

# ÖN KARIŞIMLI BİR YAKICIDA KOK FIRINI GAZI RENKSİZ DAĞITILMIŞ YANMA KARAKTERİSTİKLERİNİN SAYISAL OLARAK İNCELENMESİ

Sezgin TAŞDEMİR

# YÜKSEK LİSANS TEZİ ENERJİ SİSTEMLERİ MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI

GAZİ ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HAZİRAN 2022

### ETİK BEYAN

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

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

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

Sezgin TAŞDEMİR 23/06/2022

## ÖN KARIŞIMLI BİR YAKICIDA KOK FIRINI GAZI RENKSİZ DAĞITILMIŞ YANMA KARAKTERİSTİKLERİNİN SAYISAL OLARAK İNCELENMESİ (Yüksek Lisans Tezi)

#### Sezgin TAŞDEMİR

## GAZİ ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

#### Haziran 2022

### ÖZET

Gittikçe artan enerji ihtiyacından dolayı küresel bir tehditle karşı karşıya kalan dünyada, sahip olunan enerji kaynakları verimli kullanılmalıdır. Fosil yakıt olan kömür rezervleri ülkemizde de fazlaca bulunmasına rağmen, kömürün taşınma zorluğu, yakıcı maliyeti, yanma sonu kirletici emisyon fazlalığı nedeniyle doğrudan kullanılması elverisli olmayabilir. Yanma şartları daha kolay olan gaz yakıtların kirletici emisyon değerlerinin de daha az olmasından dolayı bu çalışmada katı yakıt olan kömürün koklaştırılmasından elde edilen yan ürün kok fırını gazı kullanılmıştır. Kok fırını gazı 10 kW ısıl güce sahip bir yakıcıda, hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,2$  şartlarında tüketilmiştir. Ayrıca ön karışımsız yakıcıya göre hava-yakıt karışımını daha çok artıran ve dinamik basınç değişimlerini azaltan ön karışımlı yakıcının, yanma sonu oluşan NO emisyon seviyesini ve yanma gürültüsünü azaltacağı beklentisiyle bu çalışmada yakıt ön karışımlı olarak tüketilmiştir. Daha ekonomik ve enerji tasarrufu olması açısından yanma simülasyonları kullanmak yeni bulgulara kılavuzluk sağlayabilir. Bu amaçla deney düzeneği ticari bir HAD kodu ile üç boyutlu olarak modellenmiştir. Eddy Dissipation Concept yanma modeline GRI-Mech 3.0 kimyasal kinetiği yardımıyla oluşturulan 162 basamaklı reaksiyonlar entegre edilmiştir. Standard k-E türbülans modeli ve P-1 radyasyon modeli de sisteme dahil edilerek yanma sonu oluşan sıcaklık ile NO değerleri deneysel sonuçlarla karşılaştırılmış ve iyi bir benzerlik yakalanmıştır. Yüksek oranda H2 içeren kok fırını gazının, yanma sırasında yüksek oranda NO<sub>X</sub> oluşturacağı beklentisine karşı, renksiz dağıtılmış yanma yöntemi üzerinde de irdeleme yapılmıştır. Bu yöntem uygulanırken, hava içerisindeki O2 oranı %21'den azalacak şekilde N2 veya CO2 seyrelticileri artırılarak sıcaklık dağılımı, yanma sonu oluşan NO, CO ve CO<sub>2</sub> emisyonları incelenmiştir. Sonuçlarda daha düşük maksimum sıcaklık ve daha homojen termal alanın elde edildiği, NO seviyelerinde önemli ölçüde düşüşün olduğu görülmüştür. Seyreltici olarak CO2 kullanmanın sıcaklık dağılımı ve NO azalması açısından daha etkili olduğu, CO azalması açısından ise N2 ile seyreltmenin daha etkili olduğu sonucuna varılmıştır.

Bilim Kodu	:	92801	
Anahtar Kelimeler	:	Kok fırını gazı, renksiz dağıtılmış yanma, ön karışımlı yakıcı, hesaplamalı akışkanlar dinamiği	
Sayfa Adedi	:	88	
Danışman	:	Doç. Dr. Serhat KARYEYEN	

# NUMERICAL INVESTIGATION OF COKE OVEN GAS COLORLESS DISTRIBUTED COMBUSTION CHARACTERISTICS IN A PREMIXED COMBUSTOR

## (M. Sc. Thesis)

### Sezgin TAŞDEMİR

### GAZİ UNIVERSITY

#### GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

### June 2022

### ABSTRACT

In the world, which is facing a global threat due to the ever-increasing energy need, the energy resources should be used efficiently. Although coal reserves, which are fossil fuels, are abundant in our country, it may not be convenient to use coal directly due to the difficulty of transportation, the cost of combustor, and the excess of post-combustion pollutant emissions. Since the gaseous fuels, which have easier combustion conditions, have lower pollutant emission values, the by-product coke oven gas obtained from the coking of the solid fuel coal was used in this study. The coke oven gas was consumed in a burner with a thermal power of 10 kW, at conditions of excess air coefficient  $\lambda = 1,2$ . In addition, the premixed burner, which increases the air-fuel mixture more and reduces the dynamic pressure changes compared to the non-premixed burner, is consumed as premixed fuel in this study, with the expectation that it will reduce the NO emission level and combustion noise after combustion. In terms of being more economical and energy efficient, using combustion simulations can guide new findings. For this purpose, the experimental setup was modeled in three dimensions with a commercial CFD code. The Eddy Dissipation Concept combustion model integrates 162-step reactions created with the help of GRI-Mech 3.0 chemical kinetics. Standard k-E turbulence model and P-1 radiation model were also included in the system, and the temperature and NO values after combustion were compared with the experimental results and a good similarity was achieved. Against the expectation that the coke oven gas containing high H<sub>2</sub> will generate high NO<sub>X</sub> during combustion, the colorless distributed combustion method has also been examined. While applying this method, the temperature distribution, NO, CO and  $CO_2$ emissions after combustion were investigated by increasing the N<sub>2</sub> or CO<sub>2</sub> diluents so that the  $O_2$  ratio in the air would decrease from 21%. In the results, it was observed that lower maximum temperature and more homogeneous thermal field were obtained, and there was a significant decrease in NO levels. It was concluded that using CO2 as a diluent is more effective in terms of temperature distribution and NO reduction, while dilution with N2 is more effective in terms of CO reduction.

Science Code	:	92801
Key Words	:	Coke oven gas, colorless distributed combustion, premixed burner, computational fluid dynamics
Page Number	:	88
Supervisor	:	Assoc. Prof. Dr. Serhat KARYEYEN

### TEŞEKKÜR

Öncelikle tez konusunun belirlenmesi ve çalışmanın her adımında farklı bakış açısı ve bilimsel katkılarıyla beni aydınlatan, kıymetli tecrübelerini ve zamanlarını esirgemeyerek bana her fırsatta yardımcı olan çok değerli tez danışmanım Doç. Dr. Serhat KARYEYEN'e en içten şükranlarımı sunarım.

Bütün eğitim-öğretim hayatım boyunca destek olan, bu günlere gelmemde en büyük katkı sahibi aileme, çalışma süresince sabır gösteren ve bu hayattaki en büyük şansım canım nişanlıma sonsuz teşekkür ederim.

Bu tezi genç yaşta kaybettiğim babam, Etem TAŞDEMİR'in aziz hatırasına ithaf ediyorum.

# İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	X
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xi
RESİMLERİN LİSTESİ	xiii
SİMGELER VE KISALTMALAR	xiv
1. GİRİŞ	1
2. KOK FIRINI GAZI, YANMA, REAKSİYON KİNETİĞİ, EMİSYON, ALEV GERİ TEPMESİ, ALEV SÖNMESİ	13
2.1. Kok Firini Gazi	14
2.2. Yanma	16
2.3. Reaksiyon Kinetiği	18
2.4. Emisyon	19
2.5. Alev Geri Tepmesi (Flashback)	22
2.6. Alev Sönmesi (Blow-off)	23
3. YANMANIN MODELLENMESİ	25
3.1. HAD Modelleme	25
3.1.1. HAD kodunun yetenekleri ve avantajları	26
3.1.2. HAD kodunun bileşenleri	27
3.2. Temel Denklemler	28
3.2.1. Kütle korunumu	28
3.2.2. Momentum korunumu	28

## Sayfa

3.2.3. Enerjinin korunumu	29
3.2.4. Taşınım denklemi	31
3.2.5. Standard k-E türbülans modeli	31
3.2.6. Eddy dissipation concept (EDC) modeli	32
3.2.7. Sınır koşulları hesabı	33
4. DENEY DÜZENEĞİNİN TANITILMASI	41
4.1. Yanma Odası	42
4.2. Ön Karışımlı Yakıcı	43
4.3. Ölçüm Elemanları	44
4.3.1. Sıcaklık ölçerler	45
4.3.2. Baca gazı analizörü	45
4.3.3. Debi ölçerler	46
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	47
5.1. Modelin Doğrulanması	47
5.1.1. Reaksiyon basamak sayısının etkisi	47
5.1.2. Türbülans modelinin etkisi	51
5.2. Renksiz Dağıtılmış Yanma (CDC) Yöntemi	54
5.2.1. Sıcaklık	55
5.2.2. Emisyon	60
6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	71
6.1. Sonuçlar	71
6.2. Öneriler	73
KAYNAKLAR	75
EKLER	83

## Sayfa

EK-1. Çalışmada kullanılan reaksiyon basamakları	84
ÖZGEÇMİŞ	88

## ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Sa	yfa
Cizelge 2.1. Koklaştırma esnasında elde edilen kok gazı içeriği	15
Cizelge 2.2. Kömür gazları ve hidrojen ile metanın fiziksel özellikleri	16
Cizelge 2.3. Zararlı gazların tehlikesine göre sınıflandırılması	20
Cizelge 2.4. GRI-Mech 3.0 kimyasal kinetiğine göre bazı NO <sub>X</sub> oluşum reaksiyonları	21
Cizelge 3.1. Standard k-E türbülans modelinde kullanılan sabitler	32
Cizelge 3.2. %21 O <sub>2</sub> gazı içeren hava şartlarında yakıt ve hava bileşenlerinin toplam mole göre konsantrasyon değerleri	34
Cizelge 3.3. N <sub>2</sub> ile seyreltme durumunda %20 O <sub>2</sub> gazı içeren hava şartlarında yakıt ve hava bileşenlerinin toplam mole göre konsantrasyon değerleri	36
Cizelge 3.4. N <sub>2</sub> ile seyreltme durumunda, %21'den %15'e kadar O <sub>2</sub> gazı içeren hava şartlarında, yakıt ve hava bileşenlerinin toplam mole göre konsantrasyon değerleri	37
Cizelge 3.5. CO <sub>2</sub> ile seyreltme durumunda %20 O <sub>2</sub> gazı içeren hava şartlarında yakıt ve hava bileşenlerinin toplam mole göre konsantrasyon değerleri	38
Cizelge 3.6. CO <sub>2</sub> ile seyreltme durumunda %21'den %15'e kadar O <sub>2</sub> gazı içeren hava şartlarında yakıt ve hava bileşenlerinin toplam mole göre konsantrasyon değerleri	39

## ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil S	ayfa
Şekil 2.1. Metan, propan ve hidrojen alevlerinin sönme mesafesi	24
Şekil 4.1. Ön karışımlı yakıcının akış kesit görünümü	44
Şekil 5.1. Deney düzeneği, sayısal modelleme ve sonuçların karşılaştırılması	47
Şekil 5.2. Eksenel sıcaklık profiline reaksiyon basamak sayısının etkisi	48
Şekil 5.3. Radyal sıcaklık profiline reaksiyon basamak sayısının etkisi	49
Şekil 5.4. Eksenel NO profiline reaksiyon basamak sayısının etkisi	50
Şekil 5.5. Eksenel sıcaklık profiline türbülans modelinin etkisi	51
Şekil 5.6. Radyal sıcaklık profiline türbülans modelinin etkisi	52
Şekil 5.7. Eksenel NO profiline reaksiyon türbülans modelinin etkisi	53
Şekil 5.8. Eksenel sıcaklık profiline CDC'nin etkisi	56
Şekil 5.9. Radyal sıcaklık profiline CDC'nin etkisi (N <sub>2</sub> ile seyreltme sol, CO <sub>2</sub> ile seyreltme sağ)	56
Şekil 5.10. Sıcaklık konturlarına CDC'nin etkisi	57
Şekil 5.11. Hava fazlalık katsayısı λ = 1,5 yanma şartları altında CDC'nin eksenel sıcaklık profiline etkisi	58
Şekil 5.12. Hava fazlalık katsayısı $\lambda = 1,5$ yanma şartları altında CDC'nin radyal sıcaklık profiline etkisi	58
Şekil 5.13. Hava fazlalık katsayısı $\lambda = 1,5$ yanma şartları altında CDC'nin sıcaklık konturuna etkisi	59
Şekil 5.14. Eksenel NO profiline CDC'nin etkisi	61
Şekil 5.15. Radyal NO profiline CDC'nin etkisi	61
Şekil 5.16. NO konturlarına CDC'nin etkisi	62
Şekil 5.17. Yanma odası çıkışındaki NO miktarına N <sub>2</sub> seyreltici gazı kullanılarak uygulanan CDC'nin etkisi	64
Şekil 5.18. Yanma odası çıkışındaki NO miktarına CO <sub>2</sub> seyreltici gazı kullanılarak uygulanan CDC'nin etkisi	64

### Şekil

## Sayfa

Şekil 5.19.	Hava fazlalık katsayısı $\lambda = 1,5$ yanma şartları altında CDC'nin eksenel NO profiline etkisi	65
Şekil 5.20.	Hava fazlalık katsayısı $\lambda = 1,5$ yanma şartları altında CDC'nin radyal NO profiline etkisi	65
Şekil 5.21.	Hava fazlalık katsayısı $\lambda = 1,5$ yanma şartları altında NO konturlarına CDC'nin etkisi	66
Şekil 5.22.	N <sub>2</sub> seyrelticisi ile uygulanan CDC'nin eksenel CO profiline etkisi	67
Şekil 5.23.	CO <sub>2</sub> seyrelticisi ile uygulanan CDC'nin eksenel CO profiline etkisi	67
Şekil 5.24.	N <sub>2</sub> ve CO <sub>2</sub> seyrelticileri ile uygulanan CDC'nin maksimum OH miktarına etkisi	68
Şekil 5.25.	$N_2$ seyrelticisi ile uygulanan CDC'nin eksenel $CO_2$ profiline etkisi	69
Şekil 5.26.	CO <sub>2</sub> seyrelticisi ile uygulanan CDC'nin eksenel CO <sub>2</sub> profiline etkisi	69

## RESİMLERİN LİSTESİ

Resim	Sayfa
Resim 4.1. Deney düzeneği	41
Resim 4.2. Yanma odası	42
Resim 4.3. Kok fırın gazı alevinin görüntüsü	43

### SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklamalar
Α	Arrhenius faktörü
a	Termal difüzyon
С	Boşluktaki ışık hızı
С	Karbon
CH <sub>4</sub>	Metan
CO	Karbon monoksit
CO <sub>2</sub>	Karbon dioksit
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	Etilen
$C_2H_6$	Etan
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Propan
d	Yanma reaksiyon bölge uzunluğu
D	Çap
Da	Damköhler sayısı
Ε	Aktivasyon enerjisi
F	Kuvvet
J	Akı
Н	Entalpi
HCN	Hidrojen siyanür
H <sub>2</sub>	Hidrojen molekülü
H <sub>2</sub> 0	Su buharı molekülü
H <sub>2</sub> S	Hidrojen sülfür
k	Isı iletim katsayısı
k	Reaksiyon hız sabiti
K	Kelvin
K	Kömürleşme indeksi
kcal	Kilokalori
kj	Kilojoule

Simgeler

Açıklamalar

kg	Kilogram
kmol	Kilomol
kW	Kilowatt
m	Metre
m	Kütle
<b>m</b> <sup>3</sup>	Metreküp
N <sub>2</sub>	Azot molekülü
NO	Azot monoksit
NO <sub>X</sub>	Azot oksit
NO <sub>2</sub>	Azot dioksit
NO <sub>3</sub>	Azot trioksit
N <sub>2</sub> O	Diazot oksit
N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Diazot trioksit
N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	Diazot tetraoksit
N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	Diazot pentaoksit
02	Oksijen molekülü
ОН	Hidroksil
Р	Basınç
Q	Isı transferi
Q	Debi
R	Universal gaz sabiti
S	Türbülans gerilim altındaki deformasyon
S <sub>L</sub>	Laminer alev hızı
SO <sub>X</sub>	Kükürt oksit
<b>SO</b> <sub>2</sub>	Kükürt dioksit
<b>SO</b> <sub>3</sub>	Kükürt trioksit
Т	Sıcaklık
u	Hız
U	İç enerji
v	Hız
v	Hacim

Açıklamalar

W	Hız
ppm	Parts per million
°C	Santigrad derece
ρ	Yoğunluk
τ	Viskoz kayma gerilmesi
Г	Difüzyon katsayısı
μ	Dinamik viskozite
3	Yayılma oranı
λ	Hava fazlalık katsayısı
Ø	Eşdeğerlik oranı
$\gamma^*$	Kütlesel oran

Kısaltmalar
-------------

## Açıklamalar

CDC	Colorless distributed combustion
CFD	Computational fluid dynamics
EDC	Eddy dissipation concept
GRI	Gas Research Institute
HAD	Hesaplamalı akışkanlar dinamiği
LHV	Lower heating value
MILD	Moderate or intense low-oxygen dilution
PDF	Probability density function
PID	Proportional integral derivative
PIV	Particle imaginary velocimetry

## 1. GİRİŞ

Her geçen gün artan ve küresel tehdit haline dönüşen enerji arayışı, enerji kaynaklarının daha verimli kullanılmasını zorunlu hale getirmektedir. Daha temiz bir çevre için her ne kadar alternatif enerji kaynakları öne çıksa da, enerji ihtiyacını tamamen karşılayamayıp, sadece destek olmaktan çıkamaması nedeniyle fosil yakıtlardan elde edilen enerji hala daha fazladır [1, 2]. Fakat fosil yakıtlar, ülkemizde de bolca bulunan kömür rezervleri, fazla miktarda inorganik madde içermesi, azot ve kükürt barındırması nedeniyle doğrudan tüketilmesi sırasında fazlaca kirletici emisyonlar meydana getirmektedir. Ayrıca katı yakıtların taşınmasının zor olması, büyük hacimli yakıcılara ihtiyaç duyması, bol miktarda kül ve cüruf oluşturması, yanma sırasında fazlaca hava kullanılmasına rağmen genelde tamamen yanmaması sorunlarına karşı gaz yakıtlar, boru hatlarıyla uzak mesafelere kolayca gönderilebilme, düşük maliyetli ve küçük hacimli yakıcılarla tüketilebilme, daha az hava ile genelde tamamen yanabilme, özellikle de çok daha az emisyon oluşturabilme avantajı sunmaktadır [3]. Daha temiz enerji arayışı idrakiyle, katı yakıt olan kömürün koklaştırılması sonucu elde edilen kok firini gazı, bu çalışmada motive kaynağı olmaktadır. Ayrıca enerji tasarrufu ve kirletici emisyonlar açısından, kok fırını gazının daha verimli üretim yollarının araştırılması da ilgi görmektedir [4-6]. Kok fırını gazı yüksek miktarda hidrojen gazı ile birlikte metan gazı da içerdiğinden, ısıl değeri bakımından iyi konumdadır [7]. Ayrıca hidrojenin, zehirli veya kanserojen olmaması [8, 9], molekül ağırlığının düşük olması, yayınım katsayısının yüksek olması, ısıl iletkenliğinin yüksek olması, viskozitesinin düşük olması ve yüksek alev hızı ile küçük sönme mesafesine sahip olduğundan, iyi bir enerji taşıyıcı bu özellikleri sayesinde fakir yanma şartlarında da alev kararlılığını artırmaktadır [10]. Doğalgaza olan bağımlılığımızı azaltmada ülkemiz için alternatif veya enerji üretiminde destek bir yakıt olabilir beklentisiyle bu çalışmada yakıt olarak kok fırını gazı kullanılmıştır.

Kok firini gazinin isil değeri doğalgaza göre düşüktür. Bu nedenle bu gazin yanma performansının iyileştirilmesi için bu alanda çalışmaların artırılması gerekmektedir. Bu gazın yanma performansını azaltan birçok etken vardır. Kok firini gazı çok bileşenli bir yakıt olup, içerisinde yüksek oranda hidrojen gazı barındırmaktadır. Hidrojen gazının ısıl değeri ile yanma reaksiyonuna katılma eğiliminin yüksek olması, yanma sırasında yoğun alev bölgesini yanma ekipmanına (yakıcı) doğru yaklaştırarak, sıcaklığın yüksek değerlere çıkmasına neden olacaktır [11]. Bu durum yanma donanımına da zarar verebilir [12]. Kok

fırın gazı bileşenlerinde azot gazı da bulundurduğundan, yüksek sıcaklık ortamında NO<sub>X</sub> oluşumunu da artıracağı tahmin edilmektedir [1]. Bu durumda yoğun ısıl alanın dağıtılması uygun bir çözüm yolu olabilir. Yanma sonucunda oluşan emisyon seviyesini düşürebilmek için sıfıra yakın kirletici emisyon sunabilen, tek tip termal alan oluşturabilen ve yanma gürültüsünü azaltabilen metot olan Renksiz Dağılmış Yanma (CDC) yöntemi [13], sisteme dahil edilerek kok fırını gazının CDC yöntemiyle yanma şartları irdelenmiştir. Çok bileşenli yakıtların yanma şartları, ön karışımlı yakıcılar, CDC yöntemi konusunda yapılan bazı çalışmalar şu şekildedir;

#### Literatür taraması

İlbaş ve Karyeyen (2016), ön karışımlı bir yakıcıda hidrojen içeren yakıtların deneysel olarak yakılması incelenmiş, çalışmalarında kok fırını gazı ve şehir gazı yakıtlarının yanma sonuçları irdelenmiş, yanma odası üzerindeki ölçüm noktalarından, bu yakıtların yanma sonu sıcaklık ve NO<sub>X</sub> ölçüm sonuçları paylaşılmıştır. Yanma odası boyunca ve radyal olarak sıcaklık ölçüm sonuçlarının hepsinde kok fırını gazı değerlerinin daha yüksek olduğu, yanma odası boyunca ölçülen NO<sub>X</sub> seviyesinin de yine kok fırını gazında daha yüksek olduğu gösterilmiştir. Bu sonuçların, kok fırını gazının ısıl değerinin daha yüksek olmasından kaynaklandığı belirtilmiştir [14].

İlbaş ve Karyeyen (2018), yapılan deneysel çalışmada, düşük kalorili kömür gazları ile hidrojen gazının karışımı sonucu elde edilen yakıtların yanma sonuçları paylaşılmıştır. 10 kW ısıl güce sahip yakıt debisinin, eşdeğerlik oranı Ø = 0.83 şartlarındaki hava debisi ile yanması sonucu elde edilen, yanma odasının eksenel ve radyal ölçüm verileri irdelenmiş, hacimsel olarak %12 H<sub>2</sub>, %0,5 CH<sub>4</sub>, %28 CO, %5 CO<sub>2</sub>, %54,5 N<sub>2</sub> karışımına sahip ve alt ısıl değeri 1124 kcal/m<sup>3</sup> olan jeneratör gazı ile %2 H<sub>2</sub>, %30 CO, %8 CO<sub>2</sub>, %60 N<sub>2</sub> karışımına sahip ve alt ısıl değeri 900 kcal/m<sup>3</sup> olan yüksek fırın gazının, alt ısıl değeri 2422 kcal/m<sup>3</sup> olan H<sub>2</sub> gazı ile karıştırılarak elde edilen yakıtlar kullanılmış, sonuçlarda jeneratör gazı ile yüksek fırın gazının içerisine H<sub>2</sub> gazı ilave edildikçe eksenel sıcaklık seviyesinin arttığı, özellikle giriş bölgesinde daha çok arttığı gösterilmiştir. Kirletici NO<sub>x</sub> emisyonları açısından, yanma odası giriş bölgesinde her iki gaz sonuçlarının aynı olmasına rağmen, yanma odası boyunca ilerledikçe jeneratör gazı verilerinin daha yüksek olduğu, H<sub>2</sub> gazı ilave edildikçe her iki gaz için de ölçüm değerlerinin arttığı gösterilmiştir. CO<sub>2</sub> açısından her iki gaz sonuçlarının, yanma odası çıkışında aynı olmasına rağmen, CO açısından yüksek firin gazı verisinin daha fazla olduğu,  $H_2$  gazı ilave edildikçe her iki gazın yanma sonuçlarında, CO ve CO<sub>2</sub> seviyelerinin düştüğü gösterilmiştir [15].

Ortiz ve diğerleri (2021), yapılan sayısal ve deneysel çalışmada, kısmi ön karışımlı yakıcıda metan yakıtı yakılarak, sıcaklık ve kirletici emisyon CO değerleri incelenmiş, deney düzeneğinde içinde su olan bir kaba alevin dokunması sağlanmış, sayısal analizde elde edilen radyal sıcaklık verileri ile deneysel verilerin uyumlu olduğu belirtilmiş, yakıcı üzerinden gönderilen taze gaz akış yönü doğrultusunda, 10 mm uzaklaşılmasına rağmen sıcaklığın düşük olmasının, ön karışımlı alevin yapısı gereği, sürüklenme alanının oluşturduğu koniden kaynaklandığı, alev hızı yönünden karşılaştırıldığında ise k-omega türbülans modeli sonuçlarının deneysel veriler ile daha çok benzerlik gösterdiği belirtilmiş, yanma bölgesine gönderilen yakıtın miktarı artırıldıkça hızın etkisiyle süpürülmenin arttığı, bu nedenle soğuk koni bölgesinin genişlediği, CO emisyon seviyesinin de arttığı belirtilmiş, yakıcı çıkış kesit alanı değiştirilerek ve yakıt debisi değiştirilerek termal verimlilik aranmış, 350-400 W civarında maksimum termal verimlilik elde edildiği belirtilmiştir [16].

Zhen, Miao, Leung, Cheung ve Huang (2016), yapılan deneysel çalışmada Bunsen Alevi üzerinde çalışılmış, ön karışımlı olarak tüketilen yakıt içerisindeki oksitleyicinin sıcaklığı artırılarak, yanma sonucu oluşan emisyon miktarı ve yanma alanında kaybedilen ısı miktarı irdelenmiş, CH4 ve H2 yakıtlarına N2 ve CO2 gazları ayrı ayrı eklenerek üç farklı çok bileşenli yakıt oluşturulmuş, yanma sonuçlarında alev sıcaklıklarının ve hızlarının arttığı, ön karışımlı alev yapısı olan koni yüksekliğinin ise azaldığı gösterilmiş, giriş sıcaklığının yükseltilmesiyle beraber NO<sub>X</sub> seviyesinin de yükseldiği, özellikle N<sub>2</sub> veya CO<sub>2</sub> eklenmemiş haldeki yakıtın tüketilmesi durumunda NO<sub>X</sub> seviyesinin daha fazla yükseldiği, CO2 eklenmesiyle oluşturulan yakıtın yanmasında ise en az oranda yükseldiği belirtilmiş, kirletici diğer bir emisyon olan CO sonuçlarında ise tam tersi olarak en yüksek CO emisyon miktarı, CO2 eklenmesiyle oluşturulan yakıtın yanmasında meydana geldiği paylaşılmış, en az CO emisyon miktarı ise ekleme yapılmayan CH4-H2 yakıtın yanmasında oluştuğu gösterilmiştir. CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub> yakıtının tüketilmesi durumunda, yakıcıdan uzaklaştıkça ısı transfer oranı en yüksek oranda azalmasına rağmen, CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> yakıtının tüketilmesi durumunda yakıcıdan uzaklaştıkça ısı transfer oranı en az oranda azaldığı deneysel verilerle gösterilmiştir [17].

İlbaş, Yanık ve Karyeyen (2018), kömürün koklaştırma prosesinde hava kullanılarak oluşturulan jeneratör gazı ve koklaştırma yan ürünü olan kok fırını gazının yanma şartları üzerinde PDF/karışım yanma modeli, standard k-E türbülans modeli ile P-1 radyasyon modeli kullanılarak sayısal bir çalışma yapılmış, 0,3 metre çapında ve 0,9 metre boyundaki yanma odasında ön karışımsız olarak yanma şartları incelenmiş, çalışma 20 kW ısıl güç ve  $\lambda = 1,2$  hava fazlalığındaki yanma durumunda, hava içerisinde bulunan %21 oranındaki  $O_2$ konsantrasyonunu %30, %40 ve %50 olacak şekilde artırılmış, Sonuçlarda oksijen seviyesi artırıldıkça alev sıcaklığının arttığı, %50 O2 konsantrasyonunda maksimum sıcaklığa, 2200 K seviyelerine ulaştığı, yüksek termal alan bölgesinin yanma odası çıkışı bölgesinden yakıcıya doğru yaklaştığı, radyal olarak da merkeze doğru yaklaşmanın olduğu, O2 konsantrasyonu artırıldıkça NO<sub>X</sub> seviyesinin de arttığı, eksenel uzaklık olarak 0,6 metre bölgesinde NO<sub>x</sub> seviyesinin 1500 ppm üzerine çıktığı gösterilmiştir. Farklı olarak ise CO seviyesinde azalma meydana geldiği, bu yanma sonu ürünü yoğunluğunun yakıcıya doğru yaklaştığı belirtilmiştir. O2 konsantrasyonu artırıldıkça CO2 seviyesinde artma olmasından dolayı yanma durumunun iyileştiği belirtilmiş, kok fırını gazı için elde edilen sonuçların jeneratör gazı için de geçerli olduğu paylaşılmıştır [7].

Salem (2018), yapılan sayısal çalışmada çok bileşenli yakıtın ön karışımlı yanma şartları incelenmiş, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub> ve CO'dan oluşan bu yakıt için 2, 5 ve 10 basamaklı yanma reaksiyonları oluşturulmuş, sonuçlarda reaksiyon basamak sayısı yükseldikçe maksimum sıcaklıkta azalma görüldüğü belirtilmiş, tek boyutlu Chemkin kodu analizlerinde de yanma sonucu değişen yakıt ve ürünlerin mol seviyeleri gösterilmiştir. Laminer alev hızı analizi için CH<sub>4</sub> ve H<sub>2</sub> yakıtları farklı oranlarda karıştırılarak tüketilmiş, oksitleyici olarak kullanılan havanın miktarı da değiştirilerek sayısal analize devam edilmiş, yakıt içerisindeki H<sub>2</sub> oranı yükseltildikçe alev hızının da yükseldiği, stokiyometrik yanma şartlarında en yüksek seviyede olduğu belirtilmiştir [2].

Zhai, Shen, L. Guo, H. Guo ve Dong (2021), yapılan çalışmada kısmi ön karışımlı yakıcı kullanılmış, yakıt olarak iki bileşenli olan  $CH_4$  ve  $H_2$  gazları kullanılmış ve yanma sonucunda oluşan alevin rengi ve ölçüleri irdelenmiş, yakıt içerisindeki  $H_2$  gazı oranı değiştirilse de oksitleyici olarak kullanılan hava miktarı artırıldıkça sürüklenme alanının küçüldüğü belirtilmiş, yakıt içerisindeki  $H_2$  gazı oranı artırıldıkça alev parlaklığının azaldığı, hava oranı artırıldıkça da bu parlaklığın daha da azaldığı belirtilmiştir [18].

Tomczak, Benelli, Carrai ve Cecchini (2002), farklı oranlarda karıştırılan doğalgaz ve hidrojen gazından türetilen yakıt karışımının gaz türbininde yanma şartları incelenmiş, tamamen %100 doğalgazdan oluşan yakıtın yanmasında, alev boyu yanma odasının ileri noktalarına kadar büyüyerek daha homojen sıcaklık profili elde edilmesine rağmen, yakıt karışımı içerisindeki hidrojen gazı konsantrasyonu artırıldıkça alev boyunun azaldığı, maksimum sıcaklığın arttığı ve termal alanın merkezde yoğunlaştığı gösterilmiştir [19].

İlbaş ve Yılmaz (2010), H<sub>2</sub> ve CH<sub>4</sub> alevi üzerinde simülasyon yapılmış ve model sabitini belirleyebilmek için sayısal ve deneysel ölçüm sonuçları karşılaştırılmış, girdap ayrışma model sabitinin 1 veya 4 değerinde olması durumunda karşılaştırma yapılmış, çalışmada %70 CH<sub>4</sub> ve %30 H<sub>2</sub> ile %30 H<sub>2</sub> ve %70 CH<sub>4</sub> yakıtları kullanılmış, 40 kW ısıl güçte %20 daha fazla hava ile yanma şartları incelenmiş, model sabiti 1 alınması durumunda deney sonuçları ile sayısal çalışma sonuçlarının yakın olduğu belirtilmiştir. Kullanılan üç farklı yakıt (H<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> ve CH<sub>4</sub>) içerisinde en hızlı tükenen yakıtın hidrojen olduğu belirtilmiş, hidrojenin difüzivitesinin yüksek olmasından, yanma işleminin daha çabuk başlamasından ve reaksiyon zamanının daha kısa olmasından kaynaklandığı belirtilmiştir. Konik giriş yanma odasında, alev çıkışa doğru yönlendirildiğinden daha doğrusal bir sıcaklık profili elde edildiği, ani genişlemeli yanma odasında ise köşe kısımlara yanma sonu sıcak gazların ilerlemesiyle ölü sıcaklık bölgelerinin oluştuğu sonucuna varılmıştır [20].

Mardani ve Tabejamaat (2010), metan gazı içerisine farklı oranlarda karıştırılan hidrojen gazı ile elde edilen yakıtın, ön karışımsız sayısal yanma şartları incelenmiş, yanma modeli olarak EDC (Eddy Dissipation Concept) seçilmiş ve GRI-Mech 2.11 kimyasal kinetiği yardımıyla reaksiyonlar oluşturulmuş, sonuçta hidrojen gazı oranı artırıldıkça alevin az süpürüldüğü, daha fazla termal alan yoğunluğunun oluştuğu belirtilmiştir [21].

Tuncer (2009),  $H_2$  gazı ile zenginleştirilmiş  $CH_4$  gazı laminer alev hızına ve NO emisyon oluşumuna basıncın etkisi sayısal olarak incelenmiş, alev geri tepme mekanizmaları belirtilerek, bu sorunun giderilmesinin yanma odası tasarımıyla giderilebileceği belirtilmiş, yanma odasında artan basıncın alev hızını düşürdüğü fakat NO emisyon seviyesini artırdığı, hava-yakıt karışım oranındaki çalkantının NO emisyon seviyesini artırdığı belirtilmiş,  $H_2$  gazı ile zenginleştirilmiş  $CH_4$  gazı alevinde, NO oluşumunda temel rolü genişletilmiş Zeldovich Mekanizmasının oynadığı sonucuna varılmıştır [22]. İlbaş, Yılmaz ve Özkan (2006), ani genişlemeli ve konik girişli gaz türbini yanma odasında hidrojen ve hidrokarbon yanmasının modellemesi ve  $NO_X$  oluşum değerleri incelenmiş, en yüksek sıcaklığın H<sub>2</sub> gazı yanmasında (2053 K) meydana geldiği, en yüksek  $NO_X$ değerinin de (862 ppm) bu en yüksek sıcaklık bölgesinde olduğu belirtilmiştir [23].

Zhou, Tao, Lin ve Kong (2013), CO ve  $H_2$  gazı karışımıyla oluşturulan yakıtın, oksitleyici olarak kullanılan hava ile ön karışımlı yakıcıda yanma şartları sayısal (bir boyutlu) olarak incelenmiş, oluşturulan yakıt-hava karışımının giriş basınç ve sıcaklığı değiştirilerek alev hızı ve kalınlığı değişimi incelenmiş, sonuçlarda giriş basınç ve sıcaklık seviyesinin artması alev hızını artırmış, alev kalınlığını ise düşürmüş olduğu belirtilmiştir [24].

Karyeyen (2018), ön karışımsız yakıcıda yakılan metan yakıtının, dağıtık yanma şartlarında sayısal yanma analizi yapılmış, standard k-E türbülans modeli ve P-1 radyasyon modeli yanma analizine dahil edilmiş, yakıt-hava karışımı farklı eşdeğerlik oranlarında karıştırılmış ve oksijen konsantrasyonu %21, %18 ve %15 olacak şekilde dağıtılmış yanma koşulları incelenmiş, bu koşullarda metan alev sıcaklığının düştüğü gösterilmiş, dağıtılmış yanma metodunun NO<sub>X</sub> emisyonunu azalttığı sonucuna varılmış, yanma odası çıkışında CO<sub>2</sub> emisyon seviyesinin hafifçe arttığı belirtilirken NO<sub>X</sub> kirletici emisyon seviyesinin neredeyse sıfır olduğu vurgulanmıştır [25].

Khalil ve Gupta (2017), CDC metodunun Borghi Diyagramı üzerindeki bölgesi konusunda ve alev yapısı ile türbülans etkileşimi üzerinde irdeleme yapılmış, CDC bölgesinin Reynolds ve Damköhler sayılarına bağlı olduğu belirtilmiş, bu iki sayının girdap alevleri ile dağıtılmış alevler arasında net bir ayrım yaptığı belirtilmiş, alev kalınlığı ve laminer alev hızının oksijen konsantrasyonunun düşürülmesiyle önemli ölçüde etkilendiği vurgulanmıştır. Yeterli karışmanın dağıtık yanma metodunda kritik öneme sahip olduğu, alevdeki reaksiyon bölgesi dağıtıldığı için termal NO<sub>X</sub> oluşumun azaldığı belirtilmiştir [13].

Fackler, Karalus, Novosselov, Kramlich ve Malte (2011), metan gazı ile karbon dioksit ve azot gazının karıştırılmasıyla oluşturulan yakıtta, yakıt bileşenlerinden karbon dioksit ve azot gazı konsantrasyonu değiştirilerek deneysel yanma sonuçları irdelenmiş, sonuçta her iki seyreltme durumunda da  $NO_X$  emisyon seviyesinin azaldığı deneysel verilerle paylaşılmıştır [26].

Saqr, Aly, Sies ve Wahid (2010), metan yakıtını yakmak için kullanılan hava üzerinde oluşturulan türbülans yoğunluğunun  $NO_X$  oluşumuna etkileri irdelenmiş, oksitleyici olarak kullanılan hava üzerinde oluşturulan türbülans yoğunluğu artırıldıkça metan alevinin oluşturduğu NO emisyon seviyesinde büyük oranda düşüşün olduğu belirtilmiştir [27].

Karyeyen, Feser ve Gupta (2019), farklı miktarlarda karıştırılan CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> ve CO<sub>2</sub> gazlarından oluşan yakıtın, girdaplı yakıcıda CDC yöntemi altında yanma şartları incelenmiş, hacimce %10 N<sub>2</sub>, %10 CO<sub>2</sub>, %50 H<sub>2</sub> ve %30 CH<sub>4</sub>'ten oluşan yakıt, eşdeğerlik oranı  $\emptyset = 0,9$  şartları altında tüketilmiş ve alev görüntüsü paylaşılmıştır. Oksijen konsantrasyonu %23'ten %19'a düşecek şekilde seyreltilerek yakıtın oluşturduğu alev görüntüleri paylaşılmıştır. Seyreltme durumunda alev yoğunluğunun dağılmış olduğu belirtilmiş, eşdeğerlik oranı düşürüldükçe de aynı sonuçlar olduğu gösterilmiştir [28].

Darwish, Hidegh, Csemány ve Józsa (2022), yapılan deneysel çalışmada bütonal ve dizel karışımlı yakıt tüketilmiş, deney düzeneğinde girdaplı yakıcı kullanılmış, ayrıca oksitleyici olarak kullanılan havanın sıcaklığı PID kontrolörü yardımıyla değiştirilmiş, bu değiştirme esnasında sınır koşulunu etkileyen hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,16$  ile  $\lambda = 1,32$  arasında kalacak şekilde ayarlanmış, ayrıca yanma bölgesine gönderilen yakıt ve havanın debisi de değiştirilerek yanma sonucu oluşan kirletici emisyon miktarı, alev rengi, gürültü yoğunluğu ve OH ara ürün yoğunluğu üzerinde irdeleme yapılmıştır. Basınç ile kontrol edilen hava debisinde, basınç değeri artırıldıkça (hava debisi artırıldıkça) alev renginin azaldığı belirtilmiş, kirletici emisyon olan NO ve CO seviyelerinde de azalmanın olduğu gösterilmiş, yakıt karışımı içerisindeki bütanın hacimsel oranı artırılması durumunda alev kalınlığının ve OH ara ürün yoğunluğunun azaldığı belirtilmiştir. Fakat yakıt kurlanılması durumunda ise OH ara ürün yoğunluğunun artığı belirtilmiştir. Fakat yakıt içerisindeki bütanın hacimsel oranı artırıldıkça gürültü yoğunluğunun yaklaşık 10 dB azaldığı belirtilmiştir [29].

Greco, Mira ve Jiang (2019), yapılan sayısal analizde ön karışımlı yanma şartları incelenmiş, yakıt olarak biyogaz kullanılmış, biyogazın bünyesinde bulunan  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $CH_4$ ve  $CO_2$  gazlarının miktarı değiştirilerek farklı yakıtlar oluşturulmuş, bu şekilde oluşturulan beş farklı yakıtların yanma sonuçları birbirleriyle karşılaştırılmıştır. Laminer alev hızı, yanma sonucu meydana gelen molar değişimler ve sıcaklık kıyaslaması için Chemkin kodu kullanılmış, sonuçlarda ise tamamen  $CH_4$ 'den oluşan yakıtın tüketilmesi durumunda en yüksek sıcaklığın elde edildiği, bu yakıt içerisine  $CO_2$  eklenmesi durumunda ise sıcaklığın azaldığı,  $CO_2$  yerine  $N_2$  eklenmesi durumunda sıcaklık üzerinde önemli değişikliklerin olmadığı belirtilmiştir. Laminer alev hızı hususunda ise sadece  $CH_4$ 'den oluşan yakıtın tüketilmesi durumunda en yüksek laminer alev hızına ulaşıldığı,  $CO_2$  eklenmesi durumunda ise laminer alev hızının azaldığı,  $CO_2$  yerine  $N_2$  eklenmesi durumunda ise laminer alev hızının arttığı belirtilmiştir. Laminer alev hızı üzerinde  $CH_4$  yakıtının çok etkili olduğu sonucuna varılmıştır [30].

Hadef, Mameri, Tabet ve Aouachria (2017),  $CO_2$  ile seyreltme durumunda emisyon değişimi üzerine yapılan sayısal çalışmada,  $CO_2$  oranı %0'dan %24'e kadar artırılması durumunda, 1900 K civarında olan maksimum sıcaklığın 1400 K civarına düştüğü, HCN, H ve OH ara ürün miktarında seyreltme oranına göre kademeli azalma olduğu gösterilirken, HCO ara ürün miktarında artma olduğu, NO emisyon seviyesinde de kademeli azalmanın olduğu, %24 seviyesindeki  $CO_2$  ile seyreltme durumunda NO mol sayısının sıfıra yaklaştığı belirtilmiş,  $CO_2$  ile seyreltmenin H ve OH ara ürünlerinin değişimi üzerinde önemli rol oynadığı sonucuna varılmış [31].

Ilbaş, Karyeyen ve Çilingir (2016), ön karışımlı ve ön karışımsız olarak tüketilen metanın deneysel yanma şartları irdelenmiştir. Farklı ısıl güç (5 kW, 10 kW, 15 kW ve 20 kW) ve farklı hava fazlalık katsayısı ( $\lambda = 1,2$ ,  $\lambda = 1,5$  ve  $\lambda = 1,7$ ) değerleri kullanılarak, yanma odası çıkışındaki sıcaklık ve yanma sonu ürünleri seviyesi incelenmiş, 1 metre uzunluğunda ve 0,4 metre çapındaki yanma odasında iki farklı tip yakıcı kullanılmış, (yakıcıların akış kesit alanları farklı olup, ön karışımsız olan yakıcıda ayrıca 15° türbülans açısı bulunmaktadır) sonuçlarda hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,2$  yanma şartlarında, ısıl güç arttıkça sıcaklık seviyesinin her iki yakıcı türü sonuçlarında arttığı, 10 kW civarında birbirlerine yakın sonuç verdiği, diğer ısıl güç yanmalarında ön karışımlı yanma sonucu oluşan sıcaklığın daha fazla olduğu gösterilmiştir. Yine farklı ısıl güçlerdeki yanma sonu ürünlerinden olan CO<sub>2</sub> seviyesinin ön karışımlı yanma şartlarında daha fazla olduğu, bu durumda ön karışımlı yakıcının daha iyi performans sağlayabildiği, ayrıca kirletici emisyon olan CO seviyesinin ön karışımlı yakıcıda daha az olduğu gösterilmiştir. NO<sub>X</sub> emisyon seviyesinin ise ön karışımsız yakıcıda daha az olduğu gösterilmiştir. Hava fazlalık katsayısı artırılması durumunda ise her iki yakıcı sonuçlarında da sıcaklığın, CO<sub>2</sub> ve NO<sub>X</sub> seviyelerinin azaldığı, CO seviyesinde ise az miktarda artışın olduğu deneysel sonuçlarla paylaşılmıştır [32]. Burada belirtmek gerekirse, yakıcıların akış kesit alanlarının farklı olması, dolayısıyla türbülans etkisinin de dikkate alınması gerekmektedir.

Nazzal ve Ertunç (2018), propan yakıtının difüzör tipi yanma odasına giriş hızı değiştirilmeden, ön karışımlı olarak tüketilmesi sonucu oluşan alevin, farklı türbülans uzunluğu kullanılarak (1 cm, 5 cm ve 10 cm) farklı türbülans yoğunluğuna maruz bırakılması sonucu alev boyu değişiklikleri sayısal olarak incelenmiş, sonuçlarda orta ve yüksek türbülans uzunluk ölçeği kullanılması durumunda türbülans yoğunluğu artırılırsa alevin difüzör girişine doğru kaydığı, yanma reaksiyonun daha önce başladığı ve sürüklenme alanının azaldığı, düşük türbülans uzunluk ölçeği kullanılması durumunda ise türbülans yoğunluğu daha da artırılsa dahi alev geri çekilmesinin belli bir miktar sonra duraksadığı resim ve grafiklerle gösterilmiştir [33].

Umemura ve Tomita (2001), yanmaya dayalı girdap kopmasını araştırmak için dönen tüpler üzerindeki alev değişimi bir ön karışımlı yakıcıda incelenmiş, sonuçlarda yüksek eksenel hızların olmasına rağmen, alev geri tepmesinin yaşandığı belirtilmiştir [34]. Bu çalışmadan, ön karışımlı yakıcı üzerinde oluşturulan yüksek dereceli burgu, yanma kararlılığını bozduğu anlaşılmaktadır.

Tabet, Sarh ve Gökalp (2009), farklı oranlarda karıştırılarak  $CH_4$  ve  $H_2$  gazlarıyla oluşturulan yakıtların yanma sonuçları sayısal olarak araştırılmış, sonuçlarda  $H_2$  oranı artırıldıkça hidrojenin düşük molekül ağırlığı, yüksek yayınım katsayısı ve düşük vizkozite özelliğinden dolayı yakıtın havayı, yanma odasına sürükleme kabiliyetini artırdığı, hızlı yanmanın meydana geldiği, alev kalınlık ve uzunluğunda küçülmenin olduğu belirtilmiştir [35].

Kido, Makahara, Hoshimoto ve Barat (2002), çalışmalarında farklı türdeki yakıtların ( $H_2$ ,  $CH_4$  ve  $C_3H_8$ ) yanma esnasındaki alev hızlarını ölçmüşlerdir. Sonuçta, aynı laminer alev hızındaki iki farklı yakıtın, türbülanslı alev hızları arasında 10 kata kadar farklılığın görüldüğü belirtmiştir [36].

Kröner, Fritz ve Sattelmayer (2003), doğalgaz ve hidrojen karışımlı yakıtların yanma sırasında oluşabilecek geri tepme olayının sınır değerleri araştırılmış, sonuçta yakıt

içerisinde bulunan hidrojen gazı konsantrasyonunun, bu sınır değerleri üzerinde önemli derecede etkisinin olduğu, hidrojen oranı artırıldıkça alev geri tepme tehlikesinin de arttığı belirtilmiştir [37].

Öztürk (2019), sentez gazının türbülanslı, adyabatik ve kısmi ön karışımlı yanma şartlarında  $N_2$ ,  $CO_2$  ve  $H_2O$  ile seyreltme sonuçları sayısal olarak incelenmiş, 0,5 m boyunda ve 0,065 m yarıçapındaki yanma odası iki boyutlu olarak modellenmiş, yakıt ve hava karışımı 30 m/s hızında, ikincil olarak kullanılan hava ise 10 m/s hızında yanma odasına gönderilmiş, sonuçlarda yanma odası basıncı artırıldıkça NO emisyon seviyesinin arttığı, oksitleyici olarak haricen kullanılan (ikincil) havanın sıcaklığı artırıldıkça veya yakıt hava karışımındaki sıcaklık artırıldıkça NO emisyon seviyesinin arttığı belirtilmiştir. Seyreltme durumunda üç gazın da NO emisyon seviyesini azalttığı,  $N_2$  ile seyreltme durumunda NO emisyon seviyesi daha az azalırken  $H_2O$  ile seyreltme durumunda en fazla seviyede azalma olduğu paylaşılmıştır [38].

Hao ve diğerleri (2020), kok fırını gazı sayısal yanma analizine göre düşük emisyon elde etmek için tasarım stratejileri üzerine yapılan çalışmada, CO ve NO üzerinde durulmuş,  $CO_2$  ile seyreltme durumunda bu emisyonların değişimleri incelenmiş, oksijen konsantrasyonu %21'den %14'e azalacak şekilde yapılan seyreltme sonucunda NO azalırken CO'nun önce hafif azaldığı daha sonra sert bir şekilde arttığı, sıcaklığın da düştüğü kontur ve grafiklerde gösterilmiştir [6].

Yu ve diğerleri (2020), eşdeğerlik oranı değiştirilerek ve  $CO_2$  ile seyreltme yapılarak, görüntüleme teknolojileri sayesinde yapılan deneysel çalışmada, OH ve CH ara ürünlerindeki değişim incelenmiş, seyreltmede kullanılan  $CO_2$  miktarı artırıldıkça alev bölgesinin dağıldığı, OH maksimum bölgesinin ise daralarak küçüldüğü, hava fazlalık katsayısı artırıldığında ise alev bölgesinin dağıldığı ve aynı şekilde OH maksimum bölgesinin küçüldüğü belirtilmiştir [39].

Arghode, Gupta ve Bryden (2012), ultra düşük emisyon seviyesi için uygulanan CDC yöntemi üzerine yapılan sayısal ve deneysel çalışmada, hem ön karışımlı hem de ön karışımsız yanma şartları incelenmiş, PIV görüntüleme tekniği ile elde edilen verilerin CFD çalışması ile paralellik gösterdiği, hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 2$ 'den sırasıyla  $\lambda = 1,25$ 

seviyesine doğru azaltıldıkça elde edilen görüntülerde renk değişiminin sırasıyla arttığı, ön karışımlı yanma şartlarındaki renk değişimin, ön karışımsız yanma şartlarına göre daha fazla olduğu gösterilmiş, OH ara ürününün değişimi hususunda ise, yine hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 2$ 'den sırasıyla  $\lambda = 1,25$  seviyesine doğru azaltıldıkça ön karışımsız yanma şartlarında maksimum OH bölgesindeki dağılımın, ön karışımlı yanma şartlarındakine göre daha az olduğu gösterilmiştir. Oksijen konsantrasyonu %15'e gerileyecek şekilde uygulanan CDC şartlarında NO ve CO seviyesinde azalmanın olduğu, dinamik basınç değişimindeki maksimum seviyenin azaldığı, ön karışımlı yanma şartlarında daha fazla azalmanın olduğu sayılarla belirtilmiştir [40].

#### <u>Tezin önemi</u>

Daha temiz çevre için verimli teknoloji geliştirme üzerinde önemli çalışmalar yapılmaktadır. Üstelik kombine çevrim santrallerinin gelişmesiyle kömürün gaz yakıtlara dönüşümü üzerinde de gelişmeler olmuştur. Bu teknoloji sayesinde atık seviyesinin minimuma düşmesi, çevrimlerin aşamalı olarak kurulabilmesi, farklı yakıtlarla da çalışabilmesi maliyet külfetini de indirgemektedir. Üzerinde yapılacak çalışmalar sayesinde daha da önemli hale gelecektir [41]. Bu sayede çok bileşenli gaz yakıtlar artacaktır. Konvansiyonel veya çok bileşenli yakıtların yanma şartlarını, seyreltme yapılarak yanma sonucu değişimlerini araştıran çok sayıda çalışma vardır, fakat ön karışımlı olarak tüketilme koşullarında alev ve reaksiyon basamak sayısı etkileşimi, basamak sayısının yanma sonu ürünlerine etkisi, yanma sonucu oluşan emisyon veya ara ürünlerin reaksiyon kinetiği ile irdelenmesi, ön karışımlı olarak CDC şartlarında tüketilen yakıtın oluşturduğu emisyonların seviyesi konularıyla ilgili kritik sorular hala devam etmektedir. Ön karışımlı yakıcılarda, hava ile yakıt yanma bölgesine gelmeden önce karıştığı için ön karışımsız yakıcılara göre daha homojen bir yakıt-hava karışımı sağladığından, emisyon seviyesine azaltma etkisi göstereceği düşünülmektedir [13]. Ayrıca ön karışımlı yakıcılarda, yanma odasında oluşan dinamik basınç değişimleri ön karışımsıza göre daha az olmakta [40], yanma ürünleri sıcaklığı ve CO emisyonları açısından daha iyi durumda olmaktadır [32]. Bu nedenle deney düzeneğinde kullanılan ön karışımlı yakıcının, gürültü ve titreşimler ile NO ve CO emisyon oluşumuna, azaltma yönünde etkisinin olacağı beklenilmektedir. Daha temiz enerji elde etmek temel motivasyon kaynağımız olduğu için bu çalışmada kok fırını gazının, ön karışımlı yanma şartları ve emisyonların azalmasında etkili olacağı düşünülen CDC yöntemi incelenmiştir.

### 2. KOK FIRINI GAZI, YANMA, REAKSİYON KİNETİĞİ, EMİSYON, ALEV GERİ TEPMESİ, ALEV SÖNMESİ

Kimyasal reaksiyonlar ile 1s1 üretimine elverişli olan maddelere yakıt denir [3]. Köken olarak doğal veya yapay, fiziksel özelliklerine göre katı, sıvı ve gaz olarak sınıflandırılabilir. Katı yakıtlara, doğal olanları taş kömürü, esmer kömürü, turb ve odun, yapay olanları kok ve odun kömürü gibi yakıtlar, sıvı yakıtlara petrol ve ürünleri, taş ve esmer kömürün koklaştırılmasından, odunun karbonizasyonundan elde edilen katran veya alkol gibi yakıtlar, gaz yakıtlara doğal olanı yer gazı, yapay olanları hava gazı, su gazı, kuvvet gazı, kok fabrikası gazları, metan, asetilen, hidrojen, bütan gibi yakıtlar örnek olarak verilebilir [3].

Bitki ve kısmen hayvan artıklarının, yüksek basınç altında, sıcaklığın etkisiyle bozunmaları sonucu kömür oluşmaktadır. Bitkilerdeki selüloz ve ligninin kömür oluşumunda temel maddeler olduğu bilinmektedir [3]. Kimyasal ve mikrobiyolojik prosesler sonucu ilk turb oluşmaktadır. Turbun birinci kömürleşme safhasıyla (biyokimyasal faz) esmer kömürü oluşmakta, esmer kömürün ikinci kömürleşme safhası (jeokimyasal safha) sonrası taş kömürü, antrazit oluşmaktadır. Bu oluşumlardan sonra kömür, üçüncü kömürleşme safhası sonrası grafite dönüşür. Kömürleşme safhalarında kömürün fiziksel, kimyasal ve teknolojik özelliklerini belirleyen maseraller oluşmaktadır [3].

Kömürde; karbon, hidrojen, oksijen, azot, fosfor, kükürt elementleri bulunmaktadır. Kömürleşme zamanı ilerledikçe kömür bünyesinde konsantrasyon olarak hidrojen, oksijen ve azot elementlerinde azalma olurken karbon elementinde ise artma meydana geldiği bilinmektedir [3]. Bu durumda tanımlanmış kömürleşme indeksi Eş. 2.1 ile belirlenmektedir [3].

$$K = 1 - \frac{42H + 2,10 + 3N}{7C} \tag{2.1}$$

Buradaki H, O, N ve C kömürün bünyesindeki elementlerin kütlesel olarak konsantrasyonunu ifade etmektedir. Odun için K = 0 değerini alırken antrazit için K = 1 değerini almaktadır. Diğer katı yakıtlar için K indeksi 0 ile 1 aralığında değer almaktadır [3].

Katı yakıtlar, taşınmasının zor olması, büyük hacimli yakıcılara ihtiyaç duyması, yanma sırasında fazlaca kül, cüruf ve özellikle kirletici emisyon oluşturması, ayrıca yanma sırasında daha fazla havaya ihtiyaç duyması ve genellikle tamamen yanamaması problemlerine karşı gaz yakıtlar, uzak mesafelere kolay taşınması (boru hatları sayesinde), küçük hacimli ve basit yakıcılar ile yanabilmesi, daha az havaya ihtiyaç duyması ve genellikle tamamen yanabilmesi, kül ve cüruf oluşturmaması ve özelikle yanma sırasında çok daha az emisyon oluşturması [3], bu çalışmayı gaz yakıtlarına yönlendirmede etkili olmuştur.

#### 2.1. Kok Fırını Gazı

Koklaştırma, katı yakıtlara oksijensiz ortamda uygulanan ısıl işlemdir [3]. Koklaştırma, her ne kadar yöntem olarak tüm katı yakıtlara uygulanabilir olsa da çoğu katı yakıt için verimli olmayabilir [3]. Örneğin katı yakıt olan turb, içerisinde yüksek oranda su barındırması ve karbon oranının az olması nedeniyle koklaştırmaya verimli değildir [3]. Esas itibari ile esmer kömürü ve taş kömürü üzerinde koklaştırma uygulandığı bilinmektedir [3]. Taş kömüründe kok oluşumu için daha yüksek verim alınabiliyor iken, esmer kömüründe ise daha yüksek verimde gaz olustuğu bilinmektedir [3]. Koklastırma aşamasında uygulanan ısıl işlemin derecesine göre çeşitli yan ürün olan yakıtlar elde edilmektedir. Katı yakıt olan kömür, 250 °C kadar ısıl işleme maruz kalırsa bünyesinde bulunan sudan tamamen arıtılmış olmaktadır. Yaklaşık 400 °C kadar ısıl işleme maruz kalırsa katran seviyesi maksimum seviyeye ulaşmaktadır [3]. Yaklaşık 600 °C kadar ısıl işleme maruz kalırsa katran bitmeye yakındır [3]. Sıvı yakıt olan katran da bittiği için bu sıcaklık seviyesinden sonra artık sadece gazlaşma meydana gelmektedir. Kömür üzerinde 1200 °C kadar ısıl işlem uygulanırsa hidrojence zengin gaz verimi yüksek olarak, katrandan tamamen arındırılmış ve yüksek oranda karbon içeren kok üretilmiş olmaktadır [3]. Koklaştırma sürecinde ısıtma hızı ve uygulama basınç değerleri önemlidir. Eğer hızlı ısıtma (pnömatik koklaştırma yöntemi) durumu uygulanırsa, gazlaşma adımı daha yüksek sıcaklık bölgesine doğru kaymaktadır [3]. Eğer yüksek basınçta koklaştırma yapılırsa, katran verimi azalmaktadır [3]. Alçak sıcaklık koklaştırmasında (600 °C kadar olan ısıl işlem) elde edilen gaz hidrokarbonlarca yüksek olmasına karşı (geriye kalan kok hala uçucu bileşenlere sahiptir) yüksek sıcaklık koklaştırmasında (1200 °C kadar olan ısıl işlem) hidrojence zengin gaz elde edilmektedir [3]. Ayrıca her kömür türü koklaştırmaya uygun olmayıp (alev kömürü, gaz alev kömürü, gaz kömürü ve yağsız kömür) yağlı kömür koklaştırmaya

elverişlidir [3]. O halde uçucu bileşenleri tamamen alınmış, katran miktarı tamamen tükenmiş, hacimsel olarak yüksek oranda karbon elementi içeren kokun geride kalabilmesi için yüksek sıcaklık koklaştırması yapılması gerektiği anlaşılmaktadır.

Koklaştırmada bir çok yöntem bulunmaktadır. Koklaştırma aşamasındaki ısıtmanın direk veya indirek oluşuna göre isimlendirmenin yanında kömür tanecik büyüklüğüne göre de değişmektedir [3]. Esmer kömürünün tanecik boyutu küçük olması durumunda (0-5 mm arası) daha çok pnömatik ve akışkan yatak koklaştırma yöntemleri kullanılmaktadır [3]. İri taneli esmer kömürüne ise direk ısıtmalı koklaştırma yöntemleri uygulanabilir [3]. Taş kömürünün alçak sıcaklık koklaştırmasında başlıca yüzey ısıtmalı, yıkama gazlı, akışkanlaştırılmış yatak ve pnömatik koklaştırma yöntemleri uygunlanmaktadır [3]. Genellikle, 1,25-1,65 ton kömürden 1 ton civarı kok elde edilirken 300-360 m<sup>3</sup> civarı kok gazı da üretilmiş olmaktadır [42]. Koklaştırmada kullanılan kömüre bağlı olarak kok gazı içeriği değişmektedir. Kok gazı yanabilen (H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO) ve yanamayan (CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>) bileşenlerden oluşmaktadır [43].

Kok Gazı	Hacimce
Bileşenleri	(%)
H <sub>2</sub>	55-60
$CH_4$	23-27
СО	5-8
$CO_2$	1-2
N <sub>2</sub>	3-6
$C_2H_4$	1-1,5
$C_2H_6$	0,5-0,8
$C_3H_8$	≤0,07
H <sub>2</sub> S	≤3,2E-5

Çizelge 2.1. Koklaştırma esnasında elde edilen kok gazı içeriği [44, 45]

İndirekt ısıtmalı bir reaktörden 1100 °C'de alınan kok gazı, %10 N<sub>2</sub>, %55 H<sub>2</sub>, %27 CH<sub>4</sub>, %6 CO ve %2 CO<sub>2</sub> bileşenlerini içermektedir. Aşağıdaki Çizelge 2.2'de bazı gaz yakıtların fiziksel özellikleri paylaşılmıştır.

Yakıtlar	%	%	%	%	%	LHV	Yoğunluk
	H <sub>2</sub>	$CH_4$	CO	C0 <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	(kcal/m <sup>3</sup> )	(kg/m <sup>3</sup> )
Şehir Gazı I	51	21	18	4	6	3434	0,54
Şehir Gazı II	44	24	12	4	16	3335	0,60
Su Gazı	50	0,5	40	5	4,5	2385	0,66
Jeneratör Gazı	12	0,5	28	5	54,5	1124	1,07
Kok Fırın Gazı	55	27	6	2	10	3678	0,45
Yüksek Fırın Gazı	2	0	30	8	60	900	1,20
Metan	0	100	0	0	0	8040	0,67
Hidrojen	10	0	0	0	0	2422	0,08

Çizelge 2.2. Kömür gazları ve hidrojen ile metanın fiziksel özellikleri [1]

Bu çalışmada da yakıt olarak aynı içeriğe sahip, 3678 kcal/m<sup>3</sup> ısıl değer ve yaklaşık 0,45 kg/m<sup>3</sup> yoğunluğundaki kok fırını gazı kullanılmıştır [14].

### 2.2. Yanma

Yakıt ve oksitleyicinin, belli bir ısı altında birleşmesiyle yanma meydana gelmektedir. Yanma işlemi, bir yakıtın büyük miktarda enerji verecek şekilde oksitlenme tepkimesidir [1]. Hava, serbest ve kolay elde edilebildiğinden genellikle oksitleyici olarak kullanılır. Mol veya hacimce kuru hava %20,9  $O_2$ , %78,1  $N_2$  ve diğer gazlardan oluşmaktadır [11]. Bu çalışmada diğer gazlar göz ardı edilerek havanın, %21  $O_2$  ve %79  $N_2$ 'den oluştuğu kabul edilmiştir.

Yanma yakıcının tasarımına göre ön karışımlı, ön karışımsız ve kısmi ön karışımlı olarak sınıflandırılmaktadır [1]. Ön karışımsız yanma, yakıt ve oksitleyicinin yanma bölgesine farklı kanallardan gönderilmesiyle oluşmaktadır. Yanma reaksiyonları da yakıt ile oksitleyicinin birleştiği anda meydana gelmektedir. Ön karışımlı yanma da ise yakıt ve hava, yanma bölgesine gönderilmeden önce buluşmasına rağmen belirli bir sürüklenmeden sonra meydana gelmektedir. Yakıt ve hava, önceden birleştirilerek yanma bölgesine gönderildiğinden, akış hızının da etkisiyle sürüklenerek yanma reaksiyonları ileri noktalarda meydana gelmektedir. Reaksiyonların başladığı bu sınır genelde koni şeklini oluşturmaktadır. Bu koninin iç kısmında yanma (kimyasal reaksiyon) olmaması nedeniyle

Bir enerji şekli olan 1sı, termodinamiğin birinci kanunu ile belirlenmiştir [11]. Termodinamikte dışarıdan sisteme giren 1sı pozitif, sistemden çıkan 1sı ise negatif olarak kabul edilmektedir [11]. Sürekli sistemlerde basınç sabit (dP = 0) kabul edilmesine karşı süreksiz sistemlerde hacim sabit (dV = 0) kabul etmektedir [11]. Potansiyel ve kinetik enerji değişimleri ihmal edilmesi durumunda, yanma sonucu sistemde meydana gelen 1sı, aşağıda Eş. 2.2'de belirtilmiştir [11].

$$dQ = dU + PdV \tag{2.2}$$

Burada, dQ 1s1 değişimini, dU iç enerji değişimini, P basınç, dV hacim değişimini ifade etmektedir. Entalpiye göre denklem düzenlenirse,

$$H = U + PV \tag{2.3}$$

$$dH = dU + PdV + VdP \tag{2.4}$$

Bu eşitlikteki dV terimi sıfır kabul edildiğinden denklem yeniden düzenlenirse,

$$dQ = dH - VdP \tag{2.5}$$

Eşitliklerden de anlaşılacağı üzere hacim değişimi sıfır kabul edilen sistemlerde, sistem ısısını iç enerji değişimi belirlemektedir.

Yanma, zincirleme kimyasal reaksiyonlarda girenler ile ürünler arasındaki dönüşümde açığa çıkan enerjidir. Yanma tepkimesi aşağıdaki Eş. 2.6'daki gibi gösterilirse,

$$A + B + C + \dots \rightarrow D + E + F + \dots$$
(2.6)

Buradaki *A*, *B*, *C* yanma tepkimesinden önce bulunan (girdiler) bileşenlerdir. *D*, *E*, *F* ise tepkimeden sonra bulunan (ürünler) bileşenlerdir.

Hem girdiler hem de ürünler aynı halde olduğu için kararlı akıştaki enerji denklik bağlantısı, ürünler ile girenler arasındaki entalpi değişiminden kaynaklanmaktadır [11]. Yani ısı transferi sadece tepkime sırasında gerçekleşen kimyasal enerjiden kaynaklanmaktadır. O halde bir yanma tepkimesinden elde edilen ısı denklemi Eş. 2.7'de belirtilmiştir [11].

$$Q = H_{\ddot{u}r\ddot{u}n} - H_{girdi} \tag{2.7}$$

Tepkime entalpisi, tüm tepkime için, belli bir haldeki ürünlerin entalpileri ile aynı haldeki girdilerin entalpileri arasındaki fark ile ifade edilebilir. Belli bir basınç ve sıcaklıkta 1 kmol veya 1 kg yakıtın tamamen yanması durumunda açığa çıkan ısı miktarını, yanma entalpisi tanımı olarak kabul edilirse [11], standart referans hal olarak da bilinen 25 °C ve 1 atm'deki karbonun yanma entalpisi -39352 kj/kmol'dür [11]. Her haldeki her bir yakıtın yanma entalpisi değerlerini oluşturma imkanı olmadığından, çok daha pratik olması için referans bir haldeki entalpi değerlerini kullanmak uygun bir yaklaşım olacaktır. Bu nedenle tüm kararlı elementlerin (N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, C ve H<sub>2</sub> gibi) standart referans haldeki oluşum entalpileri  $\bar{h}_{ol}$  sıfır olarak kabul edilir [11]. Yani tüm kararlı element için  $\bar{h}_{ol} = 0$ 'dır. O halde yanma sırasında açığa çıkan ısı hesabında, oluşum entalpisi dikkate alınarak, yanma reaksiyonuna giren ve çıkan enerji eşitliğinden yola çıkarak Eş. 2.7 yeniden düzenlenirse aşağıdaki denklem elde edilmiş olur [11].

$$Q = \sum N_{g} (\bar{h}_{ol} + \bar{h} - \bar{h}^{\circ})_{g} - \sum N_{\ddot{u}} (\bar{h}_{ol} + \bar{h} - \bar{h}^{\circ})_{\ddot{u}}$$
(2.8)

Buradaki  $\overline{h}$  belli bir haldeki duyulur entalpi,  $\overline{h}^{\circ}$  standart haldeki duyulur entalpiyi ifade etmektedir.

### 2.3. Reaksiyon Kinetiği

Yanma sırasında birçok reaksiyon meydana gelmektedir. Bazı reaksiyonların ürünleri başka bir reaksiyonun girdisi olabilmektedir. Her bir bu kimyasal reaksiyonlar sayesinde enerji açığa çıkmaktadır [46]. Bir basamaklı bir reaksiyon aşağıdaki gibi tanımlanırsa,

$$A + B + C + \dots \stackrel{k}{\Rightarrow} D + E + F + \dots$$
(2.9)

Eş. 2.9'daki *k* terimi reaksiyon hız katsayısını ifade etmektedir. Girdilerden A'nın zamanla azalma denklemi şu şekilde ifade edilebilir [46],

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^{a}[B]^{b}[C]^{c} \dots$$
(2.10)

Buraki a, b ve c bağlı oldukları girdinin derecesini ifade etmektedir. Hız sabiti k Arrhenius formatında gösterilirse [46],

$$k = Aexp(-\frac{E}{RT})$$
(2.11)

Genelde HAD kodu üzerinde simülasyon yapmak için her bir reaksiyona karşılık Arrhenius faktörü, aktivasyon enerjisi ve sıcaklık üstel değeri bilgisi gerekmektedir. Dolayısıyla bu denklemi (Eş. 2.11) ticari bir HAD kodunda kullanılabilecek hale dönüştürmek gerekirse [46],

$$k = AT^n exp(-\frac{E}{RT})$$
(2.12)

Burada A, Arrhenius faktörünü (mol-cm-s-K), E aktivasyon enerjisini (cal/mol), R üniversal gaz sabitini (cal/mol-K), T sıcaklığı (K), n ise sıcaklık üstel değerini ifade etmektedir.

#### 2.4. Emisyon

Yakıtlar yanma sırasında bünyesinde bulunan bileşenlerine göre  $NO_X$ , CO,  $CO_2$ ,  $SO_2$ , partikül madde ve diğer kimyasal türler oluşturmaktadır [47]. Oluşan bu türlerin miktarını, kullanılan yakıcı tipi, tüketilen yakıtın içeriği ve yanma şartları doğrudan etkilemektedir [47]. Özellikle nüfus yoğunluğu her geçen gün artan büyük şehirlerde oluşan hava kirliliği, insan sağlığını olumsuz etkilemektedir. Örneğin insanın bulunduğu ortamdaki karbon monoksit seviyesinin artması, solunum yoluyla akciğerlere nüfus ederek kanda oksijen taşıyan hemoglobine bağlanıp, oksijen taşınmasını azaltmaktadır. Korbon monoksit seviyesinin belli bir değerin üzerine çıkması durumunda da yaşamı sonlandırabilir. Yanma sonucunda oluşan gazların tehlikelilik açısından sınıflandırması aşağıdaki tabloda paylaşılmıştır.

Hava Kirletici			
Gazlar			
Orta Seviyede	Yüksek Seviyede		
Zararlı Gazlar	Zararlı Gazlar		
NO	СО		
SO <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>		
	SO <sub>3</sub>		
	Yanmamış Hidrokarbon		

Çizelge 2.3. Zararlı gazların tehlikesine göre sınıflandırılması [48].

Hava kirleticilerinden olan CO, yetersiz oksitleyicinin olmasıyla veya yakıt ile havanın iyi karışamamasından meydana gelebilir [49]. Yanma odasında meydana gelen yüksek sıcaklık da CO oluşumuna etki edebilir [16]. Ayrıca bazı yakıtların içeriğinde doğrudan CO olduğu için (kok fırını gazında olduğu gibi) yanma işlemine katılmadan (CO<sub>2</sub>'ye dönüşmeden) yanma ortamını terk edebilir [47].

Yanma esnasında gerek yakıt içerisindeki gerekse oksitleyici hava içerisindeki azotun oksijenle birleşmesi sonucu, N<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, NO<sub>3</sub> gibi gazları oluştururlar. Bunlardan N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> ve NO<sub>3</sub> kararsız yapıda oldukları için NO ve NO<sub>2</sub> formuna dönüşmektedirler [1]. Dolayısıyla önemli derecede hava kirliliğine neden olan gazlar NO, NO<sub>2</sub> ve N<sub>2</sub>O gazlarıdır. Bu kirletici gazların oluşma miktarını, tüketilen yakıtın içeriği, kullanılan yakıcı türü, yakıt-hava karışım oranları, yakıt-hava giriş sıcaklığı gibi etkenler belirlemektedir [47]. Kok fırını gazında ve oksitleyici olarak kullanılan havada önemli derecede N<sub>2</sub> gazı bulunduğundan, kirletici NO<sub>x</sub> emisyon oluşumu kaçınılmaz olacaktır [48].

Yanma sırasında  $NO_X$  oluşumu bilinen üç yolla gerçekleşmektedir. Bunlardan biri olan ısıl  $NO_X$  oluşumu, doğrudan ilişkili olarak alev sıcaklığının derecesine göre artmaktadır. Yüksek sıcaklıklarda (T>1800 K) önemli seviyede NO oluşmaktadır ve her 90 K sıcaklık artışı iki kat NO artışına neden olmaktadır [48]. Diğeri olan ani  $NO_X$  oluşum mekanizması, özellikle zengin karışım şartlarındaki yanmada gerçekleşmektedir [1]. Yanma sırasında oluşan CH, CH<sub>2</sub> gibi hidrokarbon ürünlerinin azot ile hızlı bir reksiyona girerek NO oluşturmasıdır [1]. Sonuncu olan yakıt  $NO_X$  oluşumunda ise yakıt içerisinde bulunan azot
bileşiklerinin, hızlı bir şekilde siyanür ve amin gibi ara ürünlere dönüşmesi sonucu azotla birleşerek NO oluşturmasıdır [1]. Bu üç  $NO_X$  oluşum mekanizmasını da içeren GRI-Mech 3.0 kimyasal kinetiğine göre bazı reaksiyonlar aşağıda paylaşılmıştır.

Reaksiyon	Kimuagal Daaksiyan	Arrhenius	Sıcaklık	Aktivasyon
No	Kiinyasai Keaksiyon	Faktörü	Üstel Değeri	Enerjisi
1.	$N + NO \leftrightarrow N_2 + O$	2,70E+13	0	355
2.	$N + O_2 \leftrightarrow NO + O$	9,00E+09	1	6500
3.	$N + OH \leftrightarrow NO + H$	3,36E+13	0	385
4.	$CH + N_2 \leftrightarrow HCN + N$	3,12E+09	0,9	20130
5.	$CN + H_2O \leftrightarrow HCN + OH$	8,00E+12	0	7460
6.	$C + NO \leftrightarrow CN + O$	1,90E+13	0	0
7.	$N_2O(+M) \leftrightarrow N_2 + O(+M)$	7,91E+10	0	56020
8.	$N_20 + 0 \leftrightarrow 2N0$	2,90E+13	0	23150
9.	$HO_2 + NO \leftrightarrow NO_2 + OH$	2,11E+12	0	-480
10.	$NO_2 + H \leftrightarrow NO + OH$	1,32E+14	0	360

Çizelge 2.4. GRI-Mech 3.0 kimyasal kinetiğine göre bazı NO<sub>X</sub> oluşum reaksiyonları

Çizelge 2.4'deki 1. ve 2. reaksiyonlar (Zeldovich) ile 3. reaksiyon (Lavoie ve ark.) ısıl NO oluşum reaksiyonlarıdır [22]. Bu reaksiyonlarda zamanla oluşan NO emisyon eşitliği aşağıda belirtilmiştir [50, 51].

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_{f,1}[N][NO] - k_{r,1}[N_2][O] + k_{f,2}[N][O_2] - k_{r,2}[NO][O] + k_{f,3}[N][OH] - k_{r,3}[NO][H]$$
(2.13)

Buradaki  $k_f$  ileri yönde reaksiyon hız katsayısını,  $k_r$  geri yöndeki reaksiyon hız katsayısını ifade etmektedir.

Ani  $NO_X$  oluşum mekanizması için 4., 5. ve 6. reaksiyonlar örnek gösterilebilir. Yakıt  $NO_X$  oluşumu, 5. ve 6. reaksiyonlarda meydana gelen CN ve HCN gibi moleküllerin oksijenle buluşmasıyla NO'nun oluşmasıdır [52, 53]. Farklı  $NO_X$  türlerinin (N<sub>2</sub>O, NO<sub>2</sub> gibi) oluşum mekanizmaları diğer reaksiyonlarda gösterilmiştir.

## 2.5. Alev Geri Tepmesi (Flashback)

Ön karışımsız yanma şartlarında, yakıtın yanma odasına girişi hava ile birlikte olmadığı için alev geri tepme durumu olmamasına rağmen, ön karışımlı yanma şartlarında hava ve yakıt önceden karışarak yanma odasına gönderildiği için alev geri tepme oluşma ihtimali vardır. Kararlı bir alevin oluşabilmesi için yakıcı üzerinden gönderilen yakıt-hava hızının (ön karışımlı yanma şartlarında) o alanda meydana gelen alev hızıyla aynı olması gerekmektedir [46]. Bu şart oluşmadığı durumda, alevin konumu (yanma reaksiyonlarının başladığı alan) yakıcıya göre değişecektir. Yakıcının akış kesit alanından geçen hava-yakıt hızının alev hızından büyük olduğu durumlarda, yanma reaksiyonu ileri noktalara taşınacak, sürüklenme alanı artacaktır. Daha da olumsuzu olan yakıt-hava karışım hızı, türbülanlı alev hızından küçük olduğu durumlarda ise alev yakıcıya yaklaşacak ve alev geri tepme olayı yaşanacaktır [54].

Türbülaslı alev hızı üzerinde, tüketilen yakıt türü çok etkilidir [55]. Kok fırını gazı bünyesinde, yüksek oranda hidrojen gazının bulunması ve hidrojen gazının yanma sırasında alev hızının oldukça yüksek olması [56-58], alev geri tepme tehlikesini artırmaktadır [59, 19].

Daha fazla güvenli bir yanma süreci istenilmesi durumunda, yakıcı üzerinde özel tasarımlı alev tutucu kullanılabilir [22]. Yanma odası tasarımı da etkili olabilir. Yanma odası iç yüzeyi tasarımı, eksenel akış hızını artırıcı yönde etkileyecek şekilde tasarlanırsa, alev geri tepme tehlikesini engelleyecek yönde katkı sağlayacaktır. Yine yanma sırasındaki basınç dalgalanmaların da fazla olmaması gerekmektedir. Basınç değişimlerinin fazla olması akış hızını etkileyeceği gibi gürültüyü de artıracaktır. Genellikle gaz türbin yakıcılarında, basınç değişimi yaklaşık %2-3 ve mutlak hız 90-120 m/s aralığında tutulmaktadır [22]. Eksenel hızı etkileyen yapıların (girdaplı yakıcı gibi) kullanılması durumunda ise aynı seviyede basınç değişimine takabül eden hız aralığı 65-85 m/s aralığındadır [60]. Dolayısıyla ön karışımlı yakıcı tasarımı üzerinde fazla bir değişiklik yapılmamalı veya akış hızını etkileyecek tasarımlardan kaçınılması gerektiği anlaşılmaktadır. Bu nedenle yakıcının ilerisinde, akışı yanal yönde açılandıran tasarımlar daha çok ilgi görmektedir [60]. Yinelemek gerekirse, eksenel hızın olduğunca fazla olmasını, lokal hız azalmasının da olduğunca az olmasını sağlayan tasarımların tercih edilmesi fayda sağlayacaktır. Alev geri tepmesi farklı mekanizmalarla olabilir [61]. Bu mekanizmalar (yanma kararsızlığı,

merkez akış içerisinde türbülanslı alevin ilerlemesi, alevin sınır tabakada genişlemesi, yanma nedenli girdap bozunumu) genel olarak aşağıda açıklanmıştır.

Sıcaklığın artmasıyla beraber yakıt-hava karışımındaki dalgalanmalardan dolayı kendiğinden tutuşma olayı yaşanabilir. Dalgalanmanın büyük olması veya yanma odasına gönderilen taze gazların termodinamik özelliğindeki değişmeler, türbülans alevi üzerinde de büyük girdap oluşmasına neden olabilir. Dolayısıyla bazı bölgelerdeki hız değeri ortalama hızın altında kalacağından, türbülanslı alev yakıcıya doğru yaklaşabilir [60, 62].

Yanma sırasında girdap bozunumu nedeni ile alev geri tepme olayı yaşanabilir. Bu durum tamamen ön karışımlı yakıcı üzerinde oluşturulan burgudan kaynaklanmaktadır [63]. Bu husus akışkanlar mekaniği ile açıklanabilir. Yanma reaksiyon kinetiği ile ilgili bir husus olmayıp, alev sönmeye yakın durumda yanma kinetiği önem kazanmaktadır [64]. Daha da kötüsü olarak bu tür alev geri tepmesi, akışkan hızının alev hızından çok daha fazla olduğu durumlarda bile olabilir [37, 65]. Bu nedenle ön karışımlı yakıcı üzerinde yapılacak büyük açılandırmadan (S>1) kaçınılması önem arz etmektedir [66, 67].

## 2.6. Alev Sönmesi (Blow-off)

Yanma odasına, yakıcı üzerinden gönderilen taze gazın akış hızı yüksek olursa veya çok fakir karışım bölgesine doğru gelindiğinde alev varlığını sürdüremeyerek sönebilir. Fakir karışım bölgesi alev sönmesi ihtimalini artırsa da bazı tür yakıtlar alev varlığını korumada yardımcı olabilir. Kok fırını gazı bünyesinde bulunan ve alev hızı yüksek olan hidrojen gazının varlığı fakir karışım bölgesinde yanma kararlılığını yükseltmektedir [57, 58]. Örneğin karbon monoksitin laminer yanma hızı 2,7 cm/s iken hidrojenin laminer yanma hızı 770 cm/s'dir [68]. Yine alev sönmesi üzerinde, yakıt-hava giriş sıcaklığı, basıncı ve türbülanslı oluşu da etkilidir [68]. Alev sönmesinin matematiksel tanımı Damköhler Sayısı ile ifade edilebir. Bu sayı yanma reaksiyonuna katılan bileşenlerin, yanma bölgesinde kalma sürelerinin, reaksiyonun tamamlanması için gereken süreye oranı olarak ifade edilebilir. Yani yanma reaksiyonuna katılan bileşenler olması gerekenden daha erken yanma bölgesini terk ederse alev söner. Damköhler Sayısı Eş. 2.14'de belirtilmiştir [69].

$$Da = \frac{S_L^2 d}{a V_{ref}} \tag{2.14}$$

Eş. 2.14'deki  $S_L$  laminer alev hızını, *a* termal difüzyonu, *d* yanma reaksiyon bölge uzunluğu,  $V_{ref}$  hız ölçeğini ifade etmektedir.

Akış hızı sınır tabakada düşüktür. Yani akış bir duvarla karşılaştığında, kaymazlık koşulundan dolayı hızı düşmektedir [65]. Bu alandaki akış hızı alev hızından düşük olduğu için alev bölgesinin büyümesine zemin hazırlanmış olur. Bu nedenle yakıcı tasarımında, alevin dokunacağı bölgelerin mesafesi, çalışma ısıl gücüne göre hesap edilmesi gerekmektedir. Buna karşı olarak alev duvar karşılaşmasında ısı ve radikal kayıpların olması nedeniyle alev hızı azalmaktadır. Bu durumda alev için sönme mesafesinden bahsedilebilir. Sönme mesafesi yakıt türüne ve yanma koşullarına göre değişiklik göstermektedir. Aşağıdaki şekilde hidrojen, metan ve propan yakıtlarının, farklı yakıt-hava karışım oranlarında yanmaları sonucu alevlerin sönme mesafesi gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Metan, propan ve hidrojen alevlerinin sönme mesafesi [70]

# **3. YANMANIN MODELLENMESİ**

Bu bölüm, yanma analizi için kullanılan HAD kodu yeteneklerini ve avantajlı yönlerini, giriş parametreleri ve probleminin çözümündeki temel denklemleri içermektedir.

## 3.1. HAD Modelleme

Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD), bilgisayar tabanlı simülasyon yaparak ısı transferi, akışkanlar dinamiği ve kimyasal reaksiyonları içeren sistemlerin analizidir [46]. Kütle, momentum, enerji ve taşınım denklemlerini yöneterek çözüme odaklanan bir hesaplama aracıdır. HAD, son yarım yüzyılda çok önemli bir nümerik yöntem haline gelmiştir [71]. Bilgisayar işlemcilerindeki gelişim ve satın alına bilirliğinin artmasıyla HAD'a olan yönelim daha da artmıştır [46]. Uçak ve araçların aerodinamiğinden, içten yanmalı motorlardaki yanmaya, mikro elektronik devre soğutma ekipmanından, polimer kalıplamaya, kirletici ve atık suların dağıtımından, meteorolojik hava tahminlerine hatta damarlardan akan kan analizine kadar çok geniş kullanım alanı bulunmaktadır [46]. Anlaşılması güç geometriye sahip birçok kompleks yanma problemini çözüme kavuşturmak, HAD kullanılmadan çok daha zor olabilir veya sınırlı halde kalabilir [2]. En avantajlı yönü malzemeye, işçiliğe para harcamadan ve özellikle de zamandan tasarruf ederek en uygun prototip oluşturmada ilgi çekici ve alternatif görselleştirme seçenekleriyle yardımcı olmaktadır [46]. Matematik alt yapısı ile fiziksel ve kimyasal yasaları referans alarak çözüm peşinde koşması, doğruluğunu ve güvenilirliğini artırmaktadır [71].

Yanma konusunda HAD, hava araçları motorlarında, içten yanmalı motorlarda, akışkan yataklı kazanlarda, güç üretimi gibi çeşitli mühendislik dallarında uygulanabilir. Fakat bazı tip uygulamalarda, kimyasal kinetiğin ve reaksiyonlara katılan akışların karmaşıklığı nedeniyle, problemin çözümü için sisteme bazı modüllerin entegre edilmesi gerekmektedir [46]. Örneğin, deneysel çalışmalarda ön karışımlı yanma ile ön karışımsız yanma incelemesinde, yakıt ile havanın yanma bölgesine gönderilmesinden sonra oluşan yanma olayında, herhangi bir sistem parçasına ihtiyaç olmamasına rağmen, yanma sırasında gelişi güzel olarak meydana gelen türbülansı analiz edebilmek için, farklı modüllerin kullanılmasına ihtiyaç vardır. Ticari bir HAD kodu üzerinde yapılan sayısal çalışmalarda, ön karışımlı yanma modellenmesi, ön karışımsız yanma modellenmesine göre çok daha zordur [72]. Gerçeğe yakın ve anlamlı bir sonuç alabilmek için, yanma reaksiyonuna giren

bütün türlerin entalpi değişimleri, kütle değişimleri ve taşınma denklemleriyle birlikte geometrinin uygun küçük parçalara bölünmesi ve yineleme (iterasyon) sayısı da dikkate alındığında, yanma problemleri çok karmaşık hale gelebilir. Yeterli bilgi ve becerilerle bu problemler giderilebilir. Sonuçta enerji, maliyet ve zaman açısından daha verimli, ayrıca daha temiz çevre için yanma analizlerinde HAD kullanılabilir.

### 3.1.1. HAD kodunun yetenekleri ve avantajları

HAD, geniş kapsamlı algoritmaları sayesinde yanma sürecini görselleştirmenin ve irdelemenin önemli bir yönü haline gelmiştir [46]. Endüstriyel ekipmanların ve prototiplerin tasarımında güvenilir ve kullanışlı bir araçtır [46]. Ayrıca teknolojinin gelişmesiyle HAD çözümlemelerinin, düşük maliyetli bilgi işlem ile artan bir doğruluğa sahip olmaya devam edeceğine inanılmaktadır [73].

Ticari bir HAD kodu olan Fluent yazılımı, akış hareketlerini (laminer, türbülans), askeri ekipmanı ve endüstride kullanılan enerji uygulamalarını analiz etmek için tasarlanmıştır [46]. Bu kod, yüksek performanslı hesaplama yeteneği ile silindir içindeki alev akış alan etkileşimini yüksek doğrulukta çözüme kavuştura bilmektedir [2]. Bu durum, tez çalışmasında kullanılacak HAD kodu seçiminde önemli etken olmuştur.

Ticari HAD yazılımının sağladığı birçok avantaj vardır. Özellikle tehlikeli uygulamaların deneysel olarak test edilmesi zor olduğundan bu uygulamaları araştırma olanağı sağlamaktadır [2]. Bu ticari yazılım sayesinde, deneysel düzeneğin her bölümü veya parçası görselleştirilebilmekte, bilgisayar donanımına bağlı olarak kısa bir süre içerisinde 1sı, sıcaklık, mukavemet gibi alanlarda ayrıntılı inceleme yapılabilmektedir [2]. Yapılabilen bu ayrıntılı incelemeler, çalışmada verimlilik, daha az maliyet ve kısa hesaplama süreci sayesinde, çok çeşitli çalışma koşullarını test ederek üretilecek olan prototip sayısını, optimum seviyeye düşürmektedir [73, 74]. Avantajlı diğer bir yönü de, istenilen her türlü geometriyi oluşturabilme ve bu geometriyi ağ şeklinde (mesh) modellemeyi sağlamaktadır. Geometri üzerinde mesh oluşturma işlemi adımında, bütün bir geometri hacmini tamamlayan belirli küçük prizmatik şekiller kullanılmaktadır [46]. Bu küçük şekiller sayesinde ısı transferi ve akış verileri geometrinin baştan sonuna kadar işlenmesinde yardımcı olmaktadır [46]. Daha doğru bir hesaplama için geometri hacminin daha da küçük parçalara ayrılması gerekmektedir [46]. Fakat parça sayısı arttıkça problemi

çözümleme süresi artmaktadır [2]. Fluent, geometri hacmi üzerinde ağ oluşturulması ve çalışma sınır koşulları girildikten sonra, kullanıcının istenilen parametreler ile programı çalıştırmasına, sınır koşullarını yeniden değiştirebilmesine olanak tanıyan kullanışlı bir akışkan çözücüdür.

## 3.1.2. HAD kodunun bileşenleri

HAD kodu tek bir yapı üzerinde tasarlanmamış olup, sistematik olarak birbiri ile etkileşimli olarak çalışan alt sistemlerden (algoritmalardan) oluşmaktadır. Kod, bu alt sistemler ile bağlantılı olarak çalışan ve kullanımı kolaylaştırmak için kullanıcı ara yüzü de içermektedir [46].

Her yazılım, ön işlemci, son işlemci ve çözücüden oluşmaktadır [46]. Her mühendislik probleminin bir girdisi veya bir başlangıç koşulu vardır [46]. Ön işlemci, incelenen problemin girdisi olarak çalışır [46]. Ön işlemci adımında, sistemin geometrisi tanımlanır, ağlar (mesh) oluşturulur. Bu sayede, sistemin modeli küçük elemanlara indirgenmiş olur. Duvar, giriş ve çıkış alanı ile simetri ekseninin belirtilmesiyle sınır koşullarının oluşturulması ön işlemcinin bir parçasıdır [74]. Ön işlemci kısmında malzemenin tanımı yapılır, akışkanın özellikleri ve model (kimyasal olayları tanımlamak için) seçimi yapılır. Çözücü adımında ise, tanımlanan akış değişkenlerinin ayrıklaştırılması ve ilgili yöntemler ile yaklaşım tekniklerini birleştirerek, problemi çözmek için yapılan cebirsel hesaplamaları barındırmaktadır [75].

HAD kodunda yaygın kullanılan metot Sonlu Elemanlar Metodudur [46]. Bu yöntemde bilinmeyen parametreleri bulmak için doğrusal ve ikinci dereceden denklemler kullanılmaktadır [46]. Problem çözümünde kullanılan temel denklemler tam çözülemeyebilir, böyle durumlarda hata parametreleri atanmaktadır. Bu parametreler, bütün değişkenler için belirlenen limit dahilinde olması gereken artıklardır [46]. Ayrıca HAD kodu, yanılsamayı minimuma düşürmek için, artıkların cebirsel denklemler üzerindeki etkisini azaltmak için bu artıklar, belirli fonksiyonlara göre de test edilmektedir [46]. Üçüncü adım olan son işlemci de ise, probleme yönelik elde edilen verilerin görselleştirme işlemi yapılmaktadır [46]. Bu kısımda grafikler veya görsel şekiller, tanımlanmış bütün parametrelerinin değişimi açısından veri hazırlanması gibi işlemleri barındırmaktadır.

## **3.2. Temel Denklemler**

Bu kısım, parçacık boyutunda gelişen fiziksel ve kimyasal olayların matematiksel olarak ifade edildiği bölümdür.

### 3.2.1. Kütle korunumu

Doğanın en temel ilkesi olup, kütle var veya yok edilemez [11]. Bu nedenle sürekli akış sistemlerinde, sisteme giren kütle debisi miktarı, sistemi terk eden kütle debisi miktarına eşittir. Genel kütle korunumu denklemi şu şekildedir [1],

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho v) = 0 \tag{3.1}$$

Bu denklem; zamana bağlı olarak, sıkıştırılabilen akış için üç boyutlu olarak süreklilik denklemini ifade etmektedir. Bu eşitlikte görüldüğü gibi yoğunluk değişiminin zamana bağlı olduğu belirtilmiştir. Bu çalışma zamandan bağımsız olarak çözdürüldüğü için bu terim sıfır olarak kabul edilmektedir. Üç boyutta (x, y ve z eksenlerinde) düzenlenirse,

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0$$
(3.2)

Üç boyutta zamandan bağımsız kütle korunumu denklemi elde edilmiş olur [11].

#### 3.2.2. Momentum korunumu

Newton'un ikinci hareket yasası referans alınarak x, y, z bileşenleri için basınç, viskoz kuvvetleri ve hacim kuvvetleri gibi yüzey etkileşimlerinin eklenmesiyle aşağıdaki momentum denklemi elde edilebilir [1, 2].

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zx})}{\partial z} + F_{mx} = 0$$
(3.3)

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial(\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(-p + \tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zy})}{\partial z} + F_{my} = 0$$
(3.4)

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial(\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(-p + \tau_{zz})}{\partial z} + F_{mz} = 0$$
(3.5)

Buradaki u, v, w eksenlerine göre hızları, p basınç,  $\tau$  viskoz gerilme tensörünü,  $F_{mx}$  ise x eksenindeki kuvveti ifade etmektedir. Buradaki Navier-Stokes momentum denklemlerindeki viskoz gerilim kuvvetleri terimi yerine, dinamik viskozite ve hız terimleri cinsinden (hacimsel deformasyon) yazılarak denklem yeniden düzenlenirse [46],

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{-\partial \rho}{\partial x} + div(\mu \Delta u) + F_{mx} = 0$$
(3.6)

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{-\partial \rho}{\partial y} + div(\mu \Delta v) + F_{my} = 0$$
(3.7)

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{-\partial \rho}{\partial z} + div(\mu \Delta w) + F_{mz} = 0$$
(3.8)

Eş. 3.6, Eş. 3.7 ve Eş. 3.8'deki gibi üç boyutta, dinamik viskozite cinsinden momentum korunumu denklemi elde edilmiş olur.

### 3.2.3. Enerjinin korunumu

Enerji çeşitlerinin birbiriyle olan ilişkileri termodinamiğin birinci yasası ile açıklanmaktadır [11]. Yani enerjinin korunumu kanunu, enerjinin var veya yok edilemeyeceğini, bir formdan başka bir forma dönüşebileceğini belirtir [11]. Aslında enerji korunumu yasası ile kütle korunumu yasası da bağlantılıdır. Albert Einstein (1879-1955) tarafından ortaya konulmuş ve çok bilinen bir denklemle bağlantısı görülebilir.

$$E = mc^2 \tag{3.9}$$

Bu denklemdeki c katsayısı, boşluktaki ışık hızını ifade etmektedir ve sabittir (2,9979E+8 m/s) [11]. Dolayısıyla kütle değişikliği de enerji değişikliği ile bağlantılı olduğu söylenebilir. Termodinamiğin birinci yasasının en önemli verisi toplam enerji (E) kavramıdır. Sistemin toplam enerji değişiminin net işe eşit olduğunu belirtmektedir [11]. Zamanla enerji artış hızı aşağıdaki Eş. 3.10'da belirtilen denklem kullanılarak hesap edilebilir [11].

$$\rho \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} \tag{3.10}$$

Bir parçacığa aktarılan ısı miktarı da aşağıdaki Eş. 3.11'de belirtilen denklem kullanılarak hesap edilebilir [11, 76].

$$-div(q) = k\frac{dT}{dx}$$
(3.11)

Buradaki T sıcaklığı, k parçacığın ısıl iletkenliğini ifade etmektedir. Parçacık üzerine aktarılan ısı hızı yukarıdaki denklemde gösterildi ve belirlendi. Parçacık yüzeyinde yapılan viskoz kuvvetlerinin yaptığı iş ise şu denklemle belirtilebilir [46],

$$-div(\rho u) + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{xy})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{xz})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{yx})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{yz})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{zx})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{zy})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{zy})}{\partial$$

Termodinamiğin birinci yasası toplam enerjideki değişimi ifade ettiği bilindiğinden (1sı "Q" ve kuvvetlerin yaptığı işteki "W" değişim, toplam enerji değişimini vermektedir),

$$\Delta Q - \Delta W = \Delta E \tag{3.13}$$

Eş. 3.11 ve Eş. 3.12 verileri Eş. 3.13'te birleştirilirse, parçacık başına birim zamandaki enerji değişimi denklemi şu şekilde elde edilebilir [46],

$$\rho \frac{dE}{dt} = -div(\rho u) + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{xy})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{xz})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{yx})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{yz})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{zx})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{zx})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{zx})}{\partial z} + k\frac{dT}{dx} + S_E = 0$$
(3.14)

Buradaki  $S_E$  terimi varsa ekstra enerji girişini (faz değişimi, radyasyon enerjisi gibi) ifade etmektedir.

Bu çalışma kapsamında birçok kimyasal tür reaksiyona katıldığı için yukarıdaki Eş. 3.14 enerji denklemi, entalpi cinsinden genel olarak Eş. 3.15'te belirtildiği gibi ifade edilebilir [48],

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{dT}{dx_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum j' h'_j J'_j + \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_h$$
(3.15)

Buradaki  $J'_{j}$  her bir kimyasal türün akısını,  $S_h$  kimyasal reaksiyondaki faz değişimi ve radyasyon değişiminin neden olduğu ısı değişiminin entalpi terimini ifade etmektedir.

### 3.2.4. Taşınım denklemi

Genel olarak kimyasal reaksiyon sonucu bir türün konsantrasyonunun taşınmasında veya bir kirletici emisyonun oluşumunda, cebirsel olarak birçok HAD modelinde kullanılan konveksiyon ve difüzyon modeller vardır [46]. Bu modeller arasında benzerlik bulunmaktadır. Silindirik ve simetrik yanma odası için taşınma denklemi şu şekilde yazılabilir [77, 78],

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\nu_j\Phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \Gamma_{\Phi} \frac{\partial\Phi}{\partial x_j} \right] + S_{\Phi}$$
(3.16)

Buradaki S<sub> $\Phi$ </sub> taşıma denklemi için kaynak terimi,  $\Phi$  bağımlı değişkeni,  $v_j$  bağımlı değişken  $\Phi$ 'ye karşılık gelen hızı,  $\Gamma$  ise değişken için difüzyon katsayısını ifade etmektedir.

Türbülanslı akışlarda birçok karmaşık olay meydana gelmektedir. Akışın rastgele ve karmaşık davranışları matematiksel olarak modellemesini zorlaştırmaktadır. Ayrıca akış hızı da sürekli değişmektedir. Bu yüzden modellemede ortalama hızdan bahsedilmektedir [79].

## 3.2.5. Standard k-E türbülans modeli

Türbülanslı akışları sayısal olarak analiz etmek oldukça zordur. Bilinmeyen ve ölçülemeyen terimler içermektedir [46]. Daha anlaşılabilir hale gelmesi amacıyla türbülansta hız ölçeğini ve uzunluk ölçeğini tanımlamak için k ve  $\mathcal{E}$  terimleri kullanılmaktadır [46].

$$v = k^{1/2} \text{ ve } l = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$$
 (3.17)

Eş. 3.17'de anlaşılacağı gibi problem karşısında karşılaşılan küçük girdap karşısında  $\mathcal{E}$  modeli ve geniş girdap karşısında k ve  $\mathcal{E}$  ile bağlantılı *l* terimi kullanılmaktadır [46]. Bu terimlerin viskozite ile bağlantısı Eş. 3.18 denklemi ile ifade edilebilir [46].

$$\mu_t = C\rho v l = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{3.18}$$

Buradaki  $\mu_t$  terimi türbülanslı viskoziteyi ifade etmektedir.  $C_{\mu}$  terimi boyutsuz bir sabit katsayıdır. Standart k- $\mathcal{E}$  türbülans modeli için kullanılan taşınım denklemleri aşağıda belirtilmiştir [46].

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + div(\rho kU) = div\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k}\Delta k\right) + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \sigma\varepsilon$$
(3.19)

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + div(\rho\varepsilon U) = div\left(\frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}}\Delta\varepsilon\right) + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}2\mu_t S_{ij}.S_{ij} - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k}$$
(3.20)

Buradaki  $S_{ij}$  terimi türbülans gerilimi altındaki deformasyonu ifade etmektedir. Diğer terimler ise standard k- $\mathcal{E}$  modelindeki sabitlerdir. Bu sabitlerin değeri aşağıdaki tabloda paylaşılmıştır.

Çizelge 3.1. Standard k-E türbülans modelinde kullanılan sabitler [46]

Sabit	$C_{\mu}$	$\sigma_k$	$\sigma_{arepsilon}$	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$
Değer	0,09	1,00	1,30	1,44	1,92

## 3.2.6. Eddy dissipation concept (EDC) modeli

Ticari bir HAD kodu üzerinde yapılabilen ön karışımlı yanma simülasyonunun, ön karışımsız yanma simülasyonuna göre daha karmaşık olduğundan önceki bölümde bahsedilmiş idi. Çünkü yanma reaksiyonları ve türbülanslı akış ince bir alev içerisinde meydana gelmektedir. EDC hızlı gelişen kimyasal reaksiyonlarda, çok çeşitli ön karışımlı yanma problemleri için, sabit değerlerin değiştirilmesine gerek kalmaksızın, uygun sonuçlar verdiği ispatlanmıştır [80]. Çok kademeli reaksiyon mekanizmalarına uygun olduğu için, bu çalışmada türbülans-reaksiyon etkileşim modeli olan EDC kullanılmıştır. Çok kademeli reaksiyon hızları, her bir kademe de farklılık gösterdiği için EDC modeli kullanılmıştır. Eddy Dissipation modelinde ise türbülans reaksiyon ölçeği tüm kademede aynı olduğu için çok kademeli yanma simulasyonuna uygun değildir [80]. EDC modelindeki türbülans ölçeği şu denklemle bulunabilir [81],

$$\gamma^* = 2,137 \left(\frac{\mu\varepsilon}{k^2}\right)^{1/4} \tag{3.21}$$

Buradaki  $\mu$  kinematik viskoziteyi, k ve  $\varepsilon$  türbülansın kinetik enerji ve yayılım oranını, 2,137 ise model sabitini ifade etmektedir. Zaman ölçeği de şu denklemle bulunabilir [81],

$$\tau^* = 0,4082 \left(\frac{\mu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \tag{3.22}$$

EDC modelinde kimyasal reaksiyonlar sonucu oluşan veya yok olan her bir türün molar oranı şu denklemle ifade edilebilir [81],

$$R_{i} = \frac{\rho(\gamma^{*})^{2}}{\tau^{*} [1 - \gamma^{*}]} (\gamma_{i}^{*} - \gamma_{i})$$
(3.23)

Buradaki  $\gamma_i^*$  terimi zaman ölçeği içerisinde reaksiyondan sonra oluşan türlerin kütlesel oranını ifade etmektedir.

## 3.2.7. Sınır koşulları hesabı

HAD kodu için gerekli olan sınır koşul değerleri hesabı için öncelikle kok fırını gazının stokiyometrik yanma durumunu incelenir ise;

$$0,55H_2 + 0,27CH_4 + 0,06CO + 0,02CO_2 + 0,1N_2 + 0,845(O_2 + 3,76N_2) \rightarrow 0,35CO_2 + 1,09H_2O + 3,1772N_2$$

$$(3.24)$$

Yukarıdaki Eş. 3.24'te görüldüğü gibi stokiyometrik yanma şartlarında oksitleyici olarak kullanılan havanın katsayısı 0,845 olmaktadır. Fakat deneyin yapıldığı şartlar referans alındığı için, hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,2$  şartlarındaki yanma denklemi hesaplanması gerekmektedir.

$$\begin{array}{l} 0,55H_2 + 0,27CH_4 + 0,06CO + 0,02CO_2 + 0,1N_2 + 1,0181(O_2 + 3,76N_2) \rightarrow \\ 0,35CO_2 + 1,09H_2O + 3,2772N_2 \end{array} \tag{3.25}$$

Hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,2$  şartlarındaki bu hesapta görüldüğü gibi yakıt bileşenlerinin toplam mol sayısı 1 olduğu şartlarda, oksitleyici olarak kullanılan hava bileşenlerinin toplam mol sayısının 4,8462 olduğu görülmüştür. Ön karışımlı yakıcı girişinde, hava ve yakıtın toplam mol sayısı;

$$n_T = 1 \text{ mol yakıt} (H_2, CH_4, CO, CO_2, N_2) + 4,8462 \text{ mol hava} (O_2, N_2) = 5,8462 \text{ mol}$$
 (3.26)

Eş. 3.26'da belirtildiği gibi toplam giriş mol sayısı 5,8462'den hesaba devam edilmiştir. Kullanılan hava girişindeki oksijen konsantrasyonu %21 olduğundan, bu duruma göre yakıt ve hava bileşenlerinin toplam 1 mol paydasındaki konsantrasyon değerleri, Çizelge 3.2'de gösterilmiştir.

Çizelge 3.2. %21 0 <sub>2</sub>	<sub>2</sub> gazı içeren hava	. şartlarında ya	ıkıt ve hava bileşe	enlerinin toplam	ı mole
göre ko	nsantrasyon değer	rleri			

21%0 <sub>2</sub>		
n(mol)	n/n <sub>T</sub>	
0,55H <sub>2</sub>	0,094H <sub>2</sub>	
0,27CH <sub>4</sub>	0,046CH <sub>4</sub>	
0,06CO	0,010CO	
0,02CO <sub>2</sub>	0,003CO <sub>2</sub>	
1,01810 <sub>2</sub>	0,1750 <sub>2</sub>	
3,9281N <sub>2</sub>	0,672N <sub>2</sub>	
$n_{Toplam} = 5,8462$	1	

Ön karışımlı yakıcı girişinde yakıt ve havanın hızını bulmak için toplam olarak yakıt hava debisi hesap edilmiştir. Deney 10 kW (2,39005736 kcal/s) ısıl güçte yapıldığı için kok fırını gazının ısıl değeri (3768 kcal/m<sup>3</sup>) oranına göre yakıtın giriş debisi bulunabilir.

$$\dot{Q}_{y} * H_{coke} = 10 \, kW \tag{3.27}$$

$$\dot{Q}_y = 6,34304E - 4 \, m^3/s \tag{3.28}$$

(Bkz. Eş. 3.25)'teki yanma denkleminin hava ve yakıt katsayı değerlerinden hava debisi hesap edilebilir.

$$\dot{Q}_h = 4,8462\dot{Q}_v = 30,73936E - 4 \,m^3/s$$
 (3.29)

Oksitleyici olarak kullanılan havanın da %21'i oksijen gazı olduğundan,

$$\dot{Q}_{O_2} = \frac{\dot{Q}_h}{4,76} = 6,4578E - 4 \, m^3/s \tag{3.30}$$

Toplam yakıt hava debisi;

$$\dot{Q}_T = \dot{Q}_{\gamma} + \dot{Q}_h = 6,34304E - 4 + 30,73936E - 4 = 37,0824E - 4 m^3/s$$
 (3.31)

Bu çalışmada CDC yöntemi şartları da araştırıldığı için bu yöntem uygulanırken, yakıtı yakmak için kullanılan hava içerisindeki oksijen miktarı sabit tutularak, oksijen konsantrasyonu belli oranda azalacak şekilde, seyreltici olarak kullanılan gaz artırılmaktadır. Bu çalışmada seyreltici olarak CO<sub>2</sub> ve N<sub>2</sub> gazları kullanılmıştır. N<sub>2</sub> gazı artırılarak oksijen konsantrasyonunun %1 azalma hesabından aşağıda bahsedilmiştir.

Öncelikle oksitleyici olarak kullanılan hava içerisindeki oksijen miktarı sabit olduğundan, Eş. 3.30'da belirtilen oksijen miktarı referans olarak kullanılmalıdır. O halde %1 oksijen konsantrasyonunun azalması durumunda elde edilecek olan hava miktarını tayin edebilmek için Eş. 3.32 kullanılmıştır.

$$\%20 * \dot{Q}_{h\%200_2} = \dot{Q}_{0_2} \tag{3.32}$$

Veriler yerine konulup işlemler yapılırsa %20 oksijen konsantrasyonuna sahip hava debisi Eş. 3.33'te gösterilmiştir.

$$\dot{Q}_{h\%200_2} = 5 * 6,4578E - 4 \, m^3/s = 32,289E - 4 \, m^3/s \tag{3.33}$$

Kullanılan yakıt debisi de sabit olduğundan yeni durumda  $(20\%0_2)$  toplam olarak yakıt hava debisi Eş. 3.34'te gösterilmiştir.

$$\dot{Q}_{T\%200_2} = \dot{Q}_{h\%200_2} + \dot{Q}_y = 38,6320E - 4 \, m^3/s \tag{3.34}$$

Seyreltme durumu aynı sıcaklık ve basınç koşullarında yapıldığı için yeni durumdaki toplam mol sayısı hesabında, toplam debi referans alınarak doğru orantı kurulabilir.

$$n_{T\%200_2} = (\dot{Q}_{T\%200_2} * n_{T\%210_2}) / \dot{Q}_{T\%210_2}$$
(3.35)

O halde veriler yerine konur ve işlemlere devam edilirse yeni durumda  $(20\%O_2)$  kullanılan toplam yakıt hava debisindeki bileşenlerin toplam mol sayısı, Eş. 3.36'da gösterilmiştir.

$$n_{T\%200_2} = 38,6320E - 4 * 5,8470/37,0824E - 4 = 6,0913 \ mol \tag{3.36}$$

Toplam mol sayısındaki artma seyreltici olarak kullanılan  $N_2$  gazı sayesinde olmuştur. Bu durumda kullanılan yakıt hava bileşenlerinin mol sayısı dağılımı aşağıda gösterilmiştir.

20%0 <sub>2</sub>		
n(mol)	n/n <sub>T</sub>	
0,55H <sub>2</sub>	0,090H <sub>2</sub>	
0,27CH <sub>4</sub>	0,044CH <sub>4</sub>	
0,06CO	0,010CO	
0,02CO <sub>2</sub>	0,003CO <sub>2</sub>	
1,01810 <sub>2</sub>	0,1670 <sub>2</sub>	
4,1732N <sub>2</sub>	0,686N <sub>2</sub>	
$n_{Toplam} = 6,0913$	1	

Çizelge 3.3.  $N_2$  ile seyreltme durumunda %20  $O_2$  gazı içeren hava şartlarında yakıt ve hava bileşenlerinin toplam mole göre konsantrasyon değerleri

Hesaplara aynı şekilde devam edilerek oksijen konsantrasyonu %15'e kadar düşürülmüştür. Her durum için toplam yakıt hava bileşenlerinin mol sayıları, aşağıdaki Çizelge 3.4'te paylaşılmıştır.

21%O <sub>2</sub>		20%0 <sub>2</sub>		
n(mol)	n/n <sub>T</sub>	n(mol)	n/n <sub>T</sub>	
0,55H <sub>2</sub>	0,094H <sub>2</sub>	0,55H <sub>2</sub>	0,090H <sub>2</sub>	
0,27CH <sub>4</sub>	0,046CH <sub>4</sub>	0,27CH <sub>4</sub>	0,044CH <sub>4</sub>	
0,06CO	0,010CO	0,06CO	0,010CO	
0,02C0 <sub>2</sub>	0,003CO <sub>2</sub>	0,02CO <sub>2</sub>	0,003CO <sub>2</sub>	
1,01810 <sub>2</sub>	0,1750 <sub>2</sub>	1,01810 <sub>2</sub>	0,1670 <sub>2</sub>	
3,9281N <sub>2</sub>	0,672N <sub>2</sub>	4,1732N <sub>2</sub>	0,686N <sub>2</sub>	
$n_{Toplam} = 5,8470$	1	$n_{Toplam} = 6,0913$	1	
19%0	2	18%0	2	
n(mol)	n/n <sub>T</sub>	n(mol)	n/n <sub>T</sub>	
0,55H <sub>2</sub>	0,086H <sub>2</sub>	0,55H <sub>2</sub>	0,082H <sub>2</sub>	
0,27CH <sub>4</sub>	0,042CH <sub>4</sub>	0,27CH <sub>4</sub>	0,040CH <sub>4</sub>	
0,06CO	0,009CO	0,06CO	0,009CO	
0,02C0 <sub>2</sub>	0,003CO <sub>2</sub>	0,02CO <sub>2</sub>	0,003CO <sub>2</sub>	
1,01810 <sub>2</sub>	0,1670 <sub>2</sub>	1,01810 <sub>2</sub>	0,1530 <sub>2</sub>	
4,4411N <sub>2</sub>	0,693N <sub>2</sub>	4,7356N <sub>2</sub>	0,711N <sub>2</sub>	
n <sub>Toplam</sub> = 6,3592	1	$n_{Toplam} = 6,6537$	1	
17%0	2	15%0	15%0 <sub>2</sub>	
n(mol)	n/n <sub>T</sub>	n(mol)	n/n <sub>T</sub>	
0,55H <sub>2</sub>	0,078H <sub>2</sub>	0,55H <sub>2</sub>	0,070H <sub>2</sub>	
0,27CH <sub>4</sub>	0,038CH <sub>4</sub>	0,27CH <sub>4</sub>	0,034CH <sub>4</sub>	
0,06CO	0,008CO	0,06CO	0,007CO	
0,02CO <sub>2</sub>	0,002CO <sub>2</sub>	0,02CO <sub>2</sub>	0,002CO <sub>2</sub>	
1,01810 <sub>2</sub>	0,1450 <sub>2</sub>	1,01810 <sub>2</sub>	0,13002	
5,0691N <sub>2</sub>	0,725N <sub>2</sub>	5,8663N <sub>2</sub>	0,753N <sub>2</sub>	
$n_{Toplam} = 6,9872$	1	$n_{Toplam} = 7,7844$	1	

Çizelge 3.4.  $N_2$  ile seyreltme durumunda, %21'den %15'e kadar  $O_2$  gazı içeren hava şartlarında, yakıt ve hava bileşenlerinin toplam mole göre konsantrasyon değerleri

 $N_2$  ile seyreltme durumu için giriş sınır koşulları hesaplandı ve Çizelge 3.4'te özet olarak gösterildi, aynı şekilde CO<sub>2</sub> ile seyreltme durumu için de yapılacak olursa;

Oksitleyici olarak kullanılan hava içerisindeki oksijen miktarı sabit olduğundan, (Bkz. Eş. 3.28)'de belirtilen oksijen miktarı, referans alınarak oksijen konsantrasyonu %1 azalacak şekilde, kullanılması gereken yeni hava debisi (Bkz. Eş. 3.31)'de bulunmuştu, 10 kW ısıl güce karşılık gelen yakıt debisi de eklendiğinde elde edilen toplam yakıt-hava debisi (Bkz. Eş. 3.32)'de bulunmuş idi.

Seyreltme durumu aynı sıcaklık ve basınç koşullarında yapıldığı için yeni durumdaki toplam mol sayısı hesabında, toplam debi miktarı üzerinden doğru orantı kurularak (Bkz. Eş. 3.33)'teki gibi hesaplama yapılması sonucu, (Bkz. Eş. 3.34)'teki gibi toplam mol sayısı elde edilmiş idi.

Bu durumda toplam mol sayısındaki artma seyreltici olarak kullanılan  $CO_2$  gazı sayesinde olmuştur. Bu durumda  $CO_2$  seyrelticisine göre kullanılan yakıt hava bileşenlerinin mol sayısı dağılımı, aşağıdaki Çizelge 3.5'te gösterilmiştir.

Çizelge 3.5.	. $CO_2$ ile seyreltme durumunda %20 $O_2$ gazı içeren hava şartlarında ya	akıt ve
	hava bileşenlerinin toplam mole göre konsantrasyon değerleri	

20%0 <sub>2</sub>		
n(mol)	n/n <sub>T</sub>	
0,55H <sub>2</sub>	0,090H <sub>2</sub>	
0,27CH <sub>4</sub>	0,044CH <sub>4</sub>	
0,06CO	0,010CO	
0,2651CO <sub>2</sub>	0,044CO <sub>2</sub>	
1,01810 <sub>2</sub>	0,1670 <sub>2</sub>	
3,9289N <sub>2</sub>	0,645N <sub>2</sub>	
$n_{Toplam} = 6,0913$	1	

Hesaplara aynı şekilde devam edilerek oksijen konsantrasyonu %15'e kadar düşürülmüştür. Her durum için toplam yakıt hava bileşenlerinin mol sayıları aşağıdaki Çizelge 3.6'da paylaşılmıştır.

21%O <sub>2</sub>		20%0 <sub>2</sub>		
n(mol)	n/n <sub>T</sub>	n(mol)	n/n <sub>T</sub>	
0,55H <sub>2</sub>	0,094H <sub>2</sub>	0,55H <sub>2</sub>	0,090H <sub>2</sub>	
0,27CH <sub>4</sub>	0,046CH <sub>4</sub>	0,27CH <sub>4</sub>	0,044CH <sub>4</sub>	
0,06CO	0,010CO	0,06CO	0,010CO	
0,02C0 <sub>2</sub>	0,003CO <sub>2</sub>	0,2651C0 <sub>2</sub>	0,044CO <sub>2</sub>	
1,01810 <sub>2</sub>	0,1750 <sub>2</sub>	1,01810 <sub>2</sub>	0,1670 <sub>2</sub>	
3,9281N <sub>2</sub>	0,672N <sub>2</sub>	3,9281N <sub>2</sub>	0,645N <sub>2</sub>	
$n_{Toplam} = 5,8470$	1	n <sub>Toplam</sub> = 6,0913	1	
19%0	2	18%0 <sub>2</sub>		
n(mol)	n/n <sub>T</sub>	n(mol)	n/n <sub>T</sub>	
0,55H <sub>2</sub>	0,086H <sub>2</sub>	0,55H <sub>2</sub>	0,082H <sub>2</sub>	
0,27CH <sub>4</sub>	0,042CH <sub>4</sub>	0,27CH <sub>4</sub>	0,040CH <sub>4</sub>	
0,06CO	0,009CO	0,06CO	0,009CO	
0,533CO <sub>2</sub>	0,0783CO <sub>2</sub>	0,8275CO <sub>2</sub>	0,1256CO <sub>2</sub>	
1,01810 <sub>2</sub>	0,1670 <sub>2</sub>	1,01810 <sub>2</sub>	0,1530 <sub>2</sub>	
3,9281N <sub>2</sub>	0,6177N <sub>2</sub>	3,9281N <sub>2</sub>	0,5904N <sub>2</sub>	
n <sub>Toplam</sub> = 6,3592	1	n <sub>Toplam</sub> = 6,6537	1	
17%0	2	15%0 <sub>2</sub>		
n(mol)	n/n <sub>T</sub>	n(mol)	n/n <sub>T</sub>	
0,55H <sub>2</sub>	0,078H <sub>2</sub>	0,55H <sub>2</sub>	0,070H <sub>2</sub>	
0,27CH <sub>4</sub>	0,038CH <sub>4</sub>	0,27CH <sub>4</sub>	0,034CH <sub>4</sub>	
0,06CO	0,008CO	0,06CO	0,007CO	
1,161CO <sub>2</sub>	0,1688CO <sub>2</sub>	1,9582CO <sub>2</sub>	0,2544CO <sub>2</sub>	
1,01810 <sub>2</sub>	0,14502	1,01810 <sub>2</sub>	0,1300 <sub>2</sub>	
3,9281N <sub>2</sub>	0,5622N <sub>2</sub>	3,9281N <sub>2</sub>	0,5046N <sub>2</sub>	
n <sub>Toplam</sub> = 6,9872	1	n <sub>Toplam</sub> = 7,7844	1	

Çizelge 3.6.  $CO_2$  ile seyreltme durumunda %21'den %15'e kadar  $O_2$  gazı içeren hava şartlarında yakıt ve hava bileşenlerinin toplam mole göre konsantrasyon değerleri

# 4. DENEY DÜZENEĞİNİN TANITILMASI

Deney düzeneği tasarlanırken, kullanılan yakıt ve yanma şartları dikkate alınmalıdır. Yakıtın ısıl değeri, yanma sırasında kullanılan hava-yakıt karışım oranı, karıştırılan yakıt ve havanın yanma odasına gönderilme debi ve hızı gibi parametreler, yanma ekipmanlarını doğrudan etkilemektedir. Bu nedenle yanma ekipmanında kullanılan malzemenin durumu, yanma odasının geometrik yapısı, yakıcının boyutu ve akış kesit alanının şekillendirilmesinde önemli parametrelerdir. Ayrıca sayısal çalışmaların da yapılacağı öngörüsü ile deney düzeneğin tasarlanması, daha yararlı olacaktır. Deney düzeneğindeki yanma ekipmanları, ısıl güç olarak 15 kW yanma şartlarını karşılayacak şekilde tasarlanmıştır. Deneyler ise 10 kW ısıl güçte yapılmıştır [14]. Deney düzeneğine ait fotoğraf aşağıda paylaşılmıştır.



Resim 4.1. Deney düzeneği

## 4.1. Yanma Odası

Yakıt olarak kullanılan metan ve kömür gazlarının yanma sonu verilerinin ölçülmesini sağlayan yanma odası Resim 4.2'de gösterilmiştir.



Resim 4.2. Yanma odası

Yanma odası, paslanmaz çelik malzeme kullanılarak Resim 4.2'de görüldüğü gibi tasarlanmış, kumlama tekniği ile yüzey işleminden geçirilmiştir. 1 metre boyunda ve 40 cm çapında silindirik şekildedir. Aşağı tarafında yakıcının takılabildiği 7 cm çapında bir giriş boşluğu, yanma sonu ürünlerin tahliyesi için çıkış bölgesinde 11 cm çapında bir çıkış boşluğu bulunmaktadır. Ön tarafında alevin görülebilmesi için yüksek sıcaklığa karşı dayanıklı, temperlenmiş cam kullanılarak oluşturulmuş gözlem penceresi bulunmaktadır. Yan tarafında yanma sonu verilerinin ölçülebilmesi için tabandan başlayarak sırasıyla 10 cm, 30 cm, 50 cm, 70 cm ve 90 cm'de olmak üzere dizilmiş 5 adet (bacasındaki hariç) ölçüm noktası bulunmaktadır. Bu ölçüm noktalarında, eksenel olanları yanma odasının merkezi çizgisinden, radyal olanları ise merkezden yanma odası yarıçapı dışına doğru sırasıyla 0 cm, 5 cm, 10 cm ve 15 cm noktalarından ölçüm yapılmıştır [14]. Yanma sonu

oluşan kok fırını gazı alevinin, gözlem penceresinden görünümü Resim 4.3'te gösterilmiştir.



Resim 4.3. Kok firin gazı alevinin görüntüsü [14]

Resim 4.3'te görüldüğü gibi alev bölgesinde kızarmış çubuklar bulunmaktadır. Bunlardan bir tanesi iyonizasyon çubuğudur. İyonizasyon çubuğu sayesinde alevin olduğu, yani yanmanın devam ettiği algılanmaktadır. Aksi durumda önlem açısından selenoid valfler sayesinde gaz akışı kesilmektedir. Diğer çubuklar ise ateşlemenin yapılmasını sağlamaktadır.

Güvenlik açısından yanma ekipmanları arasında, selenoid valfin bulunması gerekmektedir. Kontrol ünitesindeki selenoid valfler, hava-yakıt karışımını ayarladığı gibi güvenlik açısından, çalışılan ısıl gücün çok üzerine çıkılması durumunda, baca ölçüm noktasındaki sıcaklık sensöründen (PT-100 ısıl çifti) almış olduğu bilgiye göre gaz akışını kesmektedir.

# 4.2. Ön Karışımlı Yakıcı

Ön karışımlı yakıcılarda, yakıt ve hava önceden karıştırılarak yanma odasına gönderildiği için, ön karışımsız yakıcılara göre akış kesit alanı küçük farklılıklar barındırabilir. Ön karışımlı yakıcıların ön karışımsız olana göre birçok avantajı olmasına rağmen (homojen karışım sayesinde daha az kirletici emisyon, daha az yanma gürültüsü gibi), önemli bir dezavantajı da vardır. Bu dezavantaj alev geri tepmesi (flachback) olayı olup, yakıcı

üzerindeki tasarım kriterlerini etkilemektedir. Alev geri tepmesi, taze gaz akışının alev hızından küçük olduğu durumlarda oluştuğundan, öncelikle hızı etkileyen akış kesit alanı irdelenmelidir. Daha sonra girdap kopması mekanizmasıyla oluşan alev geri tepmesinde, ana etken akış kesit alanının açılandırılması olduğu için, akış kesit alanı da irdelenmelidir. Basınç düşüşü akış hızını etkilediği için, yakıcının ilerisinde makul seviyede açılandırma yapılabilir [66, 67]. Deneyde kullanılan ön karışımlı yakıcının akış kesiti, Şekil 4.1'de gösterilmiştir.



Şekil 4.1. Ön karışımlı yakıcının akış kesit görünümü [82]

Şekil 4.1'de görüldüğü gibi yakıcı; türbülatörsüz, simetrik olarak sıralanmış (sayısal çalışmayı kolaylaştırmakta), 10 mm çaplı, 9 adet gaz giriş yeri barındırmaktadır. Paslanmaz çelikten imal edilmiş, 70 mm çapındaki bu yakıcı, yanma odası alt tarafına takılmaktadır. Çalışmanın referans noktası, bu iki parçanın birleştiği noktadır. Deney düzeneğinin modellemesi yapılırken, yakıcı ile yanma odası birleşimi sıfır noktası kabul edilerek (deney düzeneğinde olduğu gibi), yanma odası x ekseni boyunca uzatılmıştır. Aşağıda '5. Sonuçlar ve Tartışma' bölümünde paylaşılmış olan grafiklerde, eksenel sonuçlar x eksenine göre, radyal olanlar diğer eksenlere göre (simetrik olduğu için sonuçlar benzer) çizdirilmiştir.

## 4.3. Ölçüm Elemanları

Yanma sonu oluşan sıcaklık veya ürün konsantrasyonu ölçümleri yapılırken çeşitli cihazlar kullanılmaktadır. Ortamındaki fiziksel büyüklükleri (1s1, 1ş1k, basınç vb.) algılayıp bilgi üreten alt sisteme sensör denilmektedir [83]. Algıladığı bilgiyi bünyesindeki bir filtreden geçirerek ana işlemciye gönderen alt sisteme de transdüser denilmektedir [83]. Kullanılan

ölçüm cihazları bu iki alt sistemi de barındıran modüllerdir. Sensörler genellikle etrafında değişen olgulara karşı, gerilim (ısıl çiftler gibi) veya direnç (kuvvet sensörleri gibi) gibi bilgi oluştururlar [83]. Fakat doğrusal değişen gerçek değerlere karşı aynı oranda değişen bilgi üretemeyip genelde parabolik veya yakın bilgi üretilebilmektedir [83]. Bu nedenle ölçüm cihazlarında, bir ölçüm aralığı ve değişen olgulara karşı hassasiyet parametresi ortaya çıkmaktadır. Cihazlarda taahhüt edilen ölçüm aralığında, gerçek ölçüm verisi ile cihaz tarafından üretilen bilgi kümesi arasında karşılaştırma yapılarak, gerçek bilgi ile örtüşme olması için gerekli matematiksel işlemlerin yapıldığı bölüm, filtreleme kısmındır [83]. Bu filtreleme kısmında çok küçük de olsa gerçek değer ile ölçülen değer arasında fark oluşmaktadır [83]. Oluşan en büyük fark cihazın hassasiyetini ortaya koymaktadır [83]. Ölçüm cihazlarının, belli aralıklarla bilgi güvenliği için kalibrasyon yapılması gerekmektedir. Bu kalibrasyon sırasında çalışma aralığındaki referans değerler, ölçüm cihazına tanıtılarak filtreleme kısmı yeniden yüklenmiş olmaktadır [83].

## 4.3.1. Sıcaklık ölçerler

Kullanılan kok fırını gazının, bünyesinde bulunan hidrojen ve metanın da etkisiyle ısıl değeri yüksektir [1]. Dolayısıyla yanma sonucu sıcaklık seviyesi de yüksek değerlere çıkmaktadır. Bu sıcaklık değerinin ölçümü normal termometreler ile sağlanamaz [83]. Bu nedenle çalışma aralığı çok daha yüksek olan sıcaklık ölçerlere ihtiyaç duyulmaktadır. Isıl çiftler -200 °C ile 2320 °C kadar olan ısıl proseslerde yaygın olarak tercih edilmektedir [84].

Isıl çiftler, farklı iki metal kullanılarak imal edilmektedir [83]. Bu iki metalin bir ucu aynı ortamda ısıtılmasına rağmen, diğer uçlarında oluşan gerilim seviyesi farklı olmaktadır [83]. Bu gerilim seviyesi küçük olsa bile elektronik devreler ile genişletilerek, her birim gerilim farkına bir sıcaklık değeri tanımlanmaktadır [83].

## 4.3.2. Baca gazı analizörü

Yanma sonucu karbon monoksit, karbon dioksit, azot monoksit gibi farklı konsantrasyonda pek çok gaz oluşmaktadır. Bu gazların oluşma miktarını belirlemek için gaz analizörleri kullanılmaktadır. Baca gazı analizörleri genelde prop uçlu olup, taşınabilir ve hızlı cevap verebilen cihazlardır [85]. Bu analizörler bünyesinde elektrokimyasal gaz sensörleri barındırmaktadır [85]. Elektrokimyasal sensörler, biyosensör çeşitlerinin bir alt kolu olup, yaygın olarak bünyesinde, amperometri esaslı elektrotlar, potansiyometri esaslı elektrotlar, yarı iletken esaslı transistörler barındırmaktadır [86]. Örneğin amperometri esaslı elektrot barındıran baca gazı analizöründe, ortamda bulunan karbon monoksit, bu elektrotla reaksiyona girmesi sonucu elektrotta bir akım oluşturur, bu akımın büyüklüğüne göre ortamdaki karbon monoksit konsantrasyonu tayin edilmektedir [85]. Aynı şekilde gerçek değer ile ölçülen değer arasında küçük sapma miktarı olabilir.

## 4.3.3. Debi ölçerler

Yapılan bu tez çalışmasında, sınır şartlarının hesabı için kullanılan yakıt ve hava miktarının bilinmesi gerekmektedir. Bu miktarın ölçümü debimetreler sayesinde yapılmaktadır. Debinin ölçümünü yapabilen birçok debimetre çeşidi vardır. Her çeşit gaz için farklı bir debimetre olmayıp, referans akışkana göre belirlenmiş bir katsayı ile istenilen akışkana göre ayarlanabilirler [87]. Debimetreler asıl olarak akışkanın hız ve basınç değişimini (fiziksel büyüklükler) tayin ettiğinden, akışkanların yoğunluk farkı kullanılarak farklı türdeki gazlar için kullanılabilir [1].

# 5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA



Şekil 5.1. Deney düzeneği, sayısal modelleme ve sonuçların karşılaştırılması

Bu bölümde öncelikle, yapılan deneysel çalışmadaki tüm veriler [14] referans alınarak, oluşturulan sayısal modelleme üzerinde yapılan kok fırını gazı yanma sonuçları ile karşılaştırılması yapılmıştır. Deneysel sonuçlarla yapılan karşılaştırmalar ile model doğrulandıktan sonra yanma sonu oluşan emisyonların miktarlarını azaltma üzerine irdeleme yapılmıştır. CDC yöntemi, sisteme dahil edilerek emisyonlardaki değişimler grafik ve konturlar ile gösterilerek elde edilen kazanımlar belirtilmiştir.

## 5.1. Modelin Doğrulanması

Sayısal modellemede, yanma sonuçlarını etkileyen birçok parametre vardır. Örneğin seçilecek bir türbülans modeli, yanma sonuçlarında önemli değişikliklere neden olacaktır. Bu bölümde türbülansın ve kullanılan reaksiyon basamak sayısının, yanma sonuçlarına etkileri irdelenmiştir.

## 5.1.1. Reaksiyon basamak sayısının etkisi

Yanma olayı, yakıt ve yanma şartlarına bağlı olarak birçok reaksiyonla gerçekleşmektedir [50]. Yanma bölgesine gönderilen her bir yakıt molekülünün, olması gereken bütün reaksiyonlardan geçmesi durumunda tam bir yanma olayından bahsedilebilir. Bu hususun dışında yakıt molekülünün, reaksiyonların bir kısmından geçip bir kısmından geçmemesi durumunda ise eksik yanma gerçekleşmiş olup, kirletici emisyonlar meydana gelmektedir. Örneğin metanın saf oksijenle yanması tek bir reaksiyonda gerçekleşse idi yanma sonu ürünleri sadece karbon dioksit ve su olacaktı. Fakat gerçekte az da olsa karbon monoksit gibi yanma sonu ürünleri de oluşabilmektedir. Bu nedenle yanma işlemi birçok reaksiyonda gerçekleşmekte olup, yanma evresini tamamlayamamış ara ürünler de meydana gelebilir. Yakıtın türüne göre olması gereken reaksiyon basamak sayısı değişebilir [46]. Tüm reaksiyonları tamamlayamamış veya tamamlamış yanma sonu ürünlerinin miktarı üzerinden, ortalama gerçekleşen reaksiyon basamak sayısından bahsedilebilir [2, 46]. Yanma sonucu oluşan NO(ppm) emisyon kansantrasyonu ve sıcaklık değerleri kullanılarak, GRI-Mech 3.0 kimyasal kinetiği yardımıyla oluşturulan reaksiyon basamak sayısı atırılmak şartı ile karşılaştırma yapılmıştır. Aşağıdaki Şekil 5.2'de gösterilmiştir.



Şekil 5.2. Eksenel sıcaklık profiline reaksiyon basamak sayısının etkisi

Şekil 5.2'de görüldüğü gibi reaksiyon basamak sayısı arttıkça sıcaklığın bir miktar azaldığı görülmüştür. Reaksiyon basamak sayısının artması durumunda, yanma sırasında oluşan ara ürün sayısı da artmaktadır. Bu ara ürünlerin, yanma işlemini tamamlayan diğer reaksiyonlara katılmadan, yanma odasında oluşan ısıyı da beraberinde götürerek, yanma odasını terk etmesi sonucu, sıcaklık profilinde bir miktar azalmaya neden olduğu tahmin edilmektedir [48]. Radyal olarak sıcaklık profilindeki değişime bakılacak olursa;



Şekil 5.3. Radyal sıcaklık profiline reaksiyon basamak sayısının etkisi

Aynı şekilde reaksiyon basamak sayısı arttıkça, sıcaklık profilinde az miktar azalma olduğu, özellikle giriş bölgesindeki (x/D = 0,25) sıcaklık değişiminin dikkat çektiği görülmüştür. Öncelikle belirtmek gerekir ki ön karışımlı alevler, ön karışımsız alevlerden şekil ve renk olarak farklıdır [18]. Ön karışımsız alevlerde, yakıt ile oksitleyici ilk karşılaştığı bölgede yanma işlemi başlamasına rağmen, ön karışımlı alevlerde yanma işlemi, yakıt ve havanın yakıcı üzerinden gönderilmesi akabinde belirli bir mesafe sürüklendikten sonra yanma işlemi başlamaktadır. Yanma işleminin başladığı, yani yanma reaksiyonlarının başladığı bu çizgi genelde koni şeklini oluşturur [88]. Koninin iç kısmında yanma reaksiyonlarla birlikte gelişen sıcaklık seviyesi yüksektir. Bu nedenle alev renk durumunda da farklılık meydana gelmektedir [18]. Bu şeklin yükseklik ve genişliği üzerinde yakıt ve hava karışımının yakıcı içerisinden gönderilme hızı doğrudan etkilidir [46]. Bu nedenle giriş bölgesinde (x/D = 0,25) yoğun yanma reaksiyonlarının gerçekleşmesi, meydana gelen sıcaklık değişimini, diğer bölgelere (az yoğun yanma reaksiyonu) göre biraz fazla olmasına neden olduğu değerlendirilmektedir.



Şekil 5.4. Eksenel NO profiline reaksiyon basamak sayısının etkisi

Yukarıda Şekil 5.4'te reaksiyon basamak sayısının NO oluşuna etkisi gösterilmiştir. Şekil olarak ikiye bölünmesinin nedeni, grafikler arasında büyük değer farklılıkları olduğu için, yüksek reaksiyon basamak sayılı grafikleri de değer ve eğilim yönünden anlaşılır biçimde gösterebilmek için yapılmıştır. Bu şekilde de görüldüğü gibi reaksiyon basamak sayısı arttıkça, NO emisyon seviyesi yüksek oranda azalmasına rağmen belli bir sayıdan sonra azalma oranının düştüğü görülmüştür. Öncelikle reaksiyon sayısının artması ile NO emisyon seviyesinin azalmasında, sıcaklık değişiminin etkisi önemlidir. Çünkü NO emisyon oluşumunda sıcaklık önemli etkendir [50]. Sıcaklığın artmasıyla özellikle ısıl NO<sub>x</sub> oluşum mekanizması, NO emisyon seviyesini artırmaktadır. Dolayısıyla artan ara ürün sayısı, yanma reaksiyonu tamamlamadan ve yanma odası ısısını beraberinde götürmesiyle, sıcaklık düşüşüne neden olduğu, sıcaklık düşüşü de NO emisyon oluşumunu azalttığı değerlendirilmiştir.

### 5.1.2. Türbülans modelinin etkisi

Ön karışımlı bir alevin sayısal analizinde karşılaşılan diğer bir zorluk ise türbülans etkisinin modellenmesidir. Yanma esnasında gelişi güzel gerçekleşen girdapların yanma sonu verilerine etkisi önemli olduğundan, bu çalışmada üç farklı k-E türbülans modeli (standard, rng realizable) kullanılarak sıcaklık ve NO emisyon profilindeki değişimler irdelenmiştir.



Şekil 5.5. Eksenel sıcaklık profiline türbülans modelinin etkisi



Şekil 5.6. Radyal sıcaklık profiline türbülans modelinin etkisi

Yukarıda Şekil 5.5'te türbülans modelinin eksenel sıcaklığa etkisi, Şekil 5.6'da ise radyal sıcaklığa etkisi gösterilmiştir. Eksenel ve radyal sıcaklık profillerindeki değişime bakıldığında, genelde sonuçların birbirine yakın olduğu, giriş bölgesinde (x/D = 0,25) biraz farklılığın olduğu görülmüştür. Farklılık oluşturan bu bölgeden, standard türbülans modeline göre realizable türbülans modeli, alevin yanal olarak genişlemesine, rng türbülans modeli ise alevin yanal olarak daralmasına etki ettiği anlaşılmıştır. Bu üç farklı türbülans modelinin NO emisyon seviyesine olan etkisine bakılacak olursa;



Şekil 5.7. Eksenel NO profiline reaksiyon türbülans modelinin etkisi

Türbülans modelinin sıcaklık profilinde (Bkz. Şekil 5.5 ve Şekil 5.6), önemli bir değişikliğe neden olmamasına karşı, NO emisyon seviyesinde önemli değişikliklere neden olduğu Şekil 5,7'de görülmüştür. İki türbülans modelinin (standard ve rng) birbirlerine çok yakın sonuçlar vermesi, çalışmanın ileriki aşamalarında kullanılacak türbülans modeli seçimini zorlaştırmış olup, özellikle NO emisyon profili değişiminde daha fazla noktada deneysel verileri kesmesi sonucu, standard k-E türbülans modeli ile çalışmaya devam edilmiştir.

Değer ve eğilim yönünden, GRI-Mech 3.0 kimyasal kinetiği kullanılarak oluşturulan 162 basamaklı reaksiyon sayısının, standard k-E türbülans modelli, Eddy Dissipation Concept yanma modellemesinde elde edilen sayısal sonuçların, deneysel veriler ile uyumlu olduğu görülmüştür. Ayrıca çok daha yüksek reaksiyon basamak sayısı ile çalışmak, işlemci

gücü ve zaman kaybına neden olacağından, optimum seviyedeki bir sayı ile çalışmanın verimli olacağı düşünülmektedir. Çalışmanın bundan sonraki bölümlerine sadece sayısal çalışma ile ilerlendi ve yanma sonu oluşan sıcaklık, emisyon değerleri irdelenmiştir.

## 5.2. Renksiz Dağıtılmış Yanma (CDC) Yöntemi

Bir önceki bölümdeki deneysel ve sayısal sonuçlar incelendiğinde, yanma sonu oluşan kirletici emisyon ve sıcaklık değerlerinin yüksek olduğu görülmektedir. Kirletici emisyon değerinin az olması hatta hiç olmaması istenmektedir. Fakat her yakıt, yanma sırasında emisyon oluşturmaktadır [11]. Özellikle kullanılan yakıt (kok fırını gazı) içerisinde bulunan  $N_2$  gazı yanında, yakma sırasında oksitleyici olarak kullanılan hava ( $0_2$  ve  $N_2$ ) içerisinde de N2 gazının olması emisyon (NO) seviyesini artırmaktadır. Yine sıcaklık seviyesinin yüksek oluşu, özellikle yoğun termal alan bölgenin olması (x/D = 0,25) emisyon oluşumuna ayrıca etki ettiği gibi yakıcı ekipmanına da zarar vermektedir. Yüksek sıcaklığın azaltılabilmesi sayesinde, ucuz alaşımlı malzemeler kullanılarak üretilen yakma sistemi maliyeti de düşebilir. Bu bölümde bu olumsuzlukları azalmak amacıyla CDC yöntemi irdelenmiştir. CDC yönteminde, yakıtı yakma sırasında kullanılan oksijen miktarı sabit tutularak, seyreltici ürünün yakıcı üzerinden gönderilme miktarının artırılmasıyla uygulanmaktadır. Diğer bir ifadeyle, yakıt-hava karışımındaki oksijen konsantrasyonunu azaltacak şekilde sisteme ilaveten seyreltici eklenmesidir. Tanımdan da anlaşılacağı üzere yanma odasına fazlaca gönderilen seyrelticinin alev sönmesine (blow-off) neden olabilir [70]. Fakat yakıt olarak kullanılan kok fırını gazı içerisinde bulunan hidrojen gazının buna engel olmaya çalışacağı düşünülmektedir. Kok fırını gazı bünyesinde fazlaca bulunan hidrojen gazının yüksek yanıcılığa sahip olması [57, 58], dolayısıyla bu yakıtın seyreltmeye uygun olması, CDC yöntemi üzerine ayrıca motive sağlamaktadır.

Bu çalışmada seyreltici olarak  $CO_2$  ve  $N_2$  gazları kullanılmıştır. CDC yöntemi uygulanırken, oksitleyici olarak kullanılan hava içerisindeki %21 oksijen konsantrasyonu her %1 azalacak şekilde (%16 hariç) seyreltici ( $CO_2$  veya  $N_2$ ) eklenerek %15'e kadar düşürülmüştür. Yukarıda "3.2.7 Sınır Koşulları Hesabı" bölümünde belirtilen giriş değerleri her bir birim oksijen konsantrasyonu azalmasında HAD kodu üzerinde çözdürülmüştür. Seyreltici türünün de etkisini daha iyi anlayabilmek için (karşılaştırabilmek için) kullanılan her iki seyrelticiye ait aynı yanma sonucu verileri yan yana gösterilmiştir. Yanma sonu oluşan emisyon değerleri, sıcaklıkla bağlantılı olduğu için, önce sıcaklık sonra emisyon verileri olacak şekilde sıralama yapılarak inceleme yapılmıştır. Ayrıca CDC yöntemi üzerinde oksitleyici miktarının etkisini de görebilmek için, hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,2$  değerini  $\lambda = 1,5$  olacak şekilde hava miktarı artırılarak çözümler yinelenmiştir. Yanma sonu oluşan NO, CO, CO<sub>2</sub> emisyonları ve sıcaklık verilerine göre, kullanılan seyreltici türünün avantaj ve dezavantajları tartışılarak sonuçta elde edilen kazanımlar belirtilmiştir.

### 5.2.1. Sıcaklık

Isıl gücü 10 kW olacak şekilde hesaplanan kok firini gazı debisi miktarı, hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,2$  yanma şartlarındaki hava ile karıştırılarak ön karışımlı yakıcı üzerinden yanma odasına gönderilmesi sonucu, taze karışım yanma bölgesine sürüklenerek ulaştıktan sonra yanma reaksiyonları başlamaktadır. Kok fırını gazı içerisinde bulunan hidrojen ve metan gazı hacimsel oranlarının yüksek olması, yoğun yanma reaksiyonlarının gerçekleştiği bu bölgedeki sıcaklığın yüksek olmasına neden olmaktadır. Ayrıca yüksek yanma hızına sahip hidrojen gazının varlığı, termal alanı toplulaştırarak yakıcıya yaklaştırmaktadır. O halde özellikle yoğun yanma reaksiyon bölgesinin yaşandığı giriş bölgesindeki (x/D = 0-0,25) maksimum sıcaklık seviyesi üzerinde odaklanılması gerekmektedir. Bilindiği üzere bir yakıttan elde edilebilecek maksimum sıcaklık, stokiyometrik yanma şartlarından geçmektedir. Bu şartı bozmaya yönelik, yakıcı üzerinden fazlaca gönderilen her bir yakıt veya havanın yanma reaksiyonuna katılmadan yanma bölgesini terk ettiği bilinmektedir. Yanma reaksiyonuna katılmadan (enerjisi alınamadan), yanma odasını terk etmekte olan bu fazlaca yakıt veya hava birimi, yanma reaksiyonlarına katılanlar tarafından oluşturulan sıcaklığı bünyelerinde toplayarak beraberinde götürmektedirler. Bu durum sıcaklık seviyesinde azalmaya neden olmaktadır. Dolayısıyla stokiyometrik yanma şartlarından ne kadar uzaklaşılırsa, yanma odasındaki sıcaklık seviyesinde o kadar azalma olması beklenilmektedir. Yakıt veya hava olmayan gazların (CO2, H2O vb) gönderilmesi durumunda da sıcaklık düşüşü gözlenebilir. Özellikle özgül ısısı yüksek olan gazların kullanılması sıcaklık seviyesini daha çok düşüreceği düşünülmektedir. Bu amaçla oksijen konsantrasyonu her yüzde bir birim azalacak şekilde yanma odasına yakıcı üzerinden gönderilen  $\mathrm{N}_2$  ve  $\mathrm{CO}_2$  gazı artırılarak (CDC) sıcaklık profilindeki değişimi eksenel ve radyal olarak gösteren grafikler (Şekil 5.8 ve Şekil 5.9) paylaşılmıştır.



Şekil 5.8. Eksenel sıcaklık profiline CDC'nin etkisi



Şekil 5.9. Radyal sıcaklık profiline CDC'nin etkisi (N<sub>2</sub> ile seyreltme sol, CO<sub>2</sub> ile seyreltme sağ)
Giriş bölgesindeki (x/D = 0-0,25 ile r/D = 0-0,25) sıcaklık azalmasının daha belirgin olduğu dikkat çekmektedir. Diğer alanlara göre bu bölgedeki sıcaklık azalmasının daha çok olması, seyreltme sırasında gönderilen fazlaca taze gaz sayesinde artan akış hızının, yoğun yanma reaksiyon bölgesini dağıtmaya çalıştığı düşünülmektedir. Artan akış hızı, taze gazın bu alanda kalma süresini azaltmaktadır. Gereken yanma reaksiyon süresi dolana kadar taze gaz daha ileri noktalara gidebildiği için, sıcaklık bölgesinin de ileri noktalara süpürüldüğü, fakat stokiyometrik yanma şartlarından uzaklaşıldığı için, yanma odasının ileri noktalarında, seyreltme oranı daha az olan bir önceki sıcaklık değerlerinin gerisinde kaldığı düşünülmektedir. Daha net ifadeyle, artan akış hızının alevi ileri noktalara süpürdüğü, tam yanma şartlarından uzaklaşıldığı için de ileri noktalarda da sıcaklığın azaldığı tahmin edilmektedir. Değişimi gösteren sıcaklık konturları aşağıdaki Şekil 5.10'da paylaşılmıştır.



Şekil 5.10. Sıcaklık konturlarına CDC'nin etkisi



Şekil 5.11. Hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,5$  yanma şartları altında CDC'nin eksenel sıcaklık profiline etkisi



Şekil 5.12. Hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,5$  yanma şartları altında CDC'nin radyal sıcaklık profiline etkisi

CDC'nin etkisini daha iyi anlayabilmek için yanma koşullarındaki hava fazlalık katsayısı üzerinde de değişiklik yapılmıştır. Aynı koşullarda hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,5$  yanma şartlarındaki sonuçlar yukarıda, Şekil 5.11 ve Şekil 5.12'de paylaşılmıştır. Değişimi daha net görebilmek için sıcaklık konturları aşağıdaki Şekil 5.13'te paylaşılmıştır.



Şekil 5.13. Hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,5$  yanma şartları altında CDC'nin sıcaklık konturuna etkisi

Sıcaklık grafik ve konturlarına bakıldığında, maksimum sıcaklıktaki azalmanın fazla olduğu, yanma odası çıkışına doğru sıcaklık azalma oranının düştüğü görülmüştür. Hava fazlalık katsayısı artırıldığı durumda da yanma odası giriş bölgesinde azalma fazla olmasına rağmen, yanma odası çıkışına doğru azalmanın daha az oranda azaldığı görülmüştür. Üstelik hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,5$  şartlarındaki yanma koşullarında, sıcaklık dağılımının daha dengeli olduğu görülmüştür. Hava miktarının artırılması, CDC'nin etkisini artırdığı anlaşılmıştır. Seyreltmeye uygun yakıtların (hızlı yanıcılığa sahip ve alev sönmesine "blow-off" dayanıklı yakıtlar), fakir yanma bölgesinde kalınarak [89, 90] CDC şartlarında tüketilmesi durumunda, yanma ekipmanına daha az zarar verebilecek, dengeli bir sıcaklık profilini elde edilebileceği anlaşılmıştır.

Sıcaklık profilindeki düşüşe seyreltici türünün de etkisinin olduğu görülmüştür. Sıcaklık grafik ve konturlarından anlaşılmakla,  $CO_2$  ile seyreltme durumunda,  $N_2$  ile seyreltme

durumuna göre maksimum sıcaklık azalmasındaki oranın daha fazla olduğu görülmüştür. Bu durumun  $CO_2$  özgül ısısının  $N_2$  özgül ısısından fazla olması sonucu kaynakladığı düşünülmektedir. O halde uygun türdeki seyreltici kullanıldığında, daha dengeli sıcaklık profili elde edilebileceği anlaşılmıştır.

## 5.2.2. Emisyon

Her yakıt yanma sırasında emisyon oluşturur [11]. Çünkü yanma işlemi, birçok zincirleme reaksiyonlarının gerçekleşmesidir. Yanmanın birçok basamakta gerçekleşmesi, ara ürün oluşumuna neden olmaktadır [46]. Oluşan emisyonlarda doğrudan ya da dolaylı olarak bu ara ürünlerden oluşmaktadır. Örneğin metanın (CH<sub>4</sub>) tek basamakta yanması sonucu karbon dioksit (CO2) ve su (H2O) oluşmasına rağmen, birçok basamakta gerçekleşmesi durumunda, karbon monoksit (CO) gibi daha karbon dioksite dönüşememiş ara ürün oluşmaktadır. Aynı durum azot monoksit (NO) için de söylenebilir. Yanma odasına gönderilen hava içerisindeki iki oksijen atomunu  $(0_2)$  birleştiren kovalent bağın veya iki azot atomunu (N<sub>2</sub>) birleştiren apolar kovalent bağın kopması sonucu ara ürün olan oksijen (O) ve azot (N) atomları oluşmaktadır. Bu atomların yine diğer bir atomlu ya da iki atomlu oksijen (0<sub>2</sub>) veya azot (N<sub>2</sub>) gibi gazlarla birleşerek kirletici emisyonlar oluşmaktadır. Oluşan bu ara ürünlerinin yanma bölgesindeki karşılaşma ihtimalini azaltmaya çalışacak şekilde, yanma bölgesine daha çok oksitleyici veya seyreltici başka bir tür gaz göndererek emisyon seviyesinin azalacağı düşünülmektedir. Çünkü emisyon oluşumunda yüksek sıcaklık önemli bir etkendir [1]. Bu bölümde sırası ile NO, CO ve CO<sub>2</sub> oluşumu irdelenmiştir.

# Azot monoksit (NO)

Yakıt olarak kullanılan kok firini gazı bünyesindeki ve oksitleyici olarak kullanılan hava içerisindeki azot gazından dolayı yanma sonucu NO oluşmaktadır. Üstelik kok firini gazı içerisindeki yüksek ısıl değere sahip hidrojen ve metanın da etkisiyle yanma odasında oluşan yüksek sıcaklık, NO oluşum mekanizmasını daha da artırmaya etki etmektedir. O halde yanma odasındaki yüksek sıcaklık bölgesinin azaltılması NO emisyon oluşumunu azaltacağı tahmin edilmektedir. CDC yöntemiyle, yakıcı üzerinden gönderilen seyrelticilerin, akış hızını artıracağı için reaksiyon süresini azaltacaktır. Olması gereken reaksiyon süresine erişemeyen reaksiyonlar tamamlanamadan sürüklenerek yanma odasını



Şekil 5.14. Eksenel NO profiline CDC'nin etkisi



Şekil 5.15. Radyal NO profiline CDC'nin etkisi

CDC uygulanması sonucu yanma odasında oluşan sıcaklığın eksenel ve radyal olarak değerleri yukarıda Şekil 5.14 ve Şekil 5.15'te gösterilmiştir. Emisyon seviyesindeki değişikliklerin daha anlaşılır şekilde görülebilmesi için ve seyreltici türünün etkisini de belirginleştirecek şekilde görselleştiren NO konturları aşağıdaki Şekil 5.16'da paylaşılmıştır.



Şekil 5.16. NO konturlarına CDC'nin etkisi

(Bkz. Şekil 5.14)'te görüldüğü gibi genelde grafiklerin, yanma odası merkez ekseni girişinin biraz ilerisinde maksimum seviyeye ulaştığı, daha sonra azaldığı görülmüştür. Tepe noktasının merkez ekseni giriş bölgesinin biraz ilerisinde olmasının nedenlerinden birinin, yakıcı türünden kaynaklandığı düşünülmektedir. Çünkü bu tür yakıcılarda hava ve yakıt karışımı birlikte yanma bölgesine gönderildiği için, belli bir sürüklenme olduktan sonra yanma reaksiyonlar başlamakta ve sıcaklık seviyesi artmaktadır. Diğer bir neden ise, NO oluşum mekanizması için, reaksiyona katılanların, sıcak bölgede olması gereken reaksiyon süresi boyunca kalması gerektiğinden, bu süre zarfında akıştan etkilenerek ileri noktalara sürüklenmesidir. Eksenel grafikte, oksijen konsantrasyonu azaldıkça, NO seviyesinin azaldığı ve 90 pmm'den 10 ppm seviyelerine kadar gerilediği görülmüştür.

(Bkz. Şekil 5.15)'te gösterilen radyal grafiklerde, Yanma odası ileri noktalarında, NO seviyelerinin birbirlerine yaklaşarak değişimin azaldığı görülmüştür. Giriş bölgesinde ise dikkat çeken değişikliklerin olduğu görülmüştür. x/D = 0.25 ile r/D = 0.25 bölgesi yoğun yanma reaksiyonlarının yaşandığı ve yoğun sıcaklık bölgesi olduğu daha önceki grafiklerde görülmüştü, bu yoğun termal alan ile NO emisyon seviyesinin çok olduğu bölgenin paralellik gösterdiği görülmüştür. CDC'nin etkisiyle dağılan termal alan, beraberinde azalan bir NO emisyon alanı da getirdiği anlaşılmıştır. Termal alanın dağılmasını akış etkilemektedir. Akışın olduğu kesimde türbülans olup olmadığını belirleyen parametre Reynold sayısıdır. Reynold sayısının büyüklüğü akış kesit alanında meydana gelebilecek girdap durumunu işaret etmektedir [50]. Reynold sayısını etkileyen alt parametrelerden bazıları ise akış kesit alanı ve akış hızıdır [50]. %210<sub>2</sub> konsantrasyon şartlarında tüketilen yakıt ve hava debisi yanında, CDC ile birlikte fazladan seyreltici gaz ilavesi, akış kesit alanından geçen debiyi artırmaktadır. Bu fazla debi yakıt ve oksitleyici gibi yanma reaksiyonlarına katılmadığı gibi akış hızını artırmaktadır. Bu nedenle fazlaca gönderilen N2 veya CO2 gazı giriş bölgesindeki, yoğun reaksiyonların gerçekleştiği alanı dağıtmaya zorlamıştır [92]. Yüksek termal alanın dağıtılması sonucu kirletici NO emisyon seviyesinin de azaldığı anlaşılmıştır. NO oluşumunu etkileyen en büyük etkenin, sıcaklık olduğu ve ısıl $\text{NO}_{\text{X}}$ oluşum mekanizmasının diğer mekanizmalara göre daha baskın olduğu sonucuna varılmıştır.

Grafik ve konturlara seyreltici yönünden bakıldığında, genel olarak  $CO_2$  ile seyreltme durumunda NO emisyon seviyesinde daha fazla azalmanın olduğu görülmüştür. Aslında

sıcaklık grafiklerinde de aynı durum gerçekleşmiş idi. O halde özgül 15151 N<sub>2</sub> gazına göre daha yüksek olan  $CO_2$  gazı ile yapılan CDC yanma koşullarında, daha az NO oluşacağı anlaşılmıştır. Kullanılan seyrelticinin türüne göre yanma odasının çıkış bölgesindeki NO miktarını, seyreltme oranına (oksijen konsantrasyonuna) göre değerlerini gösteren grafikler aşağıdaki paylaşılmıştır.



Şekil 5.17. Yanma odası çıkışındaki NO miktarına N<sub>2</sub> seyreltici gazı kullanılarak uygulanan CDC'nin etkisi



Şekil 5.18. Yanma odası çıkışındaki NO miktarına CO<sub>2</sub> seyreltici gazı kullanılarak uygulanan CDC'nin etkisi

CDC'in NO emisyon oluşumuna etkisini daha anlaşılır hale getirmek için, oksitleyici miktarı üzerinde de değişiklik yapılarak inceleme yapılmıştır.



Şekil 5.19. Hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,5$  yanma şartları altında CDC'nin eksenel NO profiline etkisi



Şekil 5.20. Hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,5$  yanma şartları altında CDC'nin radyal NO profiline etkisi

Hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,5$  yanma şartları altında, uygulanan CDC sonucu eksenel ve radyal olarak NO emisyon grafikleri yukarıda Şekil 5.19 ve Şekil 5.20'de paylaşılmıştır.

Değişimin daha iyi anlaşılabilmesi için  $CO_2$  ve  $N_2$ 'nin NO konturları aşağıda yan yana paylaşılmıştır. Artan oksitleyiciye karşı NO seviyesi çok düşük seviyelere gerilediği için, değişimin daha net görülebilmesi amacıyla gösterge skalası daha aşağılara ve ara birimlere kadar düşürülmüştür.



Şekil 5.21. Hava fazlalık katsayısı  $\lambda = 1,5$  yanma şartları altında NO konturlarına CDC'nin etkisi

Grafik ve konturlara bakıldığında, beklenildiği şekilde NO seviyesinde azalmaların olduğu görülmüştür. Stokiyometrik yanma şartlarından daha da uzaklaşıldığı için sıcaklığın düşmesi ile NO emisyon seviyesinin de düşeceği tahmini doğrulanmıştır. Maksimum 8 ppm seviyesinde olan NO seviyesinin 1 ppm'nin altına kadar gerilediği görülmüştür. Aynı şekilde CO<sub>2</sub> kullanılarak uygulanan CDC yanma şartlarında NO seviyesinin daha fazla düştüğü görülmüştür. Çalışmanın buraya kadar olan bölümünde, maksimum sıcaklık azalmasına daha çok etki eden, yanma odasındaki termal alan dağılımını daha dengeli hale getiren ve NO emisyon açısından daha verimli olan seyreltici türünün CO<sub>2</sub> olduğu anlaşılmıştır. Emisyon açısından net sonuca varmadan önce Çizelge 2.3'te gösterildiği gibi hava kirletici gazların sınıflandırmasında, orta seviyedeki zararlı gaz olan azot monoksite (NO) göre, yüksek seviyedeki zararlı gaz olan karbon monoksit (CO) yönünden olan sonuçlar aşağıdaki bölümde irdelenmiştir.

#### Karbon monoksit (CO)

Yüksek seviyedeki zararlı gaz olan karbon monoksit, yetersiz havanın olmasıyla, yakıt ile havanın iyi karışamamasıyla veya yanma odasındaki yüksek sıcaklığın etkisiyle oluşabilir [16]. Kok firini gazı bünyesindeki karbon dioksit, tükenmeden yanma bölgesinden uzaklaşmasıyla da oluşabilir [93]. CDC'nin karbon monoksite etkisini, seyreltici türüne göre ayrı ayrı olarak yanma odasının eksenel profilinde aşağıda gösterilmiştir.



Şekil 5.22. N<sub>2</sub> seyrelticisi ile uygulanan CDC'nin eksenel CO profiline etkisi



Şekil 5.23. CO<sub>2</sub> seyrelticisi ile uygulanan CDC'nin eksenel CO profiline etkisi

Şekil 5.22 ve Şekil 5.23'te görüldüğü gibi seyreltici türene göre farklılık gösterdiği anlaşılmıştır. N<sub>2</sub> ile seyreltme durumunda CO seviyesinde azalma meydana gelirken, CO<sub>2</sub> ile seyreltme durumunda ise azalan sıcaklığa rağmen CO seviyesinde artma olduğu görülmüştür [94]. Bu farklılığın oluşmasında, farklı kimyasal reaksiyon etkileşimlerinin yanında [17, 94], artan akış hızının etkisiyle, karbon dioksitten bir oksijen atomu az olan karbon monoksitin, yanma bölgesinde daha kısa süre kalmasından kaynaklandığı düşünülmektedir [95, 96]. Bu değişimleri, reaksiyon hızı veya meydana gelen ara ürün konsantrasyonları miktarlarına göre açıklamak gerekirse, karbon dioksitten etkilenen OH (hidroksil) radikallerinden bahsedilebilir [31, 97]. OH radikallerinin azalması reaksiyon hızının azaldığı anlamı taşımakta ve ara ürünlerin karbon dioksit ve su gibi tamamlanmış yanma sonu ürünlerine dönüşümü tamamlanamadan yanma ortamından uzaklaşması durumudur [97]. Seyreltici türüne göre maksimum OH radikallerinin miktarını gösteren grafik aşağıda gösterilmiştir.



Şekil 5.24. N<sub>2</sub> ve CO<sub>2</sub> seyrelticileri ile uygulanan CDC'nin maksimum OH miktarına etkisi

Şekil 5.24'te görüldüğü gibi  $CO_2$  ile seyreltme durumunda OH radikallerindeki azalmanın daha çok olduğu görülmüştür. Bu durumda  $CO_2$  ile seyreltme durumunda reaksiyon hızının daha çok yavaşladığı ve birbirini tamamlayan yanma reaksiyonlarının, hepsinin tamamlanamadığı düşünülmektedir. Diğer yandan artan akış hızının da etkisiyle oluşan ara ürünlerin yanma bölgesinde kalma süresinin azalması sonucu reaksiyonların tamamlanamadığı durumu da ifade edilebilir. Reaksiyon boyutunda bakılacak olursa; daha çok azalan OH ara ürün konsantrasyonu,  $OH+CO <=> H+CO_2$  gibi reaksiyon basamaklarını ileri yönde hızlandırma işlevliğini kaybederek [98, 99], diğer reaksiyon basamaklarında oluşan CO'nun da azalmasını engelleyecektir.

### Karbon dioksit (CO<sub>2</sub>)

Bünyesinde karbon bulunan bütün yakıtların yanması sonucu karbon dioksit oluşur [11]. Üstelik kok fırını gazı içerisinde de karbon dioksit olduğundan, yanma sonu ürünlerde karbon dioksit miktarının daha fazla olacağı beklenmektedir [93, 94].



Şekil 5.25. N<sub>2</sub> seyrelticisi ile uygulanan CDC'nin eksenel CO<sub>2</sub> profiline etkisi



Şekil 5.26. CO<sub>2</sub> seyrelticisi ile uygulanan CDC'nin eksenel CO<sub>2</sub> profiline etkisi

CDC'nin karbon dioksite etkisini, seyreltici türüne göre ayrı ayrı olarak yanma odasının eksenel profilinde yukarıda gösterilmiştir. Grafiklere bakıldığında, beklenildiği gibi  $N_2$  seyreltici kullanılarak uygulanan CDC sonucunda meydana gelen  $CO_2$  miktarında azalma olurken,  $CO_2$  seyrelticisi kullanılması durumunda ise  $CO_2$  miktarının arttığı görülmüştür.

# 6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu çalışmada kömürün koklaştırılması sonucu elde edilen yan ürün olan kok fırını gazının, ön karışımlı bir yakıcıda renksiz dağıtılmış yanma şartları, sayısal olarak ele alınmıştır. Deneyin yapıldığı şartlar referans alınarak oluşturulan sayısal modellemede, ticari bir HAD kodu kullanılmıştır. Yapılan deneysel sonuçlarla sayısal veriler arasında yakın benzerlik sağlayabilmek için uygun yanma modeli (Eddy Dissipation Concept) uygun türbülans modeli (standard k-E) ve uygun radyasyon modeli (P-1) ile birlikte GRI-Mech 3.0 kimyasal kinetiği yardımıyla oluşturulan uygun sayıda reaksiyon basamak sayısı (162 basamaklı reaksiyon) belirlenmiştir. Elde edilen sayısal veriler ile deneysel veriler detaylı olarak incelenmiştir. Yanma odasının eksenel ve radyal profilinde sıcaklık ile NO emisyon sonuçları karşılaştırılmıştır. Bu deneysel ve sayısal veriler arasında hem değer hem de eğilim olarak iyi bir uyumun olduğu görülmüştür. CDC metodu sisteme entegre edilerek sayısal çalışmalara devam edilmiştir.  $N_2$  ve  $CO_2$  ile seyreltme durumunda elde edilen veriler detaylı olarak tartışılmıştır. Hava fazlalık katsayısı üzerinde de değişiklik yapılarak ( $\lambda = 1,5$ ) elde edilen veriler incelenmiştir. Bu irdelemelerden elde edilen sonuçlar aşağıda özetlenmiştir:

# 6.1. Sonuçlar

- Özellikle kok firmi gazı gibi çok bileşenli yakıtlarda, daha iyi sonuçlu yanma modellemesi elde edebilmek için, reaksiyon basamak sayısının çok önemli bir etken olduğu anlaşılmıştır. Reaksiyon basamak sayısı artırıldıkça, gerçek (deneysel) verilere yaklaşıldığı, yani daha doğru sonuçlar elde edildiği görülmüş olduğundan, yapılacak olan sayısal çalışmada, tüketilen yakıtın bileşenleri gözetilerek, öncelikle reaksiyon basamak sayısının belirlenmesi gerektiği sonucuna varılmıştır.
- Yapılan yanma analizinde seçilen farklı türbülans modellerinin, her ne kadar sıcaklık değişimine az etkisi olsa da yanma sonu oluşan NO seviyesinde önemli farklılıklara neden olduğu görülmüştür. Seçilen realizable k-E türbülans modeli ile standard k-E türbülans modeli arasında 42 ppm kadar farklılık gösterdiğinden, analizlerde kullanılacak olan türbülans modeli için de ayrıca çalışma yapılması gerektiği sonucuna varılmıştır.

- CDC metodu ile yanmanın daha homojen olması sonucu, maksimum sıcaklığın azalmasıyla tek tip bir termal alan oluştuğu görülmüştür. N<sub>2</sub> ile seyreltme durumunda, 2049 K civarındaki maksimum sıcaklığın 1688 K civarına düşmesine rağmen, CO<sub>2</sub> ile seyreltme durumunda 1502 K civarına kadar düştüğü tahminlerine göre maksimum sıcaklık azaltılmasında, kullanılan seyreltici türünün önemli etken olduğu sonucuna varılmıştır.
- CDC şartlarında maksimum termal alan dağıtıldığından, NO emisyon seviyesinde önemli derecede azalmanın olduğu görülmüştür. N<sub>2</sub> ile seyreltme durumunda, %21 O<sub>2</sub> şartlarında 90 ppm olan NO emisyon seviyesinin 9,33 ppm seviyerine düşmesine rağmen, CO<sub>2</sub> ile seyreltme durumunda 6,55 ppm seviyelerine kadar gerilediği tahminlerine göre, oluşan NO emisyon seviyesi azaltılmasında da kullanılan seyreltici türünün önemli etken olduğu sonucuna varılmıştır.
- CDC şartlarında, maksimum sıcaklık azalmasına rağmen, kirletici emisyon olan CO seviyesinde artmanın olabileceği sayısal sonuçlar görülmüştür. N<sub>2</sub> ile seyreltme durumunda %21 O<sub>2</sub> şartlarında 862 ppm olan CO emisyon seviyesinin 230 ppm seviyesine kadar düşmesine rağmen, CO<sub>2</sub> ile seyreltme durumunda 4204 ppm seviyelerine kadar çıktığı tahminlerine göre, oluşan maksimum CO emisyon seviyesinde kullanılan seyreltici türünün önemli etken olduğu, azaltma etkisinden ziyade artırabileceği de anlaşılmıştır.
- Hava fazlalık katsayısı artırıldığı durumda, yanma odasına gönderilen fazlaca oksijen ve azotun yanma reaksiyonuna katılmamasına rağmen, yanma odasını terk ederken, bünyesinde ortam ısısını da beraberinde götürdüğünden dolayı sıcaklık seviyesinin daha da azalacağı beklentisiyle, λ = 1,2 şartlarında CO<sub>2</sub> seyrelticisi kullanılarak uygulanan CDC koşullarında, 1703 K sıcaklık ve 33 ppm NO oluşmasına rağmen, λ = 1,5 şartlarında 1478 K sıcaklık ve 0,9 ppm NO oluştuğu görülmüştür. Elde edilen bu sıcaklık ve emisyon verilerine göre fakir yanma şartlarında da CDC'den verimli sonuçlar alınabileceği sonucuna varılmıştır.
- Yanma odasında oluşan sıcaklık ile ara ürün olan OH miktarının paralellik gösterdiğinin anlaşılmasıyla, CDC uygulanarak elde OH miktarınındaki azalma oranının, CDC'de kullanılan seyreltici türünün, etkinliği konusunda (termal alan dağılmasında) bilgi barındırdığı sonucuna varılmıştır.
- Daha homojen bir termal alan ve daha az NO emisyon seviyesi elde etmek için
   CO<sub>2</sub> seyrelticisi kullanılarak uygulanan CDC koşullarında daha etkili sonuçlar

alınırken, daha az CO emisyon seviyesi elde etmek için  $N_2$  seyrelticisi kullanılarak uygulanan CDC koşullarının daha etkili olduğu sonucuna varılmıştır.

# 6.2. Öneriler

Tez çalışması sonucunda, kazanılmış bilgi ve tecrübe doğrultusunda, ileride yapılacak kok fırını gazının, sayısal yanma analizi çalışmalarına yararlı olabileceği düşünülen öneriler aşağıda belirtilmiştir.

- Deneysel sonuçlar ile sayısal sonuçlar arasında yapılan karşılaştırmada, reaksiyon basamak sayısının önemli derecede etkili olduğunun görülmesiyle, farklı reaksiyon mekanizmalarında da çalışmalar yapmak, hatta özellikle çok bileşenli yakıtlar için, her bir bileşene ayrı bir reaksiyon mekanizması kullanmak durumunda daha etkili sonuçlar alınabilir.
- Farklı hesaplamalı akışkanlar dinamiği kodu kullanılarak sayısal çalışmalar yapılabilir.
- Yüksek teknolojik cihazlar yardımıyla, yanma sonucu ölçülen OH radikalleri, model doğrulama parametrelerine dahil edilerek sayısal çalışmanın doğruluğu artırılabilir.
- Uygulanan CDC koşullarında, farklı seyreltici türlerinin eklenmesi, yanma sonucu oluşan kirletici emisyon karşılaştırmasında, seyreltici türünün etkinliği hususunda daha etkili sonuçlar alınabilir.
- Farklı koşullarda uygulanan CDC şartlarında, (yakıt-hava giriş sıcaklığının değiştirilmesi, yanma odası içerisinde akış hızını değiştirecek tasarımların yapılması vb. gibi) elde edilen verilerin irdelenmesi, gelişmiş yanma sistemi tasarımlarına yardımcı olabilir.
- Tez çalışmasından elde edinilen kazanımlardan hareketle; kok fırını gazının yanma performansına bakıldığında, diğer yakıtlara alternatif bir yakıt olduğu anlaşılmaktadır. Bu nedenle kok fırını gazı üretimi teşvik edilmelidir.

### KAYNAKLAR

- 1. Karyeyen, S. (2016). Geliştirilen Bir Yakıcıda Kömür Gazlarının Yanma Karakteristiklerinin Deneysel ve Sayısal Olarak Araştırılması, Doktara Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 17-71.
- 2. Salem, E. (2018). Numerical Simulations Of Premixed Flames Of Multi Component Fuels/Air Mixtures And Their Aplications, Masters's Thesis, University of Kentucky, Mechanical Engineering, Lexington, 23-99.
- 3. Telli, Z. (1984). *Yakıtlar ve Yanma*, (17. Baskı), Isparta, Akdeniz Üniversitesi Isparta Mühendislik Fakültesi Yayınları, 3-52.
- 4. Neto, G.W.F., Leite, M.B.M., Marcelino, T.O.A.C., Carneiro, L.O., Brito, K.D., Brito, R.P. (2021). Optimizing the coke oven process by adjusting the temperature of the combustionchambers, *Energy*, 217, 119419.
- 5. Park, J., Lee, SY., Lee, S., Oh, H., Kim, J., Yoon, YS., Lee, IB., Wooyong, Um. (2021). The comprehensive evaluation of available pilot-scale H2S abatement process in a coke-oven gas: Efficiency, economic, energy, and environmental safety (4ES), *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(6), 106903.
- 6. Li, Z., Yi, Q., Zhang, Y., Zhou, H., Zhao, Y., Huang, Y., Gao, D., Hao, Y. (2020). Numerical study and design strategy for a low emission coke oven system using oxyfuel combustion of coke oven gas, *Journal of Cleaner Production*, 252, 119656.
- 7. Ilbas, M., Yanık, E., Karyeyen, S. (2018). Kok fırını gazı ve jeneratör gazının oksijence zenginleştirilmiş yanması: Sayısal bir çalışma, *Politeknik Dergisi*, 21(1), 93-100.
- 8. Tang, C., Zhang, Y., Huang, Z. (2014). Progress in combustion investigations of hydrogen enriched hydrocarbons, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 30, 195–216.
- 9. MacLean, H. L., Lave, L. B. (2003). Evaluating automobile fuel/propulsion system technologies, *Progress in Energy and Combustion Science* 29(1), 1–69.
- 10. Sherif, S. A., Goswami, D. Y., Stefanakos, E. K., and Steinfeld, A. (2014). *Handbook* of *Hydrogen Energy*, (1. Bask1), Boca Raton, CRC Press, 477-921.
- 11. Çengel, Y. A., Boles, M. A., (2012). *Mühendislik yaklaşımıyla termodinamik* (5. Baskı), İstanbul, Güven Bilimsel Yayıncılık, 751-817.
- 12. Jafari, H., Yang, W., Ryu, C. (2020). Evaluation of a distributed combustion concept using 1-D modeling for pressurized oxy-combustion system with low flue gas recirculation, *Fuel*, 263, 116723.
- 13. Khalil, A.E.E, Gupta, A.K. (2017). Towards colorless distributed combustion regime, *Fuel*, 195, 113-122.

- 14. Ilbas, M., Karyeyen, S. (2016). Premixed Turbulent Combustion of Hydrogen Containing Fuels - An Experimental Study, 24th « Journées d'Etude » of the Belgian Section of the Combustion Institute. Louvain-la-Neuve, Belgium, May, 19-20.
- 15. Karyeyen, S., Ilbas, M. (2018). Experimental and numerical analysis of turbulent premixed combustion of low calorific value coal gases in a generated premixed burner, *Fuel*, 220, 586-598.
- Laguillo, S., Ochoa, J.S., Tizné, E., Pina, A., Ballester, J., Ortiz, A., (2021). CO Emissions And Temperature Analysis From An Experimental And Numerical Study Of Partially Premixed Methane Flames Impinging Onto A Cooking Pot, *Journal Of Natural Gas Science And Engineering*, 88, 103771.
- 17. Zhen, H.S., Miao, J., Leung C.W., Cheung, C.S., Huang, Z.H. (2016). A Study On The Effects Of Air Preheat On The Combustion And Heat Transfer Characteristics Of Bunsen Flames, *Fuel*, 184, 50-58.
- 18. Guo, L., Zhai, M., Shen, Q., Guo, H., Dong, P. (2021). Effect Of Hydrogen Addition On The Ionization Of Partially Premixed Methane Flame, *Journal Of Fuel*, 285, 119141.
- 19. Tomczak, H. J., Benelli, G., Carrai, L., Cecchini, D. (2002). Investigation of a gas turbine combustion system fired with mixtures of natural gas and hydrogen, *IFRF Combustion Journal*, 200207.
- 20. İlbaş, M., Yılmaz, İ. (2010). Hidrojen-metan karışım yanmasında yanma model sabitinin değerlendirilmesi, *Isı Bilimi ve Tekniği Dergisi*, 30(1), 45-57.
- 21. Mardani, A. ve Tabejamaat, S. (2010). Effect of hydrogen on hydrogen-methane turbulent non-premixed flame under MILD condition, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(20), 11324-11331.
- 22. Tunçer O. (2009). Hidrojenle Zenginleştirilmiş Metan Yakıtının Alev Hızları ve Emisyon Değerlerinin Kimyasal Kinetik Analizi, *Isı Bilimi ve Tekniği Dergisi*, 29(2), 29-42.
- 23. İlbaş, M., Yılmaz, İ., Özkan, F. (2006). Gaz türbini yanma odasında hidrojen ve hidrokarbon yanmasının modellenmesi ve nox oluşumunun incelenmesi, *Mühendis ve Makine*, 47-559.
- 24. Zhou, Z., Tao, Z. Q., Lin, B. Y., Kong, W. J. (2013). Numerical investigation on effects of high initial temperatures and pressures on flame behavior of CO/H2/Air mixtures near the dilution limit, *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(1), 274-281.
- 25. Karyeyen, S. (2018). Combustion characteristics of a non-premixed methane flame in a generated burner under distributed combustion conditions: A numerical study, *Fuel*, 230, 163-171.

- 26. Fackler, K. B., Karalus, M. F., Novosselov, I. V., Kramlich, J. C., Malte, P. C. (2011). Experimental and Numerical Study of NOx Formation From the Lean Premixed Combustion of CH4 Mixed With CO2 and N2, *American Society of Mechanical Engineers Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 133(12), 121502.
- 27. Saqr, K. M., Aly, H. S., Sies, M. M., Wahid, M. A. (2010). Effect of free stream turbulence on nox and soot formation in turbulent diffusion CH4-air flames, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 37(6), 611-617.
- 28. Karyeyen, S., Feser, JS, Gupta, A.K. (2019). Hydrogen concentration effects on swirlstabilized oxy-colorless distributed combustion, *Fuel*, 253, 772-780.
- 29. Darwish, M., Hidegh, G., Csemány, D., Józsa, V. (2022). Distributed combustion of diesel-butanol fuel blends in a mixture temperature-controlled burner, *Fuel*, 307, 121840.
- 30. Greco, A., Mira, D., Jiang, X. (2017). Effects of fuel composition on biogas combustion in premixed laminar flames, *Energy Procedia*, 105, 1058-1062.
- 31. Hadef, A., Mameri, A., Tabet, F., Aouachria, Z. (2017). Numerical study of the impact of CO2 dilution on emissions in turbulent diffusion flame, *Energy Procedia*, 139, 273-279.
- 32. İlbaş, M., Karyeyen, S., Çilingir, K. (2016). Ön-karışımsız ve ön-karışımlı metan alevlerinin baca yanma parametrelerinin deneysel olarak incelenmesi, *Politeknik Dergisi*, 19(3), 357-365.
- 33. Nazzal, I., Ertunç, Ö. (2018). Numerical investigation of the flame location of turbulent premixed combustion in a diffuser burner exposed to various turbulence intensities and turbulence length scales, *Ist Bilimi ve Tekniği Dergisi*, 38(1), 55-64.
- 34. Umemura, A., Tomita, K. (2001). Rapid Flame Propagation in a Vortex tube in Perspective of Vortex Breakdown Phenomenon, *Combustion and Flame*, 125, 820–838.
- 35. Tabet, F., Sarh, B. ve Gökalp, I. (2009). Hydrogen-hydrocarbon turbulent nonpremixed flame structure, *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(11), 5040-5047.
- 36. Kido, H., Nakahara, M., Hashimoto, J., and Barat, D. (2002). Turbulent Burning Velocity of Two Component Fuel Mixtures of Methane, Propane and Hydrogen, *Japan Society Mechanicaal Engineers International Journal*, 45, 355–362.
- 37. Kröner, M., Fritz, J., Sattelmayer, T. (2003). Flashback Limits for Combustion Induced Vortex Breakdown in a Swirl Burner, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 125, 693–700.
- 38. Öztürk, S. (2020). The effects of co2, h2o and n2 dilutions on pollutants of shale gas combustion, *Isi Bilimi ve Tekniği Dergisi*, 40(1), 15-25.

- 39. Yang, J., Gong, Y., Guo, Q., Zhu, H., Wang, F., Yu, G. (2020). Experimental studies of the effects of global equivalence ratio and CO2 dilution level on the OH\* and CH\* chemiluminescence in CH4/O2 diffusion flames, *Fuel*, 278, 118307.
- 40. Arghode, V.K., Gupta, A.K., Bryden, K.M. (2012). High intensity colorless distributed combustion for ultra low emissions and enhanced performance, *Applied Energy*, 92, 822-830.
- 41. Yoshi, M. M., Lee, S. (1996). Integrated Gasification Combined Cycle A Review of IGCC Technology, *Energy Sources Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects*, 18, 537-568.
- 42. Razzaq, R., Li, C. ve Zhang, S. (2013). Coke Oven Gas: Availability, properties, purification, and utilization in China, *Fuel*, 113, 287-299.
- 43. Modesto, M. ve Nebra, S. A. (2009). Exergoeconomic analysis of the power generation system using blast furnace and coke oven gas in a Brazilian steel mill, *Applied Thermal Engineering*, 29(11-12), 2127-2136.
- 44. Liao, H., Li, B. ve Zhang, B. (1998). Prolysis of coal with hydrogen-rich gases. 2. Desulfurization and denitrogenation in coal prolysis under coke-oven gas and synthesis gas, *Fuel*, 77(14), 1643-1646.
- 45. Bermúdez, J. M., Arenillas, A., Luque, R. ve Menéndez, J. A. (2013). An overview of novel technologies to valorise coke oven gas surplus, *Fuel Processing Technology*, 110, 150-159.
- 46. Versteeg, H.K., Malalasekera, W. (2007). An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method (Second Edition). England: Pearson education, 9-112.
- 47. Lieuwen, T.C., Yang, V., Yetter, R. (2010). *Synthesis gas combustion: fundamentals and applications* (Birinci Baskı), United States: Taylor and Francis Group, 169-188.
- 48. Ilbas, M. (1997). *Studies of ultra-Low NOX burners*, Doktora Tezi, School of Engineering University of Wales, Cardiff, 84(87), 109-137.
- 49. Çetintaş, S. (2021). Kaya Gazlarının Yanma ve Emisyon Davranışlarının Deneysel İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kayseri, 56-104.
- 50. Stephen R. Turns. (2013). An Introduction to Combustion Concepts and Applications, (Third Edition), Brokings, McGraw-Hill Book Company, 174-702.
- 51. Xu, Q., Zou, Z., Chen, Y., Wang, K., Du, Z., Feng, J., Ding, C., Bai, Z., Zang, Y., Xiong, Y. (2020). Performance of a novel-type of heat flue in a coke oven based on high-temperature and low-oxygen diffusion combustion technology, *Fuel*, 267(0016-2361), 117160.

- 52. Yılmaz, B. (2010). Computational Analysis And Experimental Verification Of Premixed Combustion Of Hydrogen Methane/Air Mixtures, Thesis For The Degree Of Doctor Of Philosophy, Marmara University, Institute For Graduate Studies In Pure And Applied Sciences, İstanbul, 53-143.
- 53. Sepman, A.V., Mokhov, A.V., Levinsky, H.B. (2011). The Effect Of Hydrogen Addition On NO Formation In Atmospheric-Pressure, Fuel-Rich-Premixed, Burner-Stabilized Methane, Ethane And Propane Flames, *International Journal Of Hydrogen Energy*, 36(7), 4474-4481.
- 54. Plee, S. L., Mellor, A. M. (1978). Review of Flashback Reported in Prevaporizing/Premixing Combustors, *Combustion and Flame*, 32, 193–203.
- 55. Lipatnikov, A., Chomiak, J. (2005). Molecular Transport Effects on Turbulent Flame Propagation and Structure, *Progress in Energy and Combustion Science*, 31, 1–73.
- 56. De Falco, M., Basile, A. (2015). *Enriched Methane: The First Step Towards the Hydrogen Economy*. Green Energy and Technology, Springer International Publishing, 101-230.
- 57. Dimopoulos, P., Bach, C., Soltic, P., and Boulouchos, K. (2008). Hydrogen natural gas blends fuelling passenger car engines: Combustion, emissions and well-to-wheels assessment, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(23), 7224–7236.
- 58. Ji, C., Wang, S. (2010). Combustion and emissions performance of a hybrid hydrogen gasoline engine at idle and lean conditions, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(1), 346–355.
- 59. Ducruix, S., Schuller, T., Durox, D., Candel, S. (2005). Combustion Instability Mechanisms in Premixed Combustors, Combustion Instabilities in Gas Turbine Engines, (First edition), Reston VA, American Institute of Aeronautics and Astronautics Press, 201-434.
- 60. Lieuwen, T., McDonell, V., Santavicca, D., Sattelmayer, T. (2008). Burner Developement and Operability Issues Related with Steady Flowing Syngas Combustors, *Combustion Science and Technology*, 180, 1167-1190.
- 61. Benim, A. C., Syed, K. J. (2014). Flashback Mechanisms in Lean Premixed Gas Turbine Combustion (First Edition), London, Elsevier Science, 5-102.
- Keller, J., Vaneveld, L., Korschelt, D., Hubbard, G. L., Ghoniem, A. F., Daily, J. W., Oppenheim, A. K. (1982). Mechanism of Instabilities in Turbulent Combustion Leading to Flashback, *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, 20(2), 254–262.
- 63. Sayad, P., Schönborn, A., Klingmann, J. (2016). Experimental investigation of the stability limits of premixed syngas-air flames at two moderate swirl numbers, *Combustion and Flame*, 164, 270-282.
- 64. Noble, D., Zhang, Q., Shareef, A., Tootle, J., Meyers, A., Lieuwen, T. (2006). Syngas Mixture Composition Effects Upon Flashback and Blowout, *American Society of Mechanical Engineers*, Paper No: GT2006-90470.

- 65. Davu, D., Franco, R., Choudhuri, A., Lewis, A. (2005). Investigation on Flashback Propensity of Syngas Premixed Flames, *American Institute of Aeronautics and Astronautics* Paper No: 2005–3585.
- 66. Rusak, Z., & Wang, S. (2014). Wall-separation and vortex-breakdown zones in a solid-body rotation flow in a rotating finite-length straight circular pipe, *Journal of Fluid Mechanics*, 759, 321-359.
- 67. Brown, G., & Lopez, J. (1990). Axisymmetric vortex breakdown Part 2. Physical mechanisms, *Journal of Fluid Mechanics*, 221, 553-576.
- 68. Huth, M., Heilos, A. (2013). Fuel flexibility in gas turbine systems: Impact on burner design and performance, In: Modern Gas Turbine Systems (Exxon Donor Solvent Peter Jansohn), Woodhead Publishing, 635-684.
- 69. William, H. D. (2016). UTSR Fellowship Presentation Gas Turbine Industrial Fellowship Program 2016.
- Das, L. M. (1996). Hydrogen-oxygen reaction mechanism and its implication to hydrogen engine combustion, *International Journal of Hydrogen Energy*, 21(8), 703– 715.
- 71. Chakravarthy, S. (2008). Realizing high fidelity computational simulations of fluid dynamic phenomena, *Computational Fluid Dynamics Journal*, 16-356.
- 72. Williams, F. (1985). *Combustion Theory* (Second edition), Addison-Wesley Publishing Company, 434.
- 73. İnternet: Ansys Fluent Tutorial Guide 18.0 CipecURL: http://users.abo.fi/rzevenho/ansys%20fluent%2018%20tutorial%20guide.pdf, Son Erişim Tarihi: 20.06.2022.
- 74. İnternet: Ansys Fluent Theory Guide 15.0 CipecURL: http://www.pmt.usp.br/academic/martoran/notasmodelosgrad/ANSYS%20Fluent%2T heory%20Guide%2015, Son Erişim Tarihi: 19.06.2022.
- 75. Sayma, A. (2009). *Computational fluid dynamics*, (First edition), London, Bookboon Company, 16-107.
- 76. Çengel, Y., 2013. *Pratik bir yaklaşımla ısı ve kütle transferi* (Üçüncü Basım), Güven Bilimsel Yayıncılık, İstanbul, 61-866.
- 77. Löhner, R. (2008). Applied computational fluid dynamics techniques: an introduction based on finite element methods, (2. Edition), New Jersey, Wiley, 7-449.
- 78. Internet: Flashback studies with premixed swirl combustion CipecURL: <u>https://orca.cardiff.ac.uk/id/eprint/55494/1/U569786.pdf</u>, Son Erişim Tarihi: 13.06.2022.
- 79. Karyeyen S (2013) Model Bir Yanma Odasında Kömür Gazları Yanma Davranışlarının Sayısal Analizi, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara 69-76.

- 80. Fluent 6.3 User's Guide, (2006). Fluent Incorporated, Centerra Resource Park, 10. Cavendish Court, Lebanon, NH 03766, USA.
- 81. Arslan, E. (2013). *İki zamanlı motorda değişken supap zamanlamasının motor performansına etkisinin sayısal incelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kayseri, 45-47.
- 82. Taşdemir, S., Karyeyen, S., İlbaş, M. (2022). Ön karışımlı bir yakıcıda kok fırını gazı yanma karakteristiklerinin sayısal olarak incelenmesi, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri* Dergisi Part C: Tasarım ve Teknoloji, 10(1), 135-152.
- 83. Bolton, W. (2013). Mekatronik, Makine ve Elektronik Mühendisliğinde Elektronik Kontrol Sistemleri (Üçüncü baskı), İstanbul, Dahi Yayıncılık, 450-480.
- 84. Milli Eğitim Bakanlığı. (2012). Sensörler ve transdüserler (523EO0002), Ankara: Milli Eğitim Bakanlığı, 8-12.
- 85. Atan, Ç. (2013). ZnO nanorod temelli glukoz biyosensörü hazırlanması ve kan serumunda glukoz tayininde kullanılması, Yüksek Lisans Tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul, 16-48.
- 86. İnternet: Biyosensör ve Medikal Uygulamaları CipecURL: <u>https://makinecim.com/bilgi 8078 BIYOSENSOR ve MEDIKAL UYGULAMARI</u>, Son Erişim Tarihi: 26.05.2022.
- 87. Yılmaz, İ. (2006). Model Bir Yakıcıda Hidrojen-Metan Karışımının Yanmasının Sayısal ve Deneysel İncelenmesi, Doktora Tezi, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kayseri, 40-65.
- 88. Wang, L., Jiang, Y., Qiu, R. (2021). Experimental Study Of Combustion Inhibition By Trimethyl Phosphate In Turbulent Premixed Methane/Air Flames Using OH-PLIF, *Journal Of Fuel*, 294, 120324.
- 89. Zhang, L., Xie, W., Ren, Z. (2020). Combustion stability analysis for non-standard low-calorific gases: Blast furnace gas and coke oven gas, *Fuel*, 278, 118216.
- Ortiz-Imedio, R., Ortiz, A., Urroz, J.C., Diéguez, P.M., Gorri, D., Gandía, L.M., Ortiz, I. (2021). Comparative performance of coke oven gas, hydrogen and methane in a spark ignition engine, *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(33), 17572-17586.
- 91. Arghode, V.K., Gupta, A.K. (2010). Effect of flow field for colorless distributed combustion (CDC) for gas turbine combustion, *Applied Energy*, 87(5), 1631-1640.
- 92. Li, S., Zheng, Y., Zhu, M., Martinez, D.M., Jiang, X. (2017). Large-eddy simulation of flow and combustion dynamics in a lean partially premixed swirling combustor, *Journal of the Energy Institute*, 90(1), 120-131.
- 93. Lieuwen, T., Yang, V., Yetter, R. (2009). *Synthesis Gas Combustion: Fundamentals and Applications* (First Edition), United States of America: Taylor and Francis Group, 169-188.

- 94. Hasti, V.R., Lucht, R.P., Gore, J.P. (2020). Large eddy simulation of hydrogen piloted CH4/air premixed combustion with CO2 dilution, *Journal of the Energy Institute*, 93(3), 1099-1109.
- 95. Aravind, S., Gohiya, R.K., Prakash, R.S., Sadanandan, R. (2021). Effects of CO2 dilution on partially premixed CH4-air flames in swirl and bluff body stabilized combustor, *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4), 5209-5217.
- 96. Roy, R., Gupta, A.K. (2020). Flame structure and emission signature in distributed combustion, *Fuel*, 262, 116460.
- 97. Joo, S., Kwak, S., Yoon, Y. (2020). Effect of H2 enrichment ratio and N2/CO2 dilution on swirl-stabilized partially premixed H2/CH4/C3H8 SNG combustion, *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(55), 31255-31267.
- 98. Shang, R., Li, G., Wang, Z., Wang, Z. (2020). Lower flammability limit of H2/CO/air mixtures with N2 and CO2 dilution at elevated temperatures. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(16), 10164-10175.
- 99. Sahu, A., Wang, C., Jiang, C., Xu, H., Ma, X., Xu, C., Bao, X. (2019). Effect of CO2 and N2 dilution on laminar premixed MTHF/air flames: Experiments and kinetic studies, *Fuel*, 255, 115659.

EKLER

Reaksyon         Faktôri [mol-cm-sn-K]         Ústel Degeri         Englisi [kal/mol]           1. $0_2 + M \le 0_2 + M$ 1.20E+17         -1.0         0.0           2. $0 + H_1 \ll 0_2 = 0H + M$ 5.00E+17         -1.0         0.0           3. $0 + H_2 \le 0H + 0H$ 3.87E+04         2.7         6260.0           4. $0 + H_0_2 \le > 0H + D_2$ 2.00E+13         0.0         0.0           5. $0 + H_2 0_2 \le > 0H + H_0_2$ 9.63E+06         2.0         4000.0           6. $0 + CH_2 < > H + HCO$ 5.70E+13         0.0         0.0           7. $0 + CH_2 (S) < > H_2 + CO$ 1.50E+13         0.0         0.0           9. $0 + CH_2 (S) < > H + CH_2 0$ 5.00E+13         0.0         0.0           10. $0 + CH_2 (S) < > H + CD_2$ 3.00E+13         0.0         0.0           11. $0 + CH_2 (S) < > H + CD_2$ 3.00E+13         0.0         0.0           12. $0 + CO(+M) < = > CD_2 (+M)$ 1.80E+10         0.0         2385.0           13. $0 + HCO < = > OH + CD_2$ 3.00E+13         0.0         3.0           14. $0 + HCO < = > OH + CD_2$	Daalasiyon		Arrhenius	Sıcaklık	Aktivasyon
Say 131         Implementation         Degerie         [kal/mol]           1. $0_2 + M \le 0_2 + M$ 1,20E+17         -1,0         0,0           2. $0 + H_1 \ll 0 = 0 H + M$ 5,00E+17         -1,0         0,0           3. $0 + H_2 \le 0 H + M_2$ 2,00E+13         0,0         0,0           5. $0 + H_0_2 \le 0 H + H_0_2$ 2,00E+13         0,0         0,0           6. $0 + CH \le 0 H + CO$ 5,70E+13         0,0         0,0           7. $0 + CH_2 (S) <= > H + CO$ 1,50E+13         0,0         0,0           9. $0 + CH_2 (S) <= > H + CA_2$ 5,06E+13         0,0         0,0           10. $0 + CH_2 (S) <= > H + CA_2$ 5,06E+13         0,0         0,0           11. $0 + CA_4 (S) <= > 0H + CH_3$ 1,02E+09         1,5         8600,0           12. $0 + CO (+M) <=> CO_2 (+M)$ 1,80E+10         0,0         285,0           13. $0 + HCO <=> > 0H + CO_2$ 3,00E+13         0,0         0,0           14. $0 + HC_0 <=> 0 + CO_2$ 2,50E+12         0,0         47800,0           17. $0_2 + CA_2 <=> HO_2 + MZ$ 1,00E+14	Savisi	Kimyasal Reaksiyon	Faktörü	Üstel	Enerjisi
1. $O_2 + M \le O_2 + M$ $1.20E+17$ $-1.0$ $0.0$ 2. $0 + H + M \le OH + M$ $5.00E+17$ $-1.0$ $0.0$ 3. $0 + H_2 \le OH + H$ $3.87E+04$ $2.7$ $6260.0$ 4. $0 + H_0_2 \le OH + O_2$ $2.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 5. $0 + H_2 O \le >OH + H_0_2$ $9.63E+06$ $2.0$ $4000.0$ 6. $0 + CH_2 (S) <= >H + HCO$ $5.70E+13$ $0.0$ $0.0$ 7. $0 + CH_2 (S) <=>H + HCO$ $1.50E+13$ $0.0$ $0.0$ 9. $0 + CH_2 (S) <=>H + HCO$ $1.50E+13$ $0.0$ $0.0$ 10. $0 + CH_2 (S) <=>H + HCO$ $1.50E+13$ $0.0$ $0.0$ 11. $0 + CO_4 + S > CO_2 (+M)$ $1.80E+10$ $0.0$ $2385.0$ 13. $0 + HCO <=> H + CO_2$ $3.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 14. $0 + HCO <=> HCO_4$ $3.90E+13$ $0.0$ $3.90E+13$ 16. $0_2 + CO <=> HO_2 + HCO$ $1.00E+14$ $0.0$ $4.800.0$ <	54y151		[mol-cm-sn-K]	Değeri	[kal/mol]
2.         0 + H + M          5.00E+17         -1.0         0.0           3.         0 + H <sub>2</sub> <=> H + 0H         3.87E+04         2.7         6260.0           4.         0 + H0 <sub>2</sub> <=> OH + H0 <sub>2</sub> 2.00E+13         0.0         0.0           5.         0 + H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> <=> OH + H0 <sub>2</sub> 9.63E+06         2.0         4000.0           6.         0 + CH <=> H + CO         5.70E+13         0.0         0.0           7.         0 + CH <sub>2</sub> (S) <=> H + HCO         8.00E+13         0.0         0.0           8.         0 + CH <sub>2</sub> (S) <=> H + HCO         1.50E+13         0.0         0.0           9.         0 + CH <sub>2</sub> (S) <=> H + CH <sub>3</sub> 1.02E+09         1.5         8600.0           10.         0 + CH <sub>4</sub> <=> OH + CH         1.80E+10         0.0         2385.0           13.         0 + HCO <=> OH + CO         3.00E+13         0.0         0.0           14.         0 + HCO <=> H + CO         3.00E+13         0.0         0.0           15.         0 + CH <sub>2</sub> O <=> O + CO         2.50E+12         0.0         47800.0           17.         0 <sub>2</sub> + CH <sub>2</sub> O <=> HO <sub>2</sub> + HCO         1.00E+14         0.0         40000.0           18.         H + O <sub>2</sub> + M <sub>2</sub> O <=> HO <sub>2</sub> + M <sub>2</sub> O         1.13E+19	1.	$O_2 + M \le O_2 + M$	1,20E+17	-1,0	0,0
3. $0 + H_2 <=> H + 0H$ $3.87E+04$ $2.7$ $6260,$ 4. $0 + H_2 0_2 <=> 0H + H_0_2$ $2.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 5. $0 + L_2 0_2 <=> 0H + H_0_2$ $9.63E+06$ $2.0$ $4000,0$ 6. $0 + CH_2 <=> H + HC0$ $5.70E+13$ $0.0$ $0.0$ 8. $0 + CH_2 (S) <=> H + HC0$ $1.50E+13$ $0.0$ $0.0$ 9. $0 + CH_2 (S) <=> H + HC0$ $1.50E+13$ $0.0$ $0.0$ 10. $0 + CH_2 (S) <=> H + HC0$ $1.50E+13$ $0.0$ $0.0$ 11. $0 + CH_4 <=> 0H + CH_3$ $1.02E+09$ $1.5$ $8600,0$ 12. $0 + CO(+M) <=> CO_2(+M)$ $1.80E+10$ $0.0$ $2385,0$ 13. $0 + HCO <=> H + CO_2$ $3.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 14. $0 + HCO <=> H + CO_2$ $3.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 15. $0 + H_2 O <=> HO_2 + HCO$ $1.00E+14$ $0.0$ $47800,0$ 17. $0_2 + CH_2 O <=> HO_2 + HCO$ $1.00E+14$ $0.0$ $47800,0$	2.	$0 + H + M \le OH + M$	5,00E+17	-1,0	0,0
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	3.	$0 + H_2 <=> H + OH$	3,87E+04	2,7	6260,0
5. $0 + H_2 0_2 <=> 0H + H0_2$ $9.63E+06$ $2.0$ $4000.0$ 6. $0 + CH_2 <=> H + CO$ $5.70E+13$ $0.0$ $0.0$ 7. $0 + CH_2 <=> H + HCO$ $8.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 8. $0 + CH_2(S) <=> H_2 + CO$ $1.50E+13$ $0.0$ $0.0$ 9. $0 + CH_2(S) <=> H + HCQ$ $5.06E+13$ $0.0$ $0.0$ 10. $0 + CH_3 <=> H + CH_2O$ $5.06E+13$ $0.0$ $0.0$ 11. $0 + CH_4 <=> OH + CH_3$ $1.02E+09$ $1.5$ $8600.0$ 12. $0 + CC_4 + A <=> OH + CO$ $3.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 13. $0 + HCO <=> OH + CO$ $3.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 14. $0 + HCO <=> OH + HCO$ $3.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 15. $0 + CD <=> OH + HCO$ $3.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 16. $0_2 + CD <=> O + CD_2$ $2.50E+12$ $0.0$ $47800.0$ 17. $0_2 + CH_2 O <=> HO_2 + HCO$ $1.00E+14$ $0.0$ $40000.0$ <tr< td=""><td>4.</td><td><math>0 + HO_2 \le OH + O_2</math></td><td>2,00E+13</td><td>0,0</td><td>0,0</td></tr<>	4.	$0 + HO_2 \le OH + O_2$	2,00E+13	0,0	0,0
6.         0 + CH $\leq \geq H + CO$ 5.70E+13         0.0         0.0           7.         0 + CH <sub>2</sub> $\leq \geq H + HCO$ 8.00E+13         0.0         0.0           8.         0 + CH <sub>2</sub> (S) $\leq \geq H_2 + CO$ 1.50E+13         0.0         0.0           9.         0 + CH <sub>2</sub> (S) $\leq \geq H + HCO$ 1.50E+13         0.0         0.0           10.         0 + CH <sub>2</sub> (S) $\leq \geq H + HC_2$ 5.06E+13         0.0         0.0           11.         0 + CH <sub>4</sub> $\leq \geq OH + CH_3$ 1.02E+09         1.5         8600,0           12.         0 + CO(+M) $\leq \geq CO_2(+M)$ 1.80E+10         0.0         2385,0           13.         0 + HCO $\leq \geq OH + CO$ 3.00E+13         0.0         0.0           14.         0 + HCO $\leq \geq OH + CO_2$ 2.50E+13         0.0         4780,0           15.         0 + CH <sub>2</sub> O $\leq \geq OH + CO_2$ 2.50E+13         0.0         4780,0           17.         0_2 + CH <sub>2</sub> O $\leq \geq OH + CO_2$ 2.50E+13         0.0         4780,0           16.         0_2 + CO $\leq \geq O + CO_2$ 2.50E+14         0.0         4780,0           17.         0_2 + HZO $\leq \geq HO_2 + MZ$ 1.00E+14         0.0         4780,0           18.         H + O_2 + MZ $\leq \geq HO_2 + MZ$	5.	$0 + H_2 O_2 \le OH + HO_2$	9,63E+06	2,0	4000,0
7.         0 + CH <sub>2</sub> (=> H + HC0         8.00E+13         0.0         0.0           8.         0 + CH <sub>2</sub> (S) (=> H + HC0         1.50E+13         0.0         0.0           9.         0 + CH <sub>2</sub> (S) (=> H + HC0         1.50E+13         0.0         0.0           10.         0 + CH <sub>4</sub> (S) (=> H + CH <sub>2</sub> 0         5.06E+13         0.0         0.0           11.         0 + CH <sub>4</sub> (=> OH + CH <sub>3</sub> 1.02E+09         1.5         8600.0           12.         0 + CO(+M) (=> CO <sub>2</sub> (+M)         1.80E+10         0.0         2385.0           13.         0 + HCO (=> OH + CO         3.00E+13         0.0         0.0           14.         0 + HCO (=> OH + HCO         3.00E+13         0.0         3540.0           15.         0 + CH <sub>2</sub> O (=> > OH - HCO         3.00E+13         0.0         3540.0           16.         0 <sub>2</sub> + CO (=> > HO <sub>2</sub> + HCO         1.00E+14         0.0         47800.0           17.         0 <sub>2</sub> + CH <sub>2</sub> O (=> HO <sub>2</sub> + MC         2.08E+19         -1.2         0.0           18.         H + O <sub>2</sub> + M (=> HO <sub>2</sub> + M         2.00E+14         0.0         40000.0           18.         H + O <sub>2</sub> + A (=> HO <sub>2</sub> + A R         7.00E+17         -0.8         0.0           21.         H + O <sub>2</sub> + A (=> HO <sub>2</sub> + A	6.	$0 + CH \le H + CO$	5,70E+13	0,0	0,0
8. $0 + CH_2(S) \le H_2 + CO$ $1.50E+13$ $0.0$ $0.0$ 9. $0 + CH_2(S) \le H + HCO$ $1.50E+13$ $0.0$ $0.0$ 10. $0 + CH_2(S) \le H + CH_2O$ $5.06E+13$ $0.0$ $0.0$ 11. $0 + CH_4 \le > 0H + CH_3$ $1.02E+09$ $1.5$ $8600.0$ 12. $0 + CO(+M) \le O + CO_2(+M)$ $1.80E+10$ $0.0$ $2385.0$ 13. $0 + HCO \le O + CO_2(+M)$ $1.80E+10$ $0.0$ $2385.0$ 14. $0 + HCO \le O + CO_2$ $2.50E+12$ $0.0$ $0.0$ 15. $0 + CH_2O \le O + OL_2$ $2.50E+13$ $0.0$ $3540.0$ 16. $0_2 + CO < = > O + CO_2$ $2.50E+13$ $0.0$ $47800.0$ 17. $0_2 + CH_2O < = > HO_2 + HCO$ $1.00E+14$ $0.0$ $47800.0$ 18. $H + O_2 + M \le = > HO_2 + M_2$ $2.08E+19$ $-1.2$ $0.0$ 21. $H + O_2 + H_2 O < = > HO_2 + H_2$ $1.13E+19$ $-0.8$ $0.0$ 22. $H + O_2 + AR < = > HO_2 + AR$ $7.00E+17$ $-0.8$	7.	$0 + CH_2 <=> H + HCO$	8,00E+13	0,0	0,0
9. $0 + CH_2(S) <=> H + HCO$ $1,50E+13$ $0,0$ $0,0$ 10. $0 + CH_3 <=> H + CH_2O$ $5,06E+13$ $0,0$ $0,0$ 11. $0 + CH_4 <=> OH + CH_3$ $1,02E+09$ $1,5$ $8600,0$ 12. $0 + CO(+M) <=> CO_2(+M)$ $1,80E+10$ $0,0$ $2385,0$ 13. $0 + HCO <=> OH + CO$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 14. $0 + HCO <=> OH + CO$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 15. $0 + CH_2O <=> OH + HCO$ $3,90E+13$ $0,0$ $3540,0$ 16. $0_2 + CO <=> 0 + CO_2$ $2,50E+12$ $0,0$ $47800,0$ 17. $0_2 + CH_2O <=> HO_2 + HCO$ $1,00E+14$ $0,0$ $40000,0$ 18. $H + 0_2 + M <=> HO_2 + M$ $2,80E+18$ $-0,9$ $0,0$ 19. $H + 20_2 <=> HO_2 + D_2$ $2,08E+19$ $-1,2$ $0,0$ 20. $H + 0_2 + N_2 <=> HO_2 + N_2$ $2,08E+19$ $-1,2$ $0,0$ 21. $H + 0_2 + N_2 <=> HO_2 + N_2$ $2,60E+19$ $-1,2$ $0,0$ 23. $H + 0_2 <=> H_2 + M$ $1,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 23. $H + 0_2 <=> 0 + 0H$ $2,65E+16$ $-0,7$ $17041,0$ 24. $2H + M <=> H_2 + M$ $1,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 25. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 26. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 27. $2H + B_2 <=> O_2 + H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $168,0$ 30. $H + H_2 <=> 2O_2 + H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $1068,0$	8.	$0 + CH_2(S) \le H_2 + CO$	1,50E+13	0,0	0,0
10. $0 + CH_3 <=> H + CH_20$ $5.06E+13$ $0.0$ $0.0$ 11. $0 + CH_4 <=> OH + CH_3$ $1.02E+09$ $1.5$ $8600,0$ 12. $0 + CO(+M) <=> CO_2(+M)$ $1.80E+10$ $0.0$ $2385,0$ 13. $0 + HCO <=> OH + CO$ $3.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 14. $0 + HCO <=> H + CO_2$ $3.00E+13$ $0.0$ $0.0$ 15. $0 + CH_2O <=> OH + HCO$ $3.90E+13$ $0.0$ $3540,0$ 16. $0_2 + CO <=> 0 + CO_2$ $2.50E+12$ $0.0$ $47800,0$ 17. $0_2 + CH_2O <=> HO_2 + HCO$ $1.00E+14$ $0.0$ $40000,0$ 18. $H + O_2 + M <=> HO_2 + M$ $2.80E+18$ $-0.9$ $0.0$ 19. $H + 20_2 <=> HO_2 + H_2O$ $2.08E+19$ $-1.2$ $0.0$ 20. $H + 0_2 + H_3O <=> HO_2 + H_2O$ $2.08E+19$ $-1.2$ $0.0$ 21. $H + 0_2 + H_2 <=> HO_2 + AR$ $7.00E+17$ $-0.8$ $0.0$ 23. $H + 0_2 <=> O + OH$ $2.65E+16$ $-0.7$ $17041,0$ 24. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9.00E+16$ $-0.6$ $0.0$ 25. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9.00E+16$ $-0.6$ $0.0$ 26. $2H + H_2 <=> H_2 + H_2O$ $5.50E+20$ $-2.0$ $0.0$ 27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ $5.50E+20$ $-2.0$ $0.0$ 28. $H + OH + M <=> H_2O + H_2O$ $3.97E+12$ $0.0$ $671,0$ 30. $H + HO_2 <=> O + H_2O$ $3.97E+12$ $0.0$ $635,0$ 31. $H + HO_2 <=> OH_2 + H_2O$ $1.0E+13$ $0.$	9.	$0 + CH_2(S) \le H + HCO$	1,50E+13	0,0	0,0
11. $0 + CH_4 \le > OH + CH_3$ $1,02E+09$ $1,5$ $8600,0$ 12. $0 + CO(+M) \le > CO_2(+M)$ $1,80E+10$ $0,0$ $2385,0$ 13. $0 + HCO \le > OH + CO$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 14. $0 + HCO \le > OH + CO_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 15. $0 + CH_2O \le > OH + HCO$ $3,90E+13$ $0,0$ $3540,0$ 16. $0_2 + CO \le > O + CO_2$ $2,50E+12$ $0,0$ $47800,0$ 17. $0_2 + CH_2O \le > HO_2 + HCO$ $1,00E+14$ $0,0$ $47800,0$ 18. $H + O_2 + M \le > HO_2 + H_2$ $2,80E+18$ $-0,9$ $0,0$ 20. $H + Q_2 + M \le > HO_2 + H_2$ $2,08E+19$ $-1,2$ $0,0$ 21. $H + Q_2 + N_2 \le > HO_2 + H_2$ $2,06E+19$ $-1,2$ $0,0$ 22. $H + Q_2 + N_2 \le > HO_2 + AR$ $7,00E+17$ $-0.8$ $0,0$ 22. $H + M_2 + N_2 < = > H_2 + M$ $1,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 23. $H + Q_2 <=> Q + H_2$ $4,02E+12$ $-2,0$	10.	$0 + CH_3 <=> H + CH_2 0$	5,06E+13	0,0	0,0
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	11.	$0 + CH_4 \le OH + CH_3$	1,02E+09	1,5	8600,0
13. $0 + HCO <=> 0H + CO$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 14. $0 + HCO <=> H + CO_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 15. $0 + CH_20 <=> 0H + HCO$ $3,90E+13$ $0,0$ $3540,0$ 16. $0_2 + CO <=> 0 + CO_2$ $2,50E+12$ $0,0$ $47800,0$ 17. $0_2 + CH_20 <=> HO_2 + HCO$ $1,00E+14$ $0,0$ $40000,0$ 18. $H + 0_2 + M <=> HO_2 + M$ $2,80E+18$ $-0.9$ $0,0$ 19. $H + 20_2 <=> HO_2 + D_2$ $2,08E+19$ $-1,2$ $0,0$ 20. $H + 0_2 + H_2 0 <=> HO_2 + H_2 0$ $1,13E+19$ $-0,8$ $0,0$ 21. $H + 0_2 + H_2 <=> >HO_2 + AR$ $7,00E+17$ $-0,8$ $0,0$ 23. $H + 0_2 <=> 0 + 0H$ $2,65E+16$ $-0,7$ $17041,0$ 24. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 25. $2H + H_2 <=> 2H_2 + M$ $1,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 26. $2H + H_2 0 <=> H_2 + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ $5,50E+20$ $-2,0$ $0,0$ 28. $H + 0H + M <=> H_20 + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 29. $H + HO_2 <=> 0 + H_2$ $3,97E+12$ $0,0$ $671,0$ 30. $H + HO_2 <=> 0 + H_2$ $1,00E+13$ $0,0$ $635,0$ 31. $H + HO_2 <=> 0 + H_2$ $1,00E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_2 <=> CH_3 + H_2$ $1,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 33. $H + H_2 <=> CH_3 + H_2$ $1,00E+13$ $0,0$ <	12.	$0 + CO(+M) \le CO_2(+M)$	1,80E+10	0,0	2385,0
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	13.	0 + HCO <=> OH + CO	3,00E+13	0,0	0,0
15. $0 + CH_20 <=> 0H + HC0$ $3,90E+13$ $0,0$ $3540,0$ 16. $O_2 + CO <=> 0 + CO_2$ $2,50E+12$ $0,0$ $47800,0$ 17. $O_2 + CH_20 <=> HO_2 + HC0$ $1,00E+14$ $0,0$ $40000,0$ 18. $H + O_2 + M <=> HO_2 + M$ $2,80E+18$ $-0,9$ $0,0$ 19. $H + O_2 + M <=> HO_2 + O_2$ $2,08E+19$ $-1,2$ $0,0$ 20. $H + O_2 + H_2O <=> HO_2 + H_2O$ $1,13E+19$ $-0,8$ $0,0$ 21. $H + O_2 + H_2 <=> HO_2 + N_2$ $2,60E+19$ $-1,2$ $0,0$ 22. $H + O_2 + AR <=> HO_2 + AR$ $7,00E+17$ $-0,8$ $0,0$ 23. $H + O_2 <=> 0 + 0H$ $2,65E+16$ $-0,7$ $17041,0$ 24. $2H + M <=> H_2 + M$ $1,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 25. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 26. $2H + H_2 O <=> H_2 + H_2O$ $6,00E+19$ $-1,2$ $0,0$ 27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ $5,50E+20$ $-2,0$ $0,0$ 28. $H + 0H + M <=> H_2O + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 29. $H + HO_2 <=> 0 + H_2O$ $3,97E+12$ $0,0$ $635,0$ 31. $H + HO_2 <=> 0H + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_2O_2 <=> 0H + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $635,0$ 33. $H + H_2 <=> CH_3 + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 34. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(H) <=> CH_3(HM)$ $6,00E+14$	14.	$0 + HCO \le H + CO_2$	3,00E+13	0,0	0,0
16. $0_2 + CO <=> 0 + CO_2$ $2,50E+12$ $0,0$ $47800,0$ 17. $0_2 + CH_2O <=> HO_2 + HCO$ $1,00E+14$ $0,0$ $40000,0$ 18. $H + O_2 + M <=> HO_2 + M$ $2,80E+18$ $-0,9$ $0,0$ 19. $H + 2O_2 <=> HO_2 + O_2$ $2,08E+19$ $-1,2$ $0,0$ 20. $H + O_2 + H_2O <=> HO_2 + H_2O$ $1,13E+19$ $-0,8$ $0,0$ 21. $H + O_2 + H_2 <=> HO_2 + H_2$ $2,60E+19$ $-1,2$ $0,0$ 22. $H + O_2 + AR <=> HO_2 + AR$ $7,00E+17$ $-0,8$ $0,0$ 23. $H + O_2 <=> 0 + 0H$ $2,65E+16$ $-0,7$ $17041,0$ 24. $2H + M <=> H_2 + M$ $1,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 25. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 26. $2H + H_2O <=> H_2 + H_2O$ $6,00E+19$ $-1,2$ $0,0$ 27. $2H + CO_2 <=> H_2 + H_2O$ $6,00E+19$ $-1,2$ $0,0$ 28. $H + OH + M <=> H_2O + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 29. $H + HO_2 <=> O + H_2O$ $3,97E+12$ $0,0$ $671,0$ 30. $H + HO_2 <=> OH + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $635,0$ 31. $H + H_2O <=> OH + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $3600,0$ 33. $H + H_2(S) <=> OH + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 34. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + CH_2(S) <=> CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + CH_2 <=> CH_3 + H_2$ $0,74E$	15.	$0 + CH_2 0 \le 0H + HC0$	3,90E+13	0,0	3540,0
17. $0_2 + CH_2O <=> HO_2 + HCO$ $1,00E+14$ $0,0$ $40000,0$ 18. $H + O_2 + M <=> HO_2 + M$ $2,80E+18$ $-0,9$ $0,0$ 19. $H + 20_2 <=> HO_2 + O_2$ $2,08E+19$ $-1,2$ $0,0$ 20. $H + O_2 + H_2O <=> HO_2 + H_2O$ $1,13E+19$ $-0,8$ $0,0$ 21. $H + O_2 + H_2 <=> HO_2 + N_2$ $2,60E+19$ $-1,2$ $0,0$ 22. $H + O_2 + AR <=> HO_2 + AR$ $7,00E+17$ $-0,8$ $0,0$ 23. $H + O_2 <=> 0 + 0H$ $2,65E+16$ $-0,7$ $17041,0$ 24. $2H + M <=> H_2 + M$ $1,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 25. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 26. $2H + H_2 <=> H_2 + H_2O$ $6,00E+19$ $-1,2$ $0,0$ 27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ $5,50E+20$ $-2,0$ $0,0$ 28. $H + 0H + M <=> H_2O + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 29. $H + HO_2 <=> O + H_2O$ $3,97E+12$ $0,0$ $671,0$ 30. $H + HO_2 <=> OH + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $635,0$ 31. $H + HO_2 <=> OH + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_2O_2 <=> HO_2 + H_2$ $1,21E+07$ $2,0$ $5200,0$ 33. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_2(+M)$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + CH_2(<=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ </td <td>16.</td> <td><math>0_2 + CO \le 0 + CO_2</math></td> <td>2,50E+12</td> <td>0,0</td> <td>47800,0</td>	16.	$0_2 + CO \le 0 + CO_2$	2,50E+12	0,0	47800,0
18. $H + 0_2 + M <=> H0_2 + M$ 2,80E+18-0.90,019. $H + 20_2 <=> H0_2 + 0_2$ 2,08E+19-1.20,020. $H + 0_2 + H_2 0 <=> H0_2 + H_2 0$ 1,13E+19-0.80,021. $H + 0_2 + H_2 <=> H0_2 + H_2$ 2,60E+19-1.20,022. $H + 0_2 + AR <=> H0_2 + AR$ 7,00E+17-0.80,023. $H + 0_2 <=> 0 + 0H$ 2,65E+16-0,717041,024. $2H + M <=> H_2 + M$ 1,00E+18-1.00,025. $2H + H_2 <=> 2H_2$ 9,00E+16-0,60,026. $2H + H_2 <=> H_2 + H_2 0$ 6,00E+19-1.20,027. $2H + C0_2 <=> H_2 + C0_2$ 5,50E+20-2.00,028. $H + 0H + M <=> H_2 0 + M$ 2,20E+22-2.00,029. $H + H0_2 <=> 0 + H_2 0$ 3,97E+120,0671,030. $H + H0_2 <=> 20H$ 8,40E+130,0635,031. $H + H0_2 <=> 0H + H_2 0$ 1,00E+130,03600,034. $H + CH <=> C + H_2$ 1,65E+140,00,035. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ 6,00E+140,00,036. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ 3,00E+130,00,037. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ 3,00E+130,00,038. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ 6,60E+081,610840,039. $H + CH_2 0 <=> H_2 + CO7,34E+130,00,041.H + CC_2 <=> H_2 + CO7,34E+130,00,0$	17.	$0_2 + CH_20 <=> HO_2 + HCO$	1,00E+14	0,0	40000,0
19. $H + 2O_2 <=> HO_2 + O_2$ 2,08E+19-1,20,020. $H + O_2 + H_2O <=> HO_2 + H_2O$ 1,13E+19-0,80,021. $H + O_2 + N_2 <=> HO_2 + N_2$ 2,60E+19-1,20,022. $H + O_2 + AR <=> HO_2 + AR$ 7,00E+17-0,80,023. $H + O_2 <=> 0 + OH$ 2,65E+16-0,717041,024. $2H + M <=> H_2 + M$ 1,00E+18-1,00,025. $2H + H_2 <=> 2H_2$ 9,00E+16-0,60,026. $2H + H_2O <=> H_2 + H_2O$ 6,00E+19-1,20,027. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ 5,50E+20-2,00,028. $H + OH + M <=> H_2O + M$ 2,20E+22-2,00,029. $H + HO_2 <=> O_2 + H_2$ 4,48E+130,01068,031. $H + HO_2 <=> O_2 + H_2$ 4,48E+130,0635,032. $H + H_2O_2 <=> OH + H_2O$ 1,00E+130,0635,033. $H + CH <=> C + H_2$ 1,65E+140,00,035. $H + CH_2(S) <=> CH_4(+M)$ 1,39E+16-0,5536,038. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ 3,00E+130,00,037. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ 6,60E+081,610840,039. $H + HC0 <=> H_2 + CO$ 7,34E+130,00,041. $H + CH_2 O <=> HCO + H_2$ 5,74E+071,92742,042. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 1,09E+120,5-260,043. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ 2,16E+081,53430,	18.	$H + O_2 + M \le HO_2 + M$	2,80E+18	-0,9	0,0
20. $H + O_2 + H_2O <=> HO_2 + H_2O$ $I,13E+19$ $-0,8$ $0,0$ 21. $H + O_2 + N_2 <=> HO_2 + N_2$ $2,60E+19$ $-1,2$ $0,0$ 22. $H + O_2 + AR <=> HO_2 + AR$ $7,00E+17$ $-0,8$ $0,0$ 23. $H + O_2 <=> 0 + 0H$ $2,65E+16$ $-0,7$ $17041,0$ 24. $2H + M <=> H_2 + M$ $1,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 25. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 26. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 26. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ $5,50E+20$ $-2,0$ $0,0$ 28. $H + 0H + M <=> H_2O + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 29. $H + HO_2 <=> 0_2 + H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $1068,0$ 31. $H + HO_2 <=> 2OH$ $8,40E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_2O_2 <=> 0H + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $360,0$	19.	$H + 20_2 <=> H0_2 + 0_2$	2,08E+19	-1,2	0,0
21.         H + $O_2 + N_2 <=> HO_2 + N_2$ 2,60E+19         -1,2         0,0           22.         H + $O_2 + AR <=> HO_2 + AR$ 7,00E+17         -0,8         0,0           23.         H + $O_2 <=> 0 + 0H$ 2,65E+16         -0,7         17041,0           24.         2H + $M <=> H_2 + M$ 1,00E+18         -1,0         0,0           25.         2H + $H_2 <=> 2H_2$ 9,00E+16         -0,6         0,0           26.         2H + $H_2 0 <=> H_2 + H_20$ 6,00E+19         -1,2         0,0           27.         2H + CO <sub>2</sub> <=> H <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> 0         5,50E+20         -2,0         0,0           28.         H + OH + M <=> H <sub>2</sub> 0 + M         2,20E+22         -2,0         0,0           29.         H + HO <sub>2</sub> <=> 0 + H <sub>2</sub> 0         3,97E+12         0,0         671,0           30.         H + HO <sub>2</sub> <=> 20H         8,40E+13         0,0         1068,0           31.         H + HO <sub>2</sub> <=> 20H         8,40E+13         0,0         635,0           32.         H + H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> <=> H <sub>2</sub> 1,21E+07         2,0         5200,0           33.         H + H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> <=> OH + H <sub>2</sub> O         1,00E+13         0,0         0,0           34.         H + CH <=> C + H <sub>2</sub> 1,65	20.	$H + O_2 + H_2O \le HO_2 + H_2O$	1.13E+19	-0.8	0.0
22. $H + O_2 + AR < => HO_2 + AR$ 7,00E+17       -0,8       0,0         23. $H + O_2 <=> 0 + 0H$ 2,65E+16       -0,7       17041,0         24. $2H + M <=> H_2 + M$ 1,00E+18       -1,0       0,0         25. $2H + H_2 <=> 2H_2$ 9,00E+16       -0,6       0,0         26. $2H + H_2 0 <=> H_2 + H_2 0$ 6,00E+19       -1,2       0,0         27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ 5,50E+20       -2,0       0,0         28. $H + OH + M <=> H_2 0 + M$ 2,20E+22       -2,0       0,0         29. $H + HO_2 <=> 0 + H_2 0$ 3,97E+12       0,0       671,0         30. $H + HO_2 <=> 0 + H_2 0$ 3,97E+12       0,0       635,0         31. $H + HO_2 <=> 20H$ 8,40E+13       0,0       635,0         32. $H + H_2 0_2 <=> 0H + H_2 0$ 1,00E+13       0,0       3600,0         34. $H + CH <=> C + H_2$ 1,65E+14       0,0       0,0         35. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ 3,00E+13       0,0       0,0         36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ 3,00E+13       0,0       0,0         37. $H + CH_2(S) <=> $	21.	$H + O_2 + N_2 \le HO_2 + N_2$	2.60E+19	-1.2	0.0
23. $H + O_2 <=> 0 + 0H$ 2,65E+16-0,717041,024. $2H + M <=> H_2 + M$ 1,00E+18-1,00,025. $2H + H_2 <=> 2H_2$ 9,00E+16-0,60,026. $2H + H_2 0 <=> H_2 + H_2 0$ 6,00E+19-1,20,027. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ 5,50E+20-2,00,028. $H + 0H + M <=> H_2 0 + M$ 2,20E+22-2,00,029. $H + HO_2 <=> 0 + H_2 0$ 3,97E+120,0671,030. $H + HO_2 <=> 0_2 + H_2$ 4,48E+130,01068,031. $H + HO_2 <=> 0_2 + H_2$ 1,21E+072,05200,033. $H + H_2 0_2 <=> 0H + H_2 0$ 1,00E+130,03600,034. $H + CH <=> C + H_2$ 1,65E+140,00,035. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ 6,00E+140,00,036. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ 3,00E+130,00,037. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ 1,39E+16-0,5536,038. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ 6,60E+081,610840,039. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 1,09E+120,5-260,040. $H + CH_2 0 <=> HCO + H_2$ 5,74E+071,92742,042. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 4,30E+071,579600,043. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ 2,16E+081,53430.0	22.	$H + O_2 + AR \le HO_2 + AR$	7,00E+17	-0,8	0,0
24. $2H + M <=> H_2 + M$ $1,00E+18$ $-1,0$ $0,0$ 25. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 26. $2H + H_20 <=> H_2 + H_20$ $6,00E+19$ $-1,2$ $0,0$ 27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ $5,50E+20$ $-2,0$ $0,0$ 28. $H + 0H + M <=> H_20 + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 29. $H + HO_2 <=> 0 + H_20$ $3,97E+12$ $0,0$ $671,0$ 30. $H + HO_2 <=> 0, H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $1068,0$ 31. $H + HO_2 <=> 20H$ $8,40E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_20 <=> 20H$ $8,40E+13$ $0,0$ $635,0$ 33. $H + H_20 <=> OH + H_20$ $1,00E+13$ $0,0$ $3600,0$ 34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 37. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) <=> CH_20(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HCO <=> H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_20 <=> HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_20(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $3430,0$	23.	$H + 0_2 <=> 0 + 0H$	2,65E+16	-0,7	17041,0
25. $2H + H_2 <=> 2H_2$ $9,00E+16$ $-0,6$ $0,0$ 26. $2H + H_20 <=> H_2 + H_20$ $6,00E+19$ $-1,2$ $0,0$ 27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ $5,50E+20$ $-2,0$ $0,0$ 28. $H + 0H + M <=> H_20 + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 29. $H + HO_2 <=> 0 + H_20$ $3,97E+12$ $0,0$ $671,0$ 30. $H + HO_2 <=> 0_2 + H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $1068,0$ 31. $H + HO_2 <=> 0_2 + H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_20_2 <=> HO_2 + H_2$ $1,21E+07$ $2,0$ $5200,0$ 33. $H + H_20_2 <=> 0H + H_20$ $1,00E+13$ $0,0$ $3600,0$ 34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 37. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HC0 <=> H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $3430.0$	24.	$2H + M \le H_2 + M$	1,00E+18	-1.0	0,0
26. $2H + H_2O <=> H_2 + H_2O$ $6,00E+19$ $-1,2$ $0,0$ 27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ $5,50E+20$ $-2,0$ $0,0$ 28. $H + 0H + M <=> H_2O + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 29. $H + HO_2 <=> 0 + H_2O$ $3,97E+12$ $0,0$ $671,0$ 30. $H + HO_2 <=> 0_2 + H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $1068,0$ 31. $H + HO_2 <=> 0_2 + H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_2O_2 <=> 100_2 + H_2$ $1,21E+07$ $2,0$ $5200,0$ 33. $H + H_2O_2 <=> 0H + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $3600,0$ 34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 37. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HCO <=> H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $3430,0$	25.	$2H + H_2 <=> 2H_2$	9,00E+16	-0,6	0,0
27. $2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$ $5,50E+20$ $-2,0$ $0,0$ 28. $H + OH + M <=> H_2O + M$ $2,20E+22$ $-2,0$ $0,0$ 29. $H + HO_2 <=> 0 + H_2O$ $3,97E+12$ $0,0$ $671,0$ 30. $H + HO_2 <=> 0_2 + H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $1068,0$ 31. $H + HO_2 <=> 20H$ $8,40E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_2O_2 <=> HO_2 + H_2$ $1,21E+07$ $2,0$ $5200,0$ 33. $H + H_2O_2 <=> OH + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $3600,0$ 34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 37. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HCO <=> H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $3430,0$	26.	$2H + H_20 \le H_2 + H_20$	6,00E+19	-1,2	0,0
28. $H + OH + M \le H_2O + M$ 2,20E+22-2,00,029. $H + HO_2 \le O + H_2O$ 3,97E+120,0671,030. $H + HO_2 \le O_2 + H_2$ 4,48E+130,01068,031. $H + HO_2 \le O_2 + H_2$ 4,48E+130,0635,032. $H + H_2O_2 \le HO_2 + H_2$ 1,21E+072,05200,033. $H + H_2O_2 \le OH + H_2O$ 1,00E+130,03600,034. $H + CH \le C + H_2$ 1,65E+140,00,035. $H + CH_2(+M) \le CH_3(+M)$ 6,00E+140,00,036. $H + CH_2(S) \le CH + H_2$ 3,00E+130,00,037. $H + CH_3(+M) \le CH_3 + H_2$ 6,60E+081,610840,039. $H + CH_4 \le CH_3 + H_2$ 6,60E+081,610840,039. $H + HCO(+M) \le CH_2O(+M)$ 1,09E+120,5-260,040. $H + HCO \le H_2 + CO$ 7,34E+130,00,041. $H + CH_2O \le HCO + H_2$ 5,74E+071,92742,042. $H_2 + CO(+M) \le CH_2O(+M)$ 4,30E+071,579600,043. $OH + H_2 \le H + H_2O$ 2,16E+081,53430.0	27.	$2H + CO_2 <=> H_2 + CO_2$	5,50E+20	-2,0	0,0
29. $H + HO_2 <=> 0 + H_2O$ $3,97E+12$ $0,0$ $671,0$ 30. $H + HO_2 <=> 0_2 + H_2$ $4,48E+13$ $0,0$ $1068,0$ 31. $H + HO_2 <=> 20H$ $8,40E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_2O_2 <=> HO_2 + H_2$ $1,21E+07$ $2,0$ $5200,0$ 33. $H + H_2O_2 <=> 0H + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $3600,0$ 34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 37. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HCO <=> H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $79600,0$ 43. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ $2.16E+08$ $1.5$ $3430.0$	28.	$H + OH + M \le H_2O + M$	2,20E+22	-2,0	0,0
30. $H + HO_2 <=> O_2 + H_2$ 4,48E+130,01068,031. $H + HO_2 <=> 2OH$ 8,40E+130,0635,032. $H + H_2O_2 <=> HO_2 + H_2$ 1,21E+072,05200,033. $H + H_2O_2 <=> OH + H_2O$ 1,00E+130,03600,034. $H + CH <=> C + H_2$ 1,65E+140,00,035. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ 6,00E+140,00,036. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ 3,00E+130,00,037. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ 1,39E+16-0,5536,038. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ 6,60E+081,610840,039. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 1,09E+120,5-260,040. $H + HCO <=> H_2 + CO$ 7,34E+130,00,041. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ 5,74E+071,92742,042. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 4,30E+071,579600,043. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ 2,16E+081,53430.0	29.	$H + HO_2 \le 0 + H_2O$	3,97E+12	0,0	671,0
31. $H + HO_2 <=> 2OH$ $8,40E+13$ $0,0$ $635,0$ 32. $H + H_2O_2 <=> HO_2 + H_2$ $1,21E+07$ $2,0$ $5200,0$ 33. $H + H_2O_2 <=> OH + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $3600,0$ 34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 37. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HCO <=> H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $79600,0$ 43. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ $2,16E+08$ $1,5$ $3430,0$	30.	$H + HO_2 <=> O_2 + H_2$	4,48E+13	0.0	1068,0
32. $H + H_2O_2 <=> HO_2 + H_2$ $1,21E+07$ $2,0$ $5200,0$ 33. $H + H_2O_2 <=> OH + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $3600,0$ 34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 37. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HCO <=> H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $79600,0$ 43. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ $2.16E+08$ $1,5$ $3430.0$	31.	$H + HO_2 <=> 20H$	8,40E+13	0.0	635.0
33. $H + H_2O_2 <=> OH + H_2O$ $1,00E+13$ $0,0$ $3600,0$ 34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 37. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HCO <=> H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $79600,0$ 43. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ $2.16E+08$ $1.5$ $3430.0$	32.	$H + H_2O_2 \le HO_2 + H_2$	1,21E+07	2,0	5200,0
34. $H + CH <=> C + H_2$ $1,65E+14$ $0,0$ $0,0$ 35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ $6,00E+14$ $0,0$ $0,0$ 36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ $3,00E+13$ $0,0$ $0,0$ 37. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HCO <=> H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $79600,0$ 43. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ $2.16E+08$ $1.5$ $3430.0$	33.	$H + H_2O_2 <=> OH + H_2O$	1.00E+13	0.0	3600.0
35. $H + CH_2(+M) <=> CH_3(+M)$ 6,00E+140,00,036. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ 3,00E+130,00,037. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ 1,39E+16-0,5536,038. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ 6,60E+081,610840,039. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 1,09E+120,5-260,040. $H + HCO <=> H_2 + CO$ 7,34E+130,00,041. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ 5,74E+071,92742,042. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 4,30E+071,579600,043. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ 2.16E+081.53430.0	34.	$H + CH <=> C + H_2$	1.65E+14	0.0	0.0
36. $H + CH_2(S) <=> CH + H_2$ 3,00E+130,00,037. $H + CH_3(+M) <=> CH_4(+M)$ 1,39E+16-0,5536,038. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ 6,60E+081,610840,039. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 1,09E+120,5-260,040. $H + HCO <=> H_2 + CO$ 7,34E+130,00,041. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ 5,74E+071,92742,042. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 4,30E+071,579600,043. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ 2.16E+081.53430.0	35.	$H + CH_2(+M) \le CH_2(+M)$	6.00E+14	0.0	0.0
37. $H + CH_3(+M) \le CH_4(+M)$ $1,39E+16$ $-0,5$ $536,0$ 38. $H + CH_4 \le CH_3 + H_2$ $6,60E+08$ $1,6$ $10840,0$ 39. $H + HCO(+M) \le CH_2O(+M)$ $1,09E+12$ $0,5$ $-260,0$ 40. $H + HCO \le H_2 + CO$ $7,34E+13$ $0,0$ $0,0$ 41. $H + CH_2O \le HCO + H_2$ $5,74E+07$ $1,9$ $2742,0$ 42. $H_2 + CO(+M) \le CH_2O(+M)$ $4,30E+07$ $1,5$ $79600,0$ 43. $OH + H_2 \le H + H_2O$ $2.16E+08$ $1.5$ $3430.0$	36.	$H + CH_2(S) \le CH + H_2$	3.00E+13	0.0	0.0
38. $H + CH_4 <=> CH_3 + H_2$ 6,60E+081,610840,039. $H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 1,09E+120,5-260,040. $H + HCO <=> H_2 + CO$ 7,34E+130,00,041. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ 5,74E+071,92742,042. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 4,30E+071,579600,043. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ 2,16E+081,53430.0	37.	$H + CH_2(+M) \le CH_4(+M)$	1.39E+16	-0.5	536.0
39.H + HCO(+M) <=> CH <sub>2</sub> O(+M)1,09E+120,5-260,040.H + HCO <=> H <sub>2</sub> + CO7,34E+130,00,041.H + CH <sub>2</sub> O <=> HCO + H <sub>2</sub> 5,74E+071,92742,042.H <sub>2</sub> + CO(+M) <=> CH <sub>2</sub> O(+M)4,30E+071,579600,043.OH + H <sub>2</sub> <=> H + H <sub>2</sub> O2.16E+081.53430.0	38.	$H + CH_{4} <=> CH_{2} + H_{2}$	6,60E+08	1.6	10840.0
40.H + HCO <=> H_2 + CO7,34E+130,00,041.H + CH_2O <=> HCO + H_25,74E+071,92742,042.H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)4,30E+071,579600,043.OH + H_2 <=> H + H_2O2.16E+081.53430.0	39.	$H + HCO(+M) <=> CH_2O(+M)$	1.09E+12	0.5	-260.0
41. $H + CH_2O <=> HCO + H_2$ 5,74E+071,92742,042. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 4,30E+071,579600,043. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ 2.16E+081.53430.0	40.	$H + HCO <=> H_2 + CO$	7.34E+13	0,0	0.0
42. $H_2 + CO(+M) <=> CH_2O(+M)$ 4,30E+07       1,5       79600,0         43. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ 2.16E+08       1.5       3430.0	41.	$H + CH_{2}O <=> HCO + H_{2}$	5.74E+07	1.9	2742.0
43. $OH + H_2 <=> H + H_2O$ 2.16E+08 1.5 3430.0	42.	$H_2 + CO(+M) \le CH_2O(+M)$	4.30E+07	1.5	79600.0
	43.	$OH + H_2 <=> H + H_2 O$	2,16E+08	1.5	3430.0

EK-1. Çalışmada kullanılan reaksiyon basamakları

44.	$20H(+M) \le H_2O_2(+M)$	7,40E+13	-0,4	0,0
45.	$20H \le 0 + H_20$	3,57E+04	2,4	-2110,0
46.	$OH + HO_2 <=> O_2 + H_2O$	1.45E + 12	0.0	500.0
	Declared duplicate reaction	1,43E+15	0,0	-300,0
47.	$OH + H_2O_2 <=> HO_2 + H_2O_2$	2,00E+12	0,0	427.0
	Declared duplicate reaction			+27,0
48	$OH + H_2O_2 \le HO_2 + H_2O$	1 70E±18	0.0	29410.0
+0.	Declared duplicate reaction	1,702+10	0,0	29410,0
49.	$OH + C \le H + CO$	5,00E+13	0,0	0,0
50.	$OH + CH \le H + HCO$	3,00E+13	0,0	0,0
51.	$OH + CH_2 <=> H + CH_2O$	2,00E+13	0,0	0,0
52.	$OH + CH_2 <=> CH + H_2O$	1,13E+07	2,0	3000,0
53.	$OH + CH_2(S) \le H + CH_2O$	3,00E+13	0,0	0,0
54.	$OH + CH_3 <=> CH_2 + H_2O$	5,60E+07	1,6	5420,0
55.	$OH + CH_3 <=> CH_2(S) + H_2O$	6,44E+17	-1,3	1417,0
56.	$OH + CH_4 <=> CH_3 + H_2O$	1,00E+08	1,6	3120,0
57.	$OH + CO \le H + CO_2$	4,76E+07	1,2	70,0
58.	$OH + HCO \le H_2O + CO$	5,00E+13	0,0	0,0
59.	$OH + CH_2O <=> HCO + H_2O$	3,43E+09	1,2	-447,0
60	$2HO_2 \le O_2 + H_2O_2$	1 30F±11	0.0	-1630,0
00.	Declared duplicate reaction	1,502+11	0,0	
61	$2HO_2 \le O_2 + H_2O_2$	$4.20E \pm 14$	0,0	12000,0
01.	Declared duplicate reaction	1,201111		
62.	$\mathrm{HO}_2 + \mathrm{CH}_2 <=> \mathrm{OH} + \mathrm{CH}_2 \mathrm{O}$	2,00E+13	0,0	0,0
63.	$\mathrm{HO}_2 + \mathrm{CH}_3 <=> \mathrm{O}_2 + \mathrm{CH}_4$	1,00E+12	0,0	0,0
64.	$HO_2 + CO \le OH + CO_2$	1,50E+14	0,0	23600,0
65.	$HO_2 + CH_2O <=> HCO + H_2O_2$	5,60E+06	2,0	12000,0
66.	$C + 0_2 <=> 0 + C0$	5,80E+13	0,0	576,0
67.	$CH + O_2 <=> O + HCO$	6,71E+13	0,0	0,0
68.	$CH + H_2 <=> H + CH_2$	1,08E+14	0,0	3110,0
69.	$CH + H_2O <=> H + CH_2O$	5,71E+12	0,0	-755,0
70.	$CH_2 + O_2 => OH + H + CO$	5,00E+12	0,0	1500,0
71.	$CH_2 + H_2 <=> H + CH_3$	5,00E+05	2,0	7230,0
72.	$CH_2 + CH_4 <=> 2CH_3$	2,46E+06	2,0	8270,0
73.	$CH_2(S) + N_2 <=> CH_2 + N_2$	1,50E+13	0,0	600,0
74.	$CH_2(S) + AR \le CH_2 + AR$	9,00E+12	0,0	600,0
75.	$CH_2(S) + O_2 <=> H + OH + CO$	2,80E+13	0,0	0,0
76.	$CH_2(S) + O_2 <=> CO + H_2O$	1,20E+13	0,0	0,0
77.	$CH_2(S) + H_2 <=> CH_3 + H$	7,00E+13	0,0	0,0
78.	$CH_2(S) + H_2O \le CH_2 + H_2O$	3,00E+13	0,0	0,0
79.	$CH_2(S) + CH_4 \le 2CH_3$	1,60E+13	0,0	-570,0
80.	$CH_2(S) + CO \le CH_2 + CO$	9,00E+12	0,0	0,0
81.	CU(S) + CO < -S CU + CO	$7.00E \pm 12$	0.0	0.0
-	$CH_2(3) + CU_2 <=> CH_2 + CU_2$	7,00L+12	0,0	0,0
82.	$CH_2(S) + CO_2 <=> CH_2 + CO_2$ $CH_2(S) + CO_2 <=> CO + CH_2O$	1,40E+12	0,0	0,0
82. 83.	$\begin{array}{c} CH_2(S) + CO_2 <=> CH_2 + CO_2 \\ CH_2(S) + CO_2 <=> CO + CH_2O \\ CH_3 + O_2 <=> OH + CH_2O \end{array}$	1,40E+12 2,31E+12	0,0 0,0 0,0	0,0 20315,0

EK-1. (devam) Çalışmada kullanılan reaksiyon basamakları

85.	$CH_3 + HCO \leq > CH_4 + CO$	2,65E+13	0,0	0,0
86.	$CH_3 + CH_2O \ll HCO + CH_4$	3,32E+03	2,8	5860,0
87.	$HCO + H_2O <=> H + CO + H_2O$	1,50E+18	-1,0	17000,0
88.	$HCO + M \le H + CO + M$	1,87E+17	-1,0	17000,0
89.	$HCO + O_2 <=> HO_2 + CO$	1,34E+13	0,0	400,0
90.	$N + NO \le N_2 + O$	2,70E+13	0,0	355,0
91.	$N + O_2 \le NO + O$	9,00E+09	1,0	6500,0
92.	$N + OH \le NO + H$	3,36E+13	0,0	385,0
93.	$N_20 + 0 \le N_2 + 0_2$	1,40E+12	0,0	10810,0
94.	$N_20 + 0 \le 2N0$	2,90E+13	0,0	23150,0
95.	$N_2O + H \le N_2 + OH$	3,87E+14	0,0	18880,0
96.	$N_2O + OH \le N_2 + HO_2$	2,00E+12	0,0	21060,0
97.	$N_2O(+M) \le N_2 + O(+M)$	7,91E+10	0,0	56020,0
98.	$HO_2 + NO \le NO_2 + OH$	2,11E+12	0,0	-480,0
99.	$NO + O + M \le NO_2 + M$	1,06E+20	-1,4	0,0
100.	$NO_2 + 0 \le NO + O_2$	3,90E+12	0,0	-240,0
101.	$NO_2 + H \le NO + OH$	1,32E+14	0,0	360,0
102.	$NH + O \le NO + H$	4,00E+13	0,0	0,0
103.	$\rm NH + H <=> N + H_2$	3,20E+13	0,0	330,0
104.	$NH + OH \le HNO + H$	2,00E+13	0,0	0,0
105.	$NH + OH <=> N + H_2O$	2,00E+09	1,2	0,0
106.	$NH + O_2 <=> HNO + O$	4,61E+05	2,0	6500,0
107.	$NH + O_2 <=> NO + OH$	1,28E+06	1,5	100,0
108.	$NH + N \le N_2 + H$	1,50E+13	0,0	0,0
109.	$\rm NH + H_2O <=> HNO + H_2$	2,00E+13	0,0	13850,0
110.	$\rm NH + NO <=> N_2 + OH$	2,16E+13	-0,2	0,0
111.	$\mathrm{NH} + \mathrm{NO} <=> \mathrm{N}_2\mathrm{O} + \mathrm{H}$	3,65E+14	-0,5	0,0
112.	$\rm NH_2 + O <=> OH + NH$	3,00E+12	0,0	0,0
113.	$NH_2 + 0 \le H + HNO$	3,90E+13	0,0	0,0
114.	$NH_2 + H \le NH + H_2$	4,00E+13	0,0	3650,0
115.	$NH_2 + OH \le NH + H_2O$	9,00E+07	1,5	-460,0
116.	$H + NO + M \le HNO + M$	4,48E+19	-1,3	740,0
117.	$HNO + O \le NO + OH$	2,50E+13	0,0	0,0
118.	$HNO + H \le H_2 + NO$	9,00E+11	0,7	660,0
119.	$HNO + OH \le NO + H_2O$	1,30E+07	1,9	-950,0
120.	$HNO + O_2 <=> HO_2 + NO$	1,00E+13	0,0	13000,0
121.	$CN + O \leq > CO + N$	7,70E+13	0,0	0,0
122.	$CN + OH \le NCO + H$	4,00E+13	0,0	0,0
123.	$CN + H_2O \ll HCN + OH$	8,00E+12	0,0	7460,0
124.	$CN + O_2 <=> NCO + O$	6,14E+12	0,0	-440,0
125.	$CN + H_2 \le HCN + H$	2,95E+05	2,5	2240,0
126.	$NCO + O \le NO + CO$	2,35E+13	0,0	0,0
127.	$NCO + H \le NH + CO$	5,40E+13	0,0	0,0
128.	$NCO + OH \le NO + H + CO$	2,50E+12	0,0	0,0
129.	$NCO + N \le N_2 + CO$	2,00E+13	0,0	0,0
130.	$NCO + O_2 <=> NO + CO_2$	2,00E+12	0,0	20000,0

EK-1. (devam) Çalışmada kullanılan reaksiyon basamakları

131.	$NCO + M \le N + CO + M$	3,10E+14	0,0	54050,0
132.	$NCO + NO \le N_2O + CO$	1,90E+17	-1,5	740,0
133.	$NCO + NO <=> N_2 + CO_2$	3,80E+18	-2,0	800,0
134.	$HCN + M \le H + CN + M$	1,04E+29	-3,3	126600,0
135.	$HCN + O \le NCO + H$	2,03E+04	2,6	4980,0
136.	$HCN + O \le NH + CO$	5,07E+03	2,6	4980,0
137.	$HCN + O \le CN + OH$	3,91E+09	1,6	26600,0
138.	$HCN + OH \le NH_2 + CO$	1,60E+02	2,6	9000,0
139.	$C + N_2 \le CN + N$	6,30E+13	0,0	46020,0
140.	$CH + N_2 \ll HCN + N$	3,12E+09	0,9	20130,0
141.	$CH_2 + N_2 \iff HCN + NH$	1,00E+13	0,0	74000,0
142.	$CH_2(S) + N_2 \le NH + HCN$	1,00E+11	0,0	65000,0
143.	$C + NO \leq > CN + O$	1,90E+13	0,0	0,0
144.	$C + NO \le CO + N$	2,90E+13	0,0	0,0
145.	$CH + NO \le HCN + O$	4,10E+13	0,0	0,0
146.	$CH + NO \le H + NCO$	1,62E+13	0,0	0,0
147.	$CH + NO \le N + HCO$	2,46E+13	0,0	0,0
148.	$CH_2 + NO \le OH + HCN$	2,90E+14	-0,7	760,0
149.	$CH_2(S) + NO \le OH + HCN$	2,90E+14	-0,7	760,0
150.	$CH_3 + NO \le HCN + H_2O$	9,60E+13	0,0	28800,0
151.	$CH_3 + N \le HCN + H_2$	3,70E+12	0,1	-90,0
152.	$NH + CO_2 \iff HNO + CO$	1,00E+13	0,0	14350,0
153.	$CN + NO_2 \le NCO + NO$	6,16E+15	-0,8	345,0
154.	$NCO + NO_2 \le N_2O + CO_2$	3,25E+12	0,0	-705,0
155.	$N + CO_2 \le NO + CO$	3,00E+12	0,0	11300,0
156.	$0 + CH_3 => H + H_2 + CO$	3,37E+13	0,0	0,0
157.	$OH + HO_2 \le O_2 + H_2O$	5,00E+15	0,0	17330,0
	Declared duplicate reaction			
158.	$OH + CH_3 => H_2 + CH_2O$	8,00E+09	0,5	-1755,0
159.	$CH + H_2(+M) <=> CH_3(+M)$	1,97E+12	0,4	-370,0
160.	$CH_2 + O_2 => 2H + CO_2$	5,80E+12	0,0	1500,0
161.	$CH_2 + O_2 <=> 0 + CH_2 0$	2,40E+12	0,0	1500,0
162.	$CH_2(S) + H_2O => H_2 + CH_2O$	6,82E+10	0,2	-935,0

EK-1. (devam) Çalışmada kullanılan reaksiyon basamakları



GAZİ GELECEKTİR...