizmalarıdır [131, 132]. Aynı alevler için bu çalışmada San Diego (38 bileşen, 180 tersinir tepkime) [123] mekanizması kullanılmıştır.



**Şekil 5.24** Shmakov-3 ve Shmakov-4 alevleri için hidrojen atomunun mol oranı (Noktalı ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [81] alınan Konnov v0.5 ve AramcoMech 1.3 ile yapılan modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

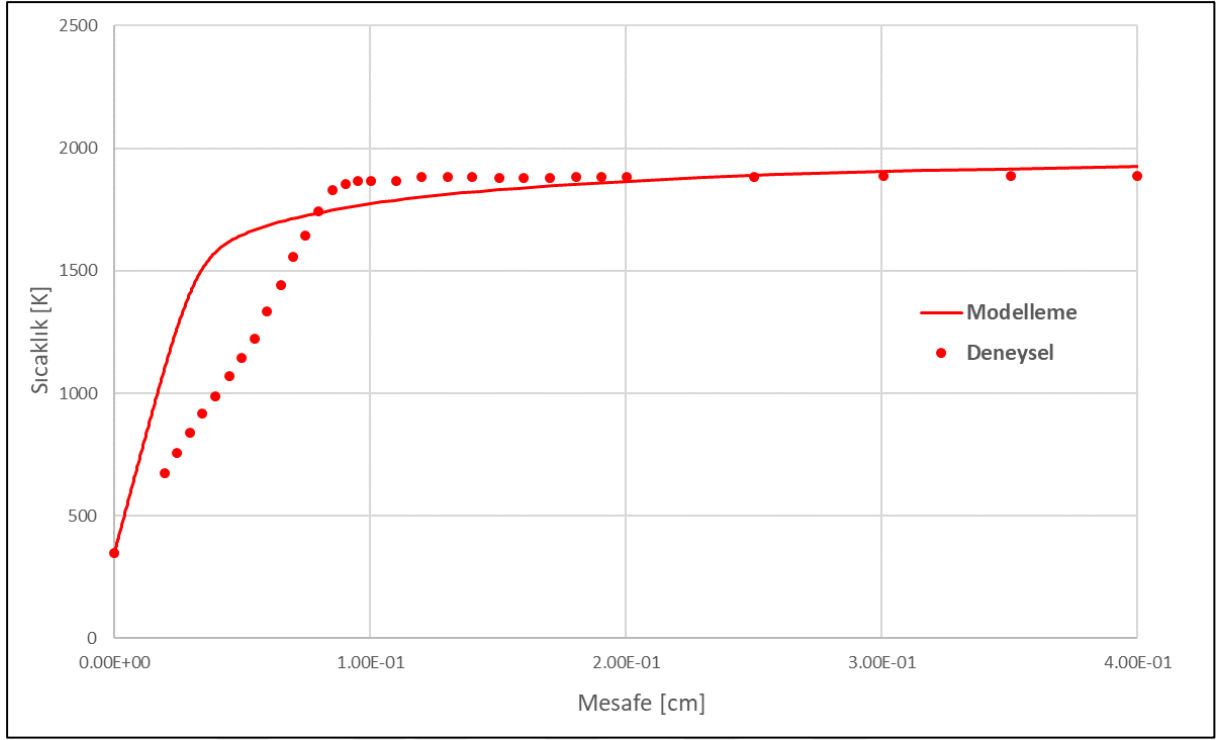


**Şekil 5.25** Shmakov-3 ve Shmakov-4 alevleri için hidroksil molekülünün mol oranı (Noktalı ve kesikli çizgiler sırasıyla literatürden [81] alınan Konnov v0.5 ve AramcoMech 1.3 ile yapılan modelleme verilerini, düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

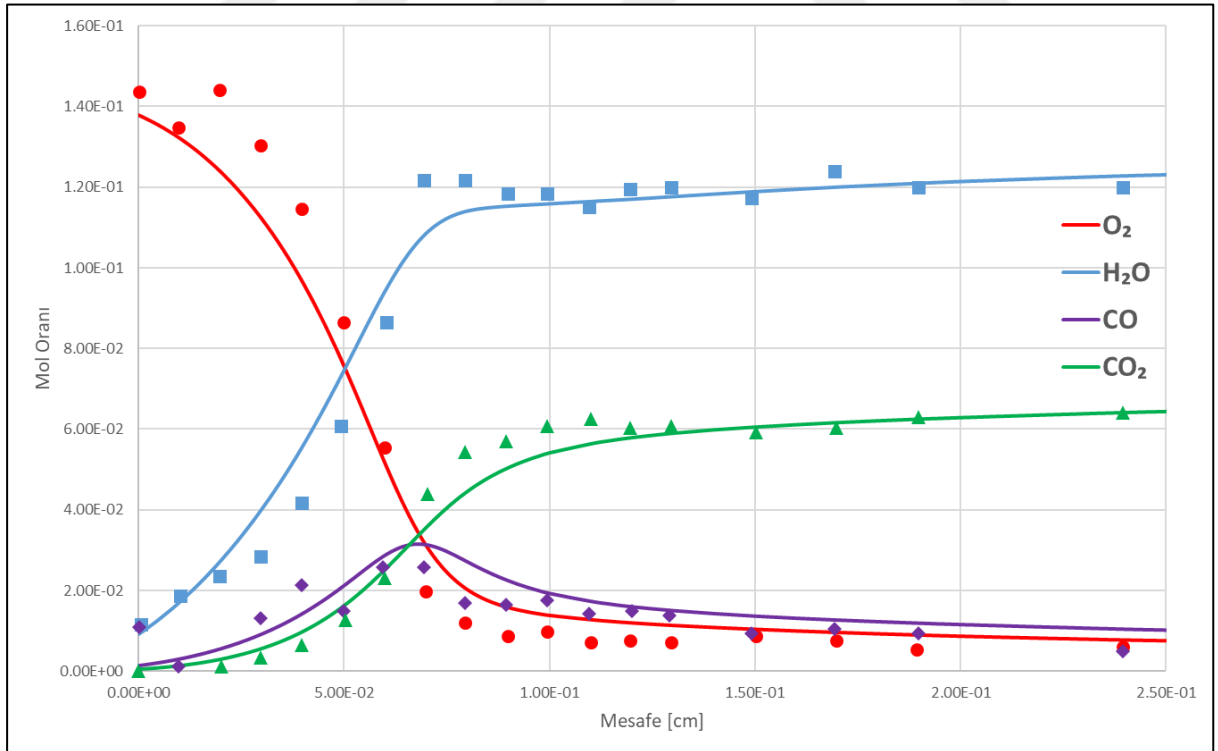
Literatürde bulunan ve Çizelge 5.11’de modelleme parametreleri verilen alevin yazılan program ile enerji denklemi de çözdürülerek bulunan sıcaklık dağılımı ve deneysel sıcaklık dağılımı [25] Şekil 5.26’da verilmiştir. Görüldüğü üzere modellenen alevin deneysel sonuçlara göre ön ısınma ve reaksiyon bölgesinin daha erken tamamlandığı, reaksiyon sonrası bölgesinde ise deneysel sonuçlar ile tam olarak uyum sağladığı gözlenmiştir. Bileşen dağılımı gibi analiz sonuçlarını, deneysel veriler ile karşılaştırılacağı düşünüldüğünde, modellemede (verilerin alındığı kaynakta da, modelleme, enerji denklemini çözmeden gerçekleştirilmiştir) deneysel sıcaklıkları kullanmak gerekmiştir.

**Çizelge 5.11** Analizi yapılan alevin parametreleri.

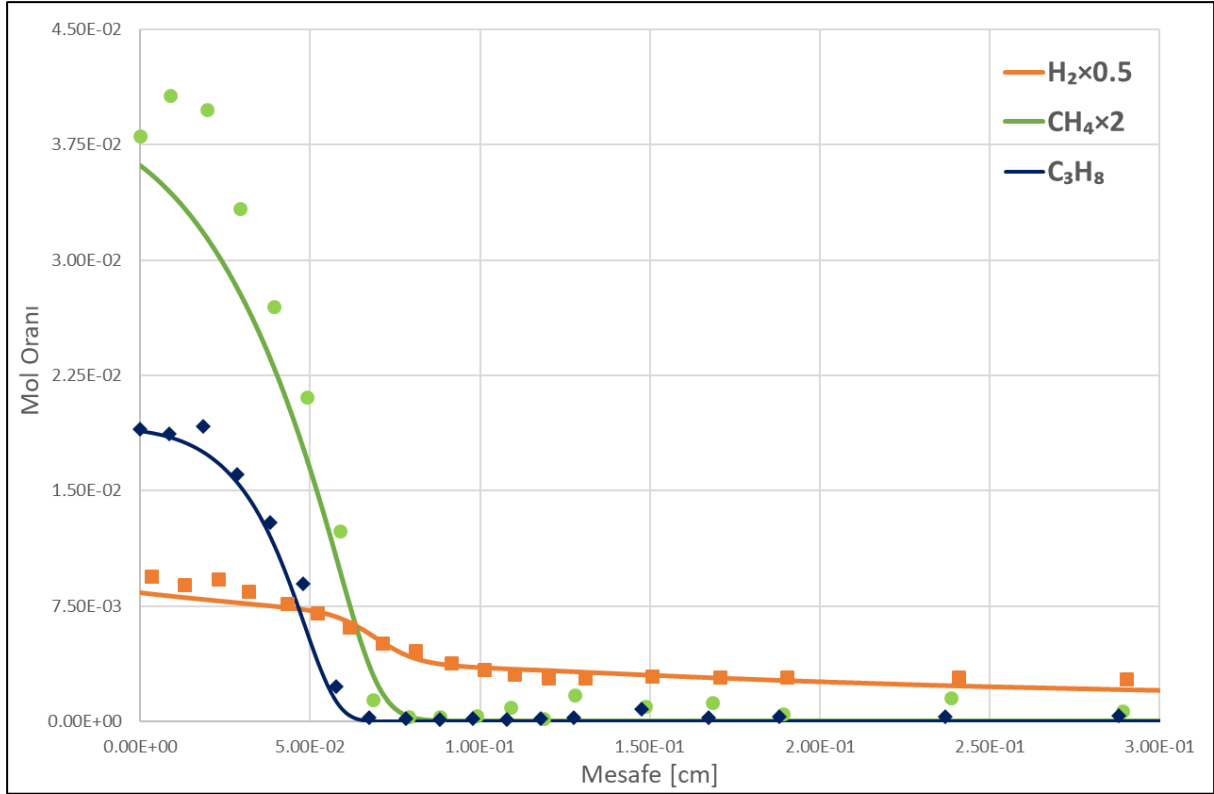
| Alev Adı | Yakıt<br>hava<br>Eşdeğer<br>Oranı | Gaz Karışımının Mol Oranları |        |          |       |       | Giriş<br>Sıcaklığı<br>[K] | Giriş Hızı<br>[cm/s] |
|----------|-----------------------------------|------------------------------|--------|----------|-------|-------|---------------------------|----------------------|
|          |                                   | $H_2$                        | $CH_4$ | $C_3H_8$ | $O_2$ | $Ar$  |                           |                      |
| Novo-1   | 1.0                               | 0.019                        | 0.019  | 0.019    | 0.143 | 0.800 | 348                       | 23.2                 |



**Şekil 5.26** Novo-1 alevinin deneysel sıcaklık verileri ile modelleme sonuçlarının karşılaştırılması (Enerji denklemi çözülerek).



**Şekil 5.27** Novo-1 alevinin modellenmesi ile elde edilen ana bileşenlerin, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi (Semboller deneysel verileri [25], çizgiler modelleme sonuçlarını göstermektedir).



**Şekil 5.28** Novo-1 alevinin yakıtı oluşturan bileşenlerin mol dağılımlarının gösterimi (Semboller deneysel verileri [25], çizgiler modelleme sonuçlarını göstermektedir).

Şekil 5.27 ve Şekil 5.28’de yapılan modellemenin deney sonuçlarını doğru bir şekilde tekrarladığı görülmüştür.

## 5.4 İS OLUŞUMUNUN İNCELENMESİ

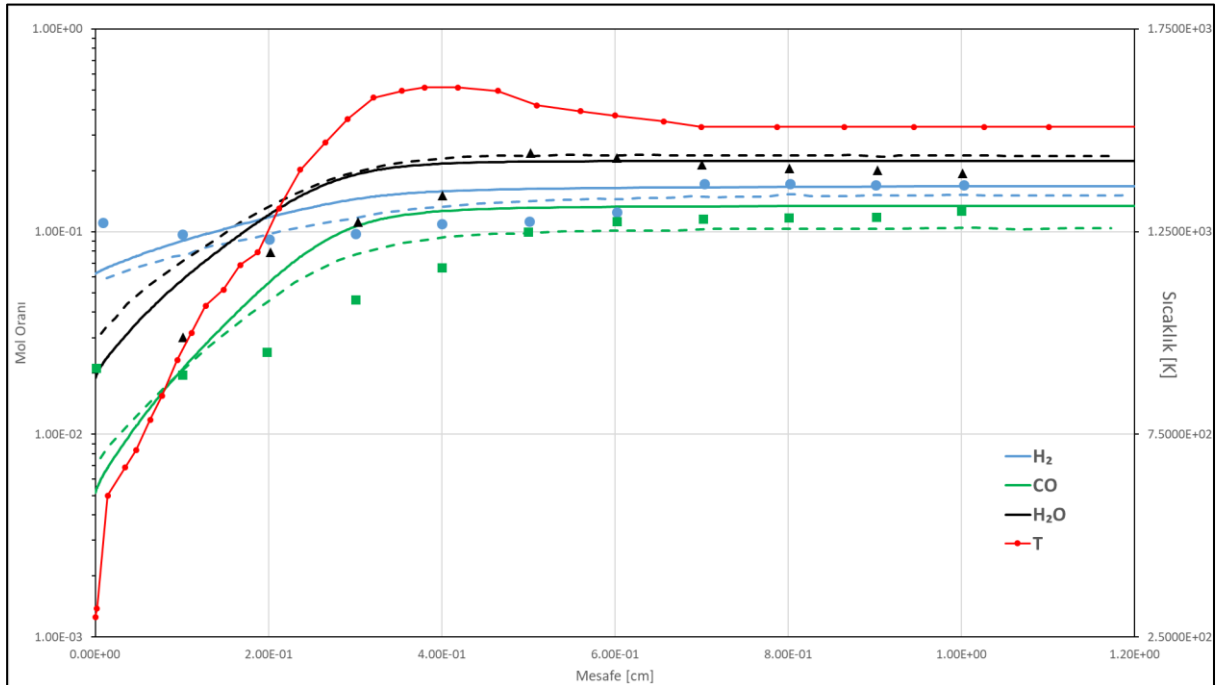
BÖLÜM 5’te bu noktaya kadar taşınım büyüklüklerinin hesaplanması, denge çözümü, adyabatik alev sıcaklığı ve yanma olayının akış alanı içinde tanımlanıp çözülmesi ele alınarak, yazılan program ile yapılan bu hesaplamaların literatür ile uyum içinde gerçekleştirildiği gösterilmiştir. İS oluşumu da söz edilen hesaplamaların ardından bu bölümde ele alınmıştır. Modellemesi yapılan alevlerin seçiminde literatürde sıkça kullanılan alevler olmalarına dikkat edilmesinin yanı sıra farklı içerikli yakıt karışımları (yakıt-hava, yakıt-oksijen, yakıt-oksijen-argon), farklı mekanizmalar ile denenmiş ve uyumları literatür ile karşılaştırılmıştır.

İlk olarak Çizelge 5.12’de parametreleri sunulan üç farklı alev incelenmiştir. Alevin modellenmesinde küçük hidrokarbon yakıtlar için geliştirilen FFCM-1 mekanizması kullanılmıştır [133].

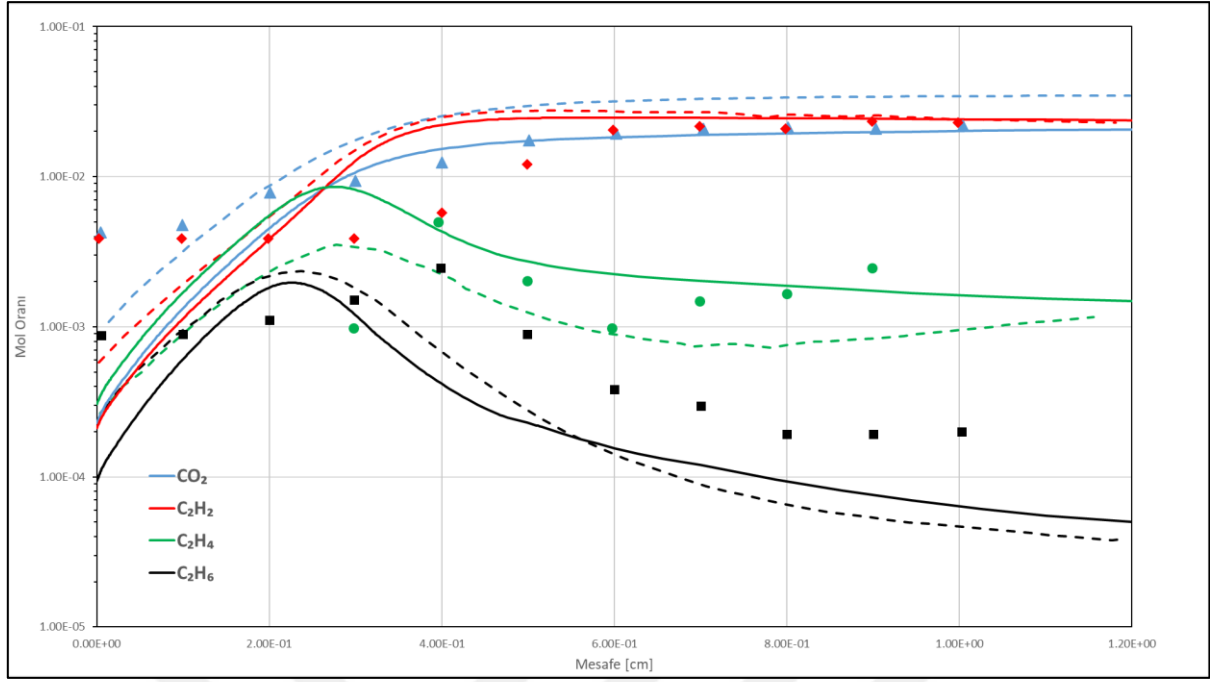
**Çizelge 5.12** İncelenen alevlerin parametreleri ([32]'den değiştirilerek).

| Alev Adı | Kütle Akışı (g/cm <sup>2</sup> s) | Basınç (bar) | Karışım (mol %) |                |                      | $\Phi$ | Kaynak         |
|----------|-----------------------------------|--------------|-----------------|----------------|----------------------|--------|----------------|
|          |                                   |              | CH <sub>4</sub> | O <sub>2</sub> | N <sub>2</sub> - Ar  |        |                |
| Slav-1   | 6.60E-03                          | 1            | 0.3108          | 0.2391         | 0.450 Ar             | 2.60   | [32, 134]      |
| Slav-2   | 5.80E-03                          |              | 0.5560          | 0.4440         | -                    | 2.50   | [32, 135, 136] |
| Slav-3   | 1.37E-02                          |              | 0.5560          | 0.4160         | 0.028 N <sub>2</sub> | 2.67   | [32, 137]      |

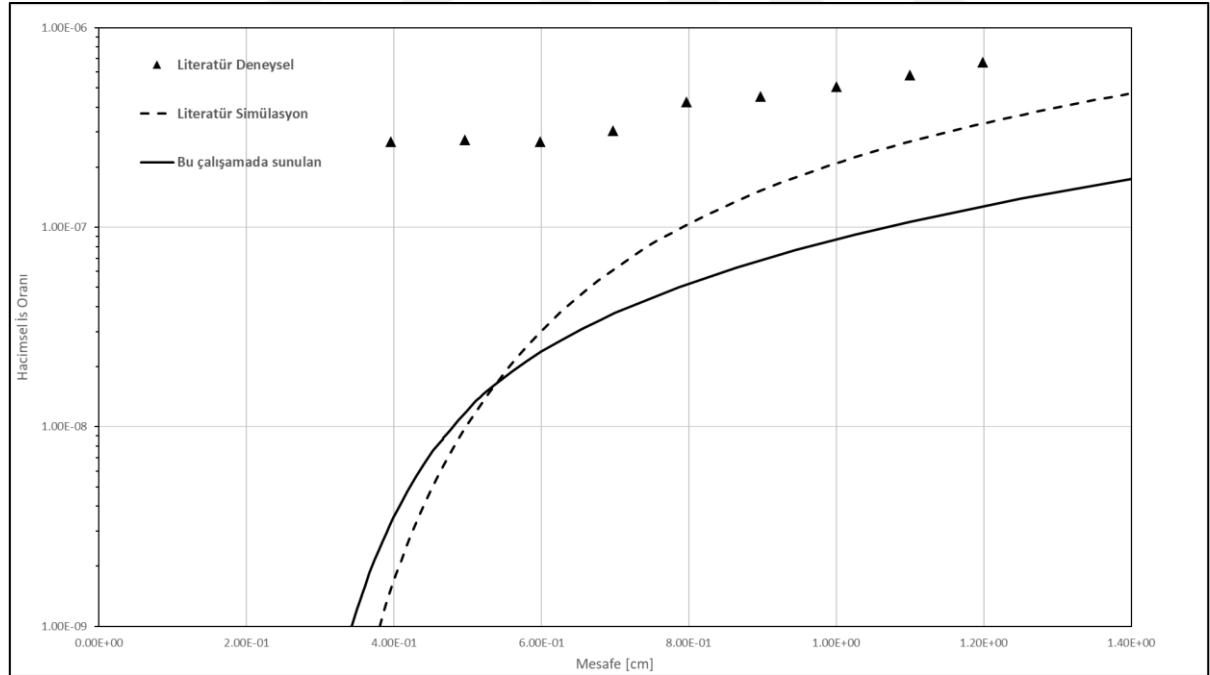
Slav-1 olarak adlandırılan alevin modelleme sonuçları Şekil 5.29 – Şekil 5.31’de verilmiştir. Yapılan modellemede her üç alev için enerji denklemi çözülmemiş, sıcaklık değerleri referans kaynaktan alınmıştır. Şekil 5.29 ve Şekil 5.30’da akış alanı boyunca bazı bileşenlerin mol oranları, Şekil 5.31’de ise hacimsel is oranı verilmiştir. Elde edilen sonuçlar incelendiğinde genel olarak sonuçların uyumlu oldukları gözlenmiştir. Karbon monoksit için bu çalışma sonucu bulunan değerler deneysel verilere daha az uyumlu olmakla beraber, etilen için literatürden alınan modelleme sonuçlarına göre deney sonuçlarına daha uyumludur. İs oluşumu gözlemlendiğinde ise yazılan programla elde edilen sonuçlar hem deneysel verilere hem de referans modelleme sonuçlarına göre bir miktar az olsa da oluşum bölgesini ve is miktarındaki değişimi yakaladığı söylenebilir.



**Şekil 5.29** Slav-1 alevinin modellenmesi ile elde edilen ana bileşenlerin, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi (Semboller deneysel verileri [134], kesikli çizgiler literatür modelleme sonuçlarını [32], düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).



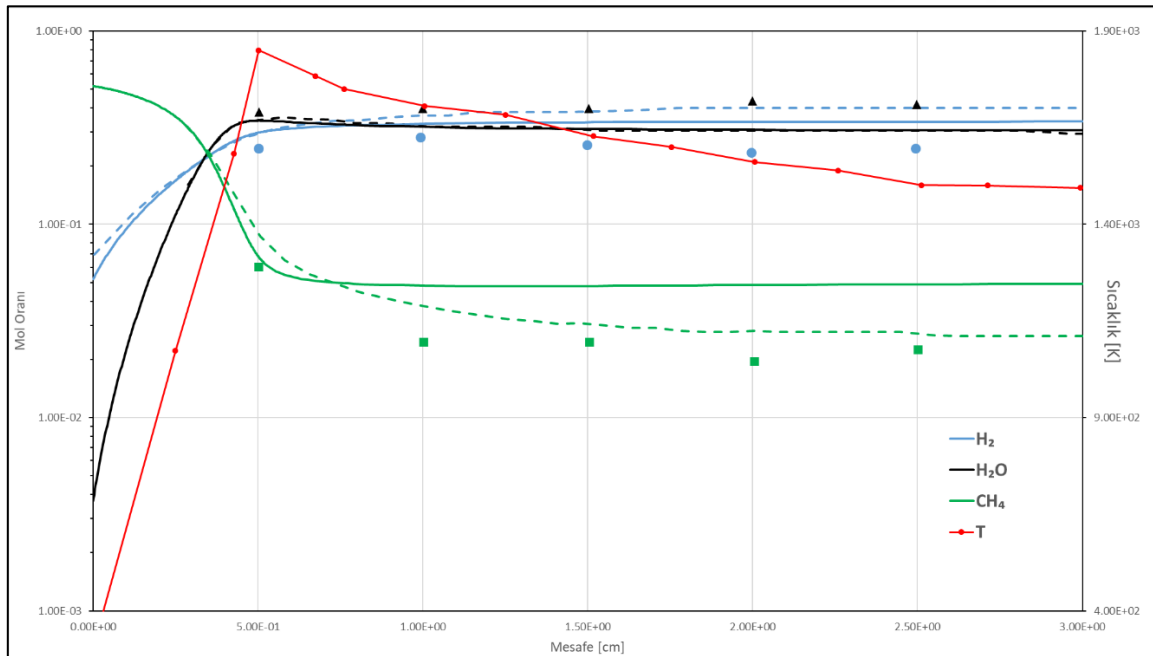
**Şekil 5.30** Slav-1 alevinin modellenmesi ile elde edilen bazı bileşenlerin mol oranlarının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi (Semboller deneysel verileri [134], kesikli çizgiler literatür modelleme sonuçlarını [32], düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).



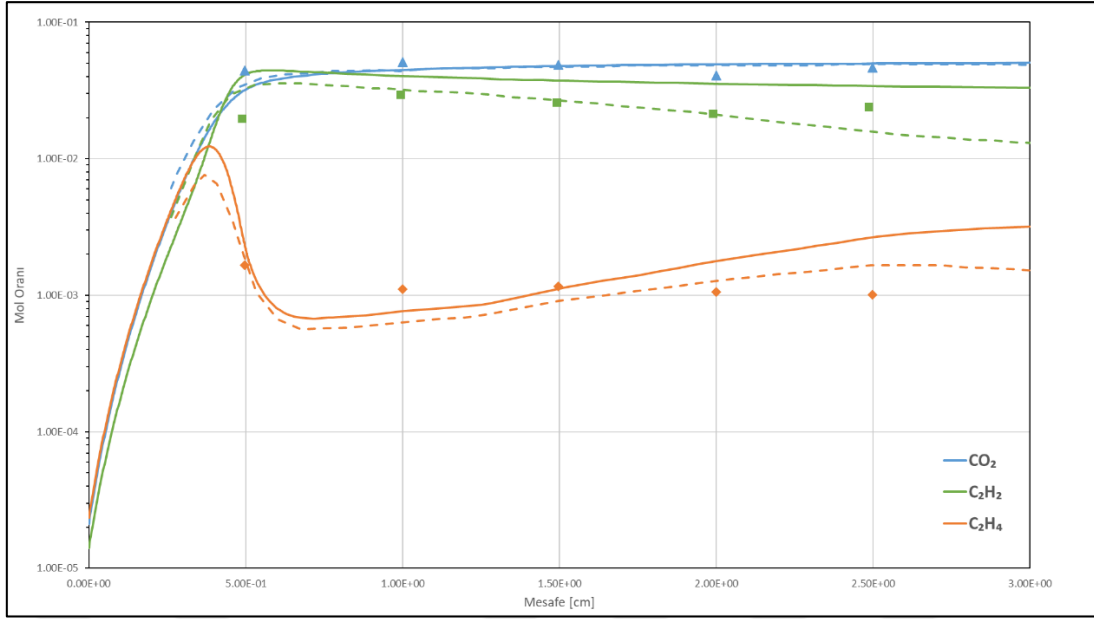
**Şekil 5.31** Slav-1 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki hacimsel is oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi (Semboller deneysel verileri [134], kesikli çizgiler literatür modelleme sonuçlarını [32], düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

Slav-2 alevinin elde edilen sonuçları Şekil 5.33 ve Şekil 5.34’te paylaşılmıştır. Sonuçlar uyumlu olmakla beraber, bileşen dağılımları açısından literatürden alınan modelleme sonuçlarının deneysel verileri daha iyi tekrarladığı söylenebilir. Aradaki bu fark modellemede kullanılan farklı mekanizmalardan kaynaklandığı söylenebilir. Hacimsel is oranı açısından ise bu çalışmada elde edilen sonuçların deneysel verileri tekrar etmede başarılı olmuştur.

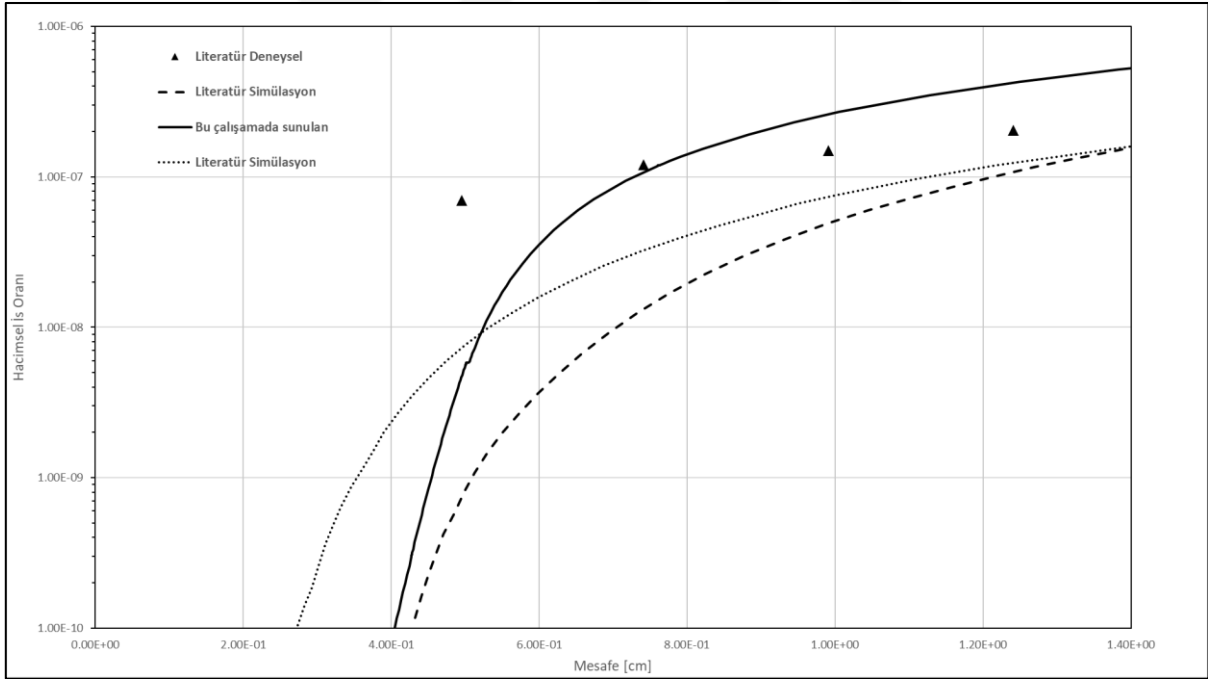
Slav-3 alevinin modelleme sonuçları ise Şekil 5.35 ve Şekil 5.36’da sunulmuştur. İs öncülü olan asetilenin mol dağılımının literatürden alınan modelleme sonuçlarına göre daha iyi oldukları söylenebilir. Fakat hem literatür sonuçları hem de bu çalışmanın sonuçları, diğer bileşenlere kıyasla, etilen dağılımı için deney sonuçlarından bir miktar farklı çıkmıştır. Her ne kadar dağılım düzenleri benzer olsa da sonuçlardaki farklılık, kullanılan yanma mekanizmalarının etilen bileşeni açısından eksik olabileceği anlamını taşır. Şekil 5.36’da verilen hacimsel is oranı için ise literatürden alınan modelleme sonuçları ile bu çalışmadan elde edilen sonuçlar, deneysel verilere göre aynı oranda yaklaşmışlardır. Literatür modelleme sonuçları is miktarını modelleme bölgesinin sonunda daha düşük, bu çalışma sonuçlarında ise hemen hemen aynı oranda daha fazla olarak hesaplamıştır. Fakat is miktarının anlam kazandığı bölge her iki modelleme sonucunda da birbirine gayet yakın çıkmışlardır.



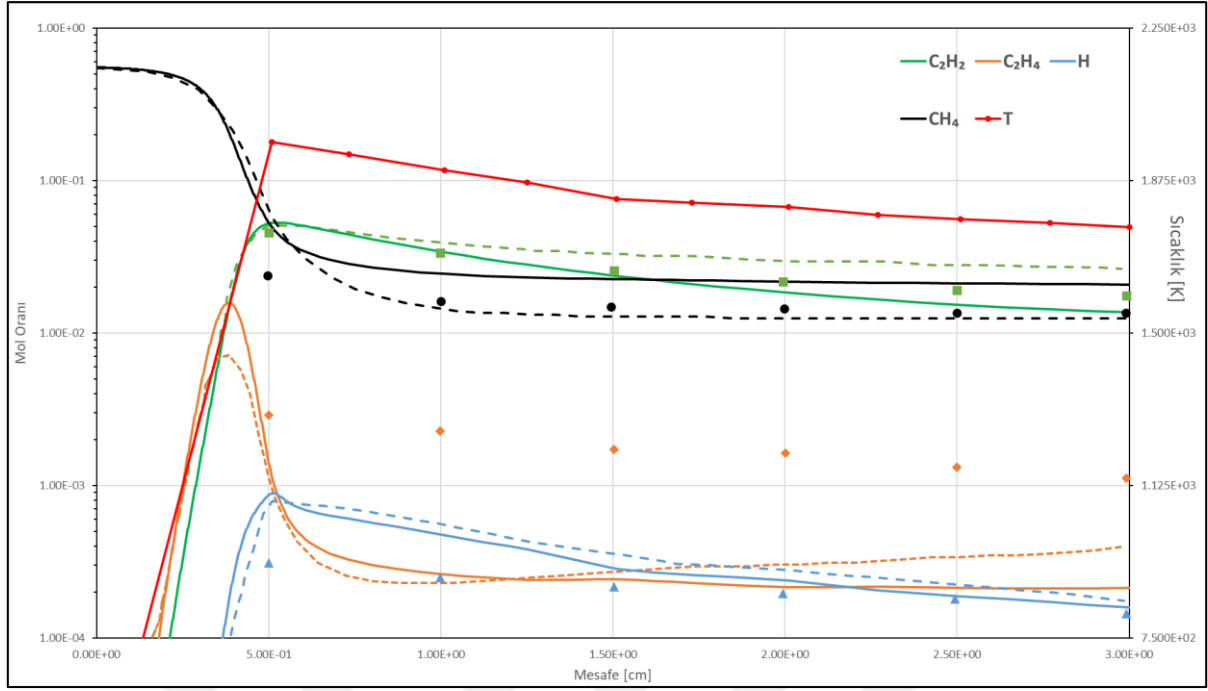
**Şekil 5.32** Slav-2 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki bazı bileşenlerin mol oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi (Semboller deneysel verileri [134], kesikli çizgiler literatür modelleme sonuçlarını[136], düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).



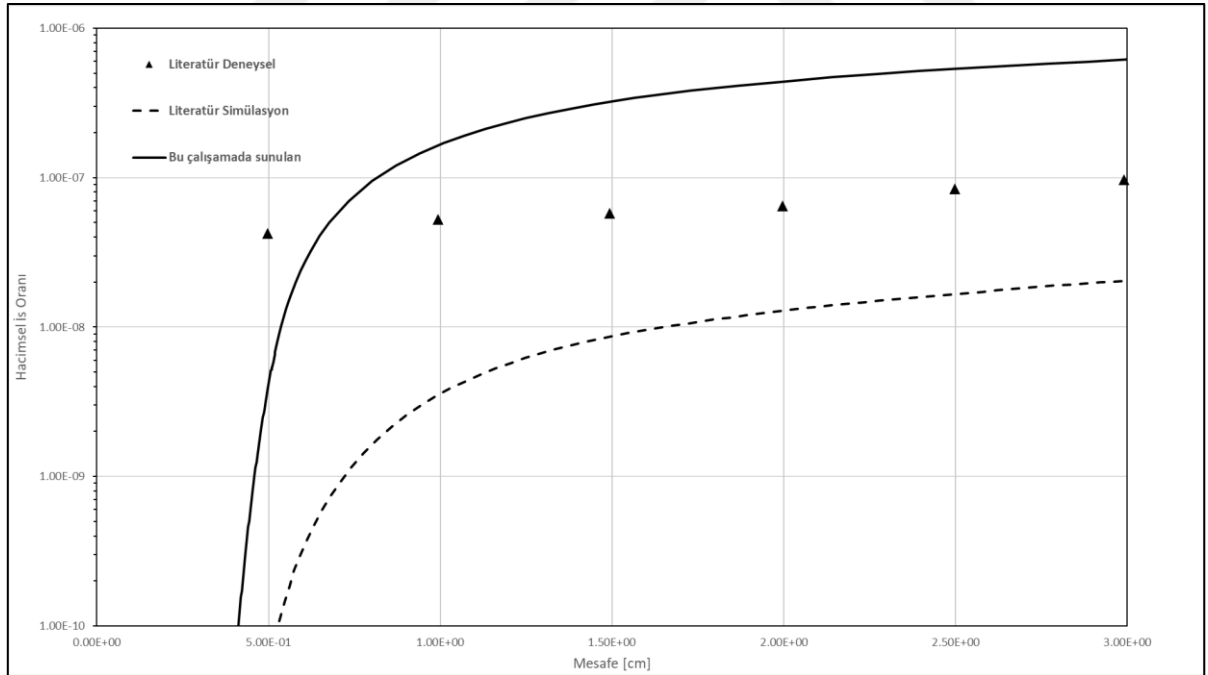
**Şekil 5.33** Slav-2 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki bazı bileşenlerin mol oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi (Semboller deneysel verileri [134], kesikli çizgiler literatür modelleme sonuçlarını[136], düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).



**Şekil 5.34** Slav-2 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki hacimsel is oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi (Semboller deneysel verileri [134], noktali çizgiler literatür modelleme sonuçlarını[136], kesikli çizgiler literatür modelleme sonuçlarını [32], düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

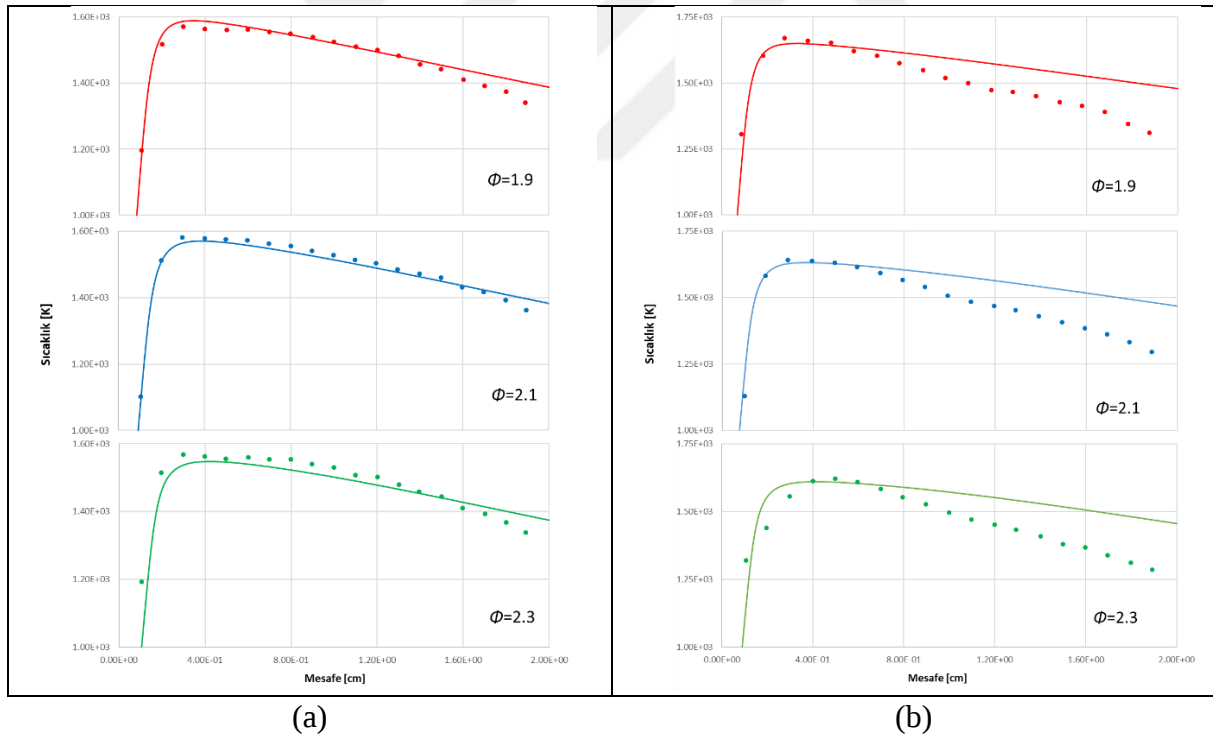


**Şekil 5.35** Slav-3 alevinin modellenmesi ile elde edilen bazı bileşenlerin mol oranlarının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi (Semboller deneysel verileri [137], kesikli çizgiler literatür modelleme sonuçlarını [32], düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

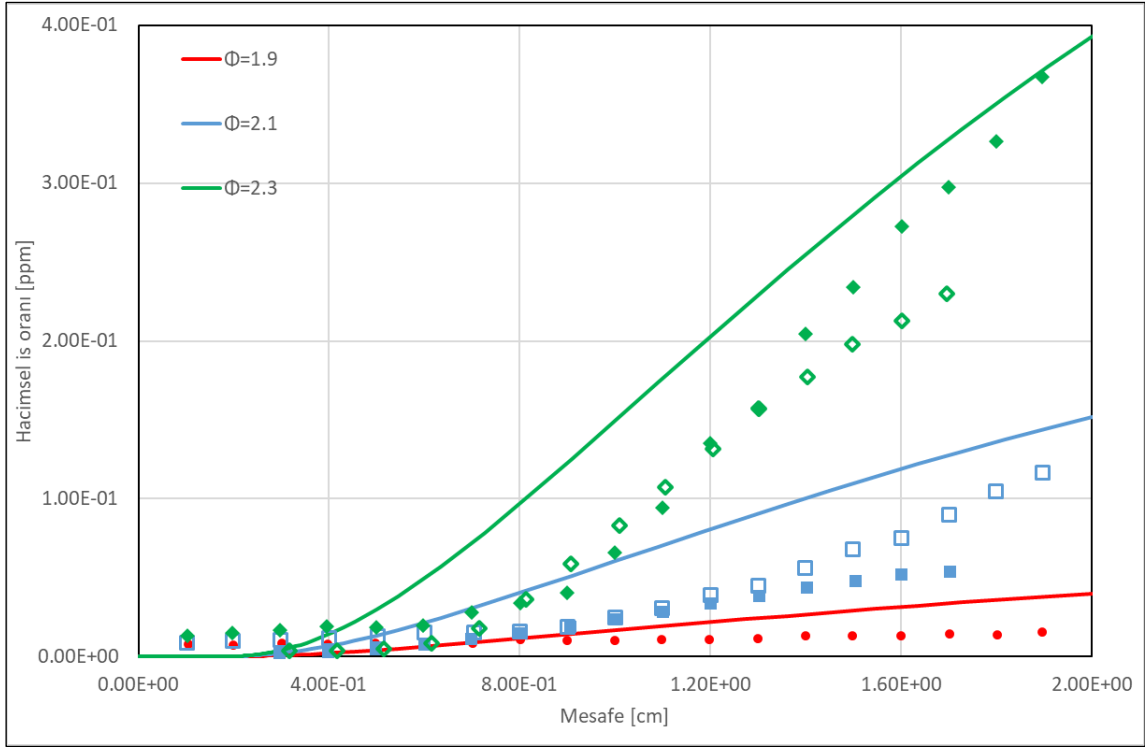


**Şekil 5.36** Slav-3 alevinin modellenmesi ile elde edilen yanma bölgesindeki hacimsel is oranının, deneysel sonuçlar ile birlikte gösterimi (Semboller deneysel verileri [137], kesikli çizgiler literatür modelleme sonuçlarını [32], düz çizgiler ise bu çalışma sonuçlarını göstermektedir).

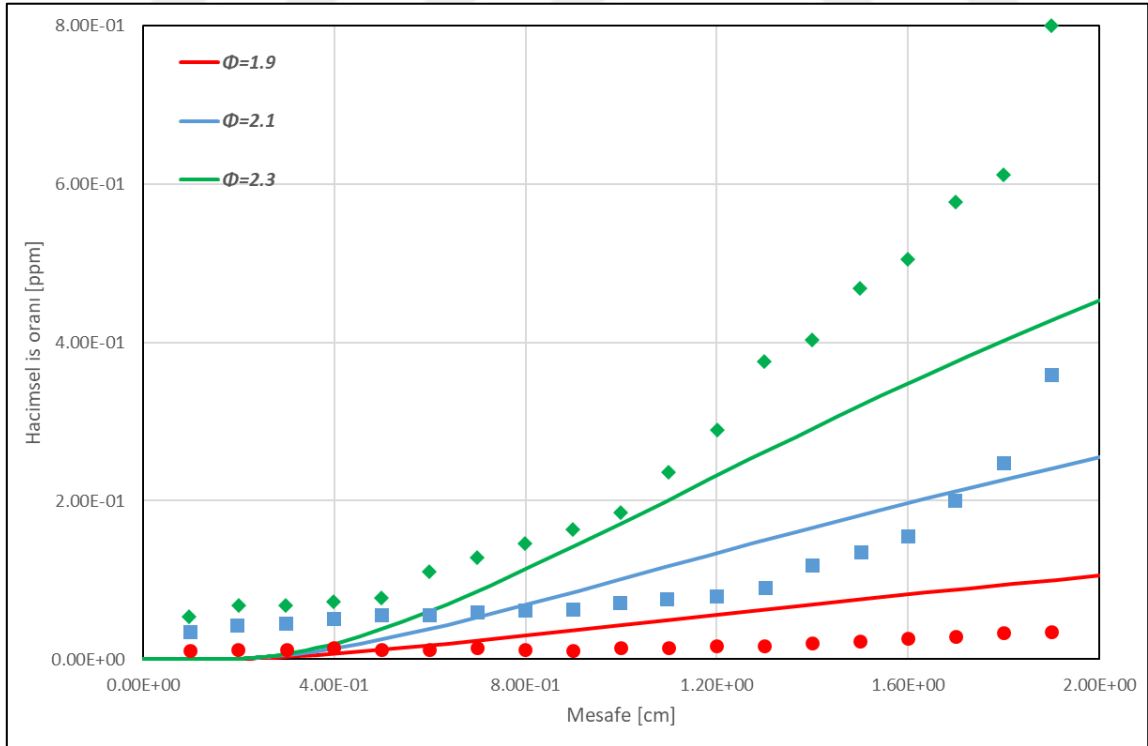
Wu et al. (2017) tarafından yapılan çalışmada, yakıtça zengin etilen-hava ön karışımli düz alevlerin sıcaklık değerleri ve oluşan is miktarları, farklı giriş hızlarında (5.9 cm/s –hızlı– ve 4.4 cm/s –yavaş–) ve her bir hız için üç farklı yakıt eşdeğer oranında ( $\Phi=2.3, 2.1, 1.9$ ) deneysel olarak incelenmiştir [138]. Yazılan program ile bahsedilen altı farklı alev modellenmiştir. Modellemede etilen için geliştirilen YARC-AF mekanizması kullanılmıştır [139, 140]. Modellemelerde enerji denklemi çözülerek, sıcaklık, bileşen ve is dağılımları program tarafından hesaplanmıştır. Sonuçlar Şekil 5.37 – Şekil 5.39’da verilmiştir. Yapılan modellemelerde sıcaklık dağılımları yavaş akış hızı için deneysel değerler tam olarak örtüşmesine karşın, hızlı akış hızına sahip alevlerde, alev sonrası bölgelerde farklılık gözükmemektedir. Is oluşumunu gösteren Şekil 5.39 ile beraber değerlendirildiğinde oluşan is miktarına bağlı olarak ışıyım ile kaybedilen ısı miktarının modellemede daha az olması anlamlıdır. Alev bölgesinde sıcaklık değerlerinde çok az farklılık olmasına rağmen sonrasındaki bu farklılık gerek is tanelerinin gerekse ışıyım modellemesinde kullanılan gazların ışıyım ile olan ısı kaybından kaynaklandığı düşünülmektedir.



**Şekil 5.37** Wu et al. (2017) tarafından deneysel olarak çalışılan alevlerin, a) giriş hızı 4.4 cm/s, b) giriş hızı 5.9 cm/s olmak üzere farklı yakıt eşdeğer oranları için sıcaklık dağılımlarının bu çalışmadan elde edilen modelleme sonuçları ile karşılaştırılması.



**Şekil 5.38** Düşük giriş hızındaki (4.4 cm/s), farklı yakıt eşdeğer oranına sahip alevlerin hacimsel is miktarlarının deneysel veriler ile karşılaştırılması (Düz çizgiler bu çalışmayı, içi dolu ve boş semboller ise sırasıyla [138] ve [141]’dan alınan deneysel verileri göstermektedir).

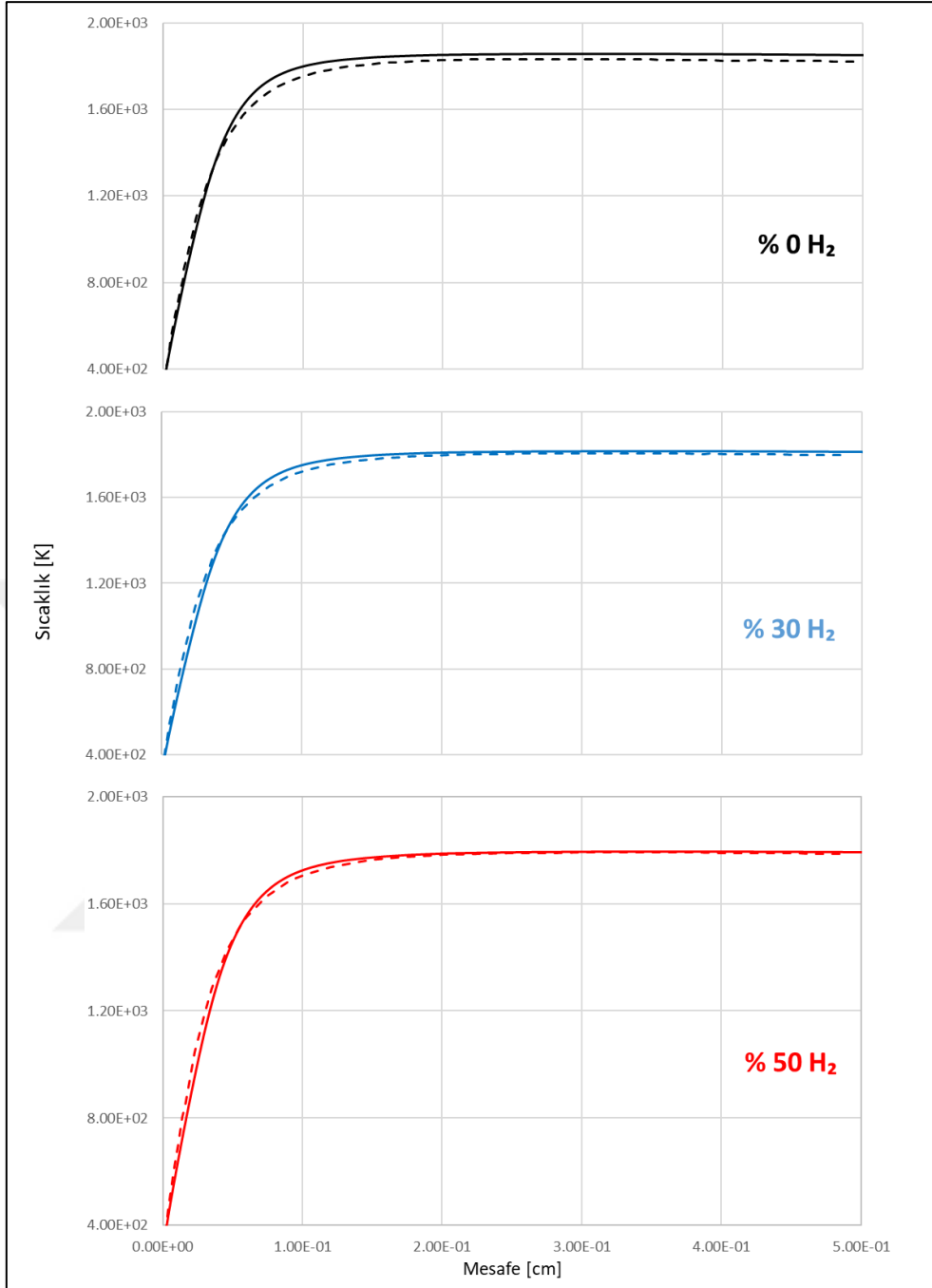


**Şekil 5.39** Düşük giriş hızındaki (5.9 cm/s), farklı yakıt eşdeğer oranına sahip alevlerin hacimsel is miktarlarının deneysel veriler ile karşılaştırılması (Düz çizgiler bu çalışmayı, semboller ise [138]’dan alınan deneysel verileri göstermektedir).

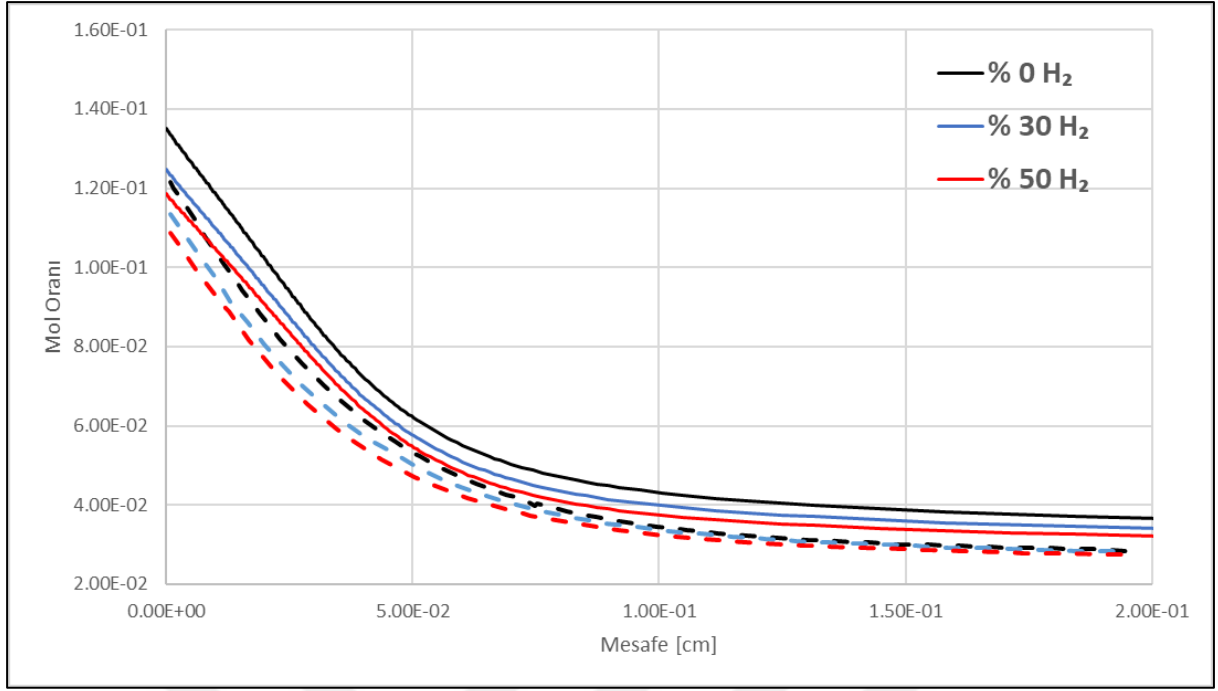
Park et al. (2011) çalışmalarında laminar ön karışımli asetilen/hava alevlerinde hidrojen ilavesinin is miktarına etkisini ticari bir programla modelleyerek incelemişlerdir [36]. Çalıştıkları alevler, bu tez kapsamında yazılan programla analiz edilerek her iki modelleme sonuçları karşılaştırılmıştır. Karşılaştırılması yapılan alevlere ait parametreler Çizelge 5.13'te verilmiştir. Soğuk karışımın giriş hızı 12 cm/s ve yakıt eşdeğer oranı ise ( $\Phi$ ) 2.35 olarak sabit tutulmuştur. Bu alevlerin analizlerinde FFCM-1 mekanizması kullanılmıştır [133]. Referans kaynakta hidrojen molekülü eklenmemiş karışım ile % 50 eklenmiş hali arasındaki, alevlerin en yüksek sıcaklık değerleri arasındaki fark 42 K olarak hesaplanmış, bu çalışmada ise bu fark yaklaşık 36 K olarak bulunmuştur. Söz konusu alevlerin, söz konusu referans kaynakta yapılan modelleme sonuçları Şekil 5.40 – Şekil 5.43'de verilmiştir. Görüldüğü üzere sıcaklık dağılım grafikleri arasında çok küçük farklılıklar vardır. Bunun yanı sıra hacimsel is oranları bir miktar fazla hesaplanmış ise de genel olarak bir uyum içindedir. Hidroksil molekülünün dağılımında ise bir miktar farklılıklar mevcuttur. Dağılımların hem tepe noktaları daha fazla bulunmuş hem de bir miktar ötelenmiş gözükmemektedir. Reaksiyon bölgesinin bir miktar daha geniş olarak hesaplandığı sonucuna varılabilir.

**Çizelge 5.13** Modellenen alevlerin parametreleri.

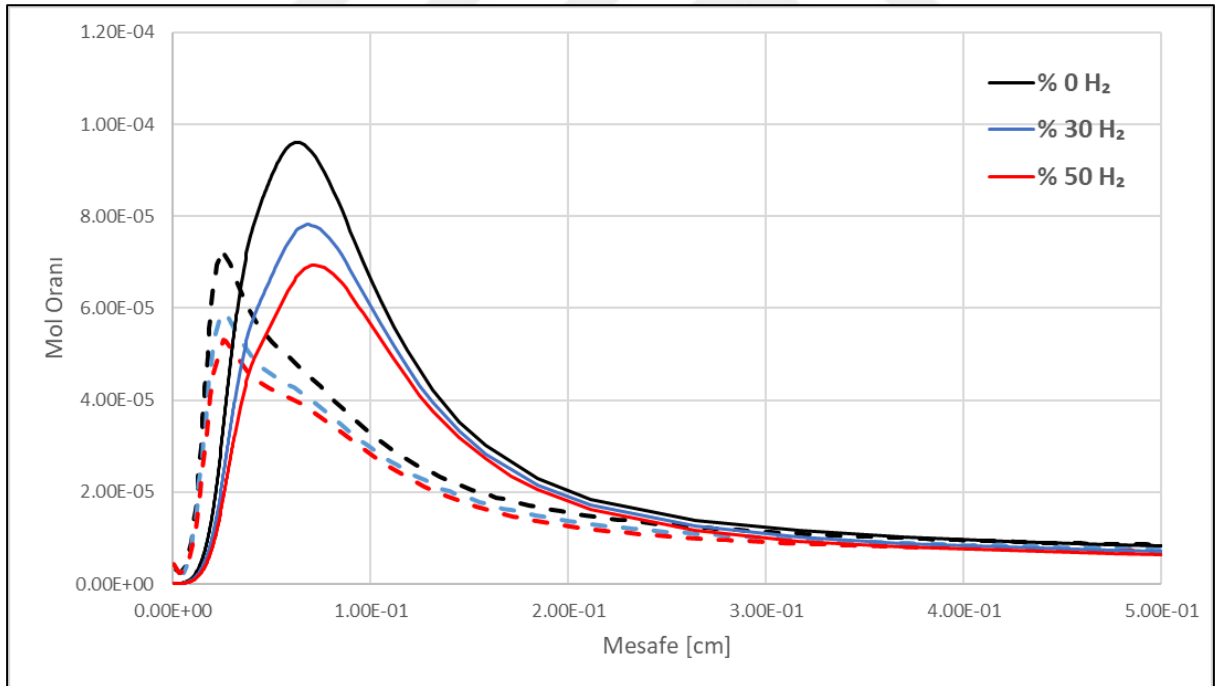
| Alev Adı | H <sub>2</sub><br>(Hacimsel %) | Mol Oranları                  |                |                |                | T <sub>maks.</sub> [36] | T <sub>maks.</sub><br>(Bu çalışma) |
|----------|--------------------------------|-------------------------------|----------------|----------------|----------------|-------------------------|------------------------------------|
|          |                                | C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> | O <sub>2</sub> | N <sub>2</sub> | H <sub>2</sub> |                         |                                    |
| Park-1   | 0                              | 0.165                         | 0.175          | 0.656          | -              | 1829                    | 1831.0                             |
| Park-2   | 30                             | 0.150                         | 0.169          | 0.636          | 0.045          | 1802                    | 1816.7                             |
| Park-3   | 50                             | 0.141                         | 0.166          | 0.622          | 0.071          | 1787                    | 1794.9                             |



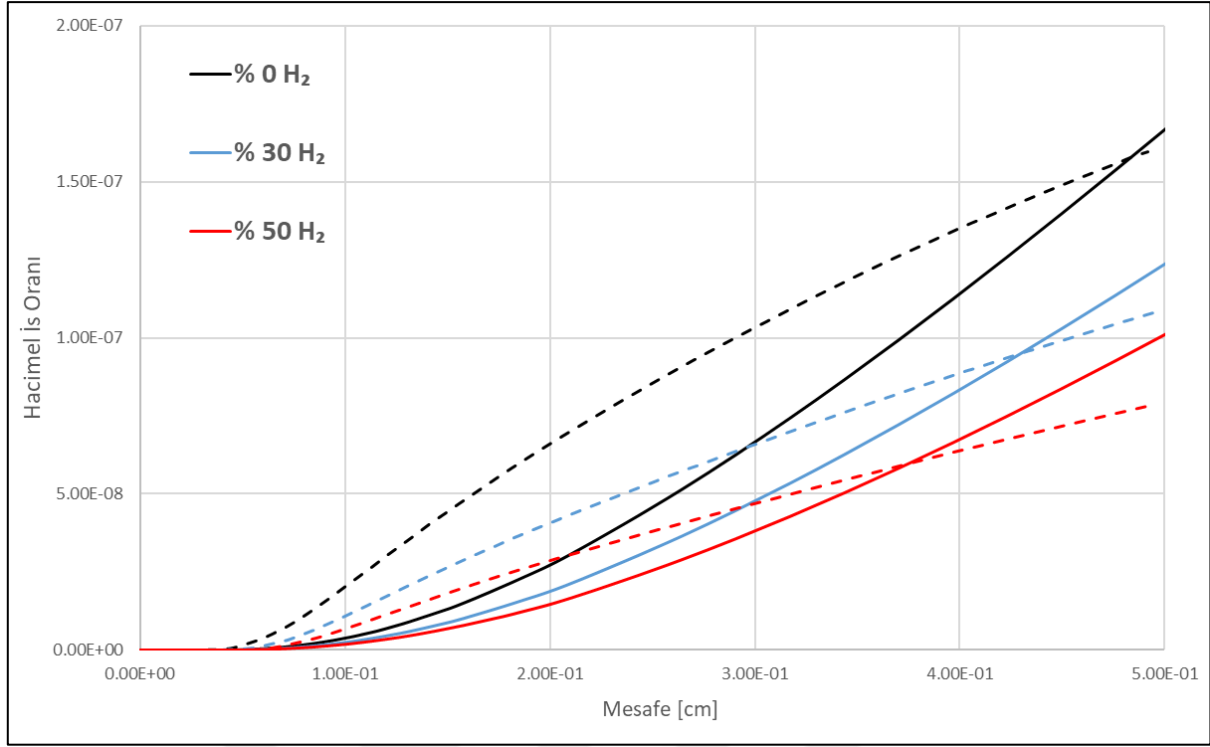
**Şekil 5.40** Park-1, Park-2 ve Park-3 adı verilen alevlerin sıcaklık dağılımlarının karşılaştırılması (Düz çizgiler bu çalışmayı, kesikli çizgiler ise literatürden alınan modelleme sonuçlarını göstermektedir [36]).



**Şekil 5.41** Park-1, Park-2 ve Park-3 adı verilen alevlerin asetilen mol oranlarının karşılaştırılması (Düz çizgiler bu çalışmayı, kesikli çizgiler ise literatürden alınan modelleme sonuçlarını göstermektedir [36]).



**Şekil 5.42** Park-1, Park-2 ve Park-3 adı verilen alevlerin hidroksil mol oranlarının karşılaştırılması (Düz çizgiler bu çalışmayı, kesikli çizgiler ise literatürden alınan modelleme sonuçlarını göstermektedir [36]).



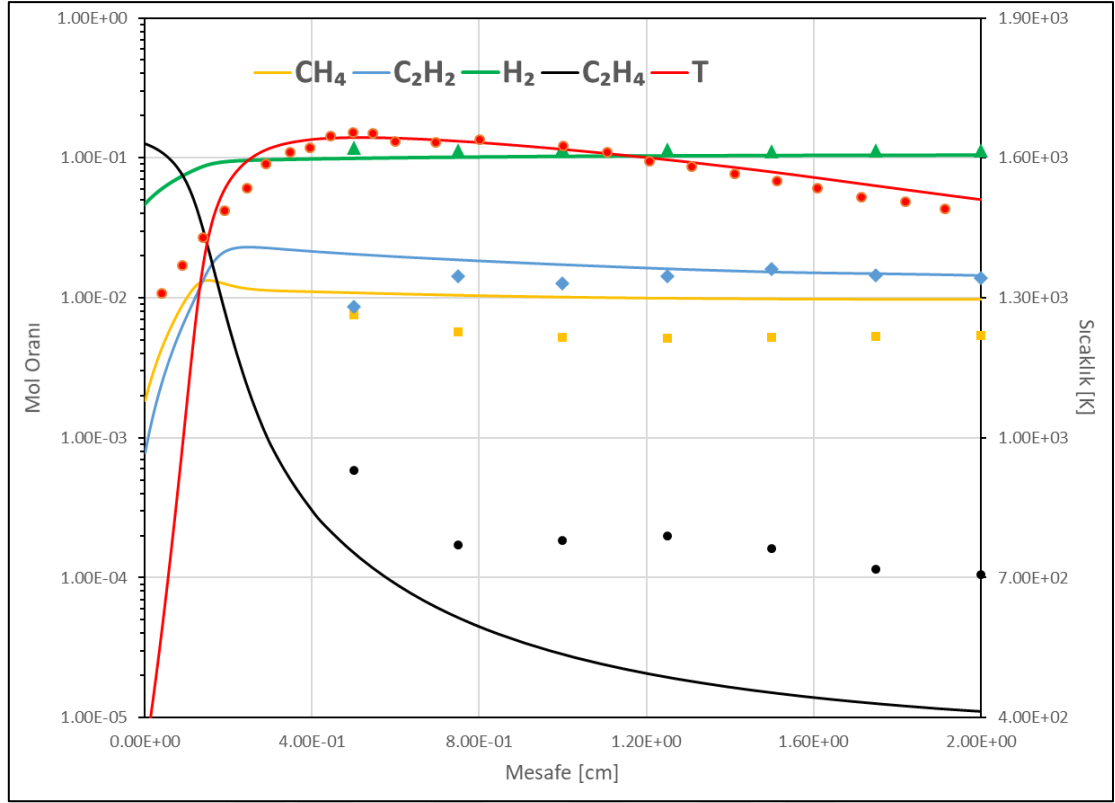
**Şekil 5.43** Park-1, Park-2 ve Park-3 adı verilen alevlerin hacimsel is oranlarının karşılaştırılması (Düz çizgiler bu çalışmayı, kesikli çizgiler ise literatürden alınan modelleme sonuçlarını göstermektedir [36]).

Çalışmanın bu kısmında çeşitli ülkelerden deneysel ve/veya modelleme çalışmaları yapan farklı araştırmacıların/grupların katılmasıyla düzenlenen bir çalıştay olan “ISF Workshop”ta hedef alev olarak seçilen bazı alevlerin modellenmesi yapılarak, literatür ile kıyaslanmıştır [121]. Modellenen alevlerin parametreleri Çizelge 5.14’te verilmiştir.

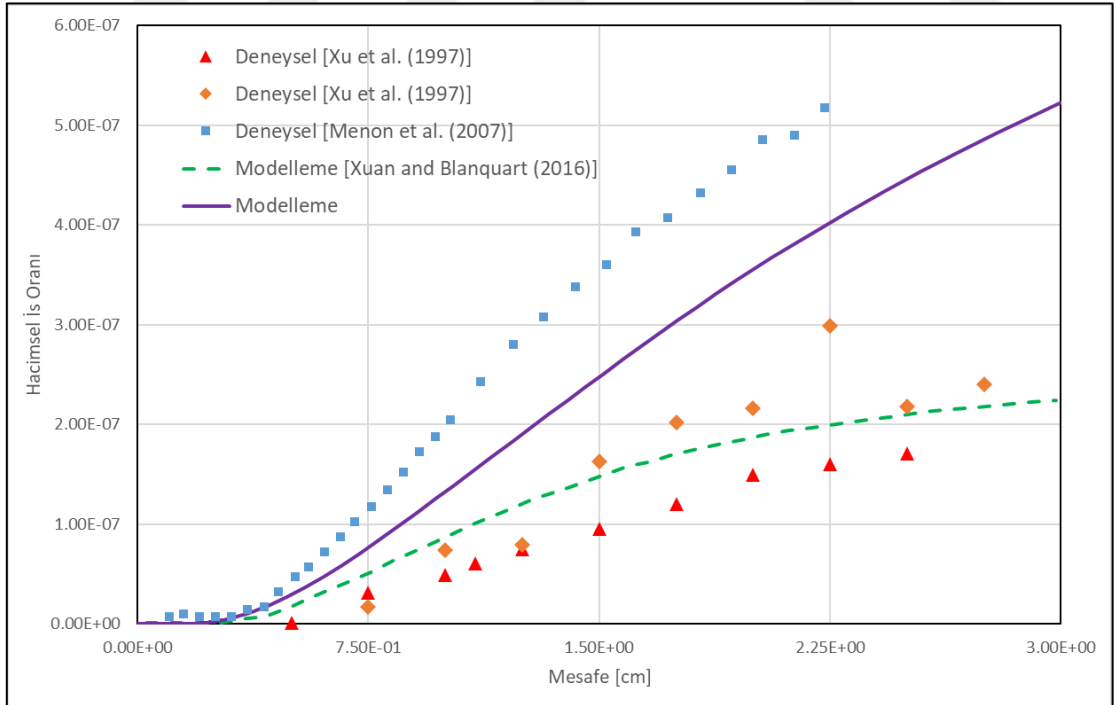
**Çizelge 5.14** Bu çalışma kapsamında çalışılan ISF alevlerinin modelleme parametreleri [121].

| Alev Adı    | Karışım                       |                |                | $\Phi$ | C/O   | Soğuk Karışım Hızı<br>[cm/s] |
|-------------|-------------------------------|----------------|----------------|--------|-------|------------------------------|
|             | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> | O <sub>2</sub> | N <sub>2</sub> |        |       |                              |
| ISF4-2a     | 0.1408                        | 0.1805         | 0.6787         | 2.34   | 0.780 | 6.73                         |
| ISF4-2b     | 0.1560                        | 0.1773         | 0.6667         | 2.64   | 0.880 |                              |
| ISF4-2c     | 0.1700                        | 0.1740         | 0.6560         | 2.94   | 0.980 |                              |
| ISF4-3a     | 0.1280                        | 0.1830         | 0.6890         | 2.10   | 0.700 | 6.44                         |
| ISF4-3b     | 0.1387                        | 0.1809         | 0.6804         | 2.30   | 0.767 |                              |
| ISF4-5a-2cm | 0.444                         | 0.556          | -              | 2.40   | 0.800 | 2.00                         |
| ISF4-5a-4cm |                               |                |                |        |       | 4.00                         |
| ISF4-5a-6cm |                               |                |                |        |       | 6.00                         |

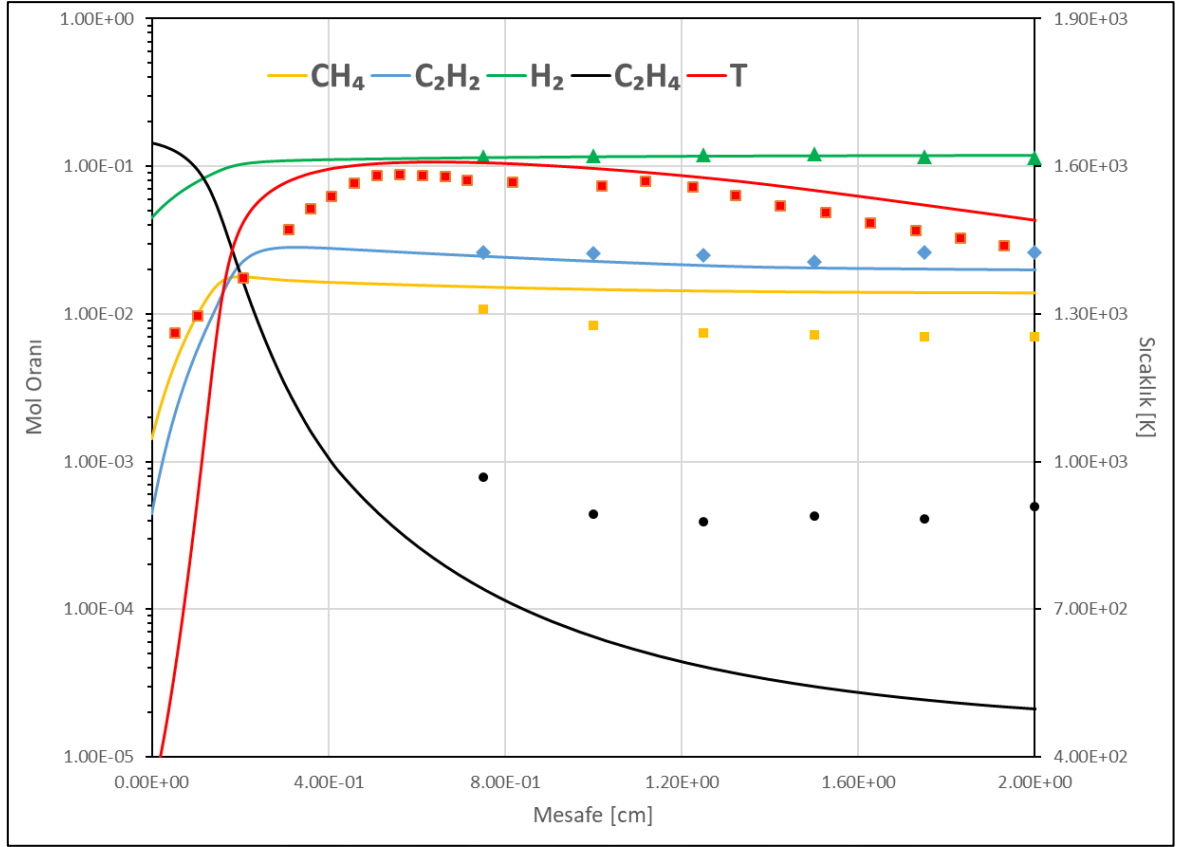
ISF4-2 alevlerinin modellenmesinde, enerji denklemi dahil edilip sıcaklık hesabını yapılmış, yanma mekanizması olarak ise RedMech adı verilen mekanizma kullanılmıştır [142]. ISF4-2 alevlerinin modelleme sonuçları ve literatür verileri Şekil 5.44 – Şekil 5.49’da sunulmuştur.



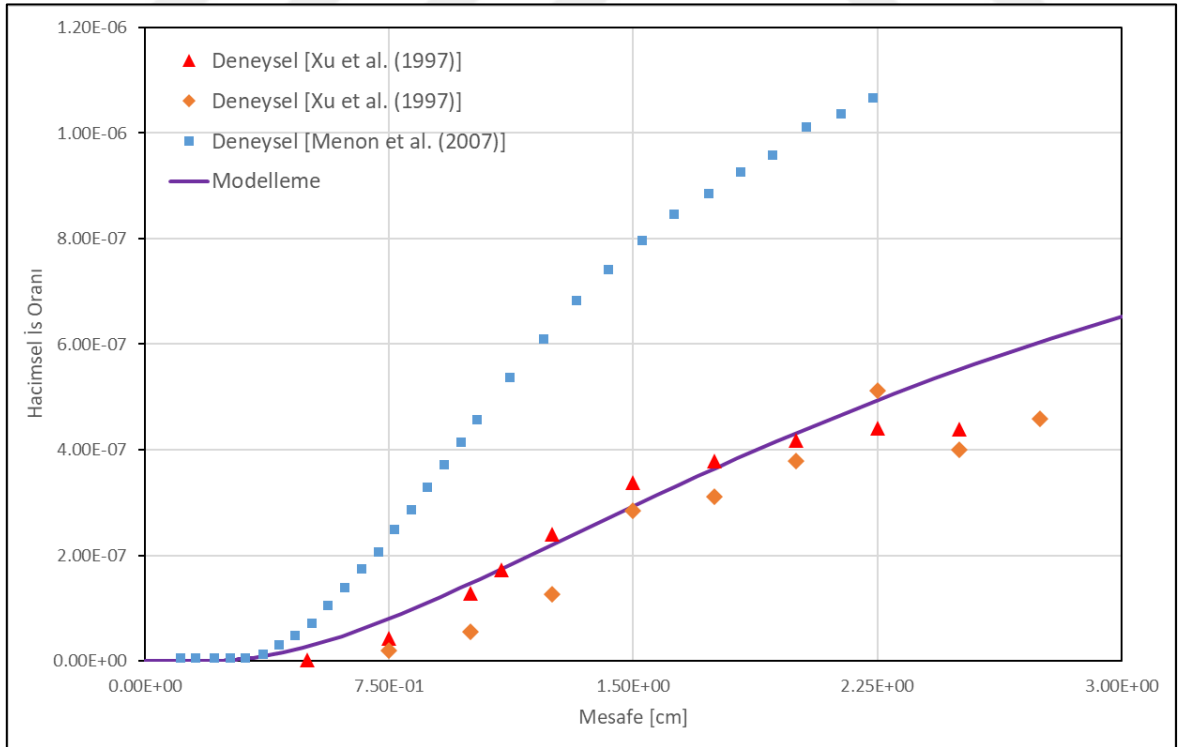
**Şekil 5.44** ISF4-2a alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [29, 35]).



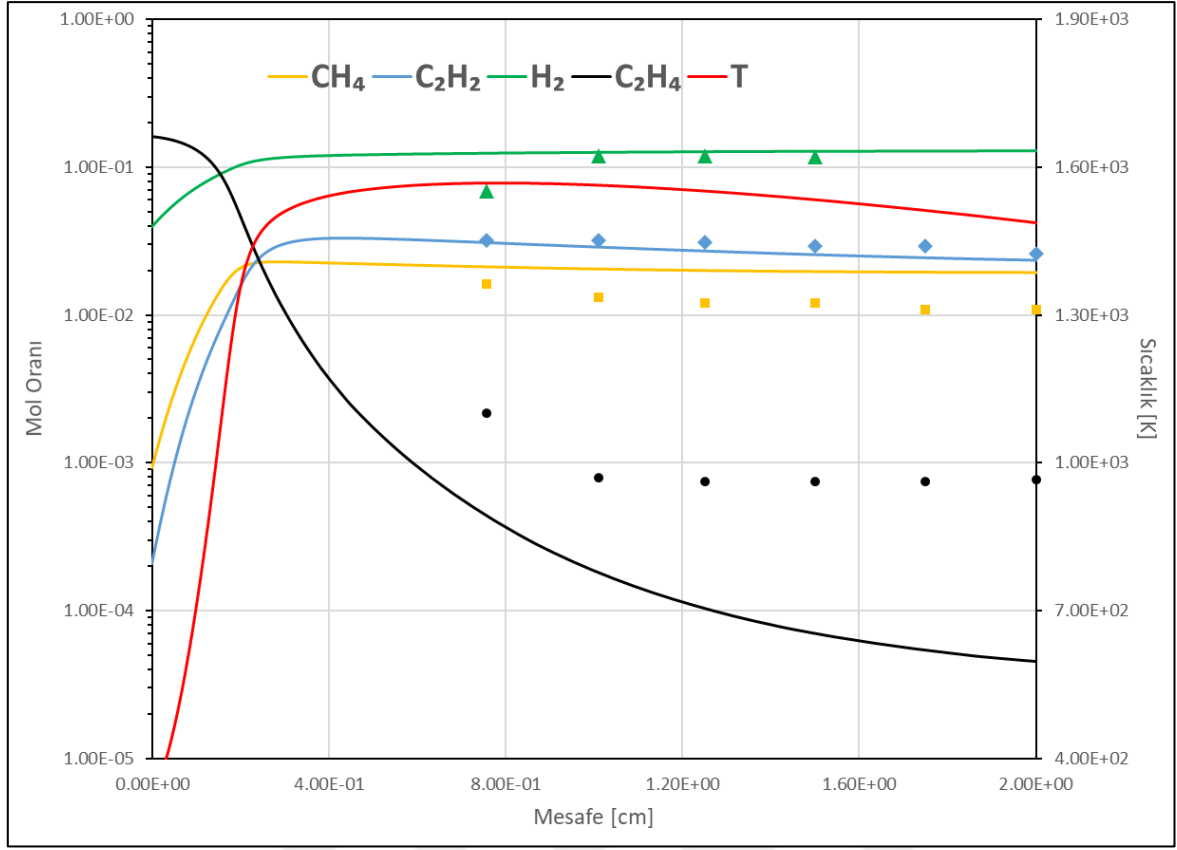
**Şekil 5.45** ISF4-2a alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri [29, 35], kesikli çizgiler ise literatürden alınan modelleme sonuçlarını göstermektedir [45]).



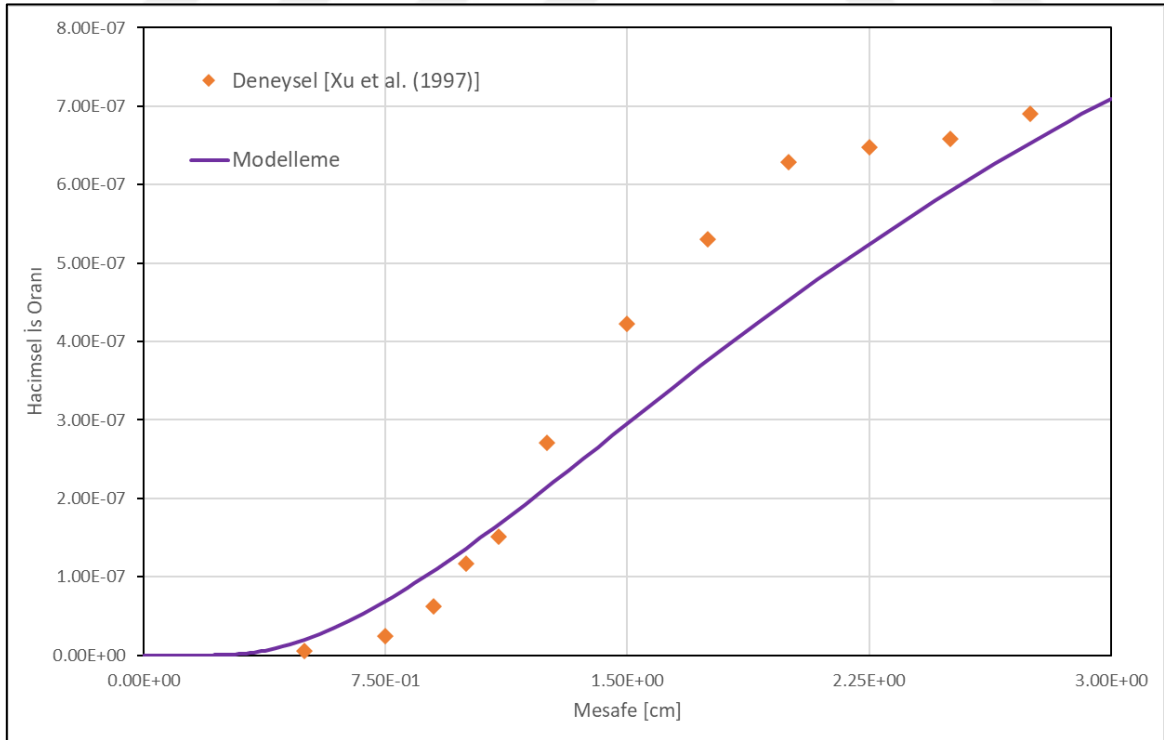
**Şekil 5.46** ISF4-2b alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [29, 35]).



**Şekil 5.47** ISF4-2b alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [29, 35]).



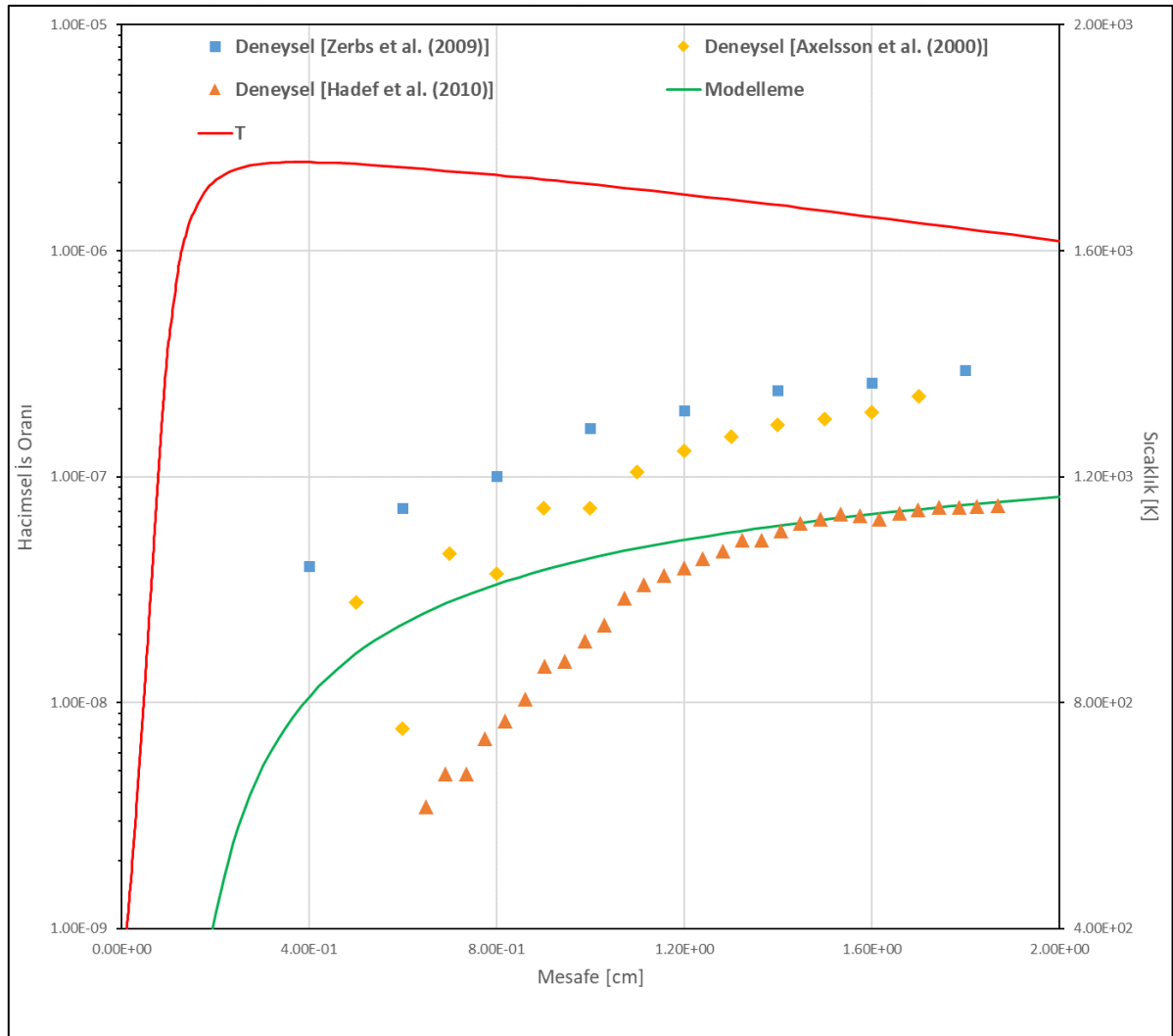
**Şekil 5.48** ISF4-2c alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [35]).



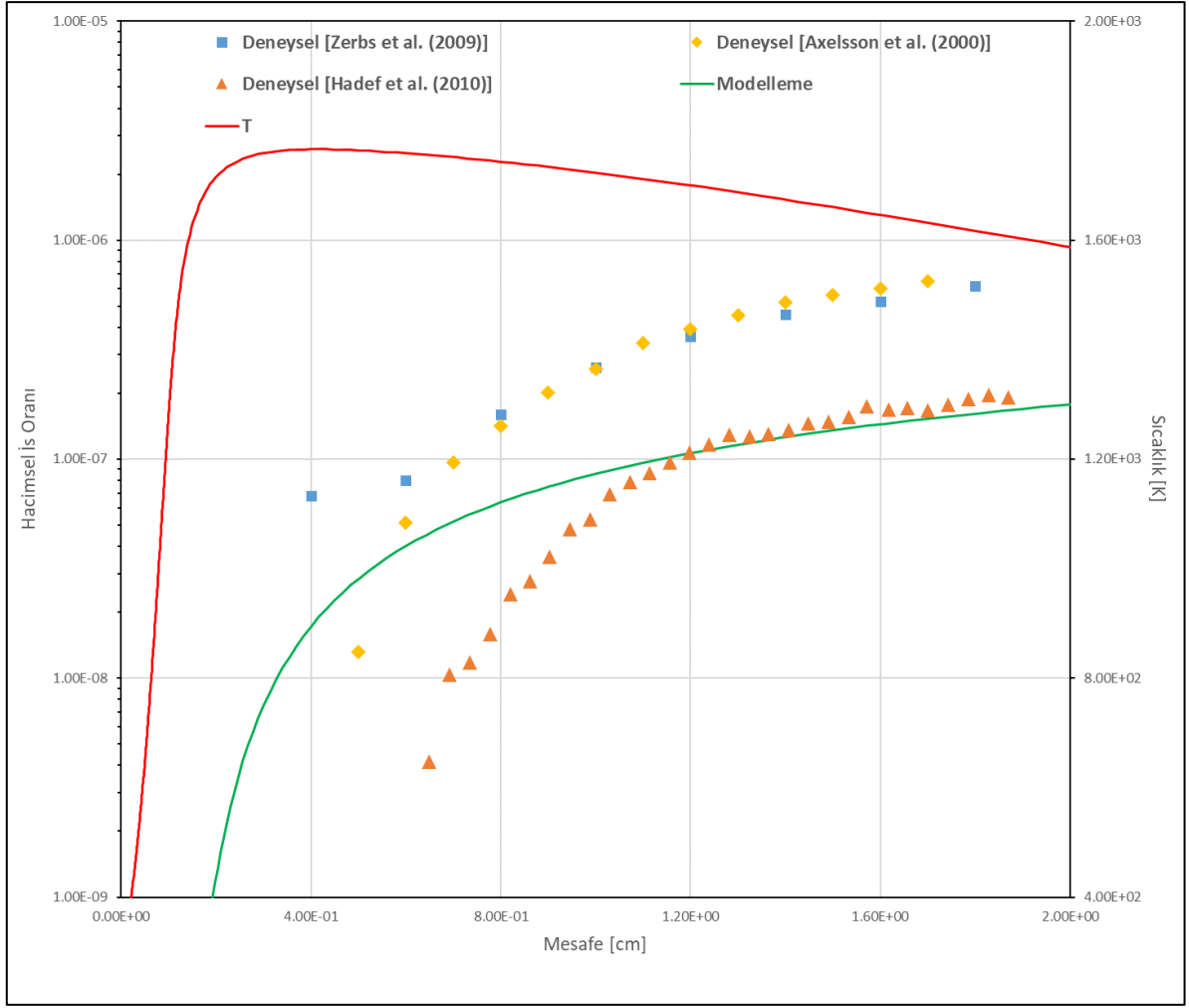
**Şekil 5.49** ISF4-2c alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [35]).

ISF4-2 alevlerinde görüldüğü üzere deneysel sonuçlar son derece iyi bir şekilde tekrar edilmiştir. Bileşen dağılımlarında sadece yakıt olarak kullanılan etilen için deneysel sonuçlardan bir miktar farklılık elde edilmiş olup, yakıt tükenme eğiliminde olduğundan sıcaklık ve is dağılımına etkisi olmamıştır.

ISF4-3 alevlerinin modellenmesinde San Diego mekanizması kullanılmış olup, enerji denklemi çözülmemiş, onun yerine sıcaklık dağılımı programa hazır olarak verilmiştir [121]. Bu standart alev özellikle deneysel çalışmalarda sıklıkla kullanılmıştır [121, 143-150]. Söz konusu alevlerin hacimsel is oranları Şekil 5.50 ve Şekil 5.51’de verilmiştir. Yazılan programdan elde edilen sonuçlar, görüldüğü üzere literatürden alınan deneysel veriler ile uyumludur.

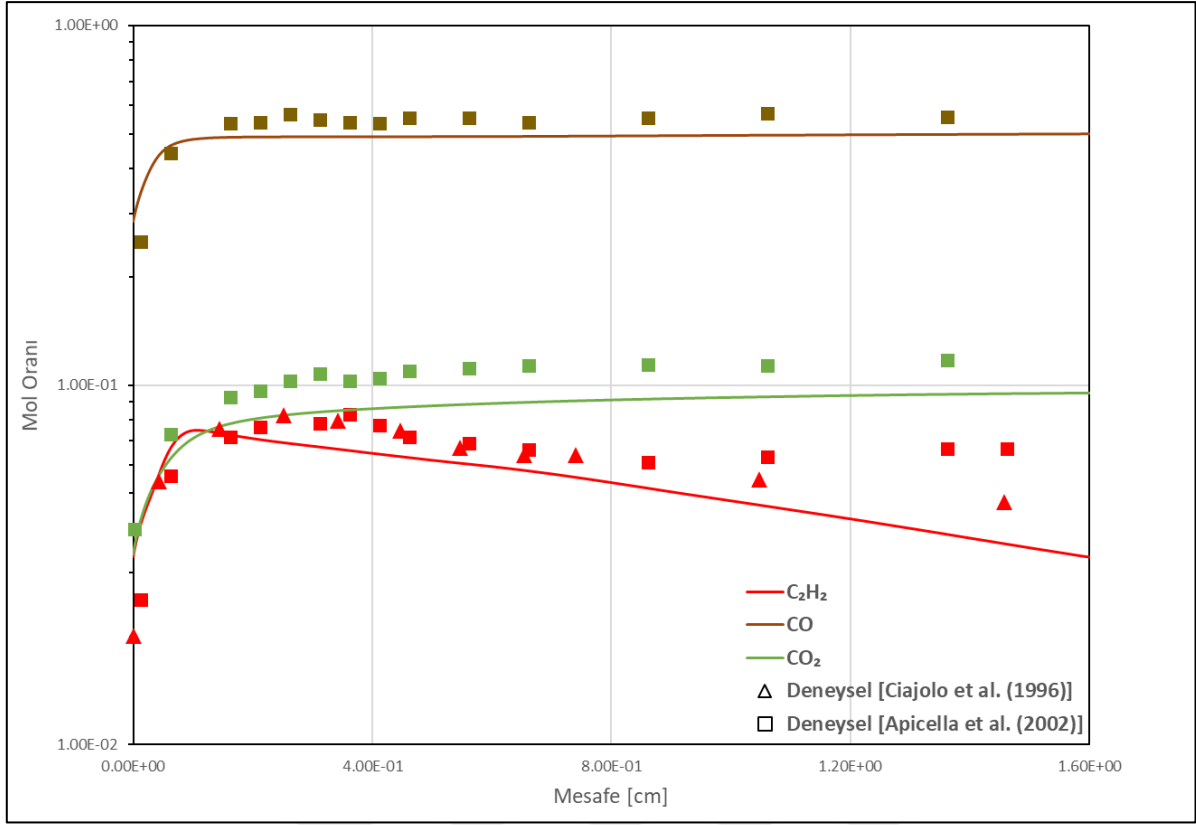


**Şekil 5.50** ISF4-3a alevi için modelleme sonucu elde edilen hacimsel is oranı ile deneysel değerlerin karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [143, 146, 147]).

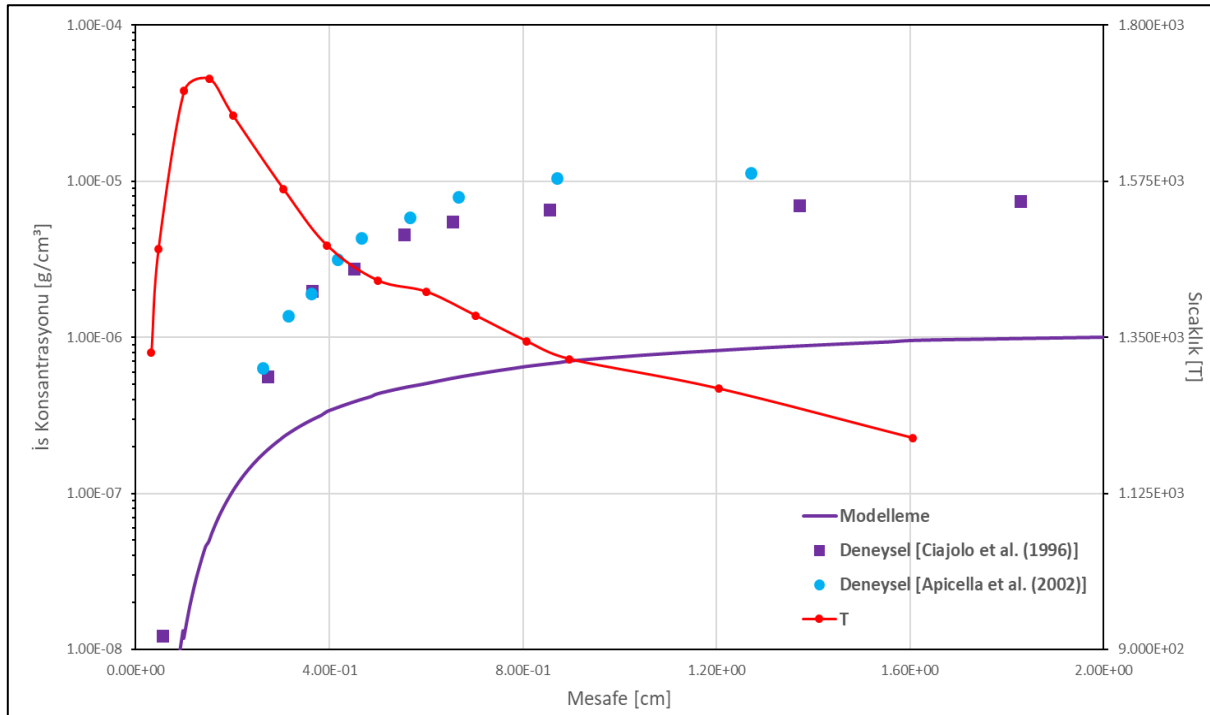


**Şekil 5.51** ISF4-3b alevi için modelleme sonucu elde edilen hacimsel is oranı ile deneysel değerlerin karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [143, 146, 147]).

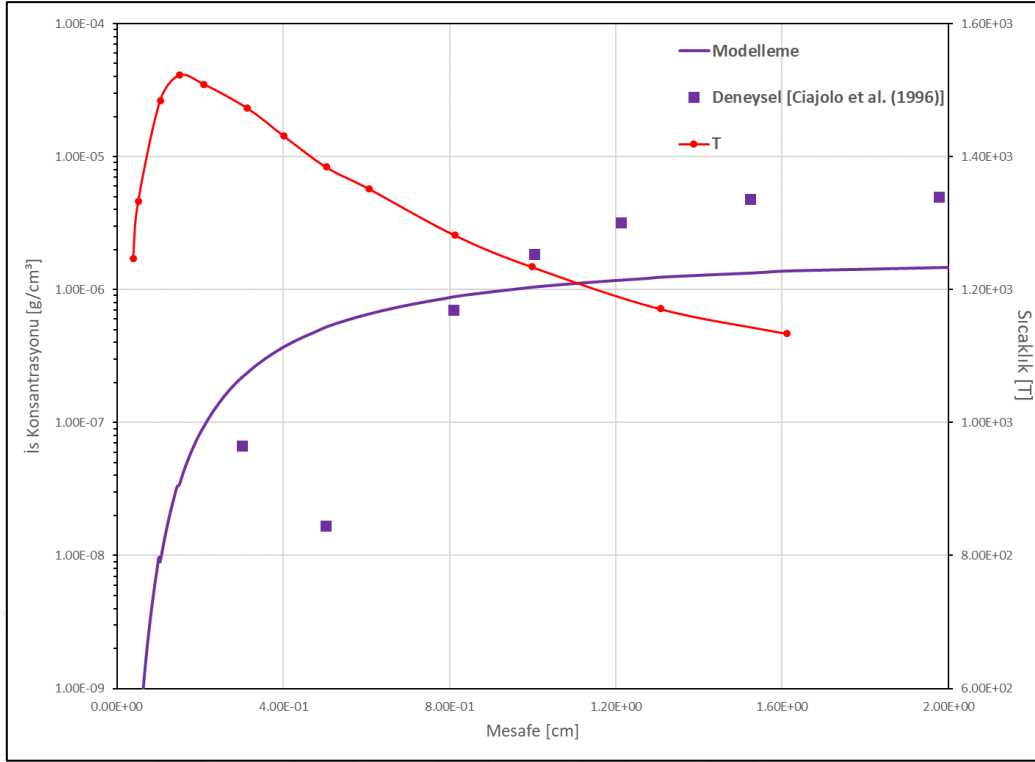
ISF4-5 alevlerinin modellenmesinde FFCM-1 mekanizması kullanılmıştır [133]. Enerji denklemi çözülmemiş, sıcaklık dağılımı literatürden alınıp programa hazır verilmiştir [121, 151]. Elde edilen sonuçlar ile ISF4-5a-4cm için bazı bileşenler dağılımları ile beraber is konsantrasyonu için, diğer iki alev içinse is konsantrasyonu değerleri ile literatürden alınan deneysel veriler (Şekil 5.52 – Şekil 5.55) beraber verilmiştir. ISF4-5a-4cm alevinde bileşen dağılımlarında 0.14 cm kayma olduğu fark edilerek, şekillere düzeltilmiş hali ile yansıtılmıştır. Deneysel verilerde ölçüm esnasında bu şekilde kayma olabileceği bilinmektedir [129].



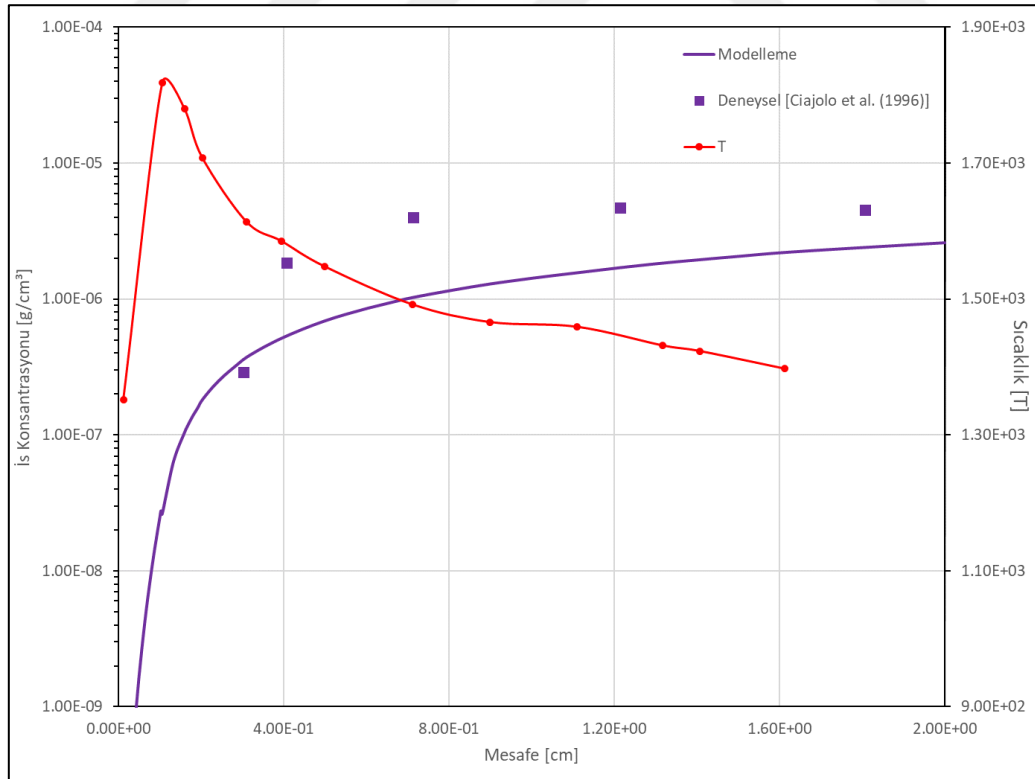
**Şekil 5.52** ISF4-5a-4cm alevi için modelleme sonuçları ile deneysel değerlerin bazı bileşenler için karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [151, 152]).



**Şekil 5.53** ISF4-5a-4cm alevi için modelleme sonuçları ile deneysel is konsantrasyonlarının karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [151, 152]).



**Şekil 5.54** ISF4-5a-2cm alevi için modelleme sonuçları ile deneysel is konsantrasyonlarının karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [151]).



**Şekil 5.55** ISF4-5a-6cm alevi için modelleme sonuçları ile deneysel is konsantrasyonlarının karşılaştırılması (düz çizgiler bu çalışmayı, semboller deneysel verileri göstermektedir [151]).

ISF4-5a alevlerinde is konsantrasyon dağılımlarına bakıldığında (Şekil 5.53 – 5.55), sonuçlara dair bazı farklılıklar ortaya çıkmıştır. Ciajolo et al. (1996), is konsantrasyonunun en yüksek olduğu alevi 4 cm/s hızındaki alev (orta sıcaklık alevi olarak tanımlamıştır) olarak belirlerken, yapılan bu çalışmada en yüksek is konsantrasyonu 6 cm/s hızındaki alevde (yüksek sıcaklık alevi) bulunmuştur [151].





## BÖLÜM 6

### SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu çalışma kapsamında bir boyutlu laminar ön karışımli alevlerin yapısı ve is oluşumu sayısal olarak incelenmiştir. Sayısal analizler için kullanılan programlar bu tez çalışmasına özgü olarak yazılmıştır. Yazılan programlarda özgür yazılım lisanslı ve/veya açık kaynak kodlu matematik kütüphanelerinden yararlanılmıştır [102-104, 106-108].

Yapılan çalışmanın kapsamında yazılan programla Bölüm 5.1’de saf gazların ve gaz karışımlarının taşınım büyüklükleri hesaplanarak literatür ile karşılaştırılmıştır. Saf gazlar için sunulan ısı iletim katsayısı ve viskozite değerleri sonuçlarında en yüksek yüzde hata sırasıyla % 7.12 ve % 6.93 değerleri ile helyum için bulunmuştur. Gaz karışımları için ise hava, beş ayrı mol oranı için  $N_2$ ,  $Ar$ ,  $CO_2$  ve  $CH_4$  içeren karışımlar, iki farklı mol oranında  $Xe$  ve  $He$  karışımı olmak üzere değişik sıcaklıklarda toplam sekiz gaz karışımı için ısı iletimi katsayısı ve viskozite değerleri literatür ile karşılaştırılmıştır. Hava için ısı iletim katsayısı hata oranı % 4’ün, viskozite için ise %2.5’in altında kalmıştır.  $N_2$ ,  $Ar$ ,  $CO_2$  ve  $CH_4$  içeren karışımlar için viskozite değerleri deneysel değerler ile karşılaştırılmış ve yüzde farkın % 3’ün altında olduğu görülmüştür. İki farklı  $Xe$  ve  $He$  karışımı için literatürde eğri uydurma yöntemi ile bulunan sonuçlar ile yazılan program sonuçları birlikte verilmiş, yüzde farkların ısı iletim katsayısı için % 7.7, viskozite için ise % 5.2’nin altında kaldığı sunulmuştur. İkili difüzyon katsayıları için farklı gaz çiftlerinin farklı sıcaklıklarda literatür ile kıyaslanmış ve burada da en yüksek fark %8’i geçmemiştir. Yanma modellemelerinde kullanılacak taşınım büyüklükleri hesaplamalarındaki hata oranlarının kabul edilebilir düzeyde oldukları görülmüştür.

Bölüm 5.2’de adyabatik alev sıcaklığı ve gaz karışımlarının termodinamiksel denge çözümleri literatür ile son derece uyumlu olarak elde edilmiştir. Değişik yakıt-hava oranları için propan-hava yanması modellenmiş ve adyabatik alev sıcaklığı için yüzde fark en yüksek % 0.09’un altında kalmış, ana bileşenlerin denge mol oranlarında ise programın sonuçları  $10^{-4}$  mertebesinde farklılıkla literatür ile uyum göstermiştir.

Değişik yakıtlar için stokiyometrik yakıt-hava karışımı için yapılan adyabatik alev sıcaklığı hesaplamalarında yüzde fark % 0.15'in altında kalmıştır. Metan-hava karışımına hidrojen eklenmesinin adyabatik alev sıcaklığına olan etkisi incelenerek, literatürde bulunan ve ticari bir programla elde edilen sonuçlar ile birlikte verilmiştir. Gerek değişik yakıt-hava oranları için gerekse farklı miktarlarda hidrojen eklenmesi ile elde edilen sonuçlar ile literatür arasındaki fark, değer olarak 2.5 K'nin altında kalmış, yüzde olarak ise en fazla % 0.6 olarak bulunmuştur. Yazılan programla adyabatik alev sıcaklığı ve denge çözümü için bulunan sonuçlar programın bahsedilen çözümler için son derece hassas olduğunu göstermektedir.

Bölüm 5.3 ve 5.4'te ise sırasıyla akış alanı içinde yanma analizi ve is oluşumları incelenmiştir. Akış alanı içinde yanma sonu ve ara ürünler için stokiyometrik metan-hava yanması sonuçları verilmiş, sonuçların son derece tutarlı olduğu gösterilmiştir. Düğüm noktası eklenmesinin çözüm üzerindeki etkisi şekiller ile sunulmuştur (Şekil 5.6 – 5.10). Daha sonra hem deneysel hem de modellemelerde sıkça kullanılan bir alev olan ISF4-2a alevinin yazılan programla elde edilen sonuçları literatür ile birlikte verilmiştir. Gerek sıcaklık dağılımı, gerekse bileşen mol oranı dağılımlarındaki uyum gösterilmiş, alev bölgesinin tespitinde kullanılan normalize edilmiş  $CH^*$  dağılımı sunulmuştur (Şekil 5.11 – 5.14).

Şekil 5.15 ile Şekil 5.16'da literatürden alınan deneysel sonuçların modellemesinde, deneysel sıcaklıkların kullanılmasının, bileşen mol dağılımlarının hesaplanmasındaki önemi gösterilmiştir. Sıcaklık değerleri enerji denklemi çözülerek elde edildiğinde bileşen dağılımlarında oluşan fark, deneysel sıcaklık değerleri yazılan programa girdi olarak verildiğinde ihmal edilebilecek düzeye geldiği görülmüştür. Şekil 5.17 – 5.25'te ise Shmakov adı verilen alevler için literatürden alınan hem modelleme sonuçları ile hem de deneysel sonuçlar ile program sonuçları birlikte verilmiştir. Literatürden alınan modelleme sonuçları ile oluşan farklılıkların kullanılan tepkime mekanizmalarının farklı olmasından kaynaklandığı düşünülmüş, bahsi geçen alevlerin modellemesinde, bu çalışmada kullanılan tepkime mekanizması hem bileşen sayısı hem de tepkime sayısı olarak sayısal olarak daha az olsa bile modellenen alevleri tekrarlamada yeterli olduğu görülmüştür. Şekil 5.26 – 5.28'de ise üç farklı yakıttan ve oksijen-argon'dan oluşan bir karışımın modellemesi yapılarak deneysel sonuçlarla birlikte verilmiştir. Elde edilen sonuçların deneysel değerler ile tutarlı ve uyumlu olduğu görülmüştür.

Bölüm 5.4’te farklı alevlerde is oluşumu incelenmiş ve literatür değerleri ile karşılaştırılmıştır. Slav-1 alevi için hacimsel is oranı miktarı hem deneysel değerden hem de literatürden alınan modelleme sonucundan daha düşük bulunmuş fakat is miktarının anlam kazandığı mesafe ve genel davranışı benzer bulunmuştur. Slav-2 ve Slav-3 alevinde ise is miktarı deneysel verilerden daha yüksek bir değer bulunmuş olmakla beraber, deneysel veriler bu çalışmada bulunan sonuçlar ve literatürden alınan modelleme sonuçlarının arasında kalmıştır (Şekil 5.31, Şekil 5.34 ve Şekil 5.36).

Şekil 5.37’de literatürde iki farklı giriş hızında, üç farklı yakıt hava eşdeğer oranında deneysel olarak çalışılmış alevlerin sıcaklık dağılımları modelleme sonuçları ile beraber verilmiştir. Yavaş olarak adlandırılan alev için sıcaklıklar modelleme sonucu ile uyum içindeyken, hızlı alev için, tepkime bölgesinde birbirine yakın olan sıcaklıklar, tepkime sonrası bölgede ayrışma göstermektedir. Bu farklılıklar Şekil 5.38 ve Şekil 5.39 ile birlikte yorumlandığında hızlı alev için sıcaklık dağılımında özellikle is oluşumu sonrası oluşan farklılığın gerek is taneciklerinin gerekse ışıınım modellemesinde kullanılan gazların ışıınımla olan ısı kaybından kaynakladığı düşünülmüştür.

Şekil 5.40 – 5.43’te sabit hız ve yakıt-hava eşdeğer oranında asetilen-hava karışımına hidrojen eklenmesinin sıcaklık, asetilen, hidroksil ve hacimsel is oranına etkisi modellenerek literatürden alınan modelleme sonuçları ile birlikte verilmiştir. Sıcaklık dağılımları Şekil 5.40’ta üst üste binmiş gözükmemektedir. Asetilen ve hidroksil mol oranlarında farklılıklar olmasına rağmen davranışlar aynıdır. Özellikle hidroksil dağılımında bu çalışmada bulunan sonuçlar, alevin bir miktar kaydığını göstermektedir. İs oluşumunda ise, is başlangıç noktası ve modellenen bölgenin sonunda sonuçlar birbirine yakın olmakla beraber ara bölgede farklılıklar görülmektedir. Kullanılan tepkime mekanizması ve is oluşum mekanizmasının farklılığından kaynaklandığı söylenebilir.

Son olarak ise ISF4 alevlerinden 2a, 2b, 2c, 3a, 3b ve 5a (üç farklı hız için) modellenmiştir. ISF4-2a alevi için üç farklı deneysel ve bir adet modelleme sonucu bu çalışmadan elde edilen verilerle beraber Şekil 5.45’te verilmiştir. Deneysel verilerin birbirinden farkı göz önüne alındığında bulunan modelleme sonucunun gayet tatmin edici olduğunu söylemek mümkündür. ISF4-2b ve 2c alevlerinde ise sonuçlar deneysel veriler ile uyum içindedir (Şekil 5.49, Şekil 5.50). ISF4-3a ve 3b alevlerinde hacimsel is oranı oluşum bölgesi modellemede bir miktar önce kendini gösterse de deneysel verilerin iyi bir şekilde tekrar elde edildiğini söylemek

mümkündür. ISF4-5a alevlerinde ise elde edilen is konsantrasyonu değerleri literatürden alınan deneysel verilerden bir miktar farklı da olsa genel anlamda deneysel verileri benzer şekilde tekrar etmiştir. Deneysel verilerde en yüksek is konsantrasyonu orta sıcaklık alevinde (giriş hızı 4 cm/s) bulunmuş, yapılan modellemede ise en yüksek is konsantrasyonu yüksek sıcaklık alevinde (giriş hızı 6 cm/s) bulunmuştur.

Modellemelerde farklı tepkime mekanizmaları, farklı yakıt-yakıcı karışımları, farklı hız ve yakıt hava eşdeğer oranları kullanılarak, ortaya konan yazılımın birbirinden farklı koşullarda da geçerli modelleme sonuçları ortaya çıkardığı gösterilmek istenmiştir. Hem akış alanı hem de is oluşumu çözümlemesindeki sonuçlar literatürdeki deneysel ve modelleme sonuçları ile karşılaştırılmış ve yazılan programın sonuçlarının literatürle uyumlu olduğu gösterilmiştir. Modellenen alev sonuçlarına göre;

- Yakıt-hava karışımına karbon dioksit eklenmesi is öncülü olarak kabul edilen asetilen miktarını düşürmektedir.
- Yakıt-hava eşdeğer oranı arttıkça (karışım zenginleştikçe) is miktarı artmaktadır.
- Soğuk karışım hızı arttıkça, alev sıcaklığı artmaktadır ve is miktarı da artmaktadır.
- Yakıt-hava karışımına hidrojen eklenmesi oluşan is miktarını düşürmektedir.

## 6.1 ÖNERİLER

Yapılan bu çalışma kapsamında yazılan programa olası en iyileştirmeler uygulanarak, performans artışı sağlanması düşünülmektedir. En iyileştirmelerin ardından daha yüksek karbon içerikli yakıtların analizlerinde de benzer çalışmalar yapılabilir. Yazılan programın genel yapısını etkilemeyecek şekilde yapılacak bir takım değişiklikler ile serbestçe yayılan alevlerin hızları ve ayrıca difüzyon alevleri için modelleme çalışmaları yapılması önerilebilir. Ayrıca benzer çalışmaların iki boyutlu yanma geometrileri üzerinde de tekrarlanması önerilmektedir. Yazılan programın bir genel ağ sayfası üzerinden açık kaynak kodlu olarak paylaşılması planlanmaktadır.

## KAYNAKLAR

- [1] **Gowlett J A J** (2016) The Discovery of Fire by Humans: A Long and Convolved Process. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*, 371(1696): 20150164.
- [2] **Turns S R** (2011) *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. Third edition, ISBN: 9780073380193, McGraw-Hill Education, 752 pp.
- [3] **Law C K** (2006) *Combustion Physics*. First edition, ISBN: 978-0-511-24584-8, Cambridge University Press, e-book, 742 pp.
- [4] **Rodriguez Y R** (2014) Great Smog of London. P Wexler (Ed.), *Encyclopedia of Toxicology* Third ed., ISBN: 978-0-12-386455-0, Academic Press, Oxford, pp. 796-797.
- [5] **Hoekman S K and Welstand J S** (2021) Vehicle Emissions and Air Quality: The Early Years (1940s–1950s). 12(10): 1354.
- [6] **Reith J W** (1951) Los Angeles Smog. *Yearbook of the Association of Pacific Coast Geographers*, 13: 24-32.
- [7] **Kallen S** (2019) Nationalism, Ideology, and the Cold War Space Race. *Constellations*, 10(2).
- [8] **Shreve B G** (2003) The US, The USSR, and Space Exploration, 1957-1963. *International Journal on World Peace*, 20(2): 67-83.
- [9] **British Petroleum Company** (2021) *BP Statistical Review of World Energy 70th Edition*, E-Book, 72 pp.
- [10] **International Energy Agency** (2021) *Turkey 2021 Energy Policy Review*, E-Book, 191 pp.
- [11] **Morley C** (15.04.2022) *A Chemical Equilibrium Program -Gaseq-*. Adres: <http://www.gaseq.co.uk/>
- [12] **Reynolds W C** (1986) *The Element Potential Method for Chemical Equilibrium Analysis: Implementation in the Interactive Program STANJAN*, Technical Rept., Dept. of Mechanical Engineering, Stanford Univ., Stanford, California, 49 pp.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [13] **Glaude P-A, Fournet R, Bounaceur R and Molière M** (2010) Adiabatic flame temperature from biofuels and fossil fuels and derived effect on NO<sub>x</sub> emissions. *Fuel Processing Technology*, 91(2): 229-235.
- [14] **de Moura R S V, Resende M T, da Silva J A and Campos J C C** (2016) Analysis of combustion efficiency in a pelletizing furnace. *Revista Escola de Minas*, 69(3): 317-324.
- [15] **Valera-Medina A, 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.
- [16] **Valera-Medina A, Morris S, Runyon J, Pugh D G, Marsh R, Beasley P and Hughes T** (2015) Ammonia, Methane and Hydrogen for Gas Turbines. *Energy Procedia*, 75: 118-123.
- [17] **Bishnu P S, Hamiroune D and Metghalchi M** (2001) Development of Constrained Equilibrium Codes and Their Applications in Nonequilibrium Thermodynamics. *Journal of Energy Resources Technology*, 123(3): 214-220.
- [18] **Chaimanatsakun A, Sawatmongkhon B, Theinnoi K and Sittichompoo S** (2022) An equilibrium analysis of hydrogen production from ethanol-gasoline fuel blends reforming. *Materials Today: Proceedings*, 52: 2387-2393.
- [19] **Mahishi M R and Goswami D Y** (2007) Thermodynamic optimization of biomass gasifier for hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(16): 3831-3840.
- [20] **CHEMKIN-PRO 15112**, Reaction Design: San Diego, 2011.
- [21] **ANSYS** (2015) *ANSYS Chemkin Theory Manual 17.0 (15151)*. Reaction Design, e-book, 412 pp.
- [22] **Kee R J, Grcar J F, Smooke M D and Miller J A** (1985) *A FORTRAN Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames*. SAND85-8240, Sandia National Laboratories, e-book, 122 pp.
- [23] **Kee R J, Rupley F M and Miller J A** (1989) *Chemkin-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics*, SAND-89-8009, United States, 127 pp.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [24] **Mze Ahmed A, Mancarella S, Desgroux P, Gasnot L, Pauwels J F and El Bakali A** (2016) Experimental and Numerical Study on Rich Methane/Hydrogen/Air Laminar Premixed Flames at Atmospheric Pressure: Effect of Hydrogen Addition to Fuel on Soot Gaseous Precursors. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(16): 6929-6942.
- [25] **Knyazkov D A, Shvartsberg V M, Dmitriev A M, Osipova K N, Shmakov A G, Korobeinichev O P and Burluka A** (2017) Combustion Chemistry of Ternary Blends of Hydrogen and C1–C4 Hydrocarbons at Atmospheric Pressure. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 53(5): 491-499.
- [26] **Liu F and Gülder Ö L** (2008) Effects of Pressure and Preheat on Super-Adiabatic Flame Temperatures in Rich Premixed Methane/Air Flames. *Combustion Science and Technology*, 180(3): 437-452.
- [27] **Marinov N M, Castaldi M J, Melius C F and Tsang W** (1997) Aromatic and Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Formation in a Premixed Propane Flame. *Combustion Science and Technology*, 128(1-6): 295-342.
- [28] **Mehta R S, Haworth D C and Modest M F** (2009) An assessment of gas-phase reaction mechanisms and soot models for laminar atmospheric-pressure ethylene–air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1): 1327-1334.
- [29] **Menon A V, Lee S-Y, Linevsky M J, Litzinger T A and Santoro R J** (2007) Addition of NO<sub>2</sub> to a laminar premixed ethylene–air flame: Effect on soot formation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1): 593-601.
- [30] **Sentko M M, Schulz S, Stelzner B, Anderlohr C, Vicari M and Trimis D** (2021) Experimental investigation of the pressure influence on flame structure of fuel-rich oxy-fuel methane flames for synthesis gas production. *Fuel*, 286: 119377.
- [31] **Tang Q, Wang M and You X** (2019) Measurements of sooting limits in laminar premixed burner-stabilized stagnation ethylene, propane, and ethylene/toluene flames. *Fuel*, 235: 178-184.
- [32] **Slavinskaya N A and Frank P** (2009) A Modelling Study of Aromatic Soot Precursors Formation in Laminar Methane and Ethene Flames. *Combustion and Flame*, 156(9): 1705-1722.
- [33] **Castaldi M J, Marinov N M, Melius C F, Huang J, Senkan S M, Pitt W J and Westbrook C K** (1996) Experimental and modeling investigation of aromatic and polycyclic aromatic hydrocarbon formation in a premixed ethylene flame. *Symposium (International) on Combustion*, 26(1): 693-702.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [34] Appel J, Bockhorn H and Wulkow M (2001) A detailed numerical study of the evolution of soot particle size distributions in laminar premixed flames. *Chemosphere*, 42(5): 635-645.
- [35] Xu F, Sunderland P B and Faeth G M (1997) Soot Formation in Laminar Premixed Ethylene/Air Flames at Atmospheric Pressure. *Combustion and Flame*, 108(4): 471-493.
- [36] Park S-H, Lee K-M and Hwang C-H (2011) Effects of Hydrogen Addition on Soot Formation and Oxidation in Laminar Premixed C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>/Air Flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(15): 9304-9311.
- [37] Yapp E K Y, Wells C G, Akroyd J, Mosbach S, Xu R and Kraft M (2017) Modelling PAH curvature in laminar premixed flames using a detailed population balance model. *Combustion and Flame*, 176: 172-180.
- [38] Chernov V, Thomson M J, Dworkin S B, Slavinskaya N A and Riedel U (2014) Soot formation with C<sub>1</sub> and C<sub>2</sub> fuels using an improved chemical mechanism for PAH growth. *Combustion and Flame*, 161(2): 592-601.
- [39] Hernández I, Lecocq G, Poitou D, Riber E and Cuenot B (2013) Computations of soot formation in ethylene/air counterflow diffusion flames and its interaction with radiation. *Comptes Rendus Mécanique*, 341(1): 238-246.
- [40] Zimmer L, Pereira F M, van Oijen J A and de Goey L P H (2016) Investigation of Mass and Energy Coupling Between Soot Particles and Gas Species in Modelling Ethylene Counterflow Diffusion Flames. *Combustion Theory and Modelling*, 21(2): 358-379.
- [41] Lecocq G, Poitou D, Hernández I, Duchaine F, Riber E and Cuenot B (2014) A Methodology for Soot Prediction Including Thermal Radiation in Complex Industrial Burners. *Flow, Turbulence and Combustion*, 92(4): 947-970.
- [42] Nobili A, Pratali Maffei L, Baggioli A, Pelucchi M, Cuoci A, Cavallotti C and Faravelli T (2022) On the radical behavior of large polycyclic aromatic hydrocarbons in soot formation and oxidation. *Combustion and Flame*, 235: 111692.
- [43] Pejpichestakul W, Ranzi E, Pelucchi M, Frassoldati A, Cuoci A, Parente A and Faravelli T (2019) Examination of a soot model in premixed laminar flames at fuel-rich conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(1): 1013-1021.
- [44] Vishwanathan G and Reitz R D (2010) Development of a Practical Soot Modeling Approach and Its Application to Low-Temperature Diesel Combustion. *Combustion Science and Technology*, 182(8): 1050-1082.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [45] **Xuan Y and Blanquart G** (2016) Two-Dimensional Flow Effects on Soot Formation in Laminar Premixed Flames. *Combustion and Flame*, 166: 113-124.
- [46] **Eyriboyun M** (1997) Endüstriyel Alevlerde İş Oluşumunun İncelenmesi. *Doktora Tezi*, Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Makina Mühendisliği Anabilim Dalı, İstanbul, 105 s.
- [47] **Tarhan T** (2004) Numerical Simulation of Laminar Reacting Flows. *PhD Thesis*, Middle East Technical University, The Graduate School of Natural and Applied Sciences, Chemical Engineering, Ankara, 219 pp.
- [48] **Öztürk S** (2008) Doğal Gaz Yanmasında Azotoksit Oluşumu. *Yüksek Lisans Tezi*, Zonguldak Karaelmas Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Makine Mühendisliği Anabilim Dalı, Zonguldak, 76 s.
- [49] **Öztürkmen M O** (2014) Turbulent Combustion Modelling with a Fully Coupled Fully Implicit Solver. *MSc Thesis*, Middle East Technical University, The Graduate School of Natural and Applied Sciences, Aerospace Engineering, Ankara, 172 pp.
- [50] **Özdemir İ** (2014) Hidrojenin Ön Karışım ve Difüzyon Yanmasının Sayısal Analizi. *Yüksek Lisans Tezi*, Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Makine Mühendisliği Anabilim Dalı, Kayseri, 148 s.
- [51] **Özsarı İ** (2015) Gaz Türbinlerinde Yanma Odalarının Teorik İncelenmesi ve Nümerik Olarak Modellenmesi. *Yüksek Lisans Tezi*, Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Gemi İnşaatı ve Gemi Makineleri Mühendisliği Anabilim Dalı, İstanbul, 120 s.
- [52] **Öztaş G** (2016) Dikdörtgeni bir Kanal ile Kuşatılmış Silindirik bir Çubuk Üzerinde Sabitlenmiş Önkarişım Laminer Alevin DeneySEL İncelenmesi. *Yüksek Lisans Tezi*, TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Makine Mühendisliği Anabilim Dalı, Ankara, 192 s.
- [53] **Cengel Y and Boles M** (2005) *Thermodynamics : An Engineering Approach*. 5th edition, ISBN: 9780073107684, McGraw-Hill, Boston, 1056 pp.
- [54] **Bockhorn H** (Ed.) (1994) *Soot Formation in Combustion: Mechanisms and Models*. First edition, ISBN: 978-3-642-85169-8, Springer-Verlag, Berlin, 596 pp.
- [55] **Liberman M** (2008) *Introduction to Physics and Chemistry of Combustion: Explosion, Flame, Detonation*. First edition, ISBN: 978-3-540-78758-7, Springer, e-book, 349 pp.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [56] **Jarosinski J and Veyssiere B** (Eds.) (2009) *Combustion Phenomena: Selected Mechanisms of Flame Formation, Propagation and Extinctions*. First edition, ISBN: 9780429127588, CRC Press, e-book, 234 pp.
- [57] **Williams F A** (1985) *Combustion Theory: The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems*. 2nd edition, ISBN: 0-8053-9801-5, The Benjamin /Cummings Publishing Company, California, 699 pp.
- [58] **Burcat A and Ruscic B** (2005) *Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables*. Seventh edition, (ANL-05/20, TAE 960), Argonne National Laboratory - Technion Israel Institute of Technology, e-book, 417 pp.
- [59] **McBride B J, Gordon S and Reno M A** (1993) *Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species*. NASA Technical Memorandum 4513, NASA, e-book, 94 pp.
- [60] **McBride B J, Zehe M J and Gordon S** (2002) *NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species*. NASA/TP—2002-211556, NASA, e-book, 295 pp.
- [61] **Mian A A** (1967) Measurement and Prediction of Binary Gaseous Diffusion Coefficients. *PhD Thesis*, Louisiana State University and Agricultural and Mechanical College, Chemical Engineering, Baton Rouge - Louisiana, 111 pp.
- [62] **Poling B E, Prausnitz J M and O'Connell J P** (2001) *The Properties of Gases and Liquids*. Fifth edition, ISBN: 0-07-011682-2, McGraw-Hill, New York, 768 pp.
- [63] **Singh K and Sood N** (2003) Viscosity and Thermal Conductivity of Gas Mixtures. *Indian Journal of Pure & Applied Physics*, 41: 121-127.
- [64] **Bird R B, Stewart W E and Lightfoot E N** (2007) *Transport Phenomena*. Second edition, ISBN: 0-471-41077-2, John Wiley & Sons Inc., New York, 914 pp.
- [65] **Annamalai K and Puri I K** (2006) *Combustion Science and Engineering*. First edition, ISBN: 9781420003789, CRC Press, e-book, 1184 pp.
- [66] **Tosun İ** (2013) *The Thermodynamics of Phase and Reaction Equilibria*. 1st edition, ISBN: 978-0-444-59497-6, Elsevier, Great Britain, 714 pp.
- [67] **Camberos J and Moubry J** (2001) Chemical Equilibrium Analysis With the Method of Element Potentials, *39th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 08 – 11 January 2001, Reno, NV, USA, AIAA Paper # 2001 – 0873.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [68] **Cantwell B J** (2021) *Aircraft and Rocket Propulsion*, AA283 Course Reader, Department of Aeronautics and Astronautics, Stanford University, Stanford, California, 339 pp.
- [69] **Bowman C T, Hanson R K, Davidson D F, Gardiner W C, Lissianski V, Smith G P, Golden D M, Frenklach M and Goldenberg M** (05.05.2020) *GRI-MECH 2.11*. Adres: [combustion.berkeley.edu/gri-mech/](http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/)
- [70] **Smith G P, Golden D M, Frenklach M, Moriarty N W, Eiteneer B, Goldenberg M, Bowman C T, Hanson R K, Song S, Gardiner W C, Lissianski V V and Qin Z** (05.05.2021) *GRI-MECH 3.0*. Adres: [combustion.berkeley.edu/gri-mech/](http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/)
- [71] **Zettervall N, Fureby C and Nilsson E J K** (2021) Evaluation of Chemical Kinetic Mechanisms for Methane Combustion: A Review from a CFD Perspective. *Fuels*, 2(2): 210-240.
- [72] **Bockhorn H, D'Anna A, Sarofim A F and Wang H** (Eds.) (2009) *Combustion Generated Fine Carbonaceous Particles*. First edition, ISBN: 978-3-86644-441-6, KIT Scientific Publishing, Karlsruhe, 752 pp.
- [73] **Dasgupta A** (2015) Numerical Simulation of Axisymmetric Laminar Diffusion Flames with Soot. *PhD Thesis*, The Pennsylvania State University, Mechanical Engineering, State College, PA, 178 pp.
- [74] **Haynes B S and Wagner H G** (1981) Soot Formation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 7(4): 229-273.
- [75] **Kennedy I M** (1997) Models of Soot Formation and Oxidation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 23(2): 95-132.
- [76] **Tree D R and Svensson K I** (2007) Soot Processes in Compression Ignition Engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 33(3): 272-309.
- [77] **Frenklach M** (2002) Reaction Mechanism of Soot Formation in Flames. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 4(11): 2028-2037.
- [78] **Shum J J** (2012) The Development and Validation of a Simplified Soot Model for use in Soot Emissions Prediction in Natural Gas Fuelled Engine Simulations. *MSc Thesis*, University of Toronto, Graduate Department of Mechanical & Industrial Engineering, Toronto, 111 pp.
- [79] **Guo H, Liu F and Smallwood G J** (2004) Soot and NO Formation in Counterflow Ethylene/Oxygen/Nitrogen Diffusion Flames. *Combustion Theory and Modelling*, 8(3): 475-489.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [80] **Leung K M, Lindstedt R P and Jones W P** (1991) A Simplified Reaction Mechanism for Soot Formation in Nonpremixed Flames. *Combustion and Flame*, 87(3): 289-305.
- [81] **Ahmad S** (2017) Numerical Simulation of Flames Using Flamelet Models. *PhD Thesis*, Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), Departament de Màquines i Motors Tèrmics, E.T.S.E.I.A.T., Terrassa, 123 pp.
- [82] **Poinsot T and Veynante D** (2001) *Theoretical and Numerical Combustion*. First edition, ISBN: 1-930217-05-6, R.T. Edwards, Philadelphia, PA, USA, 473 pp.
- [83] **El-Mahallawy F and El-Din Habik S** (2002) *Fundamentals and Technology of Combustion*. First edition, ISBN: 0-08-044106-8, Elsevier Science, Netherlands, 854 pp.
- [84] **Kee R J, Coltrin M E, Glarborg P and Zhu H** (2017) *Chemically Reacting Flow: Theory, Modeling, and Simulation*. Second edition, ISBN: 9781119184874, John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, USA, 747 pp.
- [85] **Roy S P and Haworth D C** (2016) A Systematic Comparison of Detailed Soot Models and Gas-Phase Chemical Mechanisms in Laminar Premixed Flames. *Combustion Science and Technology*, 188(7): 1021-1053.
- [86] **Zimmer L and Pereira F** (2020) Limitations of Simplified Models to Predict Soot Formation in Laminar Flames. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 42(6): 340.
- [87] **Liu F, Guo H, Smallwood G J and Gülder Ö L** (2003) Numerical Modelling of Soot Formation and Oxidation in Laminar Coflow Non-Smoking and Smoking Ethylene Diffusion Flames. *Combustion Theory and Modelling*, 7(2): 301-315.
- [88] **Liu F, Guo H, J. Smallwood G and El Hafi M** (2004) Effects of Gas and Soot Radiation on Soot Formation in Counterflow Ethylene Diffusion Flames. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84(4): 501-511.
- [89] **Blacha T, Di Domenico M, Gerlinger P and Aigner M** (2012) Soot Predictions in Premixed and Non-Premixed Laminar Flames Using a Sectional Approach for PAHs and Soot. *Combustion and Flame*, 159(1): 181-193.
- [90] **Carbonell D, Oliva A and Perez-Segarra C D** (2009) Implementation of Two-Equation Soot Flamelet Models for Laminar Diffusion Flames. *Combustion and Flame*, 156(3): 621-632.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [91] Moss J B, Stewart C D and Young K J (1995) Modeling Soot Formation and Burnout in a High Temperature Laminar Diffusion Flame Burning Under Oxygen-Enriched Conditions. *Combustion and Flame*, 101(4): 491-500.
- [92] Khalilian K (2013) Development and Validation of a Partially Coupled, Two-Equation Soot Model for Industrial Applications. *MSc Thesis*, University of Toronto, Graduate Department of Mechanical and Industrial Engineering, Toronto, 122 pp.
- [93] Shahriari B (2014) Model for Turbulent Kerosene Combustion in Industrial Applications. *MSc Thesis*, University of Toronto, Graduate Department of Mechanical and Industrial Engineering, Toronto, 149 pp.
- [94] Naseri A, Veshkini A and Thomson M J (2017) Detailed Modeling of CO<sub>2</sub> Addition Effects on the Evolution of Soot Particle Size Distribution Functions in Premixed Laminar Ethylene Flames. *Combustion and Flame*, 183: 75-87.
- [95] Chmielewski M and Gieras M (2015) Planck Mean Absorption Coefficients of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO and NO for Radiation Numerical Modeling in Combusting Flows. *Journal of Power Technologies*, 95(2): 97-104.
- [96] Hoffman J D (2001) *Numerical Methods of Engineers and Scientists*. Second edition, ISBN: 0-8247-0443-6, Marcel Dekker, USA, 823 pp.
- [97] Veldman A E P and Rinzema K (1992) Playing with Nonuniform Grids. *Journal of Engineering Mathematics*, 26(1): 119-130.
- [98] Smooke M D (1982) Solution of Burner-Stabilized Premixed Laminar Flames by Boundary Value Methods. *Journal of Computational Physics*, 48(1): 72-105.
- [99] Smooke M D, Miller J A and Kee R J (1983) Determination of Adiabatic Flame Speeds by Boundary Value Methods. *Combustion Science and Technology*, 34(1-6): 79-90.
- [100] Grcar J F (1996) *The Twopnt Program for Boundary Value Problems*. SAND91-8230, Sandia National Laboratories, e-book, 93 pp.
- [101] Burkardt J (05.04.2021) MINPACK. Adres: [https://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/f\\_src/minpack/minpack.html](https://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/f_src/minpack/minpack.html)
- [102] More J J, Garbow B S and Hillstom K E (1980) *User Guide for MINPACK-1*. ANL-80-74, Argonne National Laboratory, e-book, 258 pp.
- [103] Miller A (09.09.2020) NNES. Adres: <https://wp.csiro.au/alanmiller/>

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [104] **Bain R S** (07.08.2020) *NNES, Nonmonotonic Nonlinear Equation Solver*. Adres: <https://www.netlib.org/opt/nnes>
- [105] **Pratt D T and Wormeck J J** (1976) *CREK - A Computer Program for Calculation of Combustion Reaction Equilibrium and Kinetics in Laminar or Turbulent Flow*. Report WSU-ME-TEL-76-1, Department of Mechanical Engineering, Washington State University, 131 pp.
- [106] **Krogh F T** (01.01.2020) *MATH77/mathc90 Library*. Adres: [www.netlib.org/math/](http://www.netlib.org/math/)
- [107] **Lawson C L, Hanson R J, Kincaid D R and Krogh F T** (1979) Basic Linear Algebra Subprograms for Fortran Usage. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 5(3): 308–323.
- [108] **Anderson E, Bai Z, Bischof C, Blackford L S, Demmel J, Dongarra J J, Croz J D, Hammarling S, Greenbaum A, McKenney A and Sorensen D** (1999) *LAPACK Users' Guide*. Third edition, ISBN: 0898714478, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 439 pp.
- [109] **Skinner G M** (1994) Finding and Exploiting Parallelism in a Production Combustion Simulation Program. *MSc Thesis*, Graduate College of the University of Illinois at Urbana-Champaign, Computer Science, Urbana, Illinois, 93 pp.
- [110] **Davis S G, Joshi A V, Wang H and Egolfopoulos F** (2005) An Optimized Kinetic Model of H<sub>2</sub>/CO Combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1): 1283-1292.
- [111] **Oh S-K** (2013) Modified Lennard-Jones Potentials with a Reduced Temperature-Correction Parameter for Calculating Thermodynamic and Transport Properties: Noble Gases and Their Mixtures (He, Ne, Ar, Kr, and Xe). *Journal of Thermodynamics*, vol. 2013: 29 pp.
- [112] **Green D W and Perry R H** (2008) *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 8th edition, ISBN: 9780071422949, McGraw-Hill Education, New York, 2735 pp.
- [113] **Kestin J and Ro S T** (1974) The Viscosity of Nine Binary and Two Ternary Mixtures of Gases at Low Density. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 78(1): 20-24.
- [114] **Johnson P K** (2006) *A Method for Calculating Viscosity and Thermal Conductivity of a Helium-Xenon Gas Mixture*. NASA/CR– 2006-214394, e-book, 20 pp.
- [115] **Hashim E T and Al-Shorachi H N A** (2007) Prediction of Diffusion Coefficients for Binary Gas System. *Petroleum Science and Technology*, 25(8): 983-989.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [116] **Langenberg S, Carstens T, Hupperich D, Schweighoefer S and Schurath U** (2020) Technical note: Determination of Binary Gas-Phase Diffusion Coefficients of Unstable and Adsorbing Atmospheric Trace Gases at Low Temperature – Arrested Flow and Twin Tube Method. *Atmos. Chem. Phys.*, 20(6): 3669-3682.
- [117] **Glassman I and Yetter R A** (2008) *Combustion*. 4th edition, ISBN: 978-0-12-088573-2, Academic Press, USA, 800 pp.
- [118] **Boushaki T, Dhué Y, Selle L, Ferret B and Poinso T** (2012) Effects of Hydrogen and Steam Addition on Laminar Burning Velocity of Methane–Air Premixed Flame: Experimental and Numerical Analysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(11): 9412-9422.
- [119] **Kazakov A and Frenklach M** (12.08.2020) *Reduced Reaction Sets (DRM19 & DRM22)*. Adres: <http://combustion.berkeley.edu/drm/>
- [120] **McKeand M, Menon A, Iyer S, Lee S-Y, Linevsky M, Litzinger T and Santoro R.** (2006). Effects of NO<sub>2</sub> on Soot Formation in a Laminar Premixed Ethylene–Air Flame. *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 9-12 January 2006, Reno, Nevada, 1-12.
- [121] **ISF** (30.02.2022) *International Sooting Flame (ISF) Workshop*. Adres: <https://www.adelaide.edu.au/cet/isfworkshop/data-sets/laminar-flames>
- [122] **Wu J, Song K H, Litzinger T, Lee S-Y, Santoro R, Linevsky M, Colket M and Liscinsky D** (2006) Reduction of PAH and soot in premixed ethylene–air flames by addition of ethanol. *Combustion and Flame*, 144(4): 675-687.
- [123] **UCSD** (15.04.2022) *Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, Mechanism Ver. 2005-10-11, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego*. Adres: <https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>
- [124] **Kojima J, Ikeda Y and Nakajima T** (2005) Basic Aspects of OH(A), CH(A), and C<sub>2</sub>(d) Chemiluminescence in The Reaction Zone of Laminar Methane–Air Premixed Flames. *Combustion and Flame*, 140(1): 34-45.
- [125] **Kojima J, Ikeda Y and Nakajima T** (2000) Spatially Resolved Measurement of OH\*, CH\*, and C<sub>2</sub>\* Chemiluminescence in The Reaction Zone of Laminar Methane/Air Premixed Flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2): 1757-1764.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [126] Shmakov A G, Knyazkov D A, Bolshova T A, Dmitriev A M and Korobeinichev O P (2016) Effect of CO<sub>2</sub> Addition on the Structure of Premixed Fuel-Rich CH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> and C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Flames Stabilized on a Flat Burner at Atmospheric Pressure. *Energy & Fuels*, 30(3): 2395-2406.
- [127] Blanquart G (2008) Chemical and Statistical Soot Modeling. *PhD Thesis*, Stanford University, Department of Mechanical Engineering, California, 199 pp.
- [128] Do H-Q, Tran L-S, Gasnot L, Mercier X and El Bakali A (2021) Experimental Study of the Influence of Hydrogen as a Fuel Additive on the Formation of Soot Precursors and Particles in Atmospheric Laminar Premixed Flames of Methane. *Fuel*, 287: 119517.
- [129] Alfè M, Apicella B, Rouzaud J N, Tregrossi A and Ciajolo A (2010) The Effect of Temperature on Soot Properties in Premixed Methane Flames. *Combustion and Flame*, 157(10): 1959-1965.
- [130] Li Q, Wang T, Liu Y and Wang D (2012) Experimental Study and Kinetics Modeling of Partial Oxidation Reactions in Heavily Sooting Laminar Premixed Methane Flames. *Chemical Engineering Journal*, 207-208: 235-244.
- [131] Coppens F H V, De Ruyck J and Konnov A A (2007) The Effects of Composition on Burning Velocity and Nitric Oxide Formation in Laminar Premixed Flames of CH<sub>4</sub> + H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub> + N<sub>2</sub>. *Combustion and Flame*, 149(4): 409-417.
- [132] Metcalfe W K, Burke S M, Ahmed S S and Curran H J (2013) A Hierarchical and Comparative Kinetic Modeling Study of C<sub>1</sub> – C<sub>2</sub> Hydrocarbon and Oxygenated Fuels. *International Journal of Chemical Kinetics*, 45(10): 638-675.
- [133] Smith G P, Tao Y and Wang H (15.04.2022) *Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1)*. Adres: <http://nanoenergy.stanford.edu/ffcm1>
- [134] Melton T R, Vincitore A M and Senkan S M (1998) The Effects of Equivalence Ratio on the Formation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Soot in Premixed Methane Flames. *Symposium (International) on Combustion*, 27(2): 1631-1637.
- [135] Xu F, Lin K C and Faeth G M (1998) Soot Formation in Laminar Premixed Methane/Oxygen Flames at Atmospheric Pressure. *Combustion and Flame*, 115(1): 195-209.
- [136] Slavinskaya N, Braun-Unkloff M and Frank P (2005) Enhancement and Reduction of a Detailed Mechanism of PAH Formation for C<sub>1</sub> and C<sub>2</sub>/Air Systems, *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 10-13 January 2005, Reno, Nevada, AIAA 2005-1313.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [137] **Xu F and Faeth G M** (2000) Structure of the Soot Growth Region of Laminar Premixed Methane/Oxygen Flames. *Combustion and Flame*, 121(4): 640-650.
- [138] **Wu Q, Wang F, Li M, Yan J and Cen K** (2017) Simultaneous In-Situ Measurement of Soot Volume Fraction, H<sub>2</sub>O Concentration, and Temperature in an Ethylene/Air Premixed Flame Using Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy. *Combustion Science and Technology*, 189(9): 1571-1590.
- [139] **Felden A** (15.03.2022) *Analytically Reduced Mechanism for Ethylene/Air Combustion*. Adres: <https://www.cerfacs.fr/cantera/mechanisms/eth.php>
- [140] **Felden A** (2017) Development of Analytically Reduced Chemistries (ARC) and Applications in Large Eddy Simulations (LES) of Turbulent Combustion. *PhD Thesis*, National Polytechnic Institute of Toulouse (INP Toulouse), Mechanics, Energy, Civil Engineering, Processes (MEGeP), European Center for Research and Advanced Training in Scientific Computing (CERFACS), Toulouse, 213 pp.
- [141] **Simonsson J, Olofsson N-E, Török S, Bengtsson P-E and Bladh H** (2015) Wavelength Dependence of Extinction in Sooting Flat Premixed Flames in the Visible and Near-Infrared Regimes. *Applied Physics B*, 119(4): 657-667.
- [142] **Bisetti F, Blanquart G, Mueller M E and Pitsch H** (2012) On the Formation and Early Evolution of Soot in Turbulent Nonpremixed Flames. *Combustion and Flame*, 159(1): 317-335.
- [143] **Axelsson B, Collin R and Bengtsson P E** (2000) Laser-Induced Incandescence for Soot Particle Size Measurements in Premixed Flat Flames. *Applied Optics*, 39(21): 3683-3690.
- [144] **Brackmann C, Bood J, Bengtsson P-E, Seeger T, Schenk M and Leipertz A** (2002) Simultaneous Vibrational and Pure Rotational Coherent Anti-Stokes Raman Spectroscopy for Temperature and Multispecies Concentration Measurements Demonstrated in Sooting Flames. *Applied Optics*, 41(3): 564-572.
- [145] **Migliorini F, De Iuliis S, Cignoli F and Zizak G** (2008) How “Flat” is the Rich Premixed Flame Produced by Your McKenna Burner? *Combustion and Flame*, 153(3): 384-393.
- [146] **Zerbs J, Geigle K P, Lammel O, Hader J, Stirn R, Hader R and Meier W** (2009) The Influence of Wavelength in Extinction Measurements and Beam Steering in Laser-Induced Incandescence Measurements in Sooting Flames. *Applied Physics B*, 96(4): 683-694.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [147] Hadeif R, Geigle K P, Meier W and Aigner M (2010) Soot Characterization with Laser-Induced Incandescence Applied to a Laminar Premixed Ethylene–Air Flame. *International Journal of Thermal Sciences*, 49(8): 1457-1467.
- [148] Bladh H, Johnsson J, Olofsson N E, Bohlin A and Bengtsson P E (2011) Optical Soot Characterization Using Two-Color Laser-Induced Incandescence (2C-LII) in The Soot Growth Region of a Premixed Flat Flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1): 641-648.
- [149] De Iuliis S, Maffi S, Cignoli F and Zizak G (2011) Three-Angle Scattering/Extinction versus TEM Measurements on soot in Premixed Ethylene/Air Flame. *Applied Physics B*, 102(4): 891-903.
- [150] De Iuliis S, Maffi S, Migliorini F, Cignoli F and Zizak G (2012) Effect of Hydrogen Addition on Soot Formation in an Ethylene/Air Premixed Flame. *Applied Physics B*, 106(3): 707-715.
- [151] Ciajolo A, D'Anna A, Barbella R, Tregrossi A and Violi A (1996) The Effect of Temperature on Soot Inception in Premixed Ethylene Flames. *Symposium (International) on Combustion*, 26(2): 2327-2333.
- [152] Apicella B, Barbella R, Ciajolo A and Tregrossi A (2002) Formation of Low- and High-Molecular-Weight Hydrocarbon Species in Sooting Ethylene Flames. *Combustion Science and Technology*, 174(11-12): 309-324.

## EK AÇIKLAMALAR

### Ek A: Yedi Katsayılı NASA Polinomları Örnekleri [70]

|                 |                 |                 |                 |                 |          |          |   |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|----------|----------|---|
| O2              | TPIS89O         | 2               | G               | 200.000         | 3500.000 | 1000.000 | 1 |
| 3.28253784E+00  | 1.48308754E-03  | -7.57966669E-07 | 2.09470555E-10  | -2.16717794E-14 |          |          | 2 |
| -1.08845772E+03 | 5.45323129E+00  | 3.78245636E+00  | -2.99673416E-03 | 9.84730201E-06  |          |          | 3 |
| -9.68129509E-09 | 3.24372837E-12  | -1.06394356E+03 | 3.65767573E+00  |                 |          |          | 4 |
| H               | L 7/88H         | 1               | G               | 200.000         | 3500.000 | 1000.000 | 1 |
| 2.50000001E+00  | -2.30842973E-11 | 1.61561948E-14  | -4.73515235E-18 | 4.98197357E-22  |          |          | 2 |
| 2.54736599E+04  | -4.46682914E-01 | 2.50000000E+00  | 7.05332819E-13  | -1.99591964E-15 |          |          | 3 |
| 2.30081632E-18  | -9.27732332E-22 | 2.54736599E+04  | -4.46682853E-01 |                 |          |          | 4 |
| H2              | TPIS78H         | 2               | G               | 200.000         | 3500.000 | 1000.000 | 1 |
| 3.33727920E+00  | -4.94024731E-05 | 4.99456778E-07  | -1.79566394E-10 | 2.00255376E-14  |          |          | 2 |
| -9.50158922E+02 | -3.20502331E+00 | 2.34433112E+00  | 7.98052075E-03  | -1.94781510E-05 |          |          | 3 |
| 2.01572094E-08  | -7.37611761E-12 | -9.17935173E+02 | 6.83010238E-01  |                 |          |          | 4 |
| HNCO            | BDEA94H         | 1N 1C 1O 1G     | 300.000         | 5000.000        | 1478.000 |          | 1 |
| 6.22395134E+00  | 3.17864004E-03  | -1.09378755E-06 | 1.70735163E-10  | -9.95021955E-15 |          |          | 2 |
| -1.66599344E+04 | -8.38224741E+00 | 3.63096317E+00  | 7.30282357E-03  | -2.28050003E-06 |          |          | 3 |
| -6.61271298E-10 | 3.62235752E-13  | -1.55873636E+04 | 6.19457727E+00  |                 |          |          | 4 |

Yedi katsayılı NASA polinomlarında her bir bileşen için verilen değerler aşağıdaki şekilde tanımlanır (Yazılan programın okuduğu şekilde).

| Satır No. | İçerik                                                 | Format   | Kolon No |
|-----------|--------------------------------------------------------|----------|----------|
| 1         | Bileşen Adı                                            | A16      | 1-16     |
|           | Element sembolü ve sayısı                              | 4(A2,I3) | 25-44    |
|           | Düşük Sıcaklık                                         | E10.4    | 46-55    |
|           | Yüksek Sıcaklık                                        | E10.4    | 56-65    |
|           | Orta Sıcaklık                                          | E10.4    | 66-76    |
| 2         | Yüksek sıcaklık aralığı                                | 5E15.0   | 1-75     |
|           | için a <sub>1</sub> -a <sub>5</sub>                    |          |          |
| 3         | Yüksek sıcaklık aralığı a <sub>6</sub> -a <sub>7</sub> | 2E15.0   | 1-30     |
|           | Düşük sıcaklık aralığı a <sub>1</sub> -a <sub>3</sub>  | 3E15.0   | 31-75    |
| 4         | Düşük sıcaklık aralığı a <sub>4</sub> -a <sub>7</sub>  | 4E15.0   | 1-60     |

## Ek B: Dokuz Katsayılı NASA Polinomları Örnekleri [58]

CH2-SINGLET Methylene Radical IUPAC Task Group for Selected Radicals  
3 IU3/03 C 1.00H 2.00 0.00 0.00 0.00 0 14.0265800 428800.000  
50.000 200.000 7 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 9939.626  
4.282865690D+01-3.126873888D+00 4.092782870D+00-1.439679385D-03 1.240790484D-05  
-5.664925770D-08 1.078450834D-10 0.000000000D+00 5.038708520D+04-4.018844800D-01  
200.000 1000.000 7 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 9939.626  
-1.712482601D+04 2.867463030D+02 2.333364882D+00 3.643294630D-03-1.845501486D-06  
1.667755316D-09-7.494030720D-13 0.000000000D+00 4.903726330D+04 9.311239710D+00  
1000.000 6000.000 7 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 9939.626  
1.946875268D+05-1.777640184D+03 6.502126510D+00 3.590503910D-04 6.760941970D-08  
-2.891563718D-11 2.213737217D-15 0.000000000D+00 6.061885350D+04-1.873868416D+01

H2O2 DOROFEEVA JPCRD 32 (2003), 879. HF298=-135.88/-0.2 kJ  
3 T 8/03 H 2.000 2.00 0.00 0.00 0.00 0 34.0146800 -135880.000  
50.000 200.000 7 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 11162.000  
-2.948812406D+03 2.106424628D+02-1.663695094D+00 7.089191870D-02-4.018655710D-04  
1.182472127D-06-1.369197008D-09 0.000000000D+00-1.835181920D+04 2.734727038D+01  
200.000 1000.000 7 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 11162.000  
-9.147349230D+04 1.541838551D+03-5.830038900D+00 3.228622620D-02-3.869929140D-05  
2.464650495D-08-6.339102100D-12 0.000000000D+00-2.483469541D+04 5.797150880D+01  
1000.000 6000.000 7 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 11162.000  
1.505950346D+06-5.241735310D+03 1.138415930D+01-1.333635318D-04-5.533679760D-09  
5.604149320D-12-4.174609100D-16 0.000000000D+00 1.461216226D+04-4.722314830D+01

Dokuz katsayılı NASA polinomlarında her bir bileşen için verilen değerler aşağıdaki şekilde tanımlanır (Yazılan programın okuduğu şekilde).

| Satır No. | İçerik                                                | Format     | Kolon No |
|-----------|-------------------------------------------------------|------------|----------|
| 1         | Bileşen Adı                                           | A16        | 1-16     |
| 2         | Sıcaklık Aralığı Sayısı                               | I2         | 1-2      |
|           | Elementer semboller ve sayıları                       | 5(A2,F6,2) | 11-50    |
|           | Molekül Ağırlığı                                      | F13.7      | 53-65    |
|           | 298.15 K'de oluşum entalpisi                          | F15.5      | 66-80    |
| 3         | Sıcaklık aralığı                                      | 2F11.3     | 1-22     |
| 4         | İlk beş katsayı                                       | 5D16.9     | 1-80     |
| 5         | Sıradaki katsayı                                      | 2D16.9     | 1-32     |
|           | Son iki katsayı                                       | 2D16.9     | 49-80    |
| -         | 3,4 ve 5 sıcaklık aralığı sayısı kadar tekrar edilir. |            |          |

### Ek C: Bileşen Potansiyel Parametreleri Örnekleri [70]

|                                 |   |         |       |       |       |        |
|---------------------------------|---|---------|-------|-------|-------|--------|
| CH <sub>4</sub>                 | 2 | 141.400 | 3.746 | 0.000 | 2.600 | 13.000 |
| O <sub>2</sub>                  | 1 | 107.400 | 3.458 | 0.000 | 1.600 | 3.800  |
| OH                              | 1 | 80.000  | 2.750 | 0.000 | 0.000 | 0.000  |
| N*C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> | 2 | 266.800 | 4.982 | 0.000 | 0.000 | 1.000  |
| H <sub>2</sub> O                | 2 | 572.400 | 2.605 | 1.844 | 0.000 | 4.000  |
| AR                              | 0 | 136.500 | 3.330 | 0.000 | 0.000 | 0.000  |

Her bir satır için aşağıdaki değerler okunur (yazılan programın okuduğu şekilde).

| Kolon No | İçerik                                                                     |
|----------|----------------------------------------------------------------------------|
| 1-19     | Bileşen Adı                                                                |
| 20-21    | Molekül Düzeni<br>0=Atom, 1=Doğrusal Molekül<br>2=Doğrusal Olmayan Molekül |
| 24-31    | Lennard-Jones potansiyeli kuyu derinliği                                   |
| 36-41    | Lennard-Jones çarpışma çapı                                                |
| 46-51    | Dipol moment                                                               |
| 56-60    | Kutuplanabilirlik                                                          |
| 64-70    | 298 K'de dönel gevşeme sayısı                                              |

## Ek D: Tepkime Mekanizması Örnekleri [133]

### • Standart Tepkimeler

|                       |           |       |          |
|-----------------------|-----------|-------|----------|
| CH3OH+HO2<=>CH3O+H2O2 | 3.340E-02 | 4.120 | 16233.00 |
| CH2 (S) +O=>2H+CO     | 3.000E+13 | 0.000 | 0.00     |
| H2O2+O<=>OH+HO2       | 8.513E+06 | 2.000 | 3970.00  |

### • Üçüncü Kütle Tepkimeleri

|                                                                         |           |        |          |
|-------------------------------------------------------------------------|-----------|--------|----------|
| HCO+M<=>H+CO+M                                                          | 4.800E+17 | -1.200 | 17734.00 |
| AR/ 1.40/ HE/ 1.31/ N2/ 1.31/ H2/ 1.31/ O2/ 1.32/ H2O/15.31/ CO/ 2.04/  |           |        |          |
| CO2/ 2.00/ CH4/ 2.60/ CH2O/ 3.29/ CH3OH/ 3.00/ C2H6/ 3.00/              |           |        |          |
| O+H+M<=>OH+M                                                            | 4.710E+18 | -1.000 | 0.00     |
| AR/ 0.75/ HE/ 0.75/ N2/ 1.32/ H2/ 2.50/ H2O/15.80/ CO/ 2.52/ CO2/ 5.01/ |           |        |          |
| CH4/ 2.00/ CH2O/ 2.50/ CH3OH/ 3.00/ C2H6/ 3.00/                         |           |        |          |

### • Basınç Bağımlı Tepkimeler

|                                                                        |           |        |          |
|------------------------------------------------------------------------|-----------|--------|----------|
| H+O2 (+M) <=>HO2 (+M)                                                  | 4.565E+12 | 0.440  | 0.00     |
| LOW / 6.370E+20 -1.720 525.00/                                         |           |        |          |
| TROE/ 0.5000 30.00 90000.00 90000.00 /                                 |           |        |          |
| AR/ 0.60/ HE/ 0.71/ N2/ 0.96/ H2/ 1.87/ O2/ 0.75/ H2O/15.81/           |           |        |          |
| CO/ 1.90/ CO2/ 3.45/ CH4/ 2.00/ CH2O/ 2.50/ CH3OH/ 3.00/ C2H6/ 3.00/   |           |        |          |
| CO+O (+M) <=>CO2 (+M)                                                  | 1.880E+11 | 0.000  | 2430.00  |
| LOW / 1.400E+21 -2.100 5500.00/                                        |           |        |          |
| AR/ 0.87/ H2/ 2.50/ H2O/12.00/ CO/ 1.90/ CO2/ 3.80/ CH4/ 2.00/         |           |        |          |
| CH2O/ 2.50/ CH3OH/ 3.00/ C2H6/ 3.00/                                   |           |        |          |
| CH3CHO (+M) <=>CH4+CO (+M)                                             | 5.440E+21 | -1.740 | 86364.00 |
| LOW / 2.290E+58 -11.300 95922.00/                                      |           |        |          |
| SRI/ 0.1380 -670.0000 0.0010 1.0000 0.0000 /                           |           |        |          |
| H2/2.00/ H2O/6.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ CH4/2.00/ CH2O/2.50/ CH3OH/3.00/ |           |        |          |
| C2H2/3.00/ C2H4/3.00/ C2H6/3.00/                                       |           |        |          |

## Ek E: Bu Çalışma Kapsamında Kullanılan Tepkime Mekanizmaları

**Çizelge E.1** Bu çalışmada kapsamında kullanılan tepkime mekanizmaları.

| Mekanizma Adı | Bileşen Sayısı | Tepkime Sayısı                     | Kaynak     |
|---------------|----------------|------------------------------------|------------|
| DRM22         | 24             | 208<br>(104 adet tersinir tepkime) | [119]      |
| YARC          | 29             | 330<br>(158 adet tersinir tepkime) | [139, 140] |
| FFCM-1        | 38             | 569<br>(278 adet tersinir tepkime) | [133]      |
| San Diego     | 40             | 360<br>(180 adet tersinir tepkime) | [123]      |
| RedMech       | 47             | 290<br>(66 adet tersinir tepkime)  | [142]      |
| GRI-Mech 3.0  | 53             | 634<br>(309 adet tersinir tepkime) | [70]       |



## ÖZGEÇMİŞ

Nuri Özgür AYDIN, İlkokula Zonguldak'ta başlayıp, Malatya'da tamamladı. Ortaokul ve liseyi Ankara Yıldırım Beyazıt Anadolu Lisesi'nde tamamladıktan sonra girdiği Hacettepe Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Nükleer Enerji Mühendisliği'nden 2006 yılında mezun oldu. 2010 yılında ZKÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Makina Mühendisliği Anabilim Dalı'nda yüksek lisansını bitirdi. Halen ZBEÜ Makina Mühendisliği Bölümünde araştırma görevliliğini sürdürmektedir.