

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ MÜHENDİSLİK MİMARLIK FAKÜLTESİ VE TÜRK ISI BİLİMİ VE TEKNİĞİ DERNEĞİ



ULIBTK'97

Uluslararası Katılımla

11.ULUSAL ISI BİLİMİ VE TEKNİĞİ KONGRESİ

17 - 19 Eylül 1997

Cilt 1

Editörler : Ahmet CAN Ö. Ercan ATAER

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ Mühendislik Mimarlık Fakültesi 22030 EDİRNE

ÖN KARIŞIMLI, DÜZLEMSEL BİR ALEVDE PROPAN (C₃H₈) YANMASININ İNCELENMESİ

Mustafa EYRİBOYUN¹ Zonguldak Karaelmas Üniversitesi

> Hasan A. HEPERKAN² Yıldız Teknik Üniversitesi

ÖZET

Literatürde bulunan reaksiyon mekanizmaları kullanılarak, tek boyutlu, laminer, ön karışımlı, düzlemsel bir alev boyunca, propan (C_3H_8) yanması sırasında oluşan ara ürünlerin konsantrasyonlarındaki değişim incelenmiştir. Özellikle, is (kurum) oluşumuna öncülük eden ve ara ürünlerden biri olan asetilenin (C_2H_2) oluşumu üzerinde stokiometrinin ve reaktant giriş sıcaklığının etkileri daha detaylı olarak ele alınmıştır. Bunun için, olayı tanımlayan diferansiyel formdaki korunum denklemleri, sonlu farklar yöntemiyle cebrik foksiyonlar haline getirilmiş ve sayısal olarak çözülmüştür. Herhangi bir çözüm noktası için kinetik koşullarda, bileşen konsantrasyonları, CREK adlı bir bilgisayar programı yardımıyla hesaplanmıştır. Taşınım büyüklüklerinin (transport coefficient) hesaplanması için Fortran-77 kodunda bir bilgisayar programı geliştirilmiştir. Bileşenlere ait termokimyasal özelliklerin hesaplanmasında, JANAF tablolarından elde edilen polinom uyum katsayıları kullanılmıştır.

Anahtar Kelimeler : Propan yanması, düzlemsel alev, reaksiyon mekanizması *Key Words* : Propane combustion, flat flame, reaction mechanism

67100 / ZONGULDAK 80750 / Yıldız, ÝSTANBUL

¹ Mühendislik Fakültesi, Makina Müh. Bölümü

² Makina Fakültesi

GİRİŞ

Yanma ile ilgili deneysel çalışmalar oldukça pahalıya mal olmaktadır. Maliyeti düşürmek için, daha önce yapılmış çalışmaların sonuçlarından yararlanılarak bilgisayarla deney şartlarının modellenmesi yoluna gidilebilir. Bilgisayarla yapılacak ön deneyler, laboratuvar ortamında yapılması zorunlu olan deney sayısını azaltmakta ve böylece zaman ve para tasarrufu sağlamaktadır. Ancak bunun için de gelişmiş bilgisayarlara ve yeter sayıda elementer reaksiyona ait kinetik verilerin bulunmasına gerek duyulmaktadır. Kimyasal kinetik modelleme son yıllarda yanma olayının analizinde önemli bir araç olmuştur. Bu çalışmada literatürde bulunan bir global ve 83 elementer reaksiyondan oluşan bir mekanizma ile propan (C_3H_8) yanması, reaktant giriş sıcaklığı (T_u) 298 K ile 550 K arasında, yakıt/hava eşedeğer oranı da 1 ile 2.5 arasında değiştirilmek üzere incelenmiştir.

Literatür incelemesinden pek çok araştırmacının değişik amaçlar için değişik yöntemler kullanarak propan yanmasını incelemiş olduğu görülmektedir. Bunker et al. [1], 18 bileşen ve 37 elementer reaksiyondan oluşan bir reaksiyon mekanizması kullanarak propan yanmasını teorik olarak incelemislerdir. Ancak kullandıkları mekanizmada bileşen olarak asetielen (C₂H₂) bulunmamaktadır. Warnatz [2], hidrokarbonların oksidasyonunu deneysel ve teorik olarak incelediği çalışmasında, propan oluşumu ve tüketimine ait temel reksiyonları vermiştir. Warnatz, propan için kurduğu modelin sonuçlarını, Fristrom et al.'ın P=0.25 bar basınçta, reaktant giriş sıcaklığı T_u = 298 K olmak üzere, kararlı hal şartlarında ve laminar düzlemsel alev üzerinde yaptıkları deneysel çalışmalardan elde ettikleri sonuçlarla kıyaslamıştır. Ayrıca Jones and Lindstedt [3] ve Sloane [4] de propan için yaptıkları modelleme çalışmalarından elde ettikleri sonuçları Fristrom et al.'ın aynı deneysel sonuçlarıyla kıyaslamışlartır. Fristrom et al.'ın 1957 yılında yaptığı deneylere ait değerler yukarıda değinilen yayınlardan alınarak bu çalışmada da kullanılmıştır. Westbrook et al. [5] gaz detonasyonunda propan oksidasyonunu 163 reaksiyonlu mekanizma ile teorik olarak incelemişlerdir. Westbrook bir başka grup ile [6] sunduğu çalışmasında propanla beraber pek çok yakıta ait detaylı kimyasal kinetik verilerle beraber, ön karışımlı laminar alevler için tek adımlı global kinetik veriler de vermiştir. Jachimowski [7], 27 bileşen ve 83 reaksiyondan oluşan mekanizma ile propan yanmasını incelemistir. Jachimowski bu çlışmasında şok tüpü deneylerinin bilgisayar simülasyonunu yapmış ve stokiometrik şartlarda hesaplanan sonuçların, deney sonuçlarına iyi bir uyum sağladığını bildirmiştir.

REAKSİYON MEKANİZMASI

Kullanılan bilgisayarın ve CREK programının getirdiği kısıtlamalar çerçevesinde bir kaç değişik reaksiyon mekanizması denenmiş, ancak en iyi sonuçlar Jachimowski'nin [7] verdiği mekanizmaya, bir global reaksiyon eklenerek elde edilen yeni mekanizma ile elde edilmiştir. Global reaksiyonun genel formu,

$$C_n H_{2n+2} + n H_2 O \rightarrow n CO + (2n+1) H_2$$
(1)

şeklindedir ve bu reaksiyon için hız ifadesi,

 $R = A \exp(-E/RT) [X_{C3H8}]^a [X_{O2}]^b$ (2)

formülüyle verilmiştir. Burada R hız ifadesini, *A*, *a* ve *b* deneysel olarak tespit edilen birer parametreyi, *E* aktivasyon enerjisini, *R* gaz sabitini, *T* sıcaklığı, [X_i] *i* bileşeninin mol sayısını, ifade etmektedir. Hız sabiti parametreleri (*A*, *E*, *a*, *b*) için literatürde değişik değerler bulunmaktadır ([3], [6]). *A* için verilen değerler 3.8×10^{11} ile 8.6×10^{11} (mol cm⁻³·s⁻¹) arasında değişmektedir. Aktivasyon enerjisi (*E*) için 125.5 kJ/mol değeri verilmiştir. Hesaplamalarımızda *A* için 4.0×10^{11} değeri ve aktivasyon enerjisi için de burada verilen değerlerin dışında olarak, 133.0 kJ/mol değeri kullanılarak daha iyi sonuçlar alınmıştır. Kullanılan mekanizmaya ait bütün reaksiyonlar ve kinetik dataları Tablo 1'de verilmiştir.

MATEMATİKSEL MODEL

Çok bileşenli reaktif sistemler için korunum denklemleri, en genel haliyle oldukça karmaşık olup, çözüm için belirli kabullerin yapılmasını gerektirirler. Bu çalışmada, alev yapısının daha kolay anlaşılması ve daha çok deneysel verilerin bulunabildiği dikkate alınarak ön karışımlı, laminar düzlemsel bir alev, tek boyutlu ve kararlı hal şartları altında teorik olarak modellenmiştir. Bunun için aşağıdaki kabullerin de yapılmasıyla korunum denklemleri daha kolay çözülebilir hale getirilmiştir.

Tablo 1^{*}

No.	Reaksiy	on							logA	(mol, cm, s)	n	$E (\text{kcal/mol})^{**}$
1	СЗН8	+	02		\rightarrow	СО	+	Н2		11.6	0.0	16000. GLOBAL
2	СЗН8	+		М	\rightarrow	C2H5	+	СНЗ	М	16.6	0.0	84.8
3	СЗН8	+	02		\rightarrow	СЗН7	+	HO2		13.0	0.0	52.0
4	СЗН8	+	02		\rightarrow	H7C3	+	HO2		12.5	0.0	52.0
5	CH3	+	СЗН8		\rightarrow	C3H7	+	CH4		12.5	0.0	11.4
6	CH3	+	СЗН8		\rightarrow	H7C3	+	CH4		11.9	0.0	8.6
7	Н	+	СЗН8		\rightarrow	C3H7	+	Н2		13.7	0.0	9.1
8	Н	+	СЗН8		\rightarrow	H7C3	+	Н2		13.1	0.0	6.4
9	0	+	СЗН8		\rightarrow	C3H7	+	OH		13.6	0.0	11.1
10	0	+	СЗН8		\rightarrow	Н7СЗ	+	OH		13.0	0.0	8.4
11	HO2	+	СЗН8		\rightarrow	C3H7	+	Н2О2		11.8	0.0	10.5
12	HO2	+	СЗН8		\rightarrow	H7C3	+	Н2О2		11.3	0.0	10.5
13	C3H7	+		М	\rightarrow	C2H4	+	CH3	М	13.6	0.0	33.2
14	H7C3	+		М	\rightarrow	C2H4	+	CH3	М	12.0	0.0	34.5
15	C3H7	+		М	\rightarrow	СЗН6	+	Н	М	13.8	0.0	38.0
16	H7C3	+		М	\rightarrow	СЗНб	+	Н	М	14.3	0.0	41.3
17	C3H7	+	02		\rightarrow	СЗН6	+	HO2		12.0	0.0	5.0
18	H7C3	+	02		\rightarrow	СЗНб	+	HO2		12.0	0.0	5.0
19	CH3	+	СЗНб		\rightarrow	C3H5	+	CH4		12.4	0.0	5.4
20	Н	+	СЗН6		\rightarrow	C2H4	+	СНЗ		12.6	0.0	0.0
21	Н	+	СЗНб		\rightarrow	C3H5	+	Н2		13.7	0.0	5.0
22	OH	+	СЗН5		\rightarrow	C2H4	+	CH2O		13.0	0.0	0.0
23	0	+	СЗНб		\rightarrow	C2H5	+	HCO		13.4	0.0	2.7
24	OH	+	СЗН6		\rightarrow	C2H5	+	CH2O		13.0	0.0	0.0
25	C2H5	+		М	\rightarrow	C2H4	+	Н	М	13.5	0.0	40.7
26	CH4	+		М	\rightarrow	CH3	+	Н	М	17.1	0.0	88.4
27	Н	+	CH4		\rightarrow	CH3	+	H2		14.8	0.0	15.1
28	0	+	CH4		\rightarrow	CH3	+	OH		14.6	0.0	14.0
29	OH	+	CH4		\rightarrow	CH3	+	H2O		13.5	0.0	6.0
30	CH3	+	0		\rightarrow	CH2O	+	Н		14.1	0.0	2.0
31	CH3	+	02		\rightarrow	CH3O	+	0		13.4	0.0	29.0
32	CH3	+	HO2		\rightarrow	CH3O	+	OH		13.2	0.0	0.0
33	CH3	+	OH		\rightarrow	CH2O	+	H2		12.6	0.0	0.0
34	CH3O	+		М	\rightarrow	CH2O	+	Н	М	13.7	0.0	21.0
35	CH3O	+	02		\rightarrow	CH2O	+	HO2		12.0	0.0	6.0
36	СНЗ	+	CH3	М	\rightarrow	C2H6	+		М	12.8	0.0	-1.0
37	CH3	+	C2H6		\rightarrow	C2H5	+	CH4		-0.3	4.0	8.3
38	Н	+	C2H6		\rightarrow	C2H5	+	Н2		7.5	2.0	6.9
39	0	+	C2H6		\rightarrow	C2H5	+	OH		13.2	0.0	6.1
40	OH	+	C2H6		\rightarrow	C2H5	+	H2O		13.8	0.0	3.6
41	HO2	+	C2H6		\rightarrow	C2H5	+	Н2О2		12.0	0.0	14.0
42	C2H5	+	02		\rightarrow	C2H4	+	HO2		12.0	0.0	5.0
43	Н	+	C2H5		\rightarrow	CH3	+	CH3		13.0	0.0	0.0

 C_3H_8 – Hava alevinin modellemesinde kullanılan reaksiyon mekanizması ve ileri reaksiyon hız katsayıları. $k=AT^n\exp(-E/RT)$

Tablo 1^{*} (Devam ediyor)

No.	Reaksiy	on							logA	(mol, cm, s)	n	Ε	(kcal/mol)**
44	Н	+	C2H5		\rightarrow	H2	+	C2H4		13.7	0.0		0.0
45	Н	+	C2H4		\rightarrow	С2НЗ	+	Н2		14.0	0.0		8.5
46	0	+	C2H4		\rightarrow	СНЗ	+	НСО		13.4	0.0		2.7
47	С2НЗ	+		М	\rightarrow	C2H2	+	Н	М	14.9	0.0		31.5
48	Н	+	C2H2		\rightarrow	C2H	+	Н2		14.3	0.0		19.0
49	0	+	C2H2		\rightarrow	CH2	+	СО		13.7	0.0		3.7
50	OH	+	C2H2		\rightarrow	C2H	+	Н2О		12.8	0.0		7.0
51	C2H	+	02		\rightarrow	НСО	+	СО		13.0	0.0		7.0
52	CH2	+	02		\rightarrow	HCO	+	OH		14.0	0.0		3.7
53	Н	+	CH2O		\rightarrow	НСО	+	Н2		14.5	0.0		10.5
54	0	+	CH2O		\rightarrow	НСО	+	OH		13.3	0.0		3.1
55	OH	+	CH2O		\rightarrow	НСО	+	Н2О		12.9	0.0		0.2
56	HO2	+	CH2O		\rightarrow	НСО	+	Н2О2		12.1	0.0		8.0
57	HCO	+		М	\rightarrow	CO	+	Н	М	14.7	0.0		19.0
58	0	+	нсо		\rightarrow	СО	+	ОН		14.0	0.0		0.0
59	OH	+	CO		\rightarrow	CO2	+	H		7.2	1.3		-0.7
60	но2	+	СО		\rightarrow	CO2	+	ОН		14.2	0.0		23.6
61	СО	+	0	М	\rightarrow	CO2	+		М	15.4	0.0		4.4
62	Н	+	02		\rightarrow	ОН	+	0		17.1	-0.9		16.6
63	ОН	+	Н2		\rightarrow	Н2О	+	Н		7.5	1.8		3.0
64	0	+	Н2		\rightarrow	OH	+	Н		14.3	0.0		13.8
65	Н	+	Н	М	\rightarrow	Н2	+		М	17.8	-1.0		0.0
66	Н	+	02	М	\rightarrow	HO2	+		М	18.5	-1.0		0.0
67	Н	+	HO2		\rightarrow	Н2	+	02		13.4	0.0		0.7
68	Н	+	HO2		\rightarrow	ОН	+	ОН		14.7	0.0		1.8
69	0	+	HO2		\rightarrow	ОН	+	02		13.7	0.0		1.0
70	HO2	+	HO2		\rightarrow	Н2О2	+	02		12.3	0.0		0.0
71	HO2	+	Н2		\rightarrow	н202	+	Н		11.5	0.0		18.7
72	Н2О2	+		М	\rightarrow	OH	+	OH	М	17.1	0.0		45.5
73	0	+	н202		\rightarrow	HO2	+	ОН		13.3	0.0		5.9
74	ОН	+	нсо		\rightarrow	CO	+	Н2О		14.0	0.0		0.0
75	Н	+	н202		\rightarrow	Н2О	+	ОН		12.7	0.0		9.9
76	OH	+	H2O2		\rightarrow	HO2	+	н20		13.0	0.0		1.9
77	OH	+	СЗН8		\rightarrow	СЗН7	+	Н2О		4.7	2.7		0.1
78	ОН	+	СЗН8		\rightarrow	н7СЗ	+	Н2О		3.7	2.8		-1.7
79	ОН	+	HO2		\rightarrow	Н20	+	02		13.7	0.0		1.0
80	ОН	+	С2Н4		\rightarrow	С2Н3	+	н20		14.0	0.0		3.5
81	HCO	+	02		\rightarrow	CO	+	HO2		12.5	0.0		7.0
82	OH	+	OH		\rightarrow	Н2О	+	0		13.7	0.0		7.0
83	H	+	OH	М	\rightarrow	н20	+		М	22.3	-2.0		0.0
84	Н	+	HCO		\rightarrow	CO	+	Н2		14.3	0.0		0.0

 C_3H_8 – Hava alevinin modellemesinde kullanılan reaksiyon mekanizması ve ileri reaksiyon hız katsayıları. $k=AT^n\exp(-E/\mathbf{R}T)$

* : C₃H₇ = normal propili, H₇C₃ = izopropili göstermektedir (M = Third body).
** : Global reaksiyon için *E* kolonunda verilen değer; *E/R* olarak boyutsuz aktivasyon sıcaklığını ifade eder.

Kabuller:

a) Dış kuvvetler ihmal ediliyor,	b) Soret ve Dufour etkileri ihmal ediliyor,
c) Harici 151 ilavesi yok,	d) Viskoz etkiler ihmal ediliyor,
e) Lewis sayısı (Le) 1'e eşit,	f) Bütün ikili difüzyon katsayıları $(D_{i,j})$ eşit.

Bu kabullerin ışığı altında korunum denklemleri:

Süreklilik denklemi,

$$(\rho u) = SABIT \qquad \Rightarrow \qquad \rho u = m$$
(3)

Herhangi bir *i* bileşeni için süreklilik denklemi,

$$\rho u \frac{dY_i}{dx} - \rho D \frac{d^2 Y_i}{dx^2} = \omega_i \tag{4}$$

Enerjinin korunumu denklemi,

$$\rho u \frac{d}{dx} \int_{T^0}^T C_p dT - \rho D \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \int_{T^0}^T C_p dT \right) = -\sum_{i=1}^{NS} h_{f,i}^0 \omega_i$$
(5)

şeklinde, elde edilir. Shvab-Zel'Dovich formülasyonu yardımıyla elde edilen bu denklemlerin çıkarılmasına ait ara işlemler, sayfa sınırlaması nedeniyle burada verilmemiştir.

Bu denklemlerde; *u* akış hızını, ρ yoğunluğu, *m* sabit kütleselyi, ω_i *i* bileşeninin kimyasal reaksiyon sonucu kütlesel bazda üreme miktarını, Y_i *i* bileşenine ait kütlesel oranı, *D* difüzyon katsayısını, *x* alev ekseni boyunca mesafeyi, *T* sıcaklığı, C_p sabit basınçta ısınma ısısını, $h_{f,i}^o$ *i* bileşenine ait standart oluşum entalpisini, T^o standart sıcaklığı ifade etmektedirler.

Yukarıdaki formüllerin sonlu farklar cinsinden oluşturulmuş halini CREK [8] ile beraber çözen bir bilgisayar programı (DUZALEV) daha önce tarafımızdan geliştirilmiştir [9]. CREK, laminar veya türbülanslı akış halinde, denge ve kinetik koşullarda kimyasal reaksiyon hesabı yapan, FORTRAN kodunda oluşturulmuş bir alt programdır. CREK alt programı kendisini çağıran ana

programda, bileşen ve enerji korunumu denklemlerinin, sonlu fark yöntemi kullanılarak, belirli bir formda çözülmüş olmasını gerektirmektedir. Bu işlemi DUZALEV yapmaktadır.

Denklemlerin Sonlu Farklar Cinsinden İfade Edilmesi

Bunun için tek boyutlu akış alanı, akış ekseni boyunca eşit aralıklarla ayrık çözüm noktalarına (grid-point) bölünür (Şekil 1). Bu çözüm noktaları için sonlu farklar kurallarına uyularak (4) Denklemi, bir P noktası için aşağıdaki şekilde elde edilebilir:

$$\left(\frac{2\rho D}{(\Delta x)^2}\right)^{\mathrm{P}} Y_i^{\mathrm{P}} = \left(\frac{\rho D}{(\Delta x)^2} - \frac{\rho u}{2(\Delta x)}\right)^{\mathrm{E}} Y_i^{\mathrm{E}} + \left(\frac{\rho D}{(\Delta x)^2} + \frac{\rho u}{2(\Delta x)}\right)^{\mathrm{W}} Y_i^{\mathrm{W}} + \omega_i$$
(6)



Şekil 1. Tek boyutlu akış halinde sonlu farklar ile çözüm noktaları.

(6) Denkleminin CREK ile çözülebilmesi için Y_i kütlesel oranlarının yerine mol sayılarının ve k $g_i/(kg\cdot s)$ cinsinden olan ω_i yerine de kmol $_i/(kg\cdot s)$ cinsinden üretim terimi getirilmelidir. Bunun için; $\omega_i = G_i W_i$ yazılır, dönüşüm formüllerinden, $Y_i/W_i = [X_i]/\rho$ olduğu bilinmektedir ve L $e = \lambda/(\rho DC_p) = 1$ 'den $\rho \times D = \lambda/C_p$ elde edilir. Bütün bunlar (6) denklemine taşınırsa ,

$$\left(\frac{2\lambda}{C_{p}(\Delta x)^{2}}\right)^{P} \frac{\left[X_{i}^{P}\right]}{\rho} = \left(\frac{\lambda}{C_{p}(\Delta x)^{2}} - \frac{\rho u}{2(\Delta x)}\right)^{E} \frac{\left[X_{i}^{E}\right]}{\rho} + \left(\frac{\lambda}{C_{p}(\Delta x)^{2}} + \frac{\rho u}{2(\Delta x)}\right)^{W} \frac{\left[X_{i}^{W}\right]}{\rho} + G_{i}$$
(7)

denklemi elde edilir.

(7) Denklemindeki $[X_i]/\rho$ terimi kmol_i/kg olarak *i* bileşenine ait konsantrasyonu, G_i kmol_i/(kg·s) olarak mol cinsinden üretim miktarını ve λ ısı iletim katsayısını ifade etmektedir.

Benzer işlemler enerji denklemi için de yapılarak, bileşen ve enerjinin korunumu denklemleri, tesbit edilen sınır şartları yardımıyla, DUZALEV yardımıyla beraberce çözülmüşlerdir.

Taşınım Büyüklükleri ve Termokimyasal Veriler

Bileşenlere ve gaz karışımlarına ait ısınma ısısı ve entalpi gibi büyüklükler JANAF tablolarından elde edilen ve literatürde bulunan polinom uyum katsayıları kullanılarak, CREK bünyesindeki HCPS alt programıyla hesaplanmıştır. Gaz karışımları için ısı iletim katsayısı,

$$\lambda = 0.5 \left[\sum_{i} X_{i} \lambda_{i} + \left(X_{i} / \lambda_{i} \right)^{-1} \right]$$
(8)

ifadesi ile hesaplanmıştır. Burada, λ_i herhangi bir *i* bileşeninin ısı iletim katsayısını, X_i mol oranını göstermektedir. λ_I Lennard-Jones parametreleri kullanılarak, daha önce geliştirmiş olduğumuz CONDVISC ile hesaplanmıştır. Bu konuya ait detaylar [9]'da verilmiştir.

SONUÇLAR

DUZALEV [9] programı ile Tablo 2'de verilen reaksiyon mekanizması kullanılarak elde edilen sonuçlar aşağıda sunulmuştur. Şekil 2 ve 3'teki grafikler, P=1 bar basınç ve reaktant giriş sıcaklığı $T_u=298$ K olmak üzere, stokiometrik şartlarda yapılan hesaplamalara aittir. Her iki şekilde de içi boş ve dolu semboller Bechtel et al.'ın deneysel verilerine ait olup, [3]'den

okunmuşlardır. Şekil 2'de C_3H_8 , CO_2 ve H_2 'nin, Şekil 3'de O_2 , H_2O ve CO'in mol oranlarındaki değişim görülmektedir. Şekil 2 ve 3'ün incelenmesinden, ana bileşenlere ait bilgisayar sonuçlarının deney sonuçlarına yeterli derece uyum sağladıkları söylenebilir.

Basınç 0.25 bar ve reaktant giriş sıcaklığı 298 K için stokiometrik halde elde edilen sonuçların verildiği Şekil 4'de, semboller [3]'den alınmış olup Fristrom et al.'ın deneysel verilerine aittir. Buradaki uyum



Şekil 2 Ön karışımlı, stokiometrik propan-hava alevinde bileşen mol oranları dağılımları.

daha kötü olmakla beraber kabul edilebilir mertebededir.

Bu çalışmada reaktant giriş sıcaklığı 298 K ile 550 K arasında ve yakıt/hava eşdeğer oranı 1 ile 2.5 arasında olmak üzere hesaplamalar yapılmıştır. Giriş sıcaklığının artmasıyla asetilen mol oranının pik değeri fazla değişmediği, ancak alev kalınlığında az da olsa küçülme olduğu görülmüştür. Çıkış sıcaklığı, giriş sıcaklığındaki artışa bağlı olarak daha az oranda artmıştır (Şekil 5).



Şekil 3 Ön karışımlı, stokiometrik propan-hava alevinde bileşen mol oranları dağılımları.



Şekil 4 Ön karışımlı, stokiometrik propanhava alevi. (P=0.25 bar, $T_u=298$ K)



Şekil 5 Ön karışımlı, stokiometrik propan-hava alevinde asetilen mol oranı ve sıcaklık profilleri. (*P*=1 bar)

Reaktant giriş sıcaklığı 298 K ve basınç 1 bar sabit tutularak, Yakıt/hava eşdeğer oranının 1, 1.5, 2 ve 2.5 değerleri için yapılan hesaplamalarda, karışım zenginleştikçe asetilen mol oranının azaldığı görülmüştür. Bu konu üzerindeki çalışmalarımız devam etmektedir.

SEMBOLLER

A, a, b	: Reaksiyon hız sabiti parametreleri		C_p : Sabit basınçta ısınma ısısı
D	: Difüzyon katsayısı		G : Molar bazda kimyasal oluşum hızı
Le	: Lewis sayısı		<i>NS</i> : Toplam bileşen sayısı
Р	: Basınç		R : Reaksiyon hızı ifadesi
R	: Gaz sabiti	Т	: Sıcaklık
[X]	: Mol sayısı	X	: Mol oranı
Y	: Kütlesel oran (kütle oranı)	W	: Molekül ağırlığı (kütlesi)
$h^o_{f,i}$: Standart oluşum entalpisi	k	: Reaksiyon hızı sabiti
m	: Kütlesel debi	n	: Stokiometrik katsayılar
n	: Reaksiyon hız sabitinde sıcaklığın ü	issü	
и	: Akış hızı	x	: Alev ekseni boyunca mesafe
ρ	: Yoğunluk	λ	: Isı iletim katsayısı
ω	: Kütlesel bazda kimyasal oluşum hız	21	

KAYNAKLAR

- [1] Bunker, D.L., Garrett, B., Kleindienst, T., and Stevenson, G., (1974), Discrete Simulation Methods in Combustion Kinetic, Combustion and Flame, <u>23</u>: 373-379.
- [2] Warnatz, J., (1983), Hydrocarbon Oxidation at High Temperature, Ber. Bunsenges. Phys. Chem. <u>87</u>, 1008-1022.
- [3] Jones, W.P., and Lindstedt, R.P., (1988), Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion, Combustion and Flame, <u>73</u>: 233-249.
- [4] Sloane, T.M., (1992), Ignition and Flame Propogation Modeling with an Improved Propane Oxidation Mechanism, Combust. Sci. and Tech., <u>Vol. 83</u>, pp. 77-96.
- [5] Westbrook, C. K., Pitz, W. J., and Urtiew, P. A., (1983), International Colloquium on Gasdynamics of Explosions and Reactive Systems (<u>9th</u>, Poitiers, France).
- [6] Westbrook, C. K. and Dryer, F., (1984), Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion, Prog. Energy Combust. Sci., <u>Vol. 10</u>, pp.1-57.
- [7] Jachimowski, C. J., (1984), Chemical Kinetik Reaction Mechanism for the Comustion of Propane, Combustion and Flame, <u>55</u>: 213-224.
- [8] Pratt, D. T., Wormeck, J. J., (1976), CREK : A Computer Program for Calculation of Combustion Reaction Equilibrium in Laminar or Turbulent Flow, Report WSU-ME-TEL-76-1, Washington State University.
- [9] Eyriboyun, M., Endüstriyel Alevlerde İs Oluşumunun İncelenmesi, Doktora Tezi Çalışması. YTÜ Fen Bilimleri Ens. İSTANBUL.