

75499

**PÜSKÜRTMELİ KURUTUCUDA TRONA
ÇÖZELTİSİ İLE YAPILAN DESÜLFÜRİZASYON
ÇALIŞMALARI VE CFD SİMÜLASYONU**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Kimya Müh.S.Celal KARAKAŞ

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 23 Mart 1998

Tezin Savunulduğu Tarih : 27 Mart 1998

Tez Danışma : Doç.Dr.Gülhayat NASÜN-SAYGILI

Diğer Jüri Üyeleri : Prof.Dr. Nuran DEVECİ

Prof.Dr. Hüsnü ATA KÜL

gph 17.4.1998

GOZULMEK
YÖNÜNDEN

MART 1998

ÖNSÖZ

Yapılan bu çalışmada PHOENICS programı kullanılarak CFD yöntemi ile püskürtmeli kurutucuda gaz tutma çalışmaları modellenmiştir.

Böyle bir konuda bana çalışma fırsatı vererek çalışmalarında yol gösteren ve karşılaştığım güçlüklerin giderilmesinde yardımlarını esirgemeyen danışman hocam Sayın Doç. Dr.Gülhayat Nasün Saygılı'ya en içten teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarım sırasında yardımlarını esirgemeyen, Kimya Müh. Eyüp Sarı'ya, Kimya Müh. Sait Taşçı'ya, Kimya Yük. Müh. Melkon Tatlıer'e, teşekkürü bir borç bilirim.

Yaşantımın her aşamasında yanımda olan, maddi ve manevi desteğini esirgemeyen aileme teşekkür ederim.

Ocak 1998

S.CELAL KARAKAŞ

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
ÖNSÖZ	ii
SEMBOL LİSTESİ	v
ŞEKİL LİSTESİ	vii
TABLO LİSTESİ	ix
ÖZET	x
SUMMARY	xi
BÖLÜM 1. GİRİŞ VE AMAÇ	1
1.1. CFD'nin Tanımı ve Önemi	1
1.2. CFD'nin Tarihçesi	12
1.3. CFD'nin Kullanım Alanları	16
1.4. CFD'nin Kimya Mühendisliğindeki Yeri	17
BÖLÜM 2. TRONA MİNERALİ	18
2.1. Trona Mineralinin Özellikleri	18
2.2. Tronanın Kullanım Alanları	22
2.3. Beypazarı Trona Minerali	22
BÖLÜM 3. PÜSKÜRTMELİ KURUTUCU	28
3.1. Püskürtmeli Kurutucu Hakkında Genel Bilgi	28
3.2. Püskürtmeli Kutucunun Çalışma Prensipleri	29
3.3. Püskürtmeli Kurutucuda Gaz Tutma Çalışmaları	30

BÖLÜM 4.	DENEYSEL BÖLÜM	34
4.1.	Deney Düzeneği	34
4.2.	Deneysel Çalışma	35
4.3.	Analiz Yöntemleri	35
4.3.1.	Sodyum Oksit Tayini	35
4.3.2.	Sodyum Bikarbonat Tayini	36
4.3.3.	Sodyum Karbonat Tayini	36
4.3.4.	Sodyum Sülfat Tayini	36
4.3.5.	Sodyum Klorür Tayini	37
4.3.6.	Suda Çözünmeyenler	38
BÖLÜM 5	DENEY SONUÇLARI VE DEĞERLENDİRİLMESİ	39
BÖLÜM 6	PHOENICS PAKET PROGRAMI	45
6.1.	Programın Tanıtılması	45
6.2.	Programda Kullanılan Sayısal Yöntemler	46
6.2.1.	Sonlu Farklar Yöntemi	47
6.2.2.	Sonlu Elemanlar Yöntemi	50
6.2.3.	Sonlu Hacimler Yöntemi	54
6.3.	Programın Ana Bölümleri	54
6.3.1.	Q1 Dosyası	54
6.3.2.	Satellite	57
6.3.3.	Earth	58
6.3.4.	Photon	58
BÖLÜM 7	PÜSKÜRTMELİ KURUTUCUDA GAZ TUTMA PROBLEMİNİN CFD İLE MODELLENMESİ	59
7.1.	Problem Tanıtılması	59
7.2.	PHOENICS Paket Programının Uygulama Aşamaları	66
7.2.1.	Pre-Processor Bölümü ve Q1 Dosyasının Hazırlanması	68
7.2.2.	Processor Bölümü Dataları ve Gözlemleri	77
7.2.3.	Post-Processor Bölümü	77
7.3.	Sonuçlar ve Değerlendirilmesi	77
BÖLÜM 8.	GENEL SONUÇLAR	95
Ekler		

ŞEKİL LİSTESİ

- Şekil 2.1. $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-NaHCO}_3\text{-H}_2\text{O}$ Üçlü Sistemi.
- Şekil 2.2. 1 atm. ve 25°C'deki $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-NaHCO}_3\text{-H}_2\text{O}$ Sisteminin Faz Diyagramı
- Şekil 3.1. Püskürtmeli Kurutucu.
- Şekil 4.1. Deney Düzenegi.
- Şekil 5.1. Na/S oranının çeşitli besleme konsantrasyonları için SO_2 giderimine etkisi
- Şekil 5.2. Çıkış sıcaklığının SO_2 giderimine etkisi
- Şekil 5.3. Na/S=1.5 için Ürün bileşimi yüzdesi-Trona çözelti konsantrasyonu
- Şekil 5.4. Na/S=2 için Ürün bileşimi yüzdesi-Trona çözelti konsantrasyonu
- Şekil 5.5. Na/S=2.5 için Ürün bileşimi yüzdesi-Trona çözelti konsantrasyonu
- Şekil 6.1. Taylor Serileri İçin Noktaların Yerleşimi.
- Şekil 6.2. İki Gridli Lineer Eleman.
- Şekil 7.1. Programın Ana Menüsü.
- Şekil 7.2. Satellite Bölümünün Ana Menüsü.
- Şekil 7.3. General Menu.
- Şekil 7.4. Gentra Menu.
- Şekil 7.5. Kuruma hızı eğrisi
- Şekil 7.6. Püskürtmeli kurutucuda 200°C giriş sıcaklığında buharlaşma şiddeti
- Şekil 7.7. Püskürtmeli kurutucuda 250°C giriş sıcaklığında buharlaşma şiddeti

- Şekil 7.8. Püskürtmeli kurutucuda 300°C giriş sıcaklığında buharlaşma şiddeti
- Şekil 7.9. Püskürtmeli kurutucuda 200°C giriş sıcaklığında kütle fraksiyonu dağılımı
- Şekil 7.10. Püskürtmeli kurutucuda 250°C giriş sıcaklığında kütle fraksiyonu dağılımı
- Şekil 7.11. Püskürtmeli kurutucuda 300°C giriş sıcaklığında kütle fraksiyonu dağılımı
- Şekil 7.12. Püskürtmeli kurutucuda 200°C giriş sıcaklığında ısı değişimleri
- Şekil 7.13. Püskürtmeli kurutucuda 250°C giriş sıcaklığında ısı değişimleri
- Şekil 7.14. Püskürtmeli kurutucuda 300°C giriş sıcaklığında ısı değişimleri
- Şekil 7.15. Püskürtmeli kurutucuda hız vektörleri
- Şekil 7.16. Püskürtmeli kurutucuda düşey hız contourları
- Şekil 7.17. Püskürtmeli kurutucuda hız vektörleri dağılımı deneysel ve nümerik sonuçlar

TABLO LİSTESİ

5.1. Püskürtmeli Kurutucuda Deney Şartları

5.2. İki farklı çıkış sıcaklığında ürün bileşimi

5.3. Desülfürizasyon çalışmalarında üründeki Na_2SO_3 / Na_2SO_4 oranları

7.1. Hesaplama Sonuçları



ÖZET

Hesaplamalı mekanik günümüzde mühendislik eğitim programlarına girmeyi başarmış bir bilim dalıdır. Bilgisayar imkanlarının mühendislik alanında kullanılmaya başlanması sonucu bir çok yeni eğitim alanında gelişme sağlanmıştır. Bu alanlardan bir tanesinde CFD'dir.

Bu yeni yaklaşım akışkanlar mekaniğinin temel denklemlerinin çözümü için ileri matematik yöntemlerin gelişmesini sağlamıştır. CFD yöntemlerinin endüstriyel uygulamalarda eşanlı mühendislik (cocurrent engineering) kavramına uygun olması sonucu imalat öncesi benzeşim ve analiz yaygınlaşmıştır.

Bilgisayar teknolojisindeki gelişmeler sonucu, deneysel ağırlıklı akışkanlar mekaniği analiz yöntemleri ile bilgisayar desteğinde modelleme teknikleri arasındaki yarış her geçen gün artmaktadır. Bilgisayarların daha yaygın ve kolay elde edilebilir olması ve deneysel çalışmaların zorlukları ve uzun zaman alması ister istemez araştırmacıları CFD uygulamalarına yöneltmiştir. Çünkü deney öncesi bir çok ön sonuç yeterli hassasiyetlerle bilgisayar desteğinde hesaplanabilmektedir.

PHOENICS adındaki CFD programı ile kimya mühendisliğinde sıkça kullanılan püskürtmeli kurutucu (Spray Dryer) modellenmiştir. Bu model kullanılarak püskürtmeli kurutucuda trona çözeltisi ile kükürt dioksitin tutulması incelenmiştir. Modelin kurulmasında kurulması için gerekli veriler programa yerleştirilmiştir. Trona çözeltisi programa dispers faz olarak programa yerleştirilirken, hava-SO₂ karışımı ise sürekli faz olarak programa girilmiştir.

SUMMARY

In many branches of engineering, there has to be an understanding of the motion of fluids. One classic example of this is in the aircraft industry, where the aerodynamics of an aircraft must be determined; i.e., the lift, drag and sideforces of a design must be estimated before a prototype flies. This ensures that the lift available will be sufficient to carry the weight of the loaded aircraft, that the required power of the engines can be determined together with the aircraft's fuel economy and that the motion of the aircraft can be predicted. To obtain this aerodynamic data many models of the design could be built and tested in a wind tunnel, with the model positioned in many orientations to the flow. Such tests might consume many hours of wind tunnel time and cost many thousands or millions of pounds.

As the equations that govern fluid motion are known, numerical approximations can be made to these equations, and, with the arrival of powerful computer hardware and software, some of the aerodynamics estimations can be made using these computer tools. This does not mean that wind tunnels are redundant.

In reality, when computers and experiments are both used to produce predictions, engineers often choose to reduce the amount of wind tunnel time. Sometimes, however, the wind tunnels are used just as much as they would have been if they had been used alone. In both of these cases, wind tunnels can be used to investigate the problems that are too difficult to solve with the computational techniques, and there are many such problems. Effectively, the use of computers releases wind tunnel time and this can be used to investigate the really difficult aerodynamics problems that could not be tackled before.

Whilst this combination of experimental and computational investigations has been used to determine an aircraft's aerodynamics for some time, the use of computers for fluid flow prediction in other industrial areas is less advanced.

Recently, however, other industries have been making the transition from purely experimental investigations to a mix of experimental and computational investigations. If we look at a variety of industrial sectors, such as aerospace, defence, power, process, automotive, electrical and civil engineering, there are many examples of areas where CFD is now used. For example, predictions can be made of the following:

- **Lift and drag of aircraft** : Engineers need the data for performance prediction. CFD is used in conjunction with wind tunnel tests to determine the performance of various configurations.
- **Flows over missiles** : This, again, is an area where there is a need for lift, drag and sideforce data, so that simulations of performance can be made. As with aircraft, CFD and

wind tunnel tests are used, but because of the wide range of flows that have to be simulated for a given configuration, use is also made of semi-empirical methods which are derived from large amounts of experimental data.

- **Jet flows inside nuclear reactor halls :** Such problems involve the simulation of fault conditions, and so engineers have great difficulty in performing actual experiments, for safety reasons. Hence, computation is the only way of trying to understand such flows.
- **Flames in burners :** There is a need to understand the complex interactions between fluid flow and chemical reaction in flames. This can assist in the production of more efficient designs for burners in boilers, furnaces and other heating devices.
- **Air flow inside internal combustion engines :** When air is used to burn fuel inside an internal combustion engine, be it a gas turbine engine, a petrol engine or a diesel engine, the air must be drawn into the chamber with the minimum amount of effort, and the flow of the air once it is in the chamber must be able to promote good burning. Hence, engineers need to know the pressure drop through a system and the velocity distribution in the combustion chamber.
- **Flow of cooling air inside electrical equipment :** In this problem, electrical devices, such as integrated circuits, produce heat. This heat must be dissipated if the equipment is not to become too hot. For example, the hot devices heat the air that surrounds them and this hot air rises, creating air currents that move the heat away from the sources of heat. If insufficient heat is moved away, then it may be necessary to add fans that will force air over the hot devices.
- **Dispersion of pollutants into rivers and oceans :** Various pollutants are discharged into rivers and oceans, and computer programs can be used to predict where pollutants will travel in these naturally occurring flows and what the pollutant concentration will be at given positions in the river or sea.

From this list, it is clear that the applications can be extremely varied in nature. Despite this, the computer predictions of the different problems can be made with computer software and hardware that is not specific to a given problem. Now that these computer tools are widely available, CFD has been brought out of the research laboratory and is used by many more people. It can even be used in the engineering design process.

The emphasis is, on engineering examples where the speed of the flow is low and the fluid is viscous, but where the flow does not include any heat transfer. This type of flow is very common throughout industry and it can be used as the basic model upon which can be built a number of modifications that account for other types of flow. For example, the flow speed might be such that the density of the fluid will change, or heat transfer or combustion might occur.

Over the last few years, many commercial CFD packages have become available. The emergence of these packages has meant that CFD is no longer practised solely in a research

environment by highly trained specialists, but it is also being used in many industrial organizations as a design tool. Consequently, engineers who are not specialists in the CFD field are having to come to terms with this technology, if only in an attempt to understand what the benefits of using the technology are, and also to understand what the drawbacks are.

As a subject, CFD can appear to be far removed from the experience of those who are not specialists in the field. The situation is not helped by the numerous books on the market that address the subject of CFD, which are mainly written for the theoretical engineer or applied mathematician who is interested in the details of how the equations that govern fluid flow are solved. No general text is, available for the less-specialized user of CFD techniques, or even for their managers.

There is a wide variety of people that have a need to be able to understand something about CFD techniques, be they computational analysts using CFD for the first time, design engineers interested in obtaining information about fluid motion, and even engineering managers or computer managers who provide the computational resources for CFD. Such people are invariably graduates, often with no formal background in CFD, or even in basic fluid mechanics. If these people are offered some sympathetic help and guidance, then they can understand the basics of CFD. It is the author's experience that undergraduate engineering students can successfully model fluid flow situations, if they are given appropriate background information as to what the CFD solution process is and how it is used to obtain predictions of the behaviour of fluids.

CFD can be used to produce predictions for a wide variety of flows, So that the basics of the subject can be clearly understood, particularly by those outside the aircraft industry, the content of this book has in the main been restricted to the class of problems that can be described as being viscous, incompressible flows.

These flows are slow speed flows where the fluid is not compressed and features such as shock waves do not occur, many industrial flow problems are of this type, and so most of the available CFD packages can simulate these flows.

When people use computers they can become so engrossed in the computational aspects of their work that everything else is excluded. For people who use CFD in an industrial environment this can be a disastrous mistake, as the computer hardware and software are merely tools to assist our understanding of the ways in which fluids flow and of the interaction between this flow and some object that is being or has been designed.

Consequently, it is very important that everyone concerned with CFD has some understanding of the physical phenomena that occur when fluids flow, as it is these phenomena that CFD must analyse or predict.

Each CFD software package has to produce a prediction of the way in which a fluid will flow for a given situation. To do this the package must calculate numerical solutions to the equations that govern the flow of fluids. For the CFD analyst, therefore, it is important to have an understanding of both the basic flow features that can occur, and so must be modelled, and the equations that govern fluid flow. These equations can be found from the

knowledge that the mass of fluid must be conserved, as must the momentum of the fluid. Whilst the equations will not be formally derived the underlying philosophy behind their derivation will be explained. Once these equations are known it should be a straightforward process to produce numerical prediction of all flows.

This is not case, however, as various problems arise in translating the mathematics into a numerical solution. One problem concerns the physics of the flow and how to model turbulence, as this complicates matters by having a seemingly random effect at each point in a flow.

One of application of CFD is scrubbing of SO_2 in a spray dryer. Industrial and utility interest in the spray-dry scrubbing concept for the control of SO_2 emissions has dramatically increased during the past decade. Most applications to date are on low to medium sulphur coals, while very few data are in existence which would confirm the applicability of the process to high sulphur coals.

In the spray dry scrubbing process, flue gas at air-preheater outlet temperatures is contacted with a spray of an alkaline slurry or a clear solution. In most applications lime is the preferred sorbent. During evaporation, dissolved salts precipitate and, after complete drying residual solids are removed from the spray dryer to a particulate collection device, usually a fabric filter. Reaction with the alkaline material proceeds both in the spray dryer and in the fabric filter, i.e. both under wet and dry conditions.

A disadvantage of the spray-dry scrubbing concept is its inapplicability to flue gases from high sulphur coals, for economic rather than process reasons. More efficient sorbent utilization is required to make the spray-dry scrubbing process competitive against the established wet processes. Recently, there has been an increased interest in the modelling of the spray-dry scrubbing process. Through gaining a deeper understanding of the relevant reaction mechanisms, the applicability of the process might be extended.

Although the overall reaction chemistry of a lime based system is quite simple, the simultaneous mass and heat transfer is considerably more complex. The reaction in the spray dryer involves several drying phases and consequently, reaction conditions which have to be approached differently. Furthermore, the method of gas-liquid contacting in the spray dryer must be taken into consideration.

In this study, tentative modelling of spray dry scrubbing of SO_2 was studied using CFD. PHOENICS is the one package program of CFD that used in this study. There are three main part in PHOENICS. These are Satellite (pre-processor), Earth (processor) and Photon (post-processor).

In Satellite, problem was described. This description of problem includes geometry of the problem, boundary conditions, properties of fluids, etc. Continuous phase is mixing of SO_2 and air here. Some properties of SO_2 and air was inputted in satellite.

There is a section in satellite named GENTRA. GENTRA is a part of satellite for disperse phase. Some properties of Trona solution was settled in GENTRA.

Same time, geometry of spray dryer was define in satellite. Meshes were created this section of PHOENICS to computation.

There is a file that named Q1 that includes information about done in Fortran language. Advanced users can be make use of this file. This file records what user did.

Second main part of PHOENICS is earth. Earth is computational part of PHOENICS.

third part of PHOENICS is photon. Photon shows the results in graphical form.



BÖLÜM 1: GİRİŞ VE AMAÇ

Akışkan dinamiği hesaplama tekniği olarak bilinen “Computational Fluid Dynamics(CFD)” hem teorik hem de deneysel çalışmaları tamamlayıcı rolü açısından son zamanlarda önem kazanmıştır. CFD bir akışkanın verilen şartlarda hangi yönde akacağına dair bilgi edinmek amacıyla bilgisayarların kullanılmasıdır.

Bu çalışmada CFD yönteminin kimya mühendisliğinde uygulanmasına bir örnek olarak püskürtmeli kurutucu simülasyonu yapılmıştır. Endüstriyel alanda geniş bir kullanımı olan püskürtmeli kurutucuların, taşınım mekanizmaları konusunda yapılmış pek çok teorik çalışma vardır. Ancak CFD’nin özellikle tasarım amacıyla kullanılması çok yeni bir konudur. Gıda, ilaç ve kimya endüstrisinde kullanılan püskürtmeli kurutucuların çalışmasına etki eden parametreler, ürün kalitesini doğrudan etkilediği için, bu parametrelerin istenen ürün özelliklerine uygun seçilmesi ve optimize edilmesi gerekmektedir.

Bu çalışmanın amacı; püskürtmeli kurutucuda, trona çözeltisi kullanarak SO_2 gazının tutulmasının CFD programıyla modellenmesidir. Modelleme çalışmalarında kullanılan program PHOENICS paket programıdır.

1.1. CFD’nin Tanımı ve Önemi :

Akışkanlar mekaniği, mekanik bilim alanının en teorik ve modellenmesi en zor olanıdır. Üniversite, endüstri ve devlet araştırma kuruluşlarında çalışan araştırmacıların bu alanda bilgisayar donanım ve yazılım teknolojisine paralel olarak geliştirdikleri çok sayıda bilgisayar destekli çözüm modelleri mevcuttur. Bu modeller akışkanlar dinamiğini tanımlayan ana denklemlerin bilgisayarın özelliklerine göre çözülebilir hale getirilmesi ile oluşmaktadır. Geliştirilen çözüm yöntemlerinin tümü CFD (hesaplamalı akışkanlar dinamiği)’nin temelini oluşturur. Çözüm, tek bir prosesörlü kişisel bilgisayar

ile belirli bir mühendislik hassasiyeti ile hesaplanabilirken, birkaç bin işlemciden oluşan paralel hesaplama yöntemleri ile akışkanlar dinamiğinin temel denklemlerinin formülasyonunu ve çözümünü içermektedir.

Çok işlemcili bilgisayarlar etkin bir şekilde kullanılarak, Navier Stokes denklemlerinin sonlu farklar, sonlu elemanlar ve diğer değişik analiz yöntemlerine dayanan çok sayıda çözüm algoritması geliştirilmiştir. Bu tür çalışmaların önümüzdeki yıllarda daha da ivmelenerek paralel süper bilgisayarlarda devam edeceği tahmin edilmektedir. Kompleks cisimler etrafında oluşturulan cisim uyumlu ağ yapısını kullanarak potansiyel akış karakteristikleri sonlu elemanlar yöntemi ile hassas bir şekilde modellenabilmektedir [1] .

Hesaplamalı akışkanlar dinamiği yöntemlerinin akış alanlarının modellenmesinde büyük gelişmeler sağladığı görülmektedir. Daha önceden pek çok anlaşılmayan akış özelliklerinin doğası bu yöntemle anlaşılır hale gelmiştir. Endüstride bir çok uygulamalı mühendislik probleminde kullanılan CFD tekniklerinin deneysel gözlemleri de destekleyen bir yöntem olarak kullanımı her geçen gün büyümekte ve yeni bir teknoloji alanı ortaya çıkmaktadır. Bilgisayar teknolojisindeki gelişmeler sonucu, deneysel ağırlıklı akışkanlar mekaniği analiz yöntemleri ile bilgisayar desteğinde modelleme teknikleri arasındaki yarış her geçen gün artmaktadır. Hava tünellerinin yerine bilgisayarda tünellerinin tasarımı günden güne deneysel analizlerin maliyetleri azalmaktadır. Çünkü deney öncesi bir çok ön hesaplamalar artık yeterli hassasiyetlerle bilgisayar desteğinde hesaplanabilmektedir.

CFD programları, üç ana bölümden oluşur :

- Ön İşlemci
- Çözücü
- Son İşlemci

Ön İşlem Programları :

Sayısal çözüm sürecinden önce yapılması gereken işlemlere *Ön İşlem* denir. Bu işlemlere analiz sürecinin ilk üç aşama dahildir: Başlangıç düşüncesi, mesh oluşturma ve akışın belirlenmesi, ayrıca sayısal kontrol parametrelerini tanımlayan dördüncü fazın bir kısmı. İlk aşama, kayda değer bir düşünme ve mühendislik muhakemesi gerektirirken; fiziksel akış problemi, CFD yazılımı ile çözülebilecek bir problem haline dönüştürülürse hesaplama işlemi gerektirmez. Hesaplama işlemi ilk aşamanın bitimiyle başlar.

Ön işlem safhasındaki hesap kısmına yardımcı olarak aşağıdaki işlemleri gerçekleştirecek bir çok yazılım paketi kullanılabilir.

- Nokta gridlerinin (ağlarının), hacim veya elemanlarının tanımlanması
- Geometrinin sınırlarının tanımlanması
- Sınır şartların uygulanması
- Başlangıç koşullarının belirlenmesi
- Akışkan özelliklerinin belirtilmesi
- Sayısal kontrol parametrelerinin belirtilmesi

Tüm bunları gerçekleştirebilmek için, kullanıcının herhangi bir şekilde bilgisayarlarla uğraşması gerekir. Ön işlem programları genelde grafiksel boyuttadır. Parametreler değiştirilerek, sonuç çok hızlı olarak görülebilir. Bu, özellikle mesh oluşturulduğunda çok önem kazanır.

Ön işlem sürecinde en zor iş nokta gridlerinin veya mesh'in oluşturulmasıdır. Bu durum mesh oluşturma için tasarlanan özel yazılımlarla kolaylaştırılabilir. Örnek olarak; yapısal problemlerin sonlu eleman analizleri için uygun mesh'leri oluşturma programı gösterilebilir. Bu tür yazılımlara çok rastlanmakta ve bilgisayar destekli dizayn sistemleriyle beraber uygulanmaktadır. Bu ise kullanıcının, objelerin bilgisayar modellemelerini geliştirilmesini sağlamaktadır.

Denklemlerin Çözümü :

Her yazılım paketi, incelenen problemin sayısal denklemlerini çözecek bir program içerir. Bu programda, ön işlemci tarafından tanımlanmış tüm uygun veriler verilmiş olmalıdır. Programlar arasında veri transferi için, ön işlemci çözücü programın okuyabileceği veri tabanını yazıcıya döker. Bu dosyalar gerekirse bilgisayarlar arasında bile taşınabilir. Veri tabanına yerleştiği zaman, çözücü program aktif duruma geçerek istenen sonucu alma süreci başlar. Bu sürecin sonunda daha fazla veri dosyası elde edilerek, ön ve son işlemlerin gerçekleştiği makinalara gönderilir.

Her ne kadar çözücü program CFD yazılımının özünü oluştursa da , kullanıcı bu işlemin çok azını görebilmektedir.

Son İşlem Programları :

Mantıklı bir simülasyon gerçekleştiğinde, akış alanı ile birlikte çok sayıda nokta yaratılmış olur. Birçok değişken ise bu noktalarda depolanır. Çözücü programında yazılan verilerin görüleceği tek yer bilgisayar grafikleridir. Son işlem programı, sonuçları göstermek için kullanılır. Tıpkı ön işlemci gibi interaktifdir ve genelde ön işlemci ile aynı makinada çalıştırılır. Son işlemciden elde edilecek tipik resimler, mesh'in bir kısmı ile birlikte hız vektörleri veya basınç gibi skaler büyüklüklerin konturlarıdır [2].

Her akış probleminde, önce akışkanın fiziksel sınırları tanımlanmalıdır. Akışkan akımı denklemlerini bilgisayar yardımıyla çözdüğümüzde, akış değişkenlerinin saklanacağı noktalardan oluşan bir mesh (grid)'e ihtiyaç vardır. Bu noktalar ise akışın sınır yüzeyinde olmalıdır.

Geometrik verilerin bir çok kaynağı vardır ve bunlar analist tarafından sınır yüzeyini tanımlamak için kullanılır.

Problemın geometrisi saptandıktan sonra analizci, akışkanın seçimini yapmalıdır. Bunun için akışkanın yoğunluğu, viskozitesi gibi değerler incelenmelidir. Akışkan akımının Reynolds sayısına göre laminar veya türbülent olması belirlenir. Daha sonra akışkanın, problemın fiziksel şartlarına göre, girdiği ve çıktığı yerler, ayrıca katı yüzeyler belirlenmelidir. Bu sayede akışkanın geometri içindeki durumu hakkında bir fikir edinilebilir. Akışın yönü, girdapların konumu, ayrık akışkan alanları ve sınır tabaka öğrenilen özellikler içinde yer almalıdır. Akışın durumunu aynı zamanda, akış değişkenlerine başlangıç ve sınır safhalarında uygulanacak koşulların belirlenmesini sağlar. Akış denklemlerinin sayısal çözümlerini belirleyen etkenler; sınırlardaki akışkanın durumu, sınır koşulları, zamana bağlı bir problemın başlangıcındaki akış değişkenlerinin durumu gibi özelliklerdir. Bu yüzden eldeki taslak, sınırlar hakkındaki maksimum bilgiyi içermeli ve bu bilgi analizde istenen formda olmalıdır.

Sınırlarda uygulanması gereken bazı özel durumlar şöyledir :

- Hızı sabitlemek (Akışın laminar olduğu bir duvarda)
- Logaritmik hız profilini aktif duruma getirmek (Akışın türbülent olduğu bir duvarda)
- Türbülent kinetik enerjiyi ve dağılım oranını sabitlemek (Türbülent akışın girişinde)
- Basıncı sabitlemek (Çıkışta)
- Her iki sınıra ait noktalarda akış değişkenlerinin aynı olduğu bir çift çevrimsel sınır belirlemek

Sabit bir akışkan problemi söz konusu ise tüm akış en başta belirlenmelidir. Ancak özelliklerin zamanla değiştiği veya öyle farzedildiği bir akış problemi çözülecekse, ayrıca başlangıç koşulları da saptanmalıdır. Bunlar tüm akış değişkenlerinin başlangıçtaki değerleri olup, akış alanının her noktasında tanımlanmalıdır. Bu değerler genelde tam olarak bilinmediğinden, hassas olarak tahmin edilmelidir [2].

Akış problemi belirlendikten sonra, modelleme işlemine geçilir. İlk adım olarak akış alanındaki noktalardan bir mesh, belki de gerekli hacim veya elemanlar oluşturulur.

Basit bir problemin modellenmesi az zaman alırken, bir seri geçiş halindeki problemin tamamlanması aylar sürebilir. Genellikle, simülasyondan istenen sonucu almak için gerekli toplam süreyi bu safha belirler. Aynı şekilde, analizin tüm masrafı, bir mesh oluşturmak için gerekli çalışmanın masrafiyla bağlantılıdır.

Akışı belirleyen kısmi diferansiyel denklemleri çözmek için hangi yöntem kullanılırsa kullanılsın; akışkan hacmi içinde bir mesh oluşturulması zorunludur. Eğer sonlu farklar yöntemi kullanılırsa; noktalardaki değişken değerleri, çözüm için denklemler üretmekte kullanılır. Bu da bir grid'i gerekli kılar. Bununla beraber, eğer sonlu hacimler yöntemi kullanılırsa; noktalar bir hacim oluşturacak şekilde gruplanır ve kısmi diferansiyel denklem, hacimlerin yüzeylerindeki çeşitli akış terimlerinin eşitlenmesiyle çözülür. Eğer sonlu elemanlar yöntemi kullanılırsa; noktalar, kısmi diferansiyel denklemlerin sayısal analoglarının kurulabilmesini sağlayan elemanlar şeklinde gruplanırlar. Tüm bu durumlarda mesh yapısının son hali kullanılan yöntemden bağımsızdır. Sonuç olarak CFD probleminin çözülebilmesi için bir mesh'e gerek olduğu söylenebilir.

Modellemenin doğru bir şekilde yapılabilmesi için, akış değişkenlerinin gradientlerinin büyük olduğu yerde bir mesh'e ihtiyaç duyulur. Bu amaçla, akışkanın kritik bölgelerine dikkat çekmek için kullanılan taslaklar önem kazanır. Kritik bölgelerde mesh içinde çok sayıda noktaya ihtiyaç duyulur. Bunun sebebi ise , tüm sayısal metodlarda, akış değişkenlerinin noktaları arasında, bir hacim veya eleman içerisinde değişime uğradıkları farz edilmesidir. Sonuç olarak, akış alanında değişkenler bir değişime uğruyorlarsa, bunu doğru olarak tespit etmek için bir grid'e ihtiyaç duyulur. Kritik olmayan bölgelerde mesh'ler kaba tutulabilecekken kritik bölgelerde ise mesh'lerin ince olması gerekmektedir.

Bir mesh'i oluşturan temel parçalar şunlardır :

- Düğüm adı verilen noktalar
- Hacimler (hücreler olarakta bilinir)
- Elemanlar

Mesh'i oluřturan paralar bilindiĐine gre, artık onların alana nasıl yerleřtirileceĐi nem kazanır. Bu dzenleme iřlemine *topoloji* adı verilmektedir. Sonlu farklar yntemi kullanıldıĐında noktalar, deĐiřkenlerin hesaplandıĐı alanlarda ve hcre gridi oluřturacak řekilde yerleřirler. Buna karřın, sonlu elemanlar ynteminde noktalar, akıřkan hacmini blen elemanların dĐmleri olacak řekilde yer alırlar. Bu elemanların herhangi bir yerde, ancak yzleri dzgn hizalı olacak řekilde dzenlenirler. Sonlu hacimler ynteminde ise, sayısal czmlerin uygulanması hacim yerleřimlerinin řemasını belirtir. Bazı programlar, hacimlerin sonlu farklardaki hcre gridi yerleřimini, bazıları ise sonlu elemanları yerleřimini gerektirir.

Mesh oluřtururken, sınır alanlarının geometrileri belirlendikten sonra, hangi tip mesh yapısı kullanılacaĐına karar verilmelidir. Bazen bu, kullanılacak CFD yazılımında belirtilmiř olabilir. nk bazı programlar sadece belli yapıları kabul edebilirler veya mesh yapısı alanın geometrisine gre zaten kararlařtırılmıřtır. CFD czcsnn daha verimli olması ve yaratılmasının kolaylıĐı aısından dzenli yapıda olan bir mesh oluřturulmalıdır. Ancak bařarısızsa dzensiz olan kullanılmalıdır.

Mesh yapısına karar verdikten sonra, bir mesh dzeni tanımlanmalı ve hcre sayısı iin bir tahmin yapılmalıdır. Bunlar kullanıcının tecrbesine olduĐu kadar akıřa da baĐlıdır.

Tm hazırlıklardan sonra mesh oluřturmaya geilebilir. Basit geometriler iin, kısa bir bilgisayar programı ile mesh oluřturulabilir. Ancak genelde daha kompleks geometrilerdeki akıř problemlerine czm arandıĐından, bazı CFD paketleri, n iřlem programlarında mesh yaratma yazılımları ierirler. Aynı řekilde, diĐer yazılım paketleri de kullanılabilir.

CFD'den daha iyi bir sonu almak iin varolan bir mesh'i deĐiřtirmek mmkndr. Bu modifikasyon, akıř problemini czmeden nce veya czdkten sonra yapılabilir. Bazı CFD n iřlemcileri dzenli yapıda bir mesh alıp, onu hcreler ortogonal bir mesh oluřturacak řekilde dzeltirler. Bu iřlem bilgisayarın harcadıĐı abayı azaltırken czmn doĐruluĐunu arttırmaktadır. Bu dzeltme rutini, grid

koordinatlarındaki değişimi tanımlayan bir seri kısmi diferansiyel denklemi çözümünü temel almaktadır. Bu süreçte, orijinal mesh iteratif çözüm için ilk tahmin olarak kullanılır [2].

Diğer modifikasyon teknikleri, ilk mesh'ten CFD sonucu alındıktan sonra uygulanırlar. Bu teknikler alınan sonuç ışığında mesh'i modifiye ederler, böylece kullanıcı deneyimlerinin, sonuçların kalitesine etkisi indirgenmiş olur. Bu prosedür kaba, fakat gerçekçi bir mesh ile bir ön analizin yapılmasına ihtiyaç duyar. Alınan sonuca göre ise mesh tekrar yaratılır.

CFD analizinin ilk basamağı olan mesh oluşturdudan ve ön işlemci mesh verilerini okuduktan sonra, akış problemi belirlenir ve aşağıdaki basamaklar tamamlanarak problem çözülmüş olur.

- Akışkan özelliklerinin belirlenmesi (yoğunluk,viskozite)
- Hesaplanacak akış değişkenlerinin tanımlanması
- Sınırların belirlenmesi
- Sınır koşullarının uygulanması
- Simülasyon için başlangıç koşullarının tanımlanması

Her hücre veya hücre kümesi için bir giriş, bir duvar gibi geometrik yerler belirlenmelidir. Çünkü CFD çözücüsünün, problemin gerçek geometrisi hakkında değil, sadece akış alanındaki mesh hakkında bilgisi vardır.

Bu safha CFD ön işlem kavramına komutlar verilerek gerçekleştirilir. Tüm bölümlerin komutları ayrı ayrı gruplanmış olarak bilgisayara girilmelidir.

Akışkan Özelliklerinin Belirlenmesi :

Akışkan bir çok değişik özelliğe sahiptir ve çözücü programında bu değerleri çezecek bazı hesap yöntemler vardır. CFD ile problem çözümünde en önemli iki özellik yoğunluk ve laminar viskozitedir.

Akışkanın laminar ve sıkıştırılmayan olduğu, ısı transfer etkilerinin bulunmadığı basit problemlerde yoğunluk ve viskozite sabit kabul edilebilir. Eğer akış önemli sıcaklık değişiklikleri gösteriyorsa viskozite sıcaklığın fonksiyonu olarak değişecektir. Ön işlemci, kullanıcının bu ilişkiyi belirlenmesine imkan verecektir. Viskozite ve yoğunluğun değiştiği akış problemleri ise daha karmaşıktır. Bu problemler CFD yardımıyla çözülmektedir.

Bunların dışında, probleme bağlı olarak başka özellikler de tanımlanabilir. Eğer ısı transferi probleminin simülasyonu yapılıyorsa ısıl iletkenlik; eğer basit bir türbülans modelleniyorsa efektif türbülent viskozite eklenebilecek özellikler arasındadır.

Sınırların Bulunması :

İstenen değişkenlerin hesaplanması için kısmi diferansiyel denklemlerin çözülmesi ve her denklem için sınır koşulları belirlenmesi gerekir. Sınırlar mesh terimleri ile hücre veya elemanların yüzeyleri şeklinde tanımlanmalıdır.

Sınır Koşullarının Belirlenmesi :

Sınır yüzeyler belirlendikten sonra, uygulanacak sınır koşullar düşünülmelidir. Çözülecek her bir kısmi diferansiyel denklem için, kullanılan sayısal yöntem seçilerek sınır koşulları belirlenir. Bazı durumlarda hız veya basınç gibi tek bir sınır koşul belirtilmelidir. Bazı durumlarda ise sınırda belirlenmiş koşullar oluşacaktır. Hiçbir tanımlama yapılmamışsa, sıfırdaki sınıra normal olan hızın türevini içeren akış, yazılım belirler. Ayrıca kullanıcı isteğine uygun değerlerle, sınırdaki değerler değiştirilebilir.

Tüm sınırlar için, verilen bir sınır koşulunu sadece belli bir zaman süresince uygulanmak da mümkündür. Bu, problemin zamana bağlı olduğu durumlarda geçerlidir.

Başlangıç Koşullarının Belirlenmesi :

Her türlü problemde, alanın her hücresi için başlangıç koşulları belirlenmelidir. Bazı durumlarda, başlangıç koşulları hücre grupları için sabit bir değerle veya her grup için bir değişkenle tanımlanabilir.

Eğer türbülans değerleri olan k ve ϵ kullanılmışsa, bunlar küçük pozitif değerlere veya bazı gerçek değerlere ayarlanmıştır. Hesaplama sırasında bir hatayı önlemek için bu ayarlama yapılır [2].

Tüm akış problemi tanımladıktan sonra, CFD yazılımı akışla ilgili tüm bilgilere sahip demektir. Çözücü programın çalıştırılmasına ve sonuç eldesine çok yaklaşılmıştır.

CFD paket programlarında, çözüm süreci iteratif bir işlemdir. Bu sürecin başında, genelde tahmini olmak üzere, bir başlangıç değerine gerek vardır. Bu değere göre, denklemler daha iyi bir yaklaşımla sayısal olarak daha doğru bir sonuç eldesi için kullanılır. Yeni yaklaşımla elde edilen çözüm, tekrar bir başlangıç sonucu gibi kullanılır. Proses, hata yeterince küçülünceye kadar devam ettirilir. Yapılan bu tekrarlar *iterasyon* adı verilir. Her iterasyon sonucunda hatanın azalması beklenir (hatadan kastedilen, noktalar arası artımdır). Eğer azalıyorsa çözüm yakınsak; artıyorsa çözüm ıraksak demektir.

Analizin başında, kullanıcı sadece birkaç iterasyon yapılacağını çözücü programa bildirmelidir. Aşağı yukarı 10 iterasyondan sonra, hatanın eğilimi ve çözümün yakınsak ya da ıraksak olduğu belli olur. Çözümün yakınsak olması, dolayısıyla hatanın azalması istenir. İşlemin yakınsaklığı görüldüğünde iterasyon sayısı artırılır ve simülasyona devam edilir. Eğer ıraksaklık söz konusu ise, tek çare modellemenin kontrolüdür. Bu kontrol, çözücü program tarafından yazılan giriş verilerinin okunması veya ön işlemcide depolanan verilerin titizce gözden geçirilmesi şeklinde olabilir. Eğer modelleme hatası bulunursa, mesh veya giriş verileri düzeltilmelidir. Böylece çözücü program değiştirilerek tekrar çalıştırılabilir.

Bir kez yakınsak sayısal çözüm bulunduğunda, bu sayısal sonucun kullanılan denklem için yeterli olduğundan emin olunmalıdır. Elde edilen bu sonucun fiziksel problemin değil, sayısal problemin çözümü olduğu unutulmamalıdır. Bu ikisinin farkı, yetersiz mesh veya zayıf bir türbülans modelden kaynaklanabilir.

Sayısal sonuç elde edildiğinde, fiziksel gerçekle bir ilişkisi olup olmadığı belirlenmelidir. Eğer bir ilişkisi varsa, istenen teknik bilgiler sonuçlardan rahatlıkla çıkarılabilir.

Çözücü programın çalışmasıyla, analiz edilmesi gereken bir çok veri ortaya çıkar. İlk olarak, analizle hangi bilgilere ulaşılabileceğinin bilinmesi gereklidir. Daha sonra ise, CFD için yazılmış grafik programları kullanılarak analiz gerçekleştirilir. Analiz sonunda edinilecek bilgilerin bazıları aşağıda belirtilmiştir.

- *Çözülen çeşitli kısmi diferansiyel denklemler için hata değerleri* : Bu değerler, iterasyon sayısı veya zaman adımının fonksiyonu olarak listelenir ve çözümün yakınsak olup olmadığı hakkında fikir verir.
- *Sınırlı sayıdaki bazı yerdeki bazı değişken değerleri* : Her iterasyon veya zaman dilimi için, bu veriler çözümün yakınsaklığa ilerleyişi hakkında bir izlenim verir. Zamanla değişen çözümler için ise, akışın zamanla değişiminin çok kısa bir hikayesini belirtir.
- *Akış alanında, her hücre veya her düğümdeki akış değerlerinin tüm listesi* : Verilerin dökümü denebilecek bu listeler, çözüm işleminin en sonunda üretilirler. Ancak çözücü, işlemin ara aşamalarında da böyle bir liste üretecek şekilde yönlendirilebilir. Bu işlem farklı zamanlarda, zamanla değişen bir akışı tanımlamakta gerekli olabilir.
- *Mesh verileri* : Bu veriler bazen ön işlemci tarafından üretilirler, ancak çözücü de üretebilir. Mesh koordinatlarını ve gerekirse bağlantı listesini içerir. CFD paketine bağlı olarak, hücre hacimleri ve yüzey alanları gibi bilgilerde bulunabilir.

- *Çözümün ilerlemesiyle ilgili bazı dosyalar* : Bu dosyalar, ön işlemciden giriş verileriyle ilgili gelen yankıları içerebilir. Çözücü tarafından kullanılan bu giriş kontrol edilebilir. Artım değerlerinin tekrarı, her iterasyondaki ekran verileri, herhangi bir kullanıcı program sonuçları, iki nokta arasındaki basınç düşüşü, çözücünün çalışma süresi , kullanılan disk kaynakları gibi bilgilere erişilebilir [2].

Hesaplamalı akışkanlar dinamiği yöntemleri (CFD) bir çok araştırmacı tarafından da onaylanan avantajlara sahiptir. Bunları da aşağıdaki gibi özetleyebiliriz :

- CFD, deneysel çalışmalarda tekrarlanamayan koşulları kolayca yaratabilir,
- CFD, bilgisayar grafik teknolojisi ile birleşerek ayrıntılı ve hayal gücüne yardımcı verileri sağlar,
- CFD, rüzgar tüneli deneylerine ucuz alternatif oluşturur.
- CFD, deneysel olarak incelenmesi zor ve pahalı olan koşulların analizi için bir alternatiftir.

1.2. CFD'nin Tarihçesi :

Yüksek çalışma hızına sahip bilgisayarların geliştirilmesinin, akışkanlar ve ısı transferi ile ilgili prensiplerin modern mühendislikteki tasarım problemlerine uygulanma şekli üzerinde etkisi olmuştur. Yirmi yıl önce mevcut olan bilgisayarlar ve hesaplama yöntemleri kullanıldığında çözümü yıllar sürebilecek problemler şimdi çok kısa sürede çözülebilmektedir. Daha önce hayal bile edilemeyecek hesaplama gücünün kullanıma hazır hale gelmesi, bir çok değişikliği beraberinde getirmiştir. Bu değişikliklerin ilk göze çarptığı yerler, çözülmesi çok önemli olan karmaşık problemlerin mevcut olduğu endüstri ve araştırma laboratuvarında olmuştur. Yakın geçmişte, modern hesaplama yöntemlerinden en iyi şekilde yararlanabilmek için uzmanlığa sahip temel konuların işlendiği üniversitelerde değişimler meydana gelmiştir.

Akışkanlar mekaniği ve ısı transferindeki karmaşık problemleri çözebilmek için geliştirilen ve CFD olarak bilinen yeni yöntemin kullanılması süreci, bilgisayarın bu

yaygın kullanımı ile başlanmıştır. Bu yaklaşımda bir prosesi tanımlayan diferansiyel denklemler sayısal yöntemlerle çözülmektedir. Adi ve kısmi diferansiyel denklemlerin çözümü için kullanılan sayısal yöntemlerin gelişimi yüzyılın başına dayanır. Otomatik dijital bilgisayarlar 1930'ların sonlarında Atanassof tarafından icat edilmiştir ve baştan itibaren akışkan dinamiği problemlerini çözmek için kullanılmıştır. Ancak, bu olaylar tek başına mühendislik uygulamalarında, köklü değişimler yaratmamışlardır. Bu alandaki patlama, 1960'larda çok hızlı dijital bilgisayarların yaygınlaşmasıyla gerçekleşmiştir [3] .

Deneysel ve teorik yöntemler, akışkan akımı ve ısı transferi ile ilgili araç geliştirilmesi ve ekipmanların tasarımında uzun yıllar kullanılan yöntemler olmuştur. Dijital bilgisayarların geliştirilmesiyle, 3. yöntem olan sayısal yaklaşım kullanılabilir hale gelmiştir. Her ne kadar deneysel yöntem önemini sürdürse de, özellikle çok karışık akışkan akımları ile karşılaşıldığında, bilgisayar destekli dizayna güvenme eğilimi daha fazladır. Ancak hesaplama yöntemlerinin, tasarım amaçlı bilgi toplamak için başvuru deneysel yöntemlerin yerini, hemen ve tamamen alacağı iddia edilememektedir.

Akışkan akımı ve ısı transferi ile ilgili tasarımların çoğunda hala bazı deneysel testlerin kullanılması gereklidir. Bununla birlikte, bilgisayara dayalı çalışmalar , test edilmesi gerekli aralığı azaltmakta kullanılabilir. Deney yapılmasına duyulan ihtiyacın türbülent akışla ilgili uygulamalarda bir süre daha devam etmesi beklenebilir. Türbülent akışta ampirik olmayan hesaplama yöntemlerinin kullanılması hala daha ekonomiktir. Çok fazlı akış, kaynama ve kondensasyon içeren, özellikle karmaşık geometrisi olan uygulamalarda, deneysel yöntem tasarım için gerekli bilgilerin kaynağı olmaya devam etmektedir. Bu tür akışlar için geçerli olabilecek matematik modellerin geliştirilmesinde ilerleme kaydedilmekle birlikte, aerodinamik cisimler üzerinde laminar ve tek fazlı akışlar için geçerli olan tahmine dayalı yöntemler yanında, bunlar çok ilkel kalmaktadır.

CFD'nin temel prensiplerin ilk adımı ve bu konuda önemli yöntemlerin geliştirilmesi süreci aslında dijital bilgisayar kullanımından çok öncelere dayanmaktadır.

Londra kraliyet derneğinde sunduğu bir çalışmada Laplace ve biharmonik eşitliklerin sayısal çözümü için nokta iteratif işlemini tanıtan Richardson [3], bu konudaki ilk önemli çalışmayı yapmıştır. Bu çalışmada, *relaksasyonla* çözülmüş olan problemler ile *marching* problemler arasındaki farkı açıkça ortaya koymuş ve o tarihler için önemli bir adım atmıştır.

Richardson'un çalışmada Laplace eşitliğini çözmek için bi relaksasyon tekniğinin geliştirilmesi söz konusudur. Burada, bir önceki iterasyondaki mevcut verileri kullanarak parametrenin bilinmeyen her değerini adım adım hesaplamaktı. 1918 yılında, Liebmann, Richardson yönteminin geliştirilmiş bir versiyonunu tanıttı. Liebmann yöntemi ile Laplace eşitliğinin çözümü için yakınsama zamanında basit ısı transferi problemlerinde kullanıldı.

Modern sayısal analizin başlangıcında etkili olan diğer kişiler ise Courant, Friedrichs ve Lewy [3] dir. Bunların isimleri literatürlerde kısaca CFL olarak geçmektedir.

Soutwell 1940 yılında, yapısal ve akışkan dinamiği problemleri'nin çözümünde büyük ölçüde kullanılan gelişmiş bir relaksasyon işlemini tanıtmıştır. 1940 ile 1950 arasındaki on yıl boyunca, Soutwell'in yöntemi genelde mühendislik öğrencilerine sunulan ilk yöntemdi. Allen ve Soutwell [3] bir silindir üzerindeki sıkıştırılmaz, viskoz bir akışkanın davranışını incelemek üzere Soutwell işlemini kullandılar.

2.Dünya savaşı boyunca ve hemen onu takip eden yıllarda, akışkan dinamiğindeki problemlerin çözümü için pek çok araştırma sayısal yöntemlerin kullanılması ile yapıldı. Profesör Von Neumann *time-marching* problemlerinin çözümünde sayısal yöntemlerin kararlılığını değerlendirmek için kendi yöntemini geliştirdi ancak çalışmalarını literatüre yansıtmadı. O'Brien, Hyman, ve Kaplan [3] sonradan von Neumann yönteminin detaylı bir tanımını sundular. Bu araştırma; mühendisler ve bilim adamları tarafından anlaşıldığından ve güvenle kullanılabilen kararlılık değerlendirilmesinin pratik bir yolunu gösterdiğinden önemlidir. Von Neumann yöntemi, kararlılığın tesbiti için akışkanlar dinamiğinde en yaygın olarak

kullanılan tekniktir. Önemli katkılardan bir diğzerinin ise, yaklaşık aynı zamanlarda Peter Lax tarafından yapıldığı görülür.

Aynı zamanda, parabolik ve eliptik problemlerin her ikisi için laplace eşitliğini çözebilmek üzere ardışık *overrelaksasyon*(SQR) işlemlerinin ilk versiyonunu sundu. Bu yakınsama hızında önemli bir ilerleme sağladı. Peaceman ve Rachford [3] ve Douglas ile Rachford [3] parabolik ve eliptik denklemler için, tarama yönlerinin değiştirilebileceği ve adım büyüklüğünün kısıtlamaya tabi olmadığı yeni bir implisit yöntem türü geliştirdi. Bu gün yaygın olarak kullanılan bu yöntemlere yön değıştirmeli implisit işlemi (ADI) adı verilir.

CFD'nin ilk tanıtımını yapan kitaplar 1950'li yılların sonlarında ve 1960'lı yılların başında görölmeye başlandı. İlk olarak Richtmyer [3] ve daha sonra Ritchmyer ve Morton tarafından yayınlanan kitaplar marching problemleri çözümünde bir bilgi kaynağı oluşturmuşlardır. Forsy ve Wasow [3] eliptik türdeki problemlerin çözümünde kullanılan yöntemlere ağırlık vermişlerdir. 1960'lı yıllar boyunca CFD konusundaki araştırmalar hızlı bir şekilde devam etmiştir. Şok dalgaları içeren akışların çözümünde ilk olarak Lax yaklaşımı ya da Von Neumann ve Rictmyer tarafından *yapay viskozite yöntemi* kullanılmıştır. Los Alamos'taki ilk çalışmada şok problemini bir kaç mesh aralığına taşıyabilmek için sonlu farklar yönteminin yayılabilme özelliğinden yararlanılmış ve hücre içi tanecik (*particle in Cell*) yöntemi geliştirilmiştir. 1960'da Lax ve Wendroff dah önceki yaklaşımlardaki bazı çözümsüz noktaları gidermek üzere ve şok dalgalarına sahip akışları çözebilmek için bir yöntem geliştirmişlerdir. Bu yöntemin MacCormack [3] versiyonu şokla ilgili problemlerde hala yaygın olarak kullanılmaktadır. Moretti ve Abbett [3] şok dalgalarına uygulanan bu işlemleri değışik yapılarıdaki çok boyutlu süpersonik akışa uygulamışlardır. Ritchmyer ve Morton da bu yöntemlerin ilk örneklerini tanıtmışlardır. Bu gün bile şok dalgaları ile ilgili problemleri çözmek için hem eski hem de yeni yöntemler hala kullanılmaktadır.

Son onbeş yılda, CFD'de kaydedilen gelişmelerde ve bu alanda çalışan araştırmacı sayısında gittikçe yükselen hızda bir artış olmuştur. Bu sebepten dolayı, bu zaman dilimine ait olan kısa bir tarihçe vermek ve önemli katkıları tek tek belirtmek

zordur. Buna karşılık Hall [3] tarafından sunulan makaleler 1950'den bugüne kadar olan gelişmeleri özetlemektedir. Levine [3] tarafından yapılan bir diğer çalışmada ise hesaplama yöntemlerinin potansiyel kullanım alanları hakkında bilgi verilmiştir.

1.3. CFD'nin Kullanım Alanları :

CFD'nin kullanım alanları açısından çok geniş bir yelpazedir. Başlıca kullanım alanları ise şunlardır:

- **Uçak Endüstrisi :** Yapılacak simülasyon çalışmaları için verilere ihtiyaç vardır. CFD, rüzgar tüneli testi ile çeşitli konfigürasyonların ilk testleri yapılması için kullanılır. Sürüklenme, kaldırma ve yan kuvvet verilerine dayanarak akış simülasyonu yapılabilir. Deneysel verilerde elde edilen yarı-ampirik eşitliklerin uygulanması da işlemin diğer aşamasıdır.
- **Nükleer Endüstri :** CFD yöntemine başvurulmuş endüstrilerden biri de nükleer endüstri araştırmalarıdır. Özellikle deneysel çalışmanın ve gerçeğe yakın verilerin elde edilmesinin tehlikeli olduğu bu araştırmalarda CFD uygulamaları büyük önem taşımaktadır.
- **Brülör Tasarımı :** Akışkan akımı ile alev arasındaki kimyasal reaksiyonların karmaşık etkileşimlerini araştırmaya yönelik çalışmalar da CFD yönteminin bir diğer uygulama alanıdır. Simülasyon çalışmaları sonucunda boylerlerde, fırınlarda ve diğer ısıtma aletlerinde kullanılan brülörler için güvenilir tasarım verileri elde etmek mümkündür.
- **İçten Yanmalı Motorlarda Hava Akışı :** İçten yanmalı motor içinde yakıtı tutuşturmak için hava kullanıldığında(gaz türbin motoru ve bir benzin motoru ve ya dizel motoru) hava minimum bir çaba ile bölmeye çekilebilmeli ve bölmedeki havanın akışı iyi bir yanmaya ön ayak olmalıdır.Bu prensibe dayanarak, sistem içindeki basınç düşüşünün ve yanma odasındaki hız dağılımının tahmin edilmesi amacıyla CFD kullanılır.
- **Nehir ve Okyanuslara Kirleticilerin Yayılması :** Nehir ve okyanusların içine boşaltılan çeşitli kirleticiler için yapılan simülasyon programları, kirleticilerin doğal akımlar nedeniyle dağılımlarının tahmin edilmesinde ve

kirleticilerin yoğunluğu ile deniz veya nehirdeki lokal kirlenmelerin incelenmesinde kullanılır.

Doğada CFD uygulamalarının son derece değişken olduğu görülmektedir. Buna rağmen, farklı problemlerin bilgisayar tahminleri, verilmiş bi problem için özel olmayan, genel yazılım ve donanımlar vasıtasıyla yapılabilir.

Yanma kararlılığı, yanma hızının kontrolü ve alev karakteristiklerinin tesbitinde de CFD uygulamaları mevcuttur. Alev dinamiğinin akışkan kontrolü olduğu durumlarda Navier-Stokes eşitliklerinin basit kimyasal reaksiyon denklemleri ile çözümü, CFD yöntemi içinde çok geniş uygulaması olan proseslerden biridir.

CFD uygulamaları çok yaygın olduğu bir diğer alanda ısıtma, havalandırma ve iklimlendirme süreçleridir. Isı değiştiricilerin tasarımı, borularda ve kanallarda akış, oda ve bina içlerindeki akışın simülasyonu tasarım için ön verilerdir [1] .

Otomotiv endüstrisi, CFD uygulamaları için en yaygın kullanıma sahip endüstrilerden biridir. Taşıt iç ve dış aerodinamiği, gaz giriş ve çıkış kanalları, hava ve yağ filtrelerindeki akış, taşıt içindeki ısıtma ve iklimlendirme problemlerinin analizi CFD teknolojisini gerektirir.

1.4. CFD'nin Kimya Mühendisliğindeki Yeri :

Kimya teknolojisi, CFD uygulamaları için zengin bir laboratuvar özelliği taşımaktadır. Kimyasal reaktör dizaynı, spray kurutma ve soğutma, siklon ve seperatör tasarımı için CFD yönteminin kullanılması yeni olmakla birlikte geniş uygulamaya yönelik bir sürecin başlangıcındadır. Kimya mühendisliğini ilgilendiren diğer kullanım alanları ise nozüldeki akış, bir borudaki kaynama olayı, sedimentasyon gibi konulardır [1].

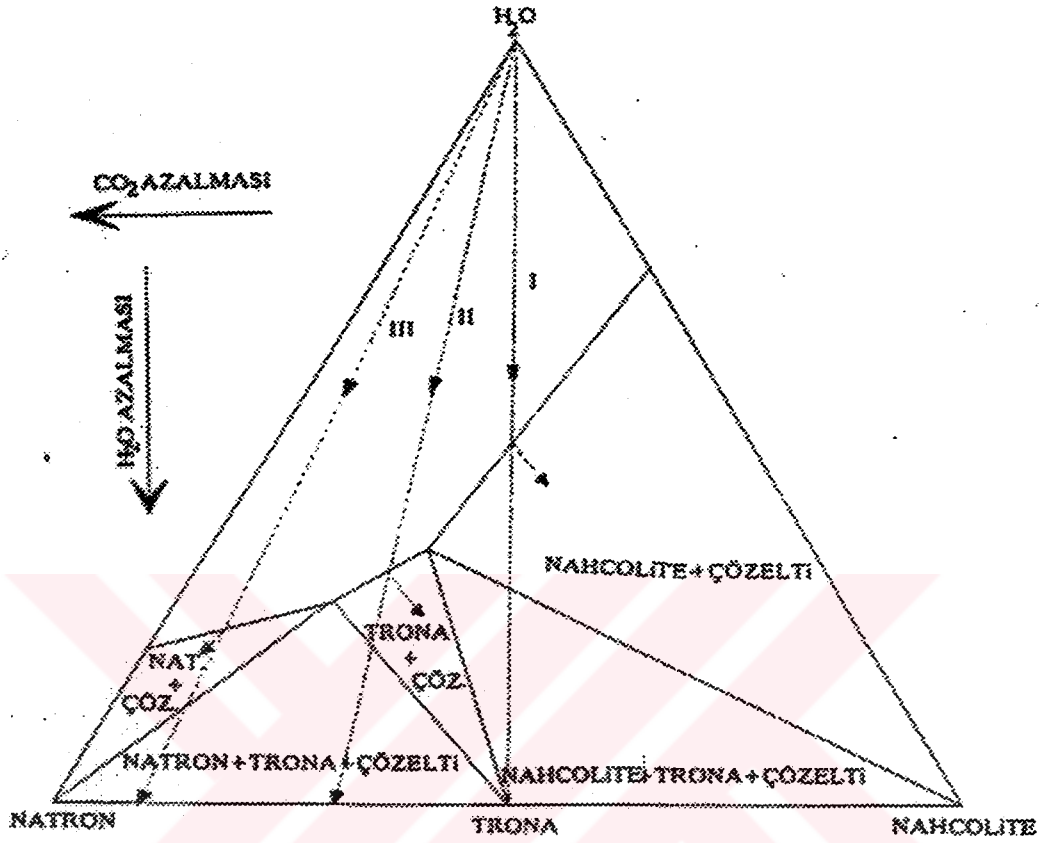
BÖLÜM 2: TRONA MİNERALİ

2.1. Tronanın Mineral Özellikleri :

Trona, $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{NaHCO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ yapısındaki doğal sodaya verilen isimdir. Na_2CO_3 - NaHCO_3 - H_2O sisteminin gerek doygunluk çözelti bileşimleri gerekse faz dengeleri üzerinde yapılan çalışmalar sonucu, sistemin kristallizasyon mekanizması bugün tamamen aydınlanmış durumdadır. Çalışmalar 1922'de Freet [4] ve 1928'de Wegscheider ve Mehl [5] adlı araştırmacılar tarafından yapılmış ve 1930'lu yıllara dek, üçlü sisteme ait denge şartlarının, düşük ve yüksek sıcaklıklardaki tuz çözünürlük mekanizmalarının ve çifte tuz oluşum şartlarının aydınlatılması amaçlamıştır. Daha sonra, bu verilere dayanarak 1959 yılında Eugster tarafından sodyum karbonat-bikarbonat minerallerinin stabilitesi, sıcaklık ve CO_2 'nin kısmi basıncı terimleri cinsinden hesaplamıştır. Truesdell ve M.Ross'un termodinamik verilerinden yola çıkarak, 1965 yılında Garrels ve Christ 25°C için diyagramlar geliştirmiş, 1966'da ise Eugster, 20 ve 70°C arasındaki sıcaklıklar için, sodyum karbonat-bikarbonat doygun çözeltileriyle dengede bulunan bir gaz fazın CO_2 içeriği ölçmüştür [6,7] .

Tüm bu verilerin değerlendirilmesi ile, tuzlu göl sularından tronanın çökelişi için birçok muhtemel mekanizma ortaya çıkarmak mümkün olmuş, hatta, sıcaklık, çözelti bileşimi ve CO_2 'nin kısmi basıncındaki kantitatif değişimlerin yarattığı etkiler dahi kolaylıkla değerlendirilebilmiştir. Şekil 2-1'den de görüldüğü üzere, Na_2CO_3 - NaHCO_3 - H_2O üçlü sisteminde 4 temel mineral yapısı söz konusudur.

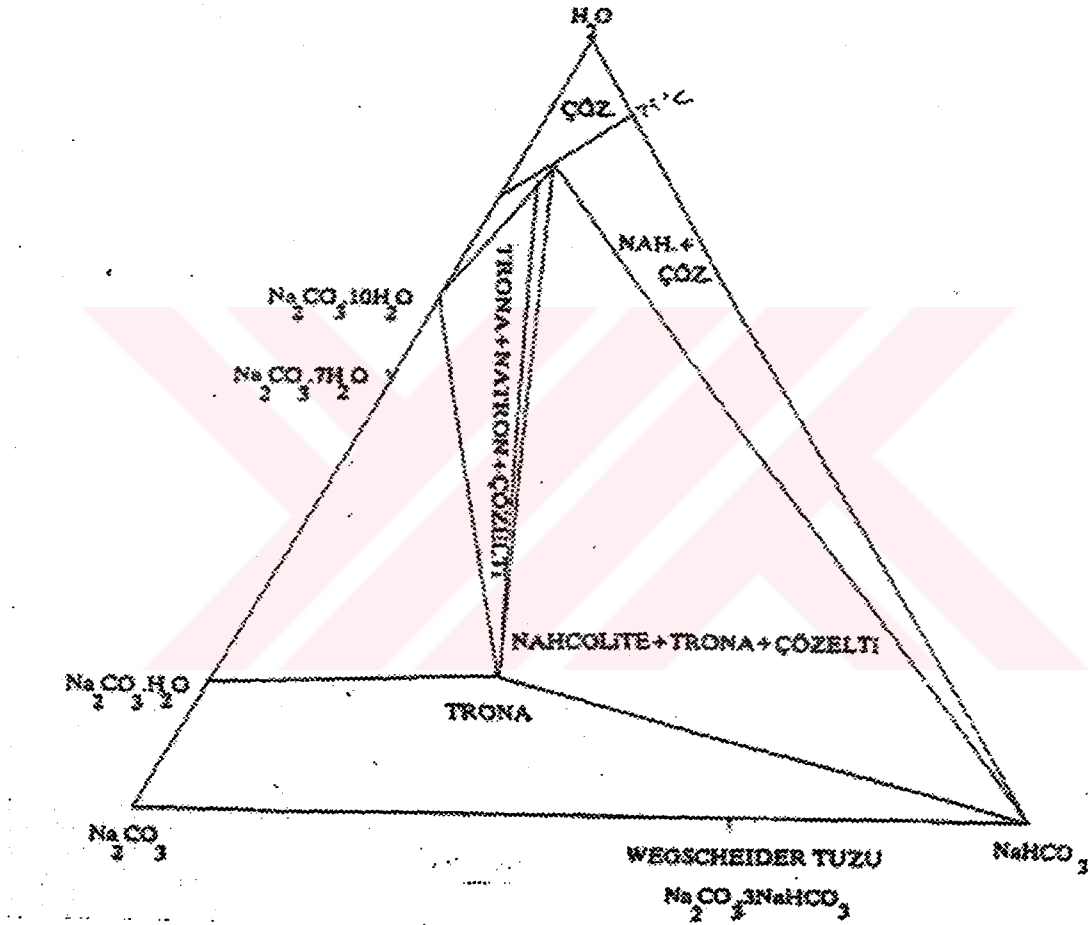
Bunlar Nahcolite (Na_2CO_3), Trona ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{NaHCO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), Natron ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$) ve Thermonatrite ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$)'dir. İlk kez Wegscheider ve Mehl [5] tarafından muhtemel varlığından söz edilen $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 3\text{NaHCO}_3$ tuzunun ise, yalnız yüksek sıcaklıklarda teşekkül ettiği 1963 yılında Fahey ve Yorks tarafından açıklanmıştır. Bu tuz, Wegscheider tuzu olarak adlandırılmıştır.



Şekil 2-1 : $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-NaHCO}_3\text{-H}_2\text{O}$ üçlü sistemi

Şekil 2-2, $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-NaHCO}_3\text{-H}_2\text{O}$ sistemindeki bilinen katı faz bileşimlerini, 1 atm basınç ve 25°C için göstermektedir [6,8]. Üçlü sistem üzerine yapılan ilk denemeler $25\text{-}30$ ve 50°C 'ler için olmuş ve bu sıcaklıklardaki izotermier çıkartılarak trona çifte tuzunun, 21.26°C ile en az 50°C arasında, doymun çözelti içindeki stabilitesini koruduğı gözlenmiş ve tronanın inkongruent bir çözünürlüğe sahip olduğı saptanmıştır [9]. Daha yüksek sıcaklıklardaki izotermier için yapılan deneysel çalışmalarda 60°C ile 100°C arasında, özellikle de 85°C 'nin üstündeki sıcaklıklarda, düşük sıcaklıklarda rastlanmayan tuzların varlığı saptanmış, Wegscheider ve Mehl bu tuzların tetra sodyum hidrokarbonat ($\text{Na}_2\text{CO}_3.2\text{NaHCO}_3.2\text{H}_2\text{O}$) ve penta sodyum hidrokarbonat ($\text{Na}_2\text{CO}_3.3\text{NaHCO}_3.x\text{H}_2\text{O}$) yapısında olduğunu belirtilmiştir [5]. Söz

konusu katı fazlardan, $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 3\text{NaHCO}_3$ fazının varlığı daha sonraki deneysel çalışmalarla da ispatlanmış, ancak diğer tuz için kesin bir veri elde edilmemiştir [10]. Halen literatürdeki 60°C ile 100°C arasındaki çözünürlük dengeleri için kesinleşmiş veriler yoktur [11]. 100°C üzerindeki sıcaklıklarda yapılan deneysel çalışmalarda ise, tronanın, 21.26°C 'den $195 \pm 5^\circ\text{C}$ 'ye dek stabilitesini koruyabildiği saptanmıştır.



Şekil 2-2 : 1 atm. ve 25°C 'deki Na_2CO_3 - NaHCO_3 - H_2O Sisteminin Faz Diyagramı

Yukarıdaki özeti verilen çalışmalar sonucunda, sodyum karbonat minerallerinin çözünürlük mekanizmaları yeterince aydınlatılmış ve bu verilerden yola çıkılarak,

sodyum karbonatın çözünürlük ürünleri, Pitzer tarafından geliştirilmiş bir iyon-çetkileşim modelinin de yardımıyla detaylı olarak incelenmiştir [12].

Basit bir iyonik yapıya sahip olduđu bilinen sesquikarbonat kristalleri üzerinde yapılan yapı aydınlatma çalışmalarında ise herbir sodyum iyonunun, bir kısmı karbonat iyonuna bir kısmı ise su molekülüne ait olan altı adet oksijen atomu ile çevrili bulunduđu görölmüştür. Karbonat iyonunun 120°C açı ile planar halde olduđu ve ortalama C-O bağıının 1.23-1.26Å° arasında değıştiğı, su molekülününse ortalama 2.72-2.77Å° uzunluğundaki hidrojen bağlarıyla oksijen ve karbonat iyonlarına bağlandığı gözlenmiştir [13]. Sodyum sesquikarbonat kristalinin, hem kısa hem de uzun hidrojen bağlarını yapısında bulundurduđu için ilginç bir kristal özelliğı sergilediğı ve bu nedenle araştırmacıların dikkatini çektiğı literatürde bildirilmektedir [13,14]. Monoklinik yapıya sahip sesquikarbonat kristallerden yola çıkarak elde edilen proses ürünlerinden yalnız NaHCO₃ yine monoklinik bir kristal yapı gösterir. Na₂CO₃ beyaz toz halde higroskopik bir kristalken, Na₂CO₃.H₂O renksiz ve ortorombik yapıda bir kristaldir [15,16].

Tronanın üzerindeki yapılan diferansiyel termal analizler, mineralin dehidretasyonu ve dekompozisyon ısı derecelerinin düşük olduğunu ve düşük sıcaklıklarda endotermik reaksiyon vererek H₂O ve CO₂ ürünlerine dönüştüğünü göstermiştir [17].

Trona mineralinin incelenen diğeri bir özelliğı de, insan sağlığı üzerindeki etkisidir. Bu konuya ilişkin yapılan çalışmalarda tronanın oluşturduđu ve pH'ı yaklaşık 10.5 olduđu bilinen tozların, özellikle solunum yolları ve cilt üzerindeki olumsuz etki yarattığı gözlenmiştir [18].

2.2. Tronanin Kullanım Alanları :

Çoğunlukla, elde ediliş yöntemi ile ilişkili olarak, "doğal soda" veya "sentetik soda" adı altında geniş bir kullanım sahasına yayılan sodanın, kristal suyu içeren formları, kimya sanayiinde nisbeten daha az rol almaktadır. Özellikle cam, kimyasal madde, deterjan, kağıt ve tekstil gibi endüstrilerin yanısıra, dökme demirin rafinasyonu, su temizleme ve asit nötralizasyonu işlemlerinde de önemli bir girdi olarak karşımıza çıkan sodanın monohidrat ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$) formu fotorafçılıkta banyo hazırlamak için, dekahidrat ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$) formu da pamuk ve keten kumaşların ağartılması amacıyla kullanılır [19, 20]. Katı yakıtların yakılması sonucu oluşan ve önemli hava kirleticilerinden birisi olan SO_2 gazının arıtılmasında son senelerde soda ve trona kullanımı üzerine yoğun çalışmalar yapılmaktadır.

Endüstride kullanımı açısından, sodanın "hafif" ve "ağır" olmak üzere iki türde üretimi söz konusudur. Hafif soda, karbondioksit kaynağı olması nedeniyle alkolsüz içeceklerden yangın söndürücülerdeki kimyasal madde üretimine, sepilme ve yün hazırlama gibi sanayi işlemlerinden, çözündüğünde gaz çıkaran tuzların üretimine ve hatta tıp alanına kadar geniş bir kullanım sahasına sahip NaHCO_3 'ün kalsinasyonu ile, ancak bu kez tek kristal su içeren sodanın kalsinasyonu ile üretilir. Sabun, deterjan, yağ ve tekstil endüstrilerinde soda çözelti halinde kullanılır ve dallarında tercih edilir. Cam ve demir çelik endüstrilerinde ise ağır soda kullanılır.

2.3. Beypazarı Trona Minerali :

MTA Genel Müdürlüğü tarafından 1979 yılında yapılan sondajlı kömür arama çalışmaları sırasında, Ankara'nın Beypazarı ilçesinde trona rezervine rastlanmıştır. 1981 yılında başlayan sondaj çalışmaları, rezervin, ticari olarak işletilmeye müsait miktarda mineral içerdiğini göstermiştir. Rezerv miktarının belirlenmesi amacıyla yapılan çalışmalar sonunda, Beypazarı trona yataklarının, dünyanın ikinci büyük doğal soda yatakları olduğu belirlenmiştir. Mineralin işlenmesi için en uygun prosesin seçimi amacıyla, bugüne dek gerek jeolojik saha etüdları, gerek minerolojik ve kimyasal yapı araştırmaları ve gerekse proses geliştirme ve fizibilite çalışmaları çerçevesinde pekçok

alıřma yapılmıřtır. İřletim hakkı halen Etibank'da olan Beypazarı trona rezervinin deęerlendirilmesi hususunda kesin kararlar henüz alınamamıřtır.

Beypazarı trona yataęı, ileye 15 km. uzaklıkta, akıloba, Zaviye ve Bařören kyleri arasında yer almaktadır. Yaklařık 8 km²'lik bir alana yayılan yatak, gneyden Zaviye fayı, kuzeyden akıloba fayı ile evrilidir. Kanlıceviz fayı ise rezervi Arıseki ve Elmalıbeli blgelerine ayırmaktadır. Yatak, genel olarak bitml řeyl, kıltařı ve tfit tabakalarıyla arakatlı olup, sodalı zon kalınlıęı yaklařık 115 metreye kadar ıkabilmektedir. Yapılan sondaj alıřmaları sonucunda, kalınlıkları 2cm'den 11.5m'ye kadar deęiřen birok trona ve nahcolite damarları tespit edilmiřtir.

Sahadaki jeokimya alıřmaları, sondajlar bařlamadan nce trona yataęı evresindeki kuyu ve kaynak suların incelenmesi řeklinde yapılmıřtır. Jeofiziksel arařtırmalarda, sodalı zonun giriř ve ıkıřını tespit etmek amacıyla yatak evresinde rezistivite alıřmaları yapılırken, hidrolojik alıřmalar trona yataęındaki iki farklı akiferin zelliklerini ve parametrelerini belirlemek zere yoęunlařtırılmıřtır. Bu alıřmalar ıřıęında, yataęın oluřumu iin bařlangı noktasını, miyosen biriminde oluřtuęu tahmin edilen kapalı bir gl havzasının teřkil ettięi saptanmıřtır. Zaman iinde iklim deęiřiklikleri nedeniyle klen glde, Ca ve Mg karbonat kelimleri sonucu pH ykselmiř, te yandan Kızılcahamam volkanizması yoluyla da, trona oluřumu iin ortamın ihtiyaı olan Na iyonları, volkanik kl ve tfitik malzemeye havzaya gelmiřtir. Kurak iklime geiř sırasında, nemli dnemlerde yařayan alglerin dibe kmesi ve havzanın akarsu ve termal kaynaklar vasıtasıyla da beslenmesi sonucu, bol CO₂ kaynaęı oluřmuř ve bylece ortam trona yataklanması iin gereken iyonlarca zenginleřtirilmiřtir. Yatak iin muhtemel kelme hızı 0.2-0.3cm/yıl olarak tahmin edilmektedir [21].

Yataklar genel olarak, tenr ve kalınlık ynnden daha dřk deęerlere sahip olan ve 6.2km²'lik bir alana yayılmıř bulunan, alt trona zonu ile 12.9km²'lik bir alan kaplayan ve nisbeten daha kalın ve yksek tenrde trona ieren st trona zonu olmak zere iki ayrı zon halinde teřekkl etmiřtir. Benzer kkenli olmalarına raęmen,

çökelme ve depolamaya etken teşkil eden volkanik aktivitenin şiddetine bağlı olarak, alt ve üst zonlardaki bazı iz elementler kısmi farklılıklar göstermektedir.

Yataktaki damarların ince olması ve çok sık bir şekilde sedimentanlar ile ardalanma göstermesi, havzada etkili olan evaporasyon sıcaklıklarının 25 ile 40°C arasında seyrettiğine işaret etmektedir, havzanın orta bölümlerinde ise çok ender olarak kalın damarlara rastlanmıştır. Düşük sıcaklıkta evaporasyon düşüncesini destekleyen bir diğer bulgu, yüksek sıcaklıklarda ve düşük bikarbonat oranlarına sahip çözeltilerden çökebilen termonatritin, havzada eser miktarda gözlemlenmesidir [17] .

Formasyonda yeralan iz elementler açısından incelendiğinde, tronanın homojen bir davranış sergilediği gözlenmektedir. Elementler geniş bir dağılım aralığı göstermemekte, genellikle birbirine yakın sayılan sınırlar içerisinde izlenmektedir. Analizler sonucunda tespit edilen bor, flor ve arsenik elementleri, ortamı oluşturan iyonların genellikle mağmatik kökenli olduğunu ortaya çıkarmıştır. Petrografik araştırmalarda tespit edilen dolomit varlığı, kalsiyum ve magnezyum iyonlarının tespiti ile kimyasal açısından da desteklenmiş, her iki zonda da baryum ve stronsyum'un bulunması, yatağın mağmatik kökenli olma ihtimalini kuvvetlendirmiştir. Havzada klor iyonunun etkili olduğunu gösterecek bir bulguya rastlanmaması ve halite, northupite gibi klor tuzlarının, düşük sıcaklıklar nedeniyle formasyonda depolanmaması, mevcut trona yataklarının kalitesini belirlemede olumlu bir nokta olarak kaydedilmiştir. Doğal soda yataklarının işlenmesinde klor kadar problem yaratan diğer iyon da sülfat iyonu olup, yapılan analizlerde Beypazarı tronasının önemli olmayan miktarlarda sülfat içerdiği tespit edilmiştir [17] .

Formasyonda, ana mineral olarak bulunan tronanın yanısıra nahcolitinde ortaya çıkarılması, bu depozitin bir başka ilginç özelliğidir. Çünkü, aynı anda oluşarak, birbirlerine dönüşebilen yapıda olmalarına rağmen, bu iki soda mineralinin beraber depolanmaları dünya üzerinde pek görülmemektedir. Hem alt hem de üst zonun üst kısımlarında rastlanan nahcolite, daha ziyade mercekler halinde olup, killerle ara katkılı, küçük hacimli kümelenmeler oluşturmuştur. İçerdiği iz elementlerinse, tronadakinden

farklı yapı göstermemekle beraber, genellikle daha düşük miktarda oldukları tespit edilmiştir.

Trona yataklarının alt ve üst zonlarında görülen ve kilaşına dönüşmemiş yapısıyla killer, genellikle bir kaç santimetre kalınlığında olarak trona ile aralanma göstermektedir. Kil içeren trona mineralinin, gerek renk gerekse biçim açısından pekçok gruba ayrılması mümkün olup, formasyondaki kil minerallerinin fizikokimyasal koşullara bağlı olarak kaolinit ve illit şeklinde teşekkül ettiği ve dikey bir dağılım gösterdikleri tespit edilmiştir [22] .

Beypazarı tronasının termal davranımı üzerinde yapılan denemelerde ise, gerek tronanın gerekse nahcolitin düşük sıcaklıklarda endotermik ürünler verdiği gözlenmiş, tronanın 132°C’de dehidratasyona uğradığı, 146°C’de ise dekompozisyona uğradığı tespit edilmiştir [17] .

Yukarıda genel olarak özelliklerinden bahsedilen Beypazarı trona yataklarının rezerv miktarını belirlemek üzere çeşitli çalışmalar yapılmıştır. İlk araştırmalarda yaklaşık 50-70 milyon ton [23, 24] olduğundan söz edilen rezervin daha sonra 170 milyon ton [25] civarında bulunduğu belirtilmiştir. MTA tarafından yapılan rezerv hesaplama çalışmalarında Beypazarı tronasının yaklaşık 200-250 milyon tonluk [21, 26, 27] bir rezerv olduğu belirtilirken, bir başka hesaplama sonucu da 376 milyon ton [17] olarak literatürde yer almaktadır. Özellikle trona ve nahcolitin beraber depolanmasının ilginç bir örneği olması, Wyoming tronasına nazaran daha düşük klor ve sülfat iyonları içermesi, yine bu yataklarla mukayese edildiğinde daha yüksek sodyum, karbonat ve bikarbonat içerikli bir yapı sergilemesi nedeniyle, Beypazarı tronasının Wyoming tronasına kıyasla üstünlük arzettiği söylenebilir.

Kolay çözünen bir mineral olan tronanın bu özelliğine, mineralin işlenmesi açısından bakıldığında, çözücü olarak suyun kullanılabilmesi, gerek proses yürüyüşü gerekse maliyet açısından pekçok üstünlüğü de beraberinde getirmektedir. Ancak tronanın su içinde çözünerek faylı zonlardan yeraltı suyuna kaçma ihtimali, kolay

öz nmesinin olumsuz y n n  teşkil etmektedir. Beypazarı trona yataklarının işletme y nteminin,  z c  sistem gibi diğ r parametrelerin de g z n nde tutulmasını gerektirirken, yukarıda belirtildiğı gibi, yatağın klor ve s lfat iyonlarını az miktarda iermesi, seimini etkileyen  nemli ve olumsuz bir parametreyi elimine etme  st nl ğ  saėlamaktadır. Beypazarı trona yatakları iin ilk jeolojik ve hidrojeolojik alıřmalar MTA Orta Anadolu B lge M d rl ğ  tarafından yapılmıřtır [21,26]. G ndoğdu, N. ve arkadařları tarafından Hacettepe  niversitesinde yapılan alıřmalarda ise yatağın kil minerolojisi incelenmiřtir [22]. Helvacı, C. ve arkadařları ise T B TAK tarafından desteklenen bir proje erevesinde y renin trona potansiyelini belirlemeye alıřmıř, rezervin jeolojik, minerolojik ve jeokimyasal  zelliklerini belirlemiřlerdir [28]. Gerek sahanın tanınması gerekse mineral yapısının aydınlatılması amacıyla yapılan bir alıřma da Suner, F. tarafından İT  Maden Fak ltesi'nde doktora tezi olarak sunulmuřtur [17].

İT  Kimya M hendisliğı B l m 'nde 1985 yılında bařlatılan alıřmalarda ise, trona mineralinden hafif ve ağır soda  retiminde kullanılabilecek proseslerin geliřtirilmesi amacına y neliktir. Laboratuvar  lekte gerekleřtirilen alıřmalarda, monohidrat, sesquikarbonat, karbonatlařtırma ve alkali ekstraksiyon proseslerinin Beypazarı tronasına uygulanabilirlik řartları arařtırılmıřtır [29, 30, 31]. Monohidrat ve sesquikarbonat prosesleri ile ilgili bir bilgisayar programı geliřtirilerek, proseslerin fizibilite alıřmalarına adım atılmıřtır [32]. Ayrıca, DPT tarafından desteklenen bir teknolojik arařtırma projesi erevesinde Beypazarı tronasından soda  retimi deėerlendirilmesi yapılmıřtır.

Beřinci Beř yıllık Planda, 1991 yılı iinde tronadan soda  reten bir tesisin faaliyete gemesi  ng r l rken, halen bu konuda somut bir adım yoktur [26]. Mevcut soda  retim kapasitemizle soda ihtiyacımızın bařabař duruma gelmiř olması bir i pazar sorunu iken,  zellikle Batı Avrupa  lkelerindeki soda talep artıřı, Beypazarı tronasının biran  nce devreye alınması iin geerli bir sebeptir. Ayrıca, ABD soda  reticilerinin pazar kaybetmemek iin  retim izgilerini deėiřtirmenin yanısıra, diğ r  lkelerdeki soda yataklarını gerek sermaye gerek teknolojik olanaklarla kazanmak ve aktif ortaklıklar

yaratmak niyetinde oldukları bilinmektedir. Bu yaklaşımın bir örneđi, yakın zamanda Beypazarı trona yatakları içinde görölmüştür [33] .

Beypazarı doğal soda rezervine ilişkin bu hem olumlu, hem de olumsuz görünüm çerçevesinde yapılması gereken, trona mineralinin değerdendirilmesiyle ilgili proje ve fizibilite çalışmalarının biran önce tamamlanmasıdır. Yabancı sermaye ve teknolojik katılım sınırları bizim belirleyeceğimiz, gerek üretilen soda kalitesi, gerekse maliyet açısından uygun, gerçekçi projelerin bir an önce devreye alınmasına gayret edilmeli, gecikmelerin iç ve dış pazarlarındaki gerilemeyi de beraberinde getireceđi unutulmamalıdır.



BÖLÜM 3: PÜSKÜRTMELİ KURUTUCU

3.1. Püskürtmeli Kurutucu Hakkında Genel Bilgi :

Püskürtmeli kurutma, akışkan beslemeyi kuru partiküllere çeviren bir işlemdir. Püskürtmeli kurutucu, atomizör yardımıyla kurutulacak maddenin çözeltisinin sıcak gaz faz içerisine ince damlacıklar halinde püskürtüldüğü dik, silindirik bir kurutma odasıdır. Sıvı besleme kurutma odasına üsten püskürtülür. Oluşan tanecikler sıcak hava ile karşılaşır. Taneciklerdeki nem buharlaşır ve beslemedeki orjinal katı, küresel partiküller olarak elde edilir. Püskürtmeli kurutucular gıda, kimya ve ilaç endüstrilerinde geniş bir şekilde kullanılmaktadır [34].

Isı ve kütle transferi, dağılan tanecikler ile sıcak gazın doğrudan temasa getirilmesi ile gerçekleşir. Kurutmanın tamamlanmasından sonra, soğuyan gaz ile katılar ayrılır. Kurutulmuş kaba taneciklerin sınıflandırılması ve ayrılması kurutma odasının altında kısmen gerçekleşebilir. İnce taneciklerin gazdan ayrılması ise siklonlarda gerçekleşir.

Püskürtmeli kurutucuların kullanımı, su içeren çözelti ve karışımlara uygulanan basit kurutma prensibine dayanır. Fazların teması açısından püskürtmeli kurutucular pnömatik taşıyıcılara benzerler [34]. Püskürtmeli kurutucularda hem çok hızlı (katı maddenin kurutucu içerisinde kalma zamanı 30 saniyeden az olabilir) bir kurutma yapılmakta hem de gayet muntazam küreciklerden ibaret bir ürün elde edilmektedir. Pek çok maddenin kurutulmasında ele geçen bu küreciklerin içlerinin boş olduğu görülür. Bu husus şu şekilde açıklanabilir. Teşekkül eden damlacıkların dış yüzü kuruduktan sonra damlacığa ısı transferi olmaktadır. Bu ısı transferi, iç kısımda kalan nemin dışarıya doğru difüzyonundan daha hızlı gerçekleşmektedir. Bu hal damlacık içerisinde buhar teşekkülüne sebep olmakta; bu buhar, viskoz olan damlacığı bir balon

gibi şişirerek ona küre şekli vermekte ve kendisi de, küre kabuğunu çatlatarak kaçmaktadır. Tanecik büyüklüğü atamizörün çalışma şartlarına, sıvının katı içeriğine, viskozitesine, yoğunluğuna ve besleme hızına bağlıdır.

Püskürtmeli kurutucular ayrıca, sıcak gazları kurutmak için kullanılabilir. Püskürtmeli kurutucuda kuruma düşük sıcaklıkta meydana gelmekte ve ürün çok kısa bir zaman kurutucuda kalmaktadır. Bu husus kahve ekstratının, meyve sularının, sütün ve bunlara benzer maddelerin, lezzet ve kokularına bir zarar vermeksizin kurutulmalarına imkan verir. Genellikle mekanik olarak kurutulamayan, ısıya hassas veya yüksek sıcaklıkta yapışan maddelere uygulanır. Aksi takdirde ekonomik olmaz. Püskürtmenin üst kısımdan yapıldığı bir kısım püskürtmeli kurutucularda gazlar, püskürtülen madde ile birlikte aşağı doğru akarlar ve artık gazlar, alt kısma yakın bir noktadan dışarı alınırlar. Diğer bir tip püskürtmeli kurutucuda ise, hem püskürtülen maddenin ve hem de gazların akımı, aşağıdan yukarıya doğrudur.

Püskürtmeli kurutucular oldukça pahalı cihazlardır ve şu hallerde kullanılmaları uygun olur :

- Diğer kurutuculardan alınan üründen daha yüksek kalitede ürün elde edilmesi istenildiğinde.
- Büyük miktarda maddenin kurutulması gerektiğinde.
- Ürünün fiziksel karakterinin püskürtmeli kurutucuda kurutulmasını gerektirmesi.

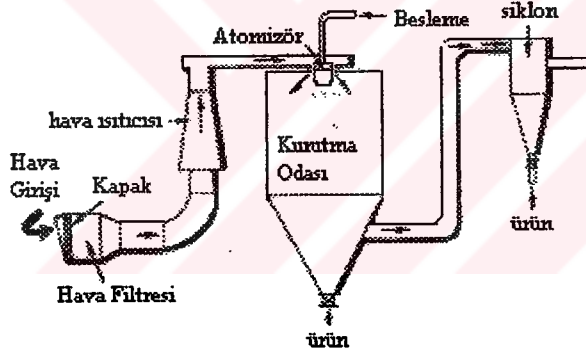
3.2. Püskürtmeli Kurutucu Çalışma Prensipleri :

Bir püskürtmeli kurutucuda, çözelti veya bulamaç ince damlacık bulutu şeklinde sıcak hava akımı içine püskürtülür. Nem damlacıklardan uzaklaşır ve geriye kalan kuru damlacık gaz akımından ayrılır. Gaz ve sıvı akışı, paralel akım, ters akım veya bunların kombinasyonu şeklinde olabilir.

Damlacıklar ya püskürtme nozülleri ya da yüksek hızlı püskürtme diskleri tarafından silindirik kurutma odası içinde şekillenir. Her iki durumda da, ıslak katı

taneciklerin veya damlacıkların kuruma olayından önce katı yüzeye çarpmalarını önlemek gereklidir ki bu yüzden kurutma odaları geniş olmalıdır.

Şekil 3-1’de bir püskürtmeli kurutucu görülmektedir. Hava filtresinden emilen hava ısıtıcıdan geçirilir ve kurutma kamarasının üstündeki kapaktan doğru kamara içine beslenir. Aynı anda hava yardımıyla dönen atomizörden ince tanecikler halinde püskürtülen çözelti ile sıcak hava karşılaşır. Başlangıçta püskürtülen çözelti ve hava karışımı spiral bir yol takip ederek, kurutucu tabanına doğru iner. Bu esnada çözücü buharlaşır, sıcak gaz, hava karışımı ile birlikte yönünü değiştirir, kurutucunun merkezinden yukarı geçerek kurutucuyu terk eder ve siklona gider. Kurutulmuş ürün konik tabanda toplanır. Siklona bir açı ile giren sıcak hava bir dönme hareketi ile hareket ederken santirfuj kuvvet katı parçacıkları merkezkaç kuvveti ile fırlatır ve katı parçacıklardan temizlenmiş hava siklonu terk eder [35] .



Şekil 3-1 : Püskürtmeli Kurutucu [35].

3.3. Püskürtmeli Kurutucuda Gaz Tutma Çalışmaları :

Hava kirliliğinin insan sağlığını etkileyici boyutlara ulaşması üzerine, sağlığa zararlı gazlardan kükürt dioksit ve azot dioksit gazlarından temizlenmesi amacıyla yoğun araştırmalar yapılmaktadır. Atmosferdeki kükürt dioksit oranının 24 saatlik ortalamasının 0.1 ppm değerinden daha yüksek değerlere ulaşmasının sağlık açısından zararlı sonuçlar doğurduğu kabul edilmektedir. Birçok ülkedeki hava kirliliği

standartları bu değerin de çok altındadır. Bu şartları sağlayabilmek için baca gazındaki SO₂ derişimini 100-200ppm.'in altında tutmak gerekmektedir. İçinde %2-4 kükürt bulunan kömürlerin yanması sonucu baca gazlarında ortalama 1500-3500ppm. oranında SO₂ açığa çıkacağı düşünülürse bu kükürt dioksidin büyük bir kısmının tutulması gereğinin kaçınılmaz olduğu görülür.

1980'li yıllara gelinceye kadar baca gazından SO₂'nin hep sulu çözeltilere absorplanması düşünülmüştür. Son yıllarda ise *kuru yıkama* veya püskürtmeli-kurutmalı absorpsiyon olarak adlandırılabilir bir yöntem geliştirilmiştir.

Kuru absorplama proseslerinde çözelti, çok ince damlacıkların spreyini sağlayan atomizelere pompalanır. Damlacıklar çok geniş bir bölme içerisinde gelen baca gazı ile karışır ve absorpsiyon ile damlacıkların içinde sülfidler ve sülfatlar oluşur. 120°C civarında hemen hemen aynı anda karışma haznesine giren baca gazının ısısı damlacıktaki suyu buharlaştırır. Böylece gaz, spray dryer'dan ayrılmadan önce bir kuru toz oluşturur. Bu nedenle bu arıtmaya *kuru ıslak arıtma* denir.

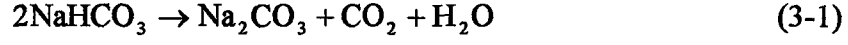
Baca gazındaki kükürt dioksitin alkali çözeltiler kullanılarak püskürtmeli kurutucuda tutulması, yaş sistemde çalışan baca gazı arıtım proseslerine göre daha düşük yatırım maliyeti gerektirmesi, katı ürün elde edilmesi, tıkanma, erozyon, korozyon problemlerinin azlığı ve işletme kolaylıkları nedeniyle önem kazanmıştır. Doğu v.ç.a. [36] tarafından yapılan çalışmada, kireç çözeltisi kullanılarak SO₂ tutulmasında, kurutucu çıkışındaki bağıl nemin %9'dan %65'e artmasıyla, bir saniyeden kısa temas süresi içinde, sistemdeki SO₂ tutulmasının %20 den %76'ya çıktığı gösterilmiştir. Sisteme beslenen Ca/S oranı bağıl nemin yüksek olma durumunda önem kazanmaktadır. Çalışmanın sonuçları kurutucu sıcaklığının 60-80°C aralığında ve çıkıştaki bağıl nem oranının da %70'in üzerinde seçilmesi gerektiğini göstermiştir. Özellikle son on yıl içinde püskürtmeli kurutucularda SO₂ tutulması konusunda yoğun araştırmalar başlatılmış olup bu sistemin yaş sistemlere göre önemli üstünlüklerinin olduğu gösterilmiştir. Bu proseste genellikle kireçtaşı kullanılarak hazırlanan çözelti püskürtmeli kurutucuya küçük damlacıklar halinde püskürtülmekte, kurutucu içinde

baca gazı ile temas sonucu hem kuruma gerçekleşmekte hem de SO_2 alkali madde ile reaksiyona girerek tutulmakta ve kuru ürün olarak sistemden alınmaktadır.

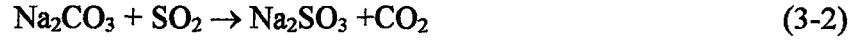
Kaplan v.ç.a.[37] tarafından yapılan çalışmalarda pilot boyuttaki bir püskürtmeli kurutucuda %90'a varan oranda SO_2 'nin tutulabildiği gösterilmiştir. Bu çalışmalarda kullanılan püskürtmeli kurutucudaki alıkonuş süresi 10 saniye dolayındadır. Kireçtaşı kullanılarak yürütülen çalışmalarda çözelti içine CaCl_2 eklenilmesinin SO_2 tutma verimini arttırdığı Stromberg v.ç.a.[38] tarafından gösterilmiştir.

Düşük sıcaklıklarda SO_2 tutulmasında aktif sodanın çok etkin olduğu literatürde ifade edilmektedir [39, 40]. Sodanın kireçtaşına göre kükürt dioksitine karşı çok daha yüksek aktivite göstermesi bu konudaki çalışmaları hızlandırmıştır. Uçar v.ç.a. [41] tarafından püskürtmeli kurutucuda trona çözeltisi kullanılarak yürütülen deneylerde SO_2 tutma veriminin Na/S mol oranının artmasıyla arttığı bu oranın stokiometrik değer olarak seçilmesi halinde verimin %80 olduğu Na/S oranının daha da artırılmasıyla %100'e varan tutma verimlerine ulaşıldığı gözlenmiştir. Sodyum karbonatın 200°C dolayında kalsinasyonu sonucu meydana gelen aktif soda, kükürt dioksitine karşı yüksek aktivite göstermektedir. Hartman [42] tarafından yapılan çalışmada bu husus vurgulanmış ve sodyum karbonatın sodyum sülfata dönüşümünün %100'e ulaşabildiği gösterilmiştir. Desülfürizasyon çalışmalarında soda kullanımını sınırlayan tek faktör daha pahalı bir artııcı olmasından kaynaklanmaktadır. Ancak doğal sodanın bulunması durumunda desülfürizasyon proseslerinde soda kullanımı ekonomik olmaktadır. Doğal soda, sodyum bikarbonat (Nahcolite) ve sodyum karbonat-bikarbonat (Trona) şekillerinde bulunabilmektedir. Doğal sodanın bu amaçla kullanılması durumunda en ekonomik yaklaşım, ya sodanın baca gazı içerisine kuru olarak püskürtülmesi ve torba filtreler ile tutulması, ya da püskürtmeli kurutucularda baca gazı ile temas ettirilmesi olmaktadır. Bu gibi sistemlerde 150°C - 200°C dolayında SO_2 ile aktif soda çok hızlı bir şekilde reaksiyona girebilmektedir [43, 44, 45].

Trona'nın ısıtılmasıyla önce kristal suyu ayrılmakta daha sonrada 200°C'nin altında sodyum bikarbonat parçalanarak sodyum karbonat vermektedir [46].



diğer reaksiyonlar ise,



Bu şekilde üretilen sodyum karbonat mikrogözenekli ve yüzey alanı oldukça yüksek bir yapıya sahip olup aktif soda olarak isimlendirilmektedir. Ağca [47] ve Doğu [44] tarafından yapılan çalışmalarda aktif sodanın mikrogözenekli bir yapıya sahip olduğu ve 120-200°C aralığında SO₂'nin tutulmasında çok aktif olduğu gösterilmiştir.

giriş ve çıkış sıcaklığına getirilen püskürtmeli kurutucuda; farklı sıcaklıklar, değişik konsantrasyondaki trona çözeltileri ve farklı orandaki hava-SO₂ karışımları için bu deney tekrarlanmıştır. Deneyler sonucunda elde edilen ürünlerden alınan numuneler analiz edilmiştir.

4.3. Uygulanan Analizler :

4.3.1.Sodyum Oksit Tayini

3.1 gr ağırlığında alınan numune 100 ml suda çözülür. Safsızlık varsa ortamdan süzülerek uzaklaştırılır. Berrak çözelti metiloranj indikatörü varlığında 1 N H₂SO₄ ile çözelti rengi sarıdan pembeye dönünceye kadar titre edilir.

Yöntemde kullanılan 1 N H₂SO₄ çözeltisi 30 ml derişik H₂SO₄ çözeltisinin litreye tamamlanıp Na₂CO₃ 'a karşı ayarlanması ile elde edilir. Çözeltideki Na₂O yüzdesi aşağıdaki formül olarak hesaplanır.

$$\% \text{ Na}_2\text{O} = \frac{V * F * 3.1}{\text{Numune Ağırlığı}} * 100 \quad (4 -1)$$

Burada :

V : H₂ SO₄ sarfiyatı

F : H₂SO₄ çözeltisinin faktörüdür.

4.3.2. Sodyumbikarbonat Tayini

8.4 gr ağırlındaki numune yaklaşık 100 ml suda çözülür. Çözelti 1 N NaOH ile taze hazırlanmış AgNO₃ dış indikatörü varlığında, alınan bir damla çözelti üzerine damlatılmış AgNO₃ ile, damlanın beyaz olan rengi açık kahverengiye dönünceye kadar titre edilir. Yöntemde kullanılan 1 N NaOH çözeltisi 41 gr NaOH' in suda çözülerek

litreye tamamlanmasından elde edilir, AgNO_3 dış indikatörü ise 1 gr AgNO_3 'ın 9 ml suda çözülmesi ile hazırlanır. Çözeltideki NaHCO_3 yüzdesi (4-2) ,lu formüle göre hesaplanabilir.

$$\% \text{NaHCO}_3 = \frac{V * F * 8.4}{\text{NumuneAğırlığı}} * 100 \quad (4-2)$$

Burada :

V : NaOH sarfiyatı

F : NaOH'in faktörüdür

4.3.3. Sodyumkarbonat Tayini

Na_2CO_3 tayini numunenin NaHCO_3 yüzdesi ve Na_2O yüzdesi üzerinden (4-3) nolu formüle göre hesaplanır.

$$\% \text{Na}_2\text{CO}_3 = [\% \text{Na}_2\text{O} - 0.3690(\% \text{NaHCO}_3)] * 1.7097 * 100 \quad (4-3)$$

4.3.4. Sodyumsülfat Tayini

5 gr numune yaklaşık 200 ml suda çözülerek, metilkırmızısı indikatörü varlığında 1 N HCl ile çözelti rengi pembe oluncaya kadar asitlendirilir. Çözünmeyen safsızlıklar varsa süzülür. Elde edilen süzüntü 1000 ml'ye tamamlanarak, 100 ml' si analiz için alınır. Bu çözeltiye sıcak BaCl_2 çözeltisinden yaklaşık 5-10 ml ilave edilerek bir gece boyunca su banyosunda çökmeye bırakılır. Su banyosundan alınan çözelti süzülür ve sıcak destile su ile yıkanarak aşırı klorür iyonları ortamdan uzaklaştırılır. Süzme operasyonunda kullanılan filtre kağıdı porselen krozede 750°C de yakılır. Bu işlemten sonra desikatörde soğutulup tartılır. Tartılan kroze ağırlından boş kroze

ağırlığı çıkartılırsa elde edilen Na_2SO_4 miktarı bulunur. Cevherdeki sülfat miktarı (4-4) nolu formül ile hesaplanabilir.

$$\% \text{Na}_2\text{SO}_4 = \frac{\text{TartılanSO}_4 * 0.4115}{100\text{mlNumuneAğırlığı}} * 100 \quad (4-4)$$

Yöntemde kullanılan BaCl_2 çözeltisi 100 gr $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 'ın litreye tamamlanması ile elde edilmektedir.

4.3.5. Sodyumklorür Tayini

5 gr numune 100 ml suda çözülür. Çözelti karışık indikatör varlığında derişik HNO_3 ile renk sarıya dönünceye kadar asitlendirilir. Daha sonra çözelti rengi mor oluncaya dek $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ çözeltisi ile titre edilir. Kullanılan karışık indikatör difenil karbozan ile bromfenol mavisinin karışımıdır. Klorür miktarı denklem (4-5) ile hesaplanmaktadır.

$$\% \text{NaCl} = \frac{V_{\text{Hg}(\text{NO}_3)_2} * \text{ClEşdeğeri}}{\text{NumuneAğırlığı}} * 100 \quad (4-5)$$

4.3.6. Suda Çözünmeyenler

Yaklaşık 20 gr numune 30 ml suda çözülür. 3 nolu sabit tartımı alınmış Gooch krozesinden süzülür ve 100°C de kurutulduktan sonra tartılır. Alınan tartımdan boş krozenin ağırlığı çıkartılarak (4-6) nolu denklem uyarınca suda çözünmeyenlerin yüzdesi bulunur.

$$\% \text{Suda Çözün meyenler} = \frac{\text{SafsızlıkMiktarı}}{\text{NumuneAğırlığı}} * 100 \quad (4-6)$$

Burada :

Safsızlık miktarı = Dolu kroze ağırlığı - Boş kroze ağırlığıdır.



BÖLÜM 5 : DENEY SONUÇLARI VE DEĞERLENDİRİLMESİ

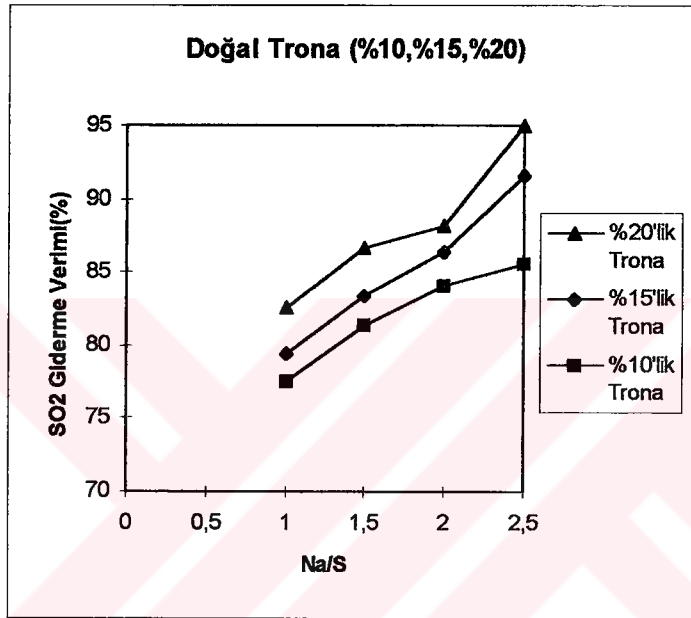
Püskürtmeli kurutucuda yapılan desülfürizasyon çalışmalarında Na/S oranı, trona besleme çözeltisi konsantrasyonu ile çıkış sıcaklığı değiştirilmiş ve bu parametrelerin etkinliği tartışılmıştır. Deney şartları Tablo 5-1’de özetlenmiştir.

Tablo 5-1 : Püskürtmeli Kurutucuda Deney Şartları

Trona Çözeltisi Besleme Hızı	1.2 - 3.2 lt/h
Trona Çözeltisi Sıcaklığı	25°C
SO ₂ Besleme Hızı	0.6 - 2.4 lt/dak
Trona Çözeltisi Konsantrasyonu	%10 - 20
Çıkış Sıcaklığı	85 - 120°C
Na/S mol oranı	0.5 - 2.5
Hava Besleme Hızı	226 lt/dak

Yapılan çalışmalarda desülfürizasyonu etkileyen en önemli parametrelerden birisinin sisteme beslenen Na/S mol oranı olduğu görülmüştür. Doğal trona ile yapılan çalışmalarda çeşitli trona çözeltisi konsantrasyonları için, %SO₂ dönüşümü Na/S oranına karşı grafiğe geçirildiğinde, Şekil 5-1’den görüldüğü gibi Na/S oranı arttıkça SO₂ tutulması da artmaktadır. Stokiyometrik oran olan Na/S = 2 değeri için SO₂ tutma oranı %90’a yaklaşmaktadır. Buna göre, tronanın SO₂’e karşı çok reaktif olduğu ve reaksiyonun çok kısa bir sürede tamamlandığı görülmektedir. Sistemdeki kalma süresi artırılarak dönüşüm oranlarını daha da artırmak mümkündür. Na/S oranının değişmesi SO₂ veya trona konsantrasyonları ya da gaz veya sıvı besleme hızları değiştirilerek sağlanabilir. Adsorbsiyon hızı SO₂ konsantrasyonunun bir fonksiyonu olup, gaz akış hızındaki değişim cihazda kalma süresini de değiştirir. Çalışmada kullanılan püskürtmeli kurutucudaki kalma süresi tam olarak bilinmemekle beraber,

literatürde pilot boyuttaki sistemlerde on saniye dolayında temas süresinde %90 civarında SO₂ tutma verimi elde edildiği belirtilmektedir. Buna göre, SO₂ tutulmasının büyük ölçüde püskürtmenin olduğu küçük bir bölgede çok kısa bir sürede tamamlandığı, sistemdeki alıkonuş süresinin artmasıyla SO₂ tutma veriminde de belli bir artış olduğu söylenebilir.



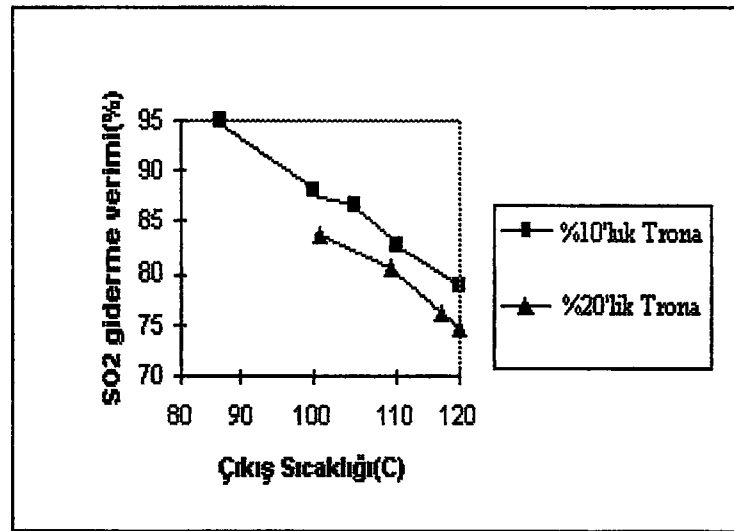
Şekil 5-1 : Na/S mol oranının değiştirilmesiyle birlikte çeşitli besleme konsantrasyonları için SO₂ gideriminin değişimi

Yapılan deneyler sonucu elde edilen ürün analiz edildiğinde, tüm Na/S oranlarında ürünün Na₂CO₃ ve NaHCO₃ içerdiği gözlenmiştir. Literatürde, özellikle Na/S oranının 2'den büyük olduğu durumlarda bu iki komponentin önemli miktarda üründe bulunduğu belirtilmiştir [49]. Ürün analizleri sonucunda, Na₂SO₃ ve Na₂SO₄'ün üründeki toplam oranlarının, değişik Na/S oranları ve trona besleme çözeltisi konsantrasyonları için ortalama %50-60 mertebesinde olduğu gözlenmiştir. Tablo 5-2, Na/S oranının 2.5 olarak alındığı ve sıcaklık dışında tüm parametrelerin sabit tutulduğu iki deneme için ürün analizini göstermektedir.

Tablo 5-2 : Püskürtmeli kurutucunun iki farklı çıkış sıcaklığı için yapılan denemelerde elde edilen ürün bileşimi

ürün bileşimi(%)						
T _{çıkış} (°C)	Na/S	Na ₂ CO ₃	NaHCO ₃	Na ₂ SO ₃	Na ₂ SO ₄	SO ₂ giderme verimi
85	2.5	9.75	35.06	46.60	8.30	91.6
100	2.5	8.45	33.03	48.87	7.39	85.6

Tablodan görülebileceği gibi her iki sıcaklıkta da NaHCO₃'ün Na₂CO₃'a dönüşümü oldukça azdır. NaHCO₃'ün bozunma kinetiğini inceleyen bir çalışmada, bozunma reaksiyonu 90°C civarında başladığı ve özellikle 110°C dan sonra etkinlik kazandığı belirtilmektedir [46]. Ancak tablo sonuçlarından görülebileceği gibi, ortamdaki Na₂CO₃'ın büyük miktarı Na₂SO₃ ve Na₂SO₄'a dönüşmektedir, ancak NaHCO₃ içeriği çok az değişmektedir. Deneyde kullanılan doğal tronanın bileşiminin %42.67 Na₂CO₃, %36.78 NaHCO₃ içerdiği düşünülecek olursa, çalışma sıcaklığının, bikarbonat dönüşümüne etkisinin ne kadar fazla olacağı ve bunun sonucunda ürünlerdeki kükürt içerikli bileşiklerin miktarında bariz bir artış beklenebileceği söylenebilir. Ancak püskürtmeli kurutucuda gerçekleştirilen deneysel çalışmalar, çıkış sıcaklığının desülfürizasyon etkinliğini azalttığını göstermiştir. Bu durum, kurutma işleminde gaz-sıvı temasının için gerekli zamanı düştüğü şeklinde açıklanabilir. Şekil 5-2'de çıkış sıcaklığındaki artışın SO₂ giderme verimine etkisi gösterilmiştir.



Şekil 5-2 : Püskürtmeli kurutucunun SO₂ giderimine etkisi

Buna bağılı olarak, sistem çıkışındaki bağılı nemin de desülfürizasyon çalışmalarında çok önemli bir parametre olduğunu söylemek mümkündür. Özellikle kireçtaşı ile yapılan desülfürizasyon çalışmalarında yüksek oranda SO₂ tutulması için bağılı nemin %70'in üzerinde olması gerektiğı literatürde ifade edilmektedir [47]. Bu çalışmada ise bağılı nem %50 dolayında olduğu halde oldukça yüksek SO₂ tutma oranları elde edilmesi, reaksiyonun büyük ölçüde kuru fazda devam ettiğini göstermektedir. Kalsiyum oksitle yapılan çalışmalarda büyük bir dezavantaj olduğu bildirilen gözenek tıkanması ise sodalı denemelerde gözlenmemektedir. Bu da Na₂SO₃'ün Na₂CO₃'e mol oranının 1.14 dolayında olmasının bir sonucudur. Yapılan tüm çalışmalarda, reaksiyonun sonucu Na₂CO₃'ün yaklaşık %20'sinin Na₂SO₄'a geri kalanının ise Na₂SO₃'a dönüştüğü gözlenmiştir. Tablo 5-3'de çeşitli ürünlerde Na₂SO₃/ Na₂SO₄ oranları verilmiştir.

Tablo 5-3 : Desülfürizasyon çalışmalarında ürünlerdeki Na₂SO₃/ Na₂SO₄ oranları

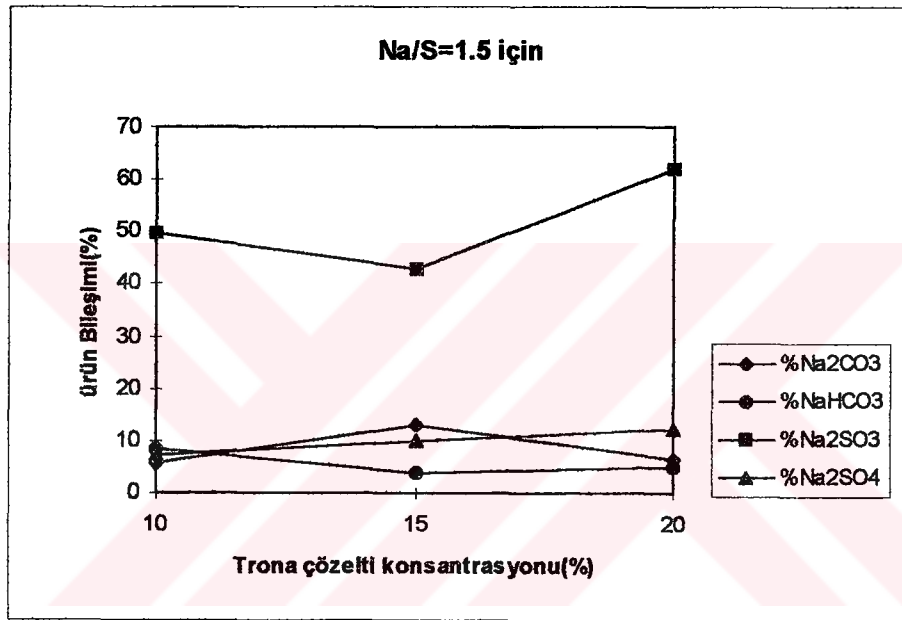
Trona besleme çöz.(%)	Na/S	SO ₂ tutma yüzdesi	Ürün içindeki Na ₂ SO ₃ / Na ₂ SO ₄
10	1.0	82.58	5.29
10	2.0	88.18	6.30
15	1.5	87.89	4.26
15	2.5	91.65	4.86
20	1.5	81.29	5.05
20	2.5	85.64	6.48

Tablodan görüldüğü gibi, Na/S oranının artması ürünlerdeki Na₂SO₃/ Na₂SO₄ oranını arttırmaktadır.

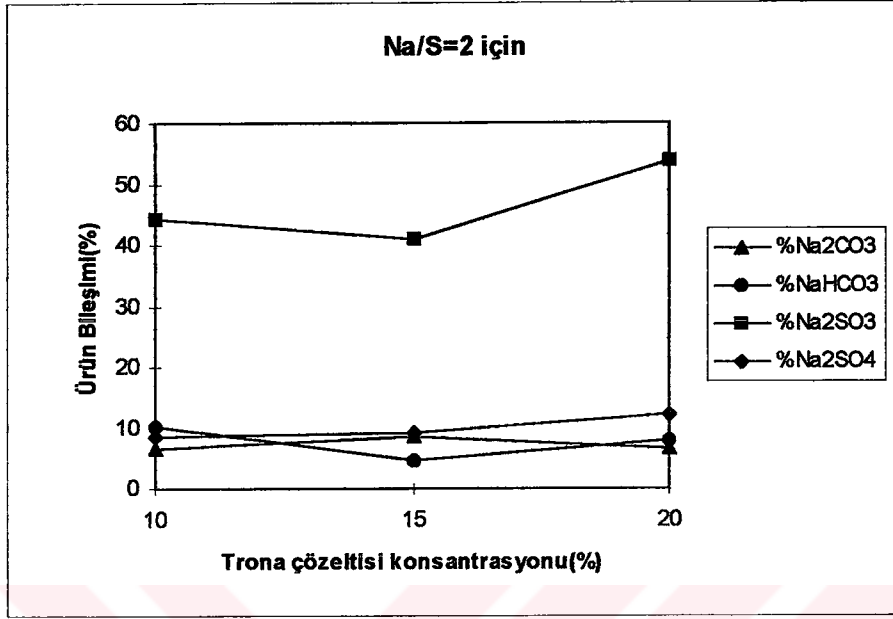
Reaksiyon sırasında yüzey reaksiyonundan önce SO₂, Na₂CO₃ yüzeyine tersinir olarak adsorblanmaktadır. SO₂'nin Na₂CO₃ içindeki difüzyon akışına yüzey difüzyonunda önemli katkısı olduğu literatürde belirtilmektedir [49]. Öte yandan aynı

çalışmada gaz ürün olan CO₂'in katı ürün tarafından adsorblanmadığıda ifade edilmiştir. Sonuç olarak sıcaklık artışı ile SO₂ giderme verimi azalmaktadır.

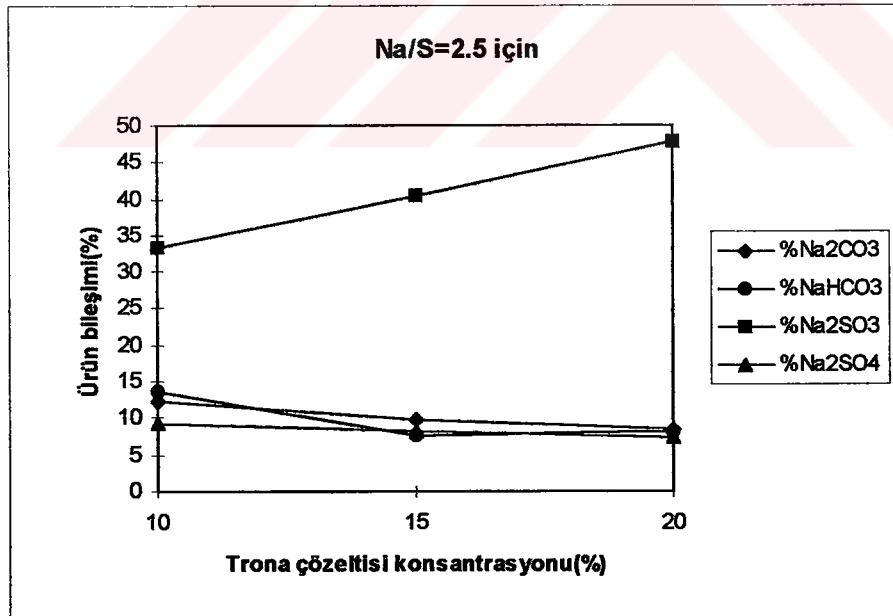
Sabit Na/S oranları(1.5,2.0,2.5) ve çıkış sıcaklıkları(100°C) için besleme çözeltisi konsantrasyonuna karşı ürün bileşimleri grafiğe geçirilmiştir. Her üç grafikte (Şekil 5-3, şekil 5-4, şekil 5-5) de özellikle dikkati çeken Na₂SO₃'ün besleme çözelti konsantrasyonu arttıkça tüm Na/S oranları için artış göstermesidir.



Şekil 5-3 : Na/S mol oranı 1.5 için Trona çözeltisi konsantrasyondaki artışa karşılık ürün içindeki bileşenlerin değişimi



Şekil 5-4 : Na/S mol oranı 2.0 için Trona çözeltisi konsantrasyondaki artışa karşılık ürün içindeki bileşenlerin değişimi



Şekil 5-5 : Na/S mol oranı 2.5 için Trona çözeltisi konsantrasyondaki artışa karşılık ürün içindeki bileşenlerin değişimi

BÖLÜM 6: PHOENICS PAKET PROGRAMI

6.1. Programın Tanıtılması :

PHOENICS, CHAM Ltd. tarafından dağıtımı yapılan genel amaçlı bir akışkan akımı simülasyon programıdır. Batıdaki ve Japonya'daki endüstri ve eğitim kuruluşlarında yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Program adını Parabolik, Hiperbolik veya Eliptik, Sayısal-İntegrasyon-Kod-Serileri (Parabolic, Hyperbolic or Elliptic Numerical-Integration-Code Series) kelimelerinin baş harflerinden alır ve çözümünü sağladığı çok çeşitli tipteki diferansiyel eşitlikleri belirtir. PHOENICS'in ilk versiyonu 1981 yılında piyasaya sürüldü, 1984 yılında önemli gelişmeler kaydedildi ve bu konudaki ilerlemeler günümüze kadar devam etti [49].

PHOENICS, girilen veri değişikliklerine göre bir veya iki fazlı olayları olduğu kadar, çok fazlı olayları da simüle edebilir. PHOENICS'in eşzamanlı çözebileceği bağımlı değişkenlerin sayısında veya hesaplama gridinin küçültülmesinde bir sınır yoktur.

PHOENICS, akışkan akımı, ısı transferi, kimyasal reaksiyonlarla ilgili problemleri simüle eden bir bilgisayar kodudur.

PHOENICS simülasyonları, değişik kademelerde yürütülebilir. Örneğin, bir endüstri dalındaki ısı değiştiricilerin tamamı simüle edilebilir veya bir boru demeti için çalışma yapılabilir ya da tek bir boru içindeki akışın ayrıntıları simüle edilebilir.

PHOENICS simülasyonları, problemin fiziksel prensiplerinden yola çıkılarak yapılan matematiksel türetmelerdir. Sonuç olarak, PHOENICS her tasarım mühendisi tarafından ihtiyaç duyulan bilgileri sağlar.

PHOENICS ve benzeri CFD konusundaki programların pek çok alanda uygulamaları vardır:

- Mühendislikte; daha etkili ekipman ve proses tasarımı yapabilme amacı ile,
- Çevre konusundaki çalışmalarda; atmosfer, hidrosfer ve geosfer' deki ısı, hava, su ve kirleticilerin akış tahminlerinde,
- İnsan vücudunun karmaşık ısıl-hidrodynamic ve akış yapısını daha iyi anlamaya ihtiyaç duyulan ilaç araştırma çalışmalarında,
- Uygulamalı bilimlerin bütün dallarında eğitim amacıyla bu tür paket programların kullanımı söz konusudur.

PHOENICS üç ana bölümden oluşan bir paket programdır. Denklemlerin çözümü yapılan ana bölüm EARTH, verilerin girildiği Satellite adındaki ön işlemci ve grafik işlemcisi PHOTON. Programın bu üç bölümünden herbiri ayrı olarak çalıştırılır. PHOENICS'in satellite bölümünün özel bir niteliği de giriş dosya kütüphanesi ile olan etkileşimdir. İmkan dahilinde kullanıcının ilgisi ne uygun olacak şekilde yapılan bazı giriş değişikliklerinden sonra, kullanıcının uygun akış simülasyonu hesaplamalarını çabuk bir şekilde yapabilmesi için giriş dosyalarının yüzlercesi paket halinde hazırdır. Kullanıcı elinde tutmak istediği bu gibi giriş dosyalarını kütüphaneye eklemekte veya diğerlerine iletmekte serbesttir [49].

PHOENICS, ANSI Fortran 66 temel alınarak yazılmış olup ANSI Fortran 77 ile de uyum göstermektedir.

6.2. Programda Kullanılan Sayısal Yöntemler :

Analitik yolla çözülemeyen teknik problemi temsil eden diferansiyel denklemlerin çözümü için, genelde yaklaşık sonuç veren yöntemler kullanılır. Basit ve kısmi diferansiyel denklemler içeren başlangıç ve sınır değer problemleri, bu gibi yöntemler ile çözülebilir. Bu sayısal çözümler genel fizik kurallarının belirlenmesini sağlamazlar, fakat sık sık problemin çeşitli parametreleri üzerinde, özellikle eşitlikler boyutsuz formda yazılmışsa, istenen değişkenlerin bağımlılığını gösterirler.

Diferansiyel denklemleri çözmek için kullanılan sayısal yöntemler son yıllarda yaygın olarak kullanılmaktadır. Teknolojinin sürekli gelişmesiyle modern bilgisayarların yaygınlaşması da bu popülaritenin oluşmasında etkileri olmuştur. Bu sayısal yöntemler aşağıda açıklanmıştır [50].

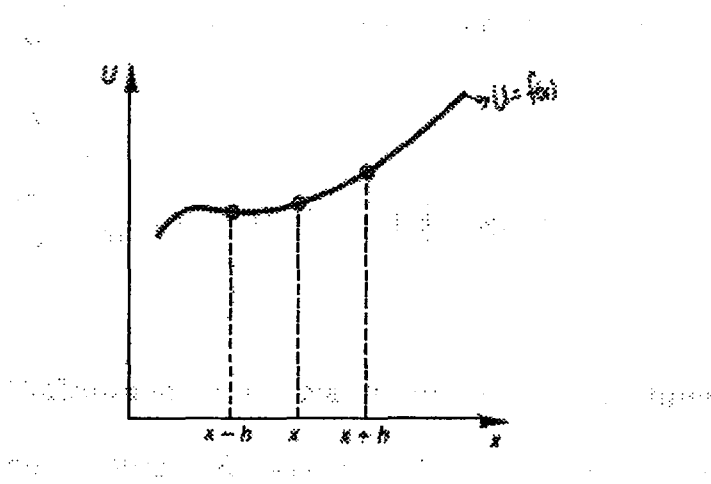
6.2.1. Sonlu Farklar Yöntemi:

İlk sayısal ayırma tekniği olarak bilinen yöntemdir[50]. Akışkanlar mekaniğinde akışkan hareketini tanımlayan kısmi diferansiyel denklemlerin türevlerinin ve diğer terimlerin birbirinden sonlu farklı uzaklıklarla ayrılmış sonlu noktalarda ayrıklaştırılması sonucu ortaya çıkan cebirsel denklem sistemlerinin ekonomik ve hızlı çözümü sonucunda yaklaşık çözüm elde edilir.

Sonlu noktalarda ayrıklaştırılan sürekli denklemlerin çözüldüğü alan grid yapısını oluşturur. Grid yapısı, sayısal analizin yapıldığı alanda bir çözüm alanı yaratmak amacıyla, problemin fiziksel geometrisine uygun oluşturulan bir ağ yapısıdır.

Sonlu farklar yönteminin temeli, kısmi diferansiyel denklemlerde görülen türevlerin sonlu ve ayrık noktalarda oluşturulmasıdır. Sonlu farklar yaklaşımı, en pratik ve kullanımı en kolay olanı CFD yaklaşımıdır. Ancak probleme ait olan geometrinin karmaşıklığı en önemli uygulama zorluğudur. Ayrıca sonlu noktada oluşturulan grid noktalarının yoğunluğunu istenildiği gibi değiştirmek pek kolay değildir.

Akış problemlerinin kısmi diferansiyel denklemler ile ifadesinde, bağımlı değişkenler hız bileşenleri komponentleri ve akış basıncı gibi değişkenlerdir. Bağımsız değişkenler ise uzay koordinatları ve zamandır. Metodun uygulanmasında bazı bağımlı değişkenlerin değerlerinin bilindiği kabul edilir. Bir bağımsız değişkene göre alınan türevlerin hepsi, bir referans değer için hesaplanan Taylor serilerinin açılımları kullanılarak, referans değerden kısa bir mesafedeki bu bağımsız değişken için bağımlı değişkenlerin değerlerini saptamada kullanılır. Örneğin Şekil 6-1'de bağımlı değişken U 'nun bağımsız değişken X ile değişimi gösterilmektedir.



Şekil 6-1 : Taylor serileri için noktaların yerleşimi

Merkez noktasına h gibi kısa mesafedeki iki nokta düşünülürse, bu noktalar x eksenini boyunca $(x-h)$ ve $(x+h)$ olacaktır. U değişkeninin iki noktadaki Taylor serisi açılımları aşağıdaki gibi verilebilir :

$$U(x+h) = U(x) + h \frac{dU}{dx} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2U}{dx^2} + \dots \quad (6-1)$$

ve

$$U(x-h) = U(x) - h \frac{dU}{dx} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2U}{dx^2} + \dots \quad (6-2)$$

Burada h , x yönündeki küçük sapmalardır ve x noktasında U 'nın türevleri alınır. (6-1) ve (6-2) eşitliklerinden yola çıkarak 2. ve 1. türevler x noktası için aşağıdaki gibi elde edilirler :

$$\frac{d^2U}{dx^2} = \frac{1}{h^2} [U(x+h) - 2U(x) + U(x-h)] + O(h^2) \quad (6-3)$$

ve

$$\frac{dU}{dx} = \frac{1}{2h} [U(x+h) - U(x-h)] + O(h^2) \quad (6-4)$$

Pratikte alınan mesafe, h , küçük olmalıdır. İhmal edilebilen bu terimler sayısal hesaplarda hata kaynağıdır. Ayrıca (6-1) ve (6-2) eşitliklerindeki türevlerin ilk basamağı şu şekilde düzenlenebilir :

$$\frac{dU}{dx} = \frac{1}{h} [U(x+h) - U(x)] + O(h) \quad (6-5)$$

ve

$$\frac{dU}{dx} = \frac{1}{h} [U(x) - U(x-h)] + O(h) \quad (6-6)$$

h değeri Şekil 6-1’de gösterildiği gibi x değerindeki artış ve azalma değerleri olarak verilir. Burada (6-5) denklemi ileriye doğru farklar formülü, (6-6) denklemi ise geriye doğru farklar formülüdür. Bu denklemlerin her ikisi de birinci basamak için doğrudur. Bu fark formülü sayısal analiz için şekillendirilen bir yardımcı formüldür ve bu formül ile bir kısmi diferansiyel denklemdeki terimlerin her birinin bir sayısal analogunu üretmek mümkündür. Bu basamak noktalarının herbirinde, türevlere uygun fark formülü, verilen nokta ve yanındaki noktalarda değişkenlerin değerlerini içeren bir denklem tarafından değiştirilebilir. Eğer proses bütün noktalarda tekrar edilirse, şekillendiren noktalar ve sayısal çözüm için alınan tüm noktalardaki değişkenler için düzeltmeler yapılabilir. Burada iki nokta önemlidir. Birincisi, alana hem bir zaman

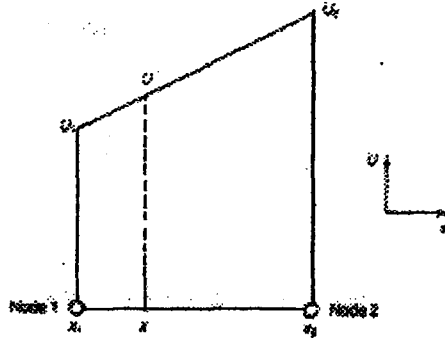
yönü hemde uzay yönü eklenebilir, ikincisi tüm alan için verilen bir kısmi diferansiyel denklem, alandaki noktaların yerleşiminin sonunda değişkenler arasındaki ilişkileri veren eşitlikler için sonlu sayıya dönüştürülebilir.

6.2.2. Sonlu Elemanlar Yöntemi :

Sınır değer problemlerinin çözümünde çok başarılı olan bir yöntemdir. Analiz için seçilmiş olan sürekli ortam, sonlu sayıda sonlu serbestlik dereceli yaylara veya küçük alanlara ya da küçük hacim elemanlarına ayrılarak modelleme gerçekleştirilir. Elemanların geometrisine bağlı olarak fiziksel parametrelerin hesaplanacağı köşe noktaları oluşturulur. Tanımlanan probleme ait çözüm, köşe noktalarındaki bağımlı değişkenlerin değerleri ile o eleman üzerinde modelleyici tarafından verilen enterpolasyon fonksiyonlarının özellikleri kullanılarak geliştirilir.

Sürekli ortamlar mekaniği problemlerinin bu yöntemler analizinde temel felsefe, çözüm bölgesinin küçük sonlu elemanlara ayrılmasıdır. Elemanın şekli çözüm alanının boyutuna, şekline, sınır koşullarının özelliğine ve fiziksel olayı tanımlayan ana denklemlerin karakteristiğine göre seçilir. Her sonlu elemanın üzerinde fiziksel olayın davranışı diferansiyel denklemler ile tanımlanır. Her elemandaki süreklilik ve ayrıca komşu elemanlardaki denge koşullarını sağlayarak bütün çözüm aralığında davranış modellenir. Fiziksel davranışa uygun olarak verilen sınır ve başlangıç koşulları altında sürekli ortamdaki diferansiyel gösterim, lineer cebirsel denklem seti haline dönüştürülür.

Alan, kısmi diferansiyel denklemlerin uygulandığı elemanlar olarak bilinen alt alanlara ayrılır. Her eleman üzerine bağımlı değişkenlerin basit bir değişimi uyarlanır ve bu parçalı gösterim tanımı bütün alanın üzerinde değişkenlerin nasıl değiştiğini gösteren bir resim oluşturur. Bu method sonlu farklar yönteminden daha karışıktır. Şekil 6-2'de bahsedilen eleman görülmektedir.



Şekil (6-2) : İki gridli lineer eleman

Şekildeki değişme lineerdir fakat aynı zamanda bir ikinci derece veya kübik değişme yada daha fazla basamaklı bir değişme olabilir. Eğer değişim lineer ise, elemanın x uzunluğu boyunca herhangi bir noktada U 'nun değeri tanımlanabilir. Elemandaki referans durum olarak kullanılan bu noktalar, elemanın gridleri olarak bilinir. Değişken dönüşümü, ikinci derece olarak kabul edilirse iki grid'e (örnek olarak elemanın orta ve son noktası) yerleştirilmiş U 'nun değerinin bilinmesi gerekir. Lineer dönüşüm gösterimi ile söz konusu ise, U 'nun türevi ve ikinci türevi alınmaz. Yüksek dereceli problemleri çözmek için, problem daha düşük dereceli türev kullanımı gerektirecek şekilde dönüştürülür. İlk olarak, kısmi diferansiyel denklem, uygulanan alan üzerinden integre edilir. Örnek olarak, Φ değişkeni x ve y 'nin uzaysal koordinatlarının bir fonksiyonu olarak tanımlandığı yerde iki boyutlu "Laplace" denklemi çözülür :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = 0 \quad (6-7)$$

Bazı V fonksiyonları ile çarptığımız dönüşüm formülünü oluşturmak üzere Ω ile belirtilen alan üzerinden bu denklemin integrasyonu :

$$\int_V \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial^1 x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial^1 y^2} \right) d\Omega = 0 \quad (6-8)$$

şeklindedir. Bu denkleme bakıldığında her bir teriminin değişken Φ 'nin ikinci türevlerinin içerdiği görülür. Bu terimler kısmi integrasyona tabi tutulduğunda :

$$\int \left(-\frac{\partial^1 V}{\partial^1 x} \frac{\partial^1 \Phi}{\partial^1 x} - \frac{\partial^1 V}{\partial^1 y} \frac{\partial^1 \Phi}{\partial^1 y} \right) d\Omega + \int \left(V \frac{\partial^1 \Phi}{\partial^1 x} n_x + \frac{\partial^1 \Phi}{\partial^1 y} n_y \right) d\Gamma = 0 \quad (6-9)$$

denklemini oluşur. Γ alanının sınırlandırıldığı yerdeki Ω , n_x ve n_y değerleri, Γ 'nin sınırına dışardan gelen normal vektör ünitesinin bileşkenleridir. Bu denklem (6-7) denkleminin dönüşümlü halidir ve alanın her bir elemanı için kısmi diferansiyel denklemin ayrı bir formunu oluşturmak için kullanılır. Elemandaki bu farklı yapı ve grid değerleri hal fonksiyonu olan eleman üzerinde değişken dönüşümünün düşünülmesi ile oluşturulur. Elemandaki grid noktaları “nn” şeklinde ifade edildiğinde değişken aşağıdaki gibi yayılır :

$$\Phi = \sum_{i=1}^{nn} N_i \phi_i \quad (6-10)$$

N_i terimleri, hal fonksiyonudur ve elemandaki bir durum fonksiyonu olarak tanımlanır. ϕ_i terimleri ise ϕ 'nin grid değerleridir. Şekil 6-2’de görülen iki gridli lineer eleman için hal fonksiyonu denklemleri U cinsinden bulunabilir :

$$U(x) = U_1 + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} (U_2 - U_1) \quad (6-11)$$

Bu denklem (6-10) denklemi cinsinden tekrar yazılabilir :

$$U(x) = U_1 \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} + U_2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \quad (6-12)$$

(6-12) denklemine kıyasla (6-10) denkleminin hal fonksiyonları :

$$N_1 = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1}, N_2 = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \quad (6-13)$$

şeklinde görülür. Bu iki ifadeye bakıldığında, x 'in yerine x_1 değeri konulduğunda $N_1 = 1$, $N_2 = 0$ ve aynı şekilde x 'in yerine x_2 değeri konulduğunda $N_1 = 0$, $N_2 = 1$ olduğu görülür. Bu özellik (6-10) denkleminin açık bir sonucudur ve elemanın kaç boyutlu olduğuna bakılmadan bir hal fonksiyonu için cebirsel ifadelerde kontrol olarak kullanılabilir. Bir eleman üzerinde değişken dönüşümü bilindiğinde, bir noktadaki değişkenin türevleri bulunabilir. Φ 'nin birinci türevini bulmak için (6-10) denklemi :

$$\frac{d\Phi}{dx} = \sum_{i=1}^m \frac{dN_i}{dx} \Phi_i \quad (6-14)$$

şeklinde yazılabilir.

Eğer bir elemanda iki grid varsa V için iki foksiyon bilinmelidir. Pratikte V için bir çok uygun form ve her bir grid için hal fonksiyonu kadar U fonksiyonu oluşturmak için standart yöntemler vardır. V için en çok kullanılan bu yöntem “Gallerkin” metodu olarak bilinir [3].

Sonuçta, problemdeki her eleman için çeşitli denklemler türetilir ve bu denklemler birlikte toplanarak çözüm için saklanır.

6.2.3. Sonlu Hacimler Metodu :

CFD’de kullanılan sayısal ayırma yöntemi sonlu hacimler yöntemidir. Sonlu hacim yöntemi çözülecek denklemin integral halde kullanımı ve işlemi üzerine kuruludur. Hesaplama bölgesinin dörtgen gibi hacimlere ayrılması ile hesaba başlanır. Böylece çok karışık geometrilerde eleman uyumlu grid yapılarının oluşturulmasına gerek duyulmadan hesaplamalar gerçekleştirilir.

Sonlu hacim yöntemi, özellikle sıvı akışı ve ısı transferi denklemlerini çözmek için geliştirilmiş ve “ Patankar” tarafından ayrıntılarıyla tanımlanmıştır [52].

6.3. Programın Ana Bölümleri :

6.3.1. Q1 Dosyası :

Programın en önemli bölümünü oluşturan Satellite bölümünün çalıştırılması sırasında oluşturulan Q1 dosyası 24 ana gruptan meydana gelir. Problem şartlarına uygun verilerin ve nümerik analiz parametrelerinin girilmesi ile oluşturulan bu dosya, programın en çok emek ve zaman isteyen bölümüdür. Fonksiyonları şu şekilde özetlenebilir :

Aşağıda sözü geçen Q1 dosyasının 24 ana grup fonksiyonu açıklanmıştır :

- Grup 1 Çalışma Başlıkları ve Diğer Hazırlıklar : Bu grup parametrik çalışmalar gerektiğinde, değiştirilen parametrelere ait elde edilen bilgisayar çalışmalarının sırasını düzeltmek amacıyla kullanılır.
- Grup 2 Prosesin Kararlı-Kararsız Olma Durumu : PHOENICS kararlı ve kararsız hal proseslerinin her ikisini de simüle edebilir. Kararlı hal çalışmaları için Grup 2'nin kullanılmasına gerek yoktur ; kararsız hal çalışmalarında ise parametrelerin zaman ile ilişkisi bu bölümde tanımlanmaktadır.
- Grup 3, 4, 5: X, Y, Z yönlerinde Grid Belirtme : PHOENICS problemi bir boyutlu, iki boyutlu veya üç boyutlu uzay sisteminde simüle edebilir. Hiç bir seçim yapılmazsa, program üç boyutlu koordinat sistemine göre çalışır. X,Y ve Z koordinatlarında bütün mesafeler metre cinsinden verilir.
- Grup 6 Body Fitted Koordinatlar : PHOENICS kartezyen veya silindirik kutupsal grid geometrisi uygulamaları için de uygun seçeneklere sahiptir. Body fitted koordinatlarda, program koordinat dönüşümü yapmak suretiyle kompleks geometriler için hassas grid yapısı oluşturur.
- Grup 7 Değişkenlerin Saklanması, Çözülmesi, Adlandırılması : PHOENICS programı, 50'den fazla bağımlı değişken için diferansiyel denklemleri çözebilmektedir. Ancak kullanıcı, problem gereksinimi doğrultusunda daha fazla değişken içinde çözüm isteyebilir. Karmaşık problemlerde karşılaşılan bu durumda, kullanıcının hem değişkeni hem de diferansiyel denklemi tanımlaması gerekmektedir.
- Grup 8 Diferansiyel Eşitliklerdeki Terimler : PHOENICS, diferansiyel denklemleri kararlı hal, konveksiyon, difüzyon gibi temel terimler için çözer. Ancak kullanıcı tarafından istenen değişkenler, çözülmek üzere verilen diferansiyel denklemler varsa, bunlara ait terimlerin, PHOENICS program koduna dönüştürülmesi bu grupta yapılır.
- Grup 9 Akışkan Özellikleri : Tanımlanan problemde söz konusu akışkana ait tüm fiziksel özellikler bu grupta verilir. Bu özellikler PHOENICS içinde yer alan kütüphaneden seçilebileceği gibi, kullanıcı tarafından da girilebilir.
- Grup 10 Fazlar Arası Transfer İşlemleri ve Özellikleri : Özel bir grup olan Grup 10 , iki veya daha çok akışın olduğu problemlerde kullanılır. Fazların

birbiriyle etkileşimi ve fazların tüm sistem ile ilişkisine ait veriler bu grupta programa girilir. Söz konusu etkileşimler, kütle,ısı ve momentum transferine ait eşitliklerin çözümü, kimyasal kinetik ve termodinamik eşitlikleri hakkında ön çalışma verilerine ihtiyaç duyar.

- Grup 11 Porozite Özellikleri ve Initialization : Çözümü istenen problem zamana bağlı parametreler içeriyorsa, genellikle bu değişkenlerin değerleri için bir ön tahmin yapılır. Ayrıca bu grupta poröz ortamda akış söz konusu ise, bu geçirgen ortamın özellikleri verilir.
- Grup 12 Konveksiyon ve Difüzyon Parametreleri : Konveksiyon ve difüzyon parametreleri, kütle ve momentum bağımlı değişkenleri düzenler.
- Grup 13 Sınır Şartları : Probleme ait sınır şartlarının verildiği bölümdür. Problem geometrisi ve grid yapısının oluşturulmasından sonra en önemli ikinci gruptur.
- Grup 14 Downstream Basıncı : PHOENICS bir uçak kanadının üstündeki sınır tabakanın geliştirilmesi örneğinde olduğu gibi, parabolik olarak tanımlanan akışkan akımı olaylarını simüle edebilir. Akış tipinin eliptik veya parabolik olmasına ilişkin özellikler bu grupta verilir.
- Grup 15 Sweep Sayısı : Nümerik analiz parametrelerin verildiği ilk gruptur. Tüm geometri boyunca yapılacak iterasyon sayısını belirtir.
- Grup 16 İterasyon Sayısı : PHOENICS'te iki çeşit iterasyon vardır; dış iterasyonlar veya sweepler ve iç iterasyonlar. Dış iterasyonlar geometrinin tümünü ilgilendirirken iç iterasyonlar grid yapısının her bir elemanı için istenen iterasyon sayısını verir. Problem çözümü için istenen hassasiyete bağlı olarak kullanıcı tarafından girilen bir parametredir.
- Grup 17 Relaksasyon Parametreleri : Yakınsamayı sağlamak için, kullanılan relaksasyon parametreleri ile çözümü istenen değişkene ait bağılangıç değerlerinin verildiği gruptur.
- Grup 18 Değişkenlerin Sınırları ve Artım Aralıkları : Değişkenler için limit değerlerinin verildiği ve bu limit değere ulaşırken geçilecek adım sayılarının verildiği gruptur.

- Grup 19 Satellite ve GROUND'un Veri Bağlantısı : Programın GROUND bölümü ile bağlantıyı sağlayan gruptur. Özel fonksiyonların çözümlerinin yapılmasında baş vurulur.
- Grup 20-24 Değişken, Nokta Değeri ve Alan, Çıkış ve Çizim Kontrolü:

Hesaplanan değişkenlerin çıkışlarına ait bilgiler bu grupta yer alır.

Sonuçların grafik veya RESULT dosyasında izlenmesi konusundaki

açıklamalar bu grupta verilir. Q1 dosyasına bir örnek EK-1'de verilmiştir.

6.3.2. Satellite :

PHOENICS'in ana bölümlerinden biri olan Satellite'ta kullanıcılar ;

- İsteklerine göre kullanıcılar, bütün verileri girerler, soruşturmaları yönetirler, kütüphanesine eklenmiş giriş dosyalarını kullanırlar;
- SATLIT adında bir Fortran programı, kullanıcının ihtiyaçlarına uymadığında değiştirilebilir.

Yeni bir akış simülasyonu problemi için alışılmış metod şöyledir :

- Kullanıcı programın kütüphanesini, kendi akış simülasyonu problemine uyan dosyayı aramak için tarar.
- Kullanıcı bunu basit bir komutla yükler ve PHOENICS satellite içindeki bir yazılım kullanılmak suretiyle bu dosyayı incelemek ve değiştirmek mümkündür.
- Bu değişiklikler yapılırken, kullanıcı, bütün değişkenlerin anlamlarını ve onları nasıl kullanacağı hakkında tavsiyeleri içeren yardım dosyasına girebilir.
- Ayrıca kullanıcıya, PHOENICS giriş dili kurallarına uymayan kelimeler hemen reddedilmesi sayesinde yardım edilir.
- Eğer kullanıcı alışılmadık bir hesaplama gridi oluşturmuşsa, onu inceleyebilir ve eğer görünüşünü beğenmezse onu değiştirebilir.

Eğer kullanıcı oluşturduğu giriş dosyasından tatmin olduysa, onu kayıt edebilir ve onun nicel sonuçlarını hesaplayacak olan EARTH aktif hale getirmek için devam eder [48].

6.3.3. Earth :

EARTH, açık- kapalı olmak üzere iki bölümden oluşur. Açık bölüm, kullanıcının ilgilendiği herşeyi içerir. Belki de EARTH'ün %90 oluşturan kapalı bölüm ise eşitlikleri ve onların çözümlerini ayarlayan, yakınsaklığı ve sonuçların çıkartılmasını sağlayan yüksek derecede yoğunlaşmış bir yazılımdır. Kapalı bölüm ,temel denge kanunlarının bilgisayar yazılımı ifadelerini içerir. Açık bölüm ise bir akış simülasyonu hesaplamasının daha az belirli bileşenlerinin temsilini içerir. Örnek olarak, arafaz sürtünmesi ve çeşitli türbülans modelleri temsilleri.

Bu GROUND adı verilen açık bölüm, bazen çözüm çevriminde EARTH'ün içinden çağrılan bir Fortran alt programı olarak hazırdır. Bu alt programlar sınır şartları, akışkan özellikleri, kütle, enerji ve momentum kaynakları, yakınsaklık ve çıkış kontrolü konularındaki değişimlerle ilgilidirler [48].

Örnek gösterilen GROUND alt programları PHOENICS ile sağlanır ve bunlar çok sayıda kullanıcının ihtiyaçları için yeterlidir.

6.3.4. Photon :

Simülasyon çalışmasına ait hesaplama sonuçlarının alınmasından sonra, bu sonuçların grafik gösterimi PHOTON'un kullanılması ile yapılır.

PHOTON, EARTH'de elde edilen sonuçları grafiksel olarak gösteren bölümdür. Bu bölümde hız vektörleri, konturları, akış çizgileri ve diğer görsel grafikler çizilir.

BÖLÜM 7: PÜSKÜRTMELİ KURUTUCUDA GAZ TUTMA PROBLEMİNİN CFD İLE MODELLENMESİ

7.1. Problemin Tanıtılması :

Püskürtmeli kurutucuda trona çözeltisi ile SO₂'nin tutulması modellenmeye çalışılmıştır. Bunun için model denklemleri oluşturulması gerekmektedir.

Reaksiyon kinetiği difüzyona göre çok hızlı olduğundan ihmal edilmiştir.

Hız Eşitlikleri :

Çözünmüş katılar içeren tek bir damlacığın evaporasyon hızı şu şekilde türetilir,

Isı Transferi içeren evaporasyon hızı denklemi şu şekildedir :

$$\frac{dW}{dt} = \frac{h_c \cdot A \cdot (T_a - T_s)}{\Delta h} \quad (7-1)$$

h_c: Konveksiyonel Isı Transfer Katsayısı

T_a: Hava Sıcaklığı

T_s: Damlacık Yüzey Sıcaklığı

Δh: Buharlaşma Gizli Isısı

$$Nu = \frac{h_c \cdot D}{\lambda} \quad (7-2)$$

D : Damlacık Çapı

λ : Isıl İletkenlik

$$h_c = \frac{Nu \cdot \lambda}{D} \quad (7-3)$$

$$A = \pi \cdot D^2 \quad (\text{Küre için}) \quad (7-4)$$

(7-3) ve (7-4) eşitlikleri (7-1) denkleminde yerine yazılırsa

$$\frac{dW}{dt} = \frac{Nu \cdot \lambda \cdot \pi \cdot D^2 \cdot \Delta T}{D \cdot \Delta h} \quad (7-5)$$

$$\text{Küre için} \quad \frac{V_T}{A_T} = \frac{\frac{\pi \cdot D^3}{6}}{\pi \cdot D^2} = \frac{D}{6} \Rightarrow V_T = \frac{D \cdot A}{6}$$

$$V_T = \frac{m_T}{\rho_T} \Rightarrow \frac{D \cdot A}{6} = \frac{m_T}{\rho_T} \Rightarrow A = \frac{6 \cdot m_T}{D \cdot \rho_T}$$

$$\frac{\pi \cdot D^2}{D} = \frac{6 \cdot m_T}{D^2 \cdot \rho_T} \quad (7-6)$$

$$\rho_T = \frac{m_T}{V_T}; \rho_s = \frac{m_s}{V_T(1-\epsilon)} \Rightarrow V_T = \frac{m_s}{\rho_s(1-\epsilon)}$$

$$\rho_T = \frac{m_T \cdot \rho_s(1-\epsilon)}{m_s} \quad (7-7)$$

ρ_s : Katının yoğunluğu

m_s : Katının Kütlesi

(7-7) denklemi (7-6) denkleminde yerine yazılırsa ;

$$\frac{\pi \cdot D^2}{D} = \frac{6 \cdot m_T}{D^2 \frac{m_T \cdot \rho_s(1-\epsilon)}{m_s}}$$

$$\frac{\pi \cdot D^2}{D} = \frac{6 \cdot m_s}{D^2 \cdot \rho_s(1-\epsilon)} \quad (7-8)$$

(7-8) denklemi (7-5) denkleminde yerine yazılırsa

$$\frac{dW}{dt} = \frac{6m_s}{D^2 \cdot \rho_s(1-\epsilon)} \left(\frac{Nu \cdot \lambda \cdot \Delta T}{\Delta h} \right) \quad (7-9)$$

$$\frac{dW}{dt} = \frac{6m_s \cdot D}{D^3 \cdot \rho_s(1-\epsilon)} \left(\frac{Nu \cdot \lambda \cdot \Delta T}{\Delta h} \right) \quad (7-10)$$

$$\frac{d(W / m_s)}{dt} = \frac{6}{D^2 \cdot \rho_s (1 - \epsilon)} \left(\frac{Nu \cdot \lambda \cdot \Delta T}{\Delta h} \right) \quad (7-11)$$

$$\frac{dW}{dt} = \frac{6m_s \cdot D}{D^3 \cdot \rho_s (1 - \epsilon)} \left(\frac{Nu \cdot \lambda \cdot \Delta T}{\Delta h} \right) \quad (7-12)$$

burada $D = d$ değışken dönüşümü yapılırsa,

$$\frac{dW}{dt} = - \left(\frac{6d}{\rho_s \cdot d_c^3 (1 - \epsilon)} \right) \left(\frac{Nu \cdot \lambda \cdot \Delta T}{\Delta h} \right) \quad (7-13)$$

Burada;

dW/dt = evaporasyon hızı

d : damlacık çapı (m)

ρ_s : Yoğunluk ($g \cdot m^{-3}$)

d_c : kritik damlacık çapı(m)

ϵ : porozite

Nu : Nusselt Sayısı

λ : Termal Kondüktivite ($J \cdot m^{-1} \cdot s^{-1} \cdot K^{-1}$)

ΔT : Sıcaklık Farkı (K)

Δh : Evaporasyon Gizli Isısı ($J \cdot mol^{-1}$)

Evaporasyon işlemiyle benzer olarak, trona SO_2 tarafından tutularak azalmaya başlar. Tronanın dönüşüm hızı şöyle ifade edilebilir :

$$\frac{dZ}{dt} = - \left(\frac{6d}{\rho_s \cdot d_c^3 (1 - \epsilon)} \right) (Sh \cdot D \cdot C_T \cdot Y \cdot M_a) \quad (7-14)$$

dZ/dt : Tronanin dönüşüm hızı

Sh : Sherwood Sayısı

D : Gaz Fazda SO₂ için Difüzyon Katsayısı (m².s⁻¹)

C_T : Toplam Gaz Konsantrasyonu (mol. m⁻³)

Y : Gaz Kütlesi içindeki SO₂ mol fraksiyonu

M_a : Görünür Molar Kütle (g.mol⁻¹)

(7-13) ve (7-4) eşitlikleri damlacık çapı aracılığıyla bağlantılıdır, zaman değişkeni elimine edilebilir. Buradan şu elde edilir.

$$\frac{dW}{dZ} = \left(\frac{Nu}{Sh} \right) \left(\frac{\lambda}{D \cdot C_T \cdot M_a \cdot \Delta h} \right) \left(\frac{\Delta T}{Y} \right) \quad (7-15)$$

Cebirsel dönüşüm sonunda, başlangıçta karışımdaki su miktarı şu şekilde ifade edilebilir :

$$W_o = \frac{C_p \cdot \Delta T_2}{M_a \cdot SR \cdot C_T \cdot Y_o \cdot \Delta h} \quad (7-16)$$

W_o : damlacığın başlangıçtaki su içeriği (kg su / kg katı)

C_p : Spesifik Isı Kapasitesi (J.mol⁻¹.K⁻¹)

1 : Çıkış ve Damlacık Ara Yüzeyi Sıcaklıkları Arasındaki fark

2 : Giriş ve Çıkış Sıcaklıkları Arasındaki Fark

SR : Stokiyometrik oran

Y : Başlangıçtaki gaz Kütlesi içindeki SO₂ mol fraksiyonu

Eğer X=W/W_o olarak ifade edilirse, (7-15) denklemi şöyle yazılır :

Burada, W damlacığın su içeriği, W_o ise damlacığın başlangıçtaki su içeriği dir.

$$\frac{dX}{dZ} = SR \left(\frac{\Delta T}{\Delta T_2} \cdot \frac{Y_o}{Y} \right) / \beta \quad (7-17)$$

β : sabit

Burada,

$$\beta = \frac{Sh}{Nu} \left(\frac{D}{C_p \lambda} \right) \quad (7-18)$$

$(D.C/\lambda)$ Lewis sayısı olarakda bilinir. Ayrıca makroskobik bir karışım modeli ile birlikte (7-17) eşitliği, SO_2 'nin püskürtmeli kurutucudan uzaklaştırılmasının tahmin edilmesi için ilişkileri elde etmek için kullanılabilir. Nusselt ve Sherwood sayıları damlacıkların hızına ve çapına bağlıdır

Püskürtmeli kurutucudaki sıcaklık ve SO_2 konsantrasyon gradientleri akış şartlarına bağlıdır. Tıkama akış ve mükemmel karışma şartları kabul edilerek, SO_2 nin uzaklaştırılması için iki farklı bağıntı türetilmiştir.

Püskürtmeli kurutucuda mükemmel karışma şartları göz önüne alındığında, sıcaklık ve SO_2 konsantrasyonları püskürtmeli kurutucunun girişinden çıkışına kadar sabittir. Bu durumda, SO_2 uzaklaştırma verimi $\eta = 1 - Y/Y_o$ şeklinde ifade edilir ve aşağıdaki sınır şartlarına uygulanır. Burada Y ; gaz kütlesi içindeki SO_2 mol fraksiyonu, Y_o ; başlangıçtaki gaz kütlesi içindeki SO_2 mol fraksiyonudur.

$$\begin{cases} X = 1 \\ Z = 1 \end{cases} \quad \text{ve} \quad \begin{cases} X = 0 \\ Z = 1 - \eta / SR \end{cases}$$

(7-5) eşitliği, püskürtmeli kurutucu SO₂ uzaklaştırma verimini vermesi için integre edilebilir :

$$\eta = \frac{(\tau - 1)\beta}{(\tau - 1)\beta + 1} \quad (7-19)$$

τ : Boyutsuz Sıcaklık

Burada,

$$\tau = \frac{\Delta T_2}{\Delta T_1} + 1 \quad (7-20)$$

Püskürtmeli kurutucuda tıkama akış geçerli olduğunda, sıcaklık ve SO₂ konsantrasyonları püskürtmeli kurutucunun ekseni boyunca incelenir. Bundan dolayı damlacıklar içindeki reaksiyona girmemiş trona fraksiyonu (Z) girişteki SO₂-hava karışımındaki SO₂ konsantrasyonu ile değişir.

$$Z = 1 - (1 - Y / Y_o) / SR \quad (7-21)$$

(7-9) eşitliği (7-5) eşitğinde yerine konulursa,

$$\frac{dX}{d(Y / Y_o)} = \left(\frac{\Delta T}{\Delta T_2} \frac{Y_o}{Y} \right) / \beta \quad (7-22)$$

Püskürtmeli kurutucudaki sıcaklık gradienti, ortalama logaritmik sıcaklık farkları ile tanımlanabilir; Bu hem püskürtmeli kurutmada hem de diğer uygulamalarda genellikle kabul edilen yaklaşımdır. Buradan :

$$\frac{\Delta T_2}{\Delta T} \approx \ln(\tau) \quad (7-23)$$

Aşağıdaki sınır şartlarının kullanılarak :

$$\begin{cases} X = 1 \\ Y / Y_o = 1 \end{cases} \quad \text{ve} \quad \begin{cases} X = 0 \\ Y / Y_o = 1 - \eta \end{cases}$$

(7-14) eşitliği tıkama akış şartlarında püskürtmeli kurutucunun SO₂ uzaklaştırma verimini vermesi için integre edilebilir :

$$\eta = 1 - \tau^{-\beta} \quad (7-24)$$

Bu eşitlikteki parametreler püskürtmeli kurutucunun çıkış şartları esas alınarak kullanılmıştır.

7.2. PHOENICS Paket Programının Uygulama Aşamaları :

Programın çalıştırılmasıyla ortaya bir ana menü çıkar (Şekil 7-1). Bu ana bölümde Satellite, Earth ve Photon gibi ana bölümlerin yanısıra Q1, Result, Autoplot ve Polis gibi yan bölümler vardır.

Püskürtmeli kurutucudaki sıcaklık gradienti, ortalama logaritmik sıcaklık farkları ile tanımlanabilir; Bu hem püskürtmeli kurutmada hem de diğer uygulamalarda genellikle kabul edilen yaklaşımdır. Buradan :

$$\frac{\Delta T_2}{\Delta T} \approx \ln(\tau) \quad (7-23)$$

Aşağıdaki sınır şartlarının kullanılarak :

$$\begin{cases} X = 1 \\ Y / Y_o = 1 \end{cases} \quad \text{ve} \quad \begin{cases} X = 0 \\ Y / Y_o = 1 - \eta \end{cases}$$

(7-14) eşitliği tıkama akış şartlarında püskürtmeli kurutucunun SO₂ uzaklaştırma verimini vermesi için integre edilebilir :

$$\eta = 1 - \tau^{-\beta} \quad (7-24)$$

Bu eşitlikteki parametreler püskürtmeli kurutucunun çıkış şartları esas alınarak kullanılmıştır.

7.2. PHOENICS Paket Programının Uygulama Aşamaları :

Programın çalıştırılmasıyla ortaya bir ana menü çıkar (Şekil 7-1). Bu ana bölümde Satellite, Earth ve Photon gibi ana bölümlerin yanısıra Q1, Result, Autoplot ve Polis gibi yan bölümler vardır.

Püskürtmeli kurutucudaki sıcaklık gradienti, ortalama logaritmik sıcaklık farkları ile tanımlanabilir; Bu hem püskürtmeli kurutmada hem de diğer uygulamalarda genellikle kabul edilen yaklaşımdır. Buradan :

$$\frac{\Delta T_2}{\Delta T} \approx \ln(\tau) \quad (7-23)$$

Aşağıdaki sınır şartlarının kullanılarak :

$$\begin{cases} X = 1 \\ Y / Y_o = 1 \end{cases} \quad \text{ve} \quad \begin{cases} X = 0 \\ Y / Y_o = 1 - \eta \end{cases}$$

(7-14) eşitliği tıkama akış şartlarında püskürtmeli kurutucunun SO₂ uzaklaştırma verimini vermesi için integre edilebilir :

$$\eta = 1 - \tau^{-\beta} \quad (7-24)$$

Bu eşitlikteki parametreler püskürtmeli kurutucunun çıkış şartları esas alınarak kullanılmıştır.

7.2. PHOENICS Paket Programının Uygulama Aşamaları :

Programın çalıştırılmasıyla ortaya bir ana menü çıkar (Şekil 7-1). Bu ana bölümde Satellite, Earth ve Photon gibi ana bölümlerin yanısıra Q1, Result, Autoplot ve Polis gibi yan bölümler vardır.

Püskürtmeli kurutucudaki sıcaklık gradienti, ortalama logaritmik sıcaklık farkları ile tanımlanabilir; Bu hem püskürtmeli kurutmada hem de diğer uygulamalarda genellikle kabul edilen yaklaşımdır. Buradan :

$$\frac{\Delta T_2}{\Delta T} \approx \ln(\tau) \quad (7-23)$$

Aşağıdaki sınır şartlarının kullanılarak :

$$\begin{cases} X = 1 \\ Y / Y_o = 1 \end{cases} \quad \text{ve} \quad \begin{cases} X = 0 \\ Y / Y_o = 1 - \eta \end{cases}$$

(7-14) eşitliği tıkama akış şartlarında püskürtmeli kurutucunun SO₂ uzaklaştırma verimini vermesi için integre edilebilir :

$$\eta = 1 - \tau^{-\beta} \quad (7-24)$$

Bu eşitlikteki parametreler püskürtmeli kurutucunun çıkış şartları esas alınarak kullanılmıştır.

7.2. PHOENICS Paket Programının Uygulama Aşamaları :

Programın çalıştırılmasıyla ortaya bir ana menü çıkar (Şekil 7-1). Bu ana bölümde Satellite, Earth ve Photon gibi ana bölümlerin yanısıra Q1, Result, Autoplot ve Polis gibi yan bölümler vardır.

Püskürtmeli kurutucudaki sıcaklık gradienti, ortalama logaritmik sıcaklık farkları ile tanımlanabilir; Bu hem püskürtmeli kurutmada hem de diğer uygulamalarda genellikle kabul edilen yaklaşımdır. Buradan :

$$\frac{\Delta T_2}{\Delta T} \approx \ln(\tau) \quad (7-23)$$

Aşağıdaki sınır şartlarının kullanılarak :

$$\begin{cases} X = 1 \\ Y / Y_o = 1 \end{cases} \quad \text{ve} \quad \begin{cases} X = 0 \\ Y / Y_o = 1 - \eta \end{cases}$$

(7-14) eşitliği tıkama akış şartlarında püskürtmeli kurutucunun SO₂ uzaklaştırma verimini vermesi için integre edilebilir :

$$\eta = 1 - \tau^{-\beta} \quad (7-24)$$

Bu eşitlikteki parametreler püskürtmeli kurutucunun çıkış şartları esas alınarak kullanılmıştır.

7.2. PHOENICS Paket Programının Uygulama Aşamaları :

Programın çalıştırılmasıyla ortaya bir ana menü çıkar (Şekil 7-1). Bu ana bölümde Satellite, Earth ve Photon gibi ana bölümlerin yanısıra Q1, Result, Autoplot ve Polis gibi yan bölümler vardır.

- **Properties** : Kullanılacak akışkanın seçimi ve özellikleri bu bölümde seçilir.
- **Initialization** : Değişkenler için başlangıç değerleri bu bölümde verilir.
- **Boundary conditions** : Problemin sınır şartları bu bölümde tanıtılır.
- **Solution controls**: Çözüm için gerekli ayarlamaların yapıldığı bölümdür.
- **Data-to-Ground variables** : Uzman kullanıcıların kullandığı karışık bir bölümdür.
- **Monitoring controls** : Problem şeklinin ekranda görülmesini ayarlayan bölümdür.

Bu bölümde, Tablo 7-1'de de görülen, yapılan hesaplamalar sonucunda şu değerler programa yüklenmiştir.

Tablo 7-1 : Yapılan hesaplamalar sonucu programa yüklenen veriler

sıcaklık(°C)	200			250			300		
%karışım	10	15	20	10	15	20	10	15	20
CPGAS	993.25	977.63	962	1003.15	987.475	971.8	1015.54	1001.01	986.48
ENUL	1.52E-5	1.466E-5	1.405E-5	1.538E-5	1.48E-5	1.408E-5	1.554E-5	1.494E-5	1.434E-5
ENUT	2.086E-5	2.068E-5	2.046E-5	2.106E-5	2.089E-5	2.05E-5	2.128E-5	2.108E-5	2.09E-5
PRNDTL	0.69	0.69	0.68	0.69	0.69	0.68	0.69	0.69	0.68
DEN1	1.369	1.411	1.456	1.369	1.411	1.456	1.369	1.411	1.456
GKONC	0.0295	0.0289	0.0283	0.0299	0.0292	0.0286	0.0302	0.0296	0.0289
GCPCON	975.47	958.06	940.64	979.4	961.8	944.2	980.23	962.7	945.16
GMWCON	30.68	31.60	32.56	30.68	31.60	32.56	30.68	31.60	32.56

Bu değişkenlerin verilen şartlar için yapılan hesaplamaları aşağıda gösterilmiştir:

CPGAS'ın hesaplanması (CPGAS : Gaz karışımının spesifik ısı kapasitesi ($J.kg^{-1}.K^{-1}$))

200 °C 'deki , %10 luk gaz karışımı için ,

$$Cp_{SO_2} = 712 J/kg.K$$

$$Cp_{hava} = 1024.5 J/kg.K$$

$$m_1.Cp_1.\Delta t + m_2.Cp_2.\Delta t = m_{karışım}.Cp_{karışım}.\Delta t \quad (7-25)$$

$$0,9.1024,5 + 0,1.712 = 1.Cp_{\text{karışım}}$$

$Cp_{\text{karışım}} = 993,25 \text{ J/kg.K}$ ve bu değer CPGAS değişkenin değeri olarak programa girilir.

ENUT' ün hesaplanması : (ENUT : Dinamik viskozite ($\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$))

100°C 'deki, %10 luk gaz karışımı için,

Bileşen	Mol Fraksiyonu	Molekül Ağırlığı	Viskozite(kg/m.s)
Hava	0.952	29	21.24E-6
SO ₂	0.048	64	16.12E-6

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2 \quad (7-26)$$

formülünden faydanılarak

I	J	Mi/Mj	μ_i/μ_j	Φ_{ij}	$\sum_{j=1}^2 x_j \Phi_{ij}$
1	1	1.000	1.000	1.000	1.033
	2	0.453	1.318	1.688	
2	1	2.207	0.759	0.581	0.601
	2	1.000	1.000	1.000	

$$\mu_{\text{mix}} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \mu_i}{\sum_{j=1}^n x_j \Phi_{ij}} \quad (7-27)$$

Burada, n komponent sayısı, x_i ve x_j mol fraksiyonları, μ_i ve μ_j viskoziteleri, M_i ve M_j molekül ağırlıklarıdır. Φ_{ij} ise boyutsuzdur.

Tablodaki değerler (7-15) formülünde yerine yazılırsa,

ENUT = $2,086 \cdot 10^{-5}$ kg/m.s olarak bulunur.

DEN1'in hesaplanması : (DEN1: Yoğunluk (kg.m^{-3}))

yoğunluk ise,

$$d_T = \frac{(m_1 + m_2) \cdot d_1 \cdot d_2}{m_1 \cdot d_2 + m_2 \cdot d_1} \quad (7-28)$$

burada m_1 ve m_2 madde miktarlarını, d_1 ve d_2 'de yoğunlukları göstermektedir.

Bu formülünden

$d_T = 1.369 \text{ kg/m}^3$ bulunur ve bu değer DEN1 olarak programa girilir.

ENUL'ün hesaplanması : (ENUL : Kinematik viskozite (m^2/s))

$$\text{ENUL} = \frac{\text{ENUT}}{\text{DEN1}} = 1,52 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \quad \text{olarak bulunur.}$$

Gentra menu :

GENTRA, bir akışkan (sürekli faz) sayesinde taneciklerin (kesikli faz) hareketini simüle eden bir alt programdır. GENTRA , akışkan hızının, sıcaklığının, türbülansının tanecikler üzerindeki etkisini hesaba katar ve buna karşılık taneciklerin varlığının da sürekli faz üzerindeki etkilerini de göz önüne alır.

Sürekli ve kesikli faz için, veri tanımlanması ve çözüm yöntemleri şöyledir :

- PHOENICS, sürekli fazla ilgisi olan verilerin tanımlanmasında kullanılır. Böylece tanımlanan sürekli faz, EARTH tarafından bilinen yolla çözülür.
- GENTRA, kesikli faza uyan verilerin tanımlanmasında kullanılır. Böylece tanımlanan kesikli faz GENTRA tarafından çözülür.

Tabiki, tanecikler ve sürekli faz için çözüm yöntemleri etkileşmelidir. PHOENICS, iki etkileşimli fazı temsil eden Euler transport eşitliklerini kullanan mevcut iki faz kapasitesine sahiptir. Tek fazlı akışa benzer olarak, her bir hesaplama hücresi üzerinde eşitliği integre ederek ve cebirsel eşitlikler sisteminin sonucunun çözülmesiyle, bu eşitlikler çözülür.

GENTRA yaklaşımı farklı bir yaklaşımdır. Sürekli faz yukarıdaki gibi ele alınırken, tanecikler; oluşan tanecik yörüngesi ve bu yörünge boyunca tanecik özellikleri birleştiren Lagrange eşitlikleri tarafından temsil edilirler.

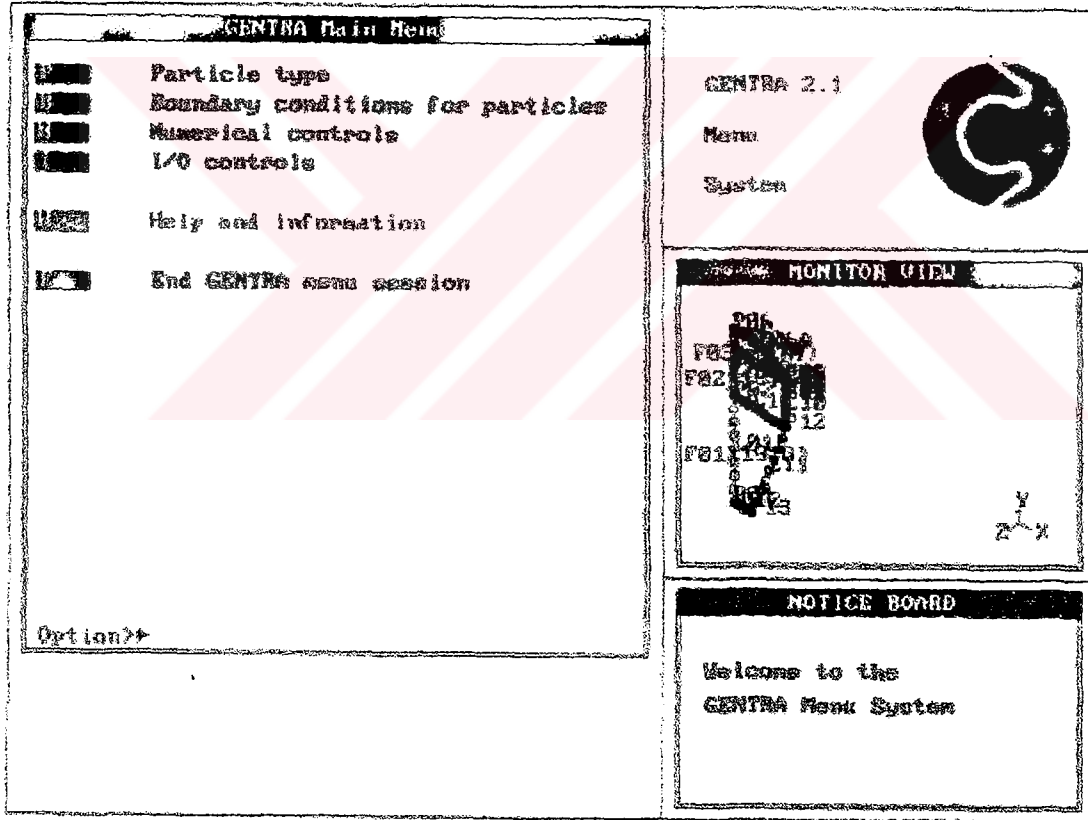
Gentra'da bulunan tanecik izleme yöntemi, akışkanın her bir hücredeki hacim fraksiyonunu tanecik lokasyonuna bağlı olarak hesaplar, sonra yoğunluklar hesaplanır. Özellikle serbest yüzey fonksiyonuna uygulanır.

Standart iki fazlı PHOENICS bu yüzden tanecik akışını simüle edebilir; bunun yanında, GENTRA yaklaşımı ise kullanıcın :

- tanecik yörüngesi hakkında detaylı bilgiye ihtiyaç duyduğunda,

- tanecik-engel etkileşimini doğru bir şekilde simüle etmeye ihtiyaç duyduğunda
- tanecik boyutlarının alanı, sıcaklıklar, yoğunluklar vb. eş zamanlı olarak değerlendirmek durumunda olduğu durumda tercih edilir.

"Gentra menu" bölümüne girdiğimizde karşımıza çıkan menü şöyledir (Şekil 7-4):



Şekil 7-4 : Gentra menu

- **Particle type** : Burada kullanılacak taneciğin çeşiti ve fiziksel özellikleri açıkça belirtilir.

- **Boundary conditions for particles :** Kullanılacak tanecik türü için sınır şartları bu bölümde belirlenir.
- **Numerical controls :** Bu bölümde kullanıcı, tanecik fazı için çözüm yöntemini kontrol eder.
- **I/O controls :** Gentra bölümünün veri giriş ve çıkışları buradan kontrol edilir.

Bu bölümde yapılan hesaplamalar sonucunda şu değerler programa yerleştirilmiştir.

GKONC'nin hesaplanması : (GKONC: Termal kondüktivite($W.m^{-1}.K^{-1}$))

$$k_M = \frac{y_1 \cdot k_1 \cdot (M_1)^{1/3} + y_2 \cdot k_2 \cdot (M_2)^{1/3}}{y_1 \cdot (M_1)^{1/3} + y_2 \cdot (M_2)^{1/3}} \quad (7-29)$$

y_1 , y_2 mol fraksiyonları; k_1 , k_2 ısı iletkenlikleri; M_1 ve M_2 ise mol ağırlıklarını göstermektedir.

formülde değerler yerine yazılırsa,

$k_M = 0.0295 \text{ w/m.K}$ olarak bulunur.

GCPCON'un hesaplanması (GCPCON: Sürekli fazın spesifik ısı kapasitesi ($J.kg^{-1}.K^{-1}$))

100 °C 'deki , %10 luk gaz karışımı için ,

$C_{p_{SO_2}} = 662 \text{ J/kg.K}$

$C_{p_{hava}} = 1010,3 \text{ J/kg.K}$

$$m_1 \cdot C_{p1} \cdot \Delta t + m_2 \cdot C_{p2} \cdot \Delta t = m_{karışım} \cdot C_{p_{karışım}} \cdot \Delta t \quad (7-30)$$

$$0,9.1010,3 + 0,1.662 = 1.Cp_{\text{karışım}}$$

$Cp_{\text{karışım}} = 975 \text{ J/kg.K}$ olarak bulunur.

GMWCON'un hesaplanması (GMWCON: Karışımın Molekül Ağırlığı (kg.mol^{-1}))

$$M_{\text{ort}} = M_1.x_1 + M_2.x_2 \quad (7-31)$$

$$M_{\text{ort}} = 64.0,048 + 29.0,952$$

$$M_{\text{ort}} = 30,69$$

7.2.2. Processor Bölümü Dataları ve Gözlemleri :

Problem, satellite bölümünde tanımlanmasından sonra çözümün yapılacağı bölüm olan Earth bölümüne girilir. Burada Satellite bölümünde girilen verilere göre problemin çözümü yapılır. Deneyimli kullanıcılar Earth bölümüne müdahale edebilir. Earth bölümünde yapılan çözümün sonra kullanıcı sonuçların grafiksel görünümü için Photon bölümüne girilir.

7.2.3. Post-processor Bölümü :

Photon bölümü, Earth bölümündeki hesaplamaların sonuçlarını grafiksel olarak görüntüler.

7.3. Sonuçlar ve Değerlendirilmesi :

Püskürmeli Kurutucuda meydana gelen kuruma 2 aşamada gerçekleşir :

1. Aşama (Sabit kuruma) :

Püskürtülen damlacıklar sıcak gaz faz ile karşılaşır karşılaşmaz damlacık yüzeyinde hemen oluşan doygun buhar film tabakasında evaporasyon meydana gelir.

Sıcak gaz fazdan damlacıklara konveksiyonla ısı transferi olur. Isı transferi sonucu buharlaşan nem, damlacığı çevreleyen sınır tabakanın içinden geçerek gaz faza taşınır. Bu sırada damlacığın içindeki nem damlacık yüzeyine difüze olarak, damlacık yüzeyini doyurmaya devam eder. Damlacık yüzeyinin sıcaklığı yaşı termometre sıcaklığına eşittir. Bu aşama kurumanın en fazla olduğu aşamadır.

2. Aşama (Azalan kuruma) :

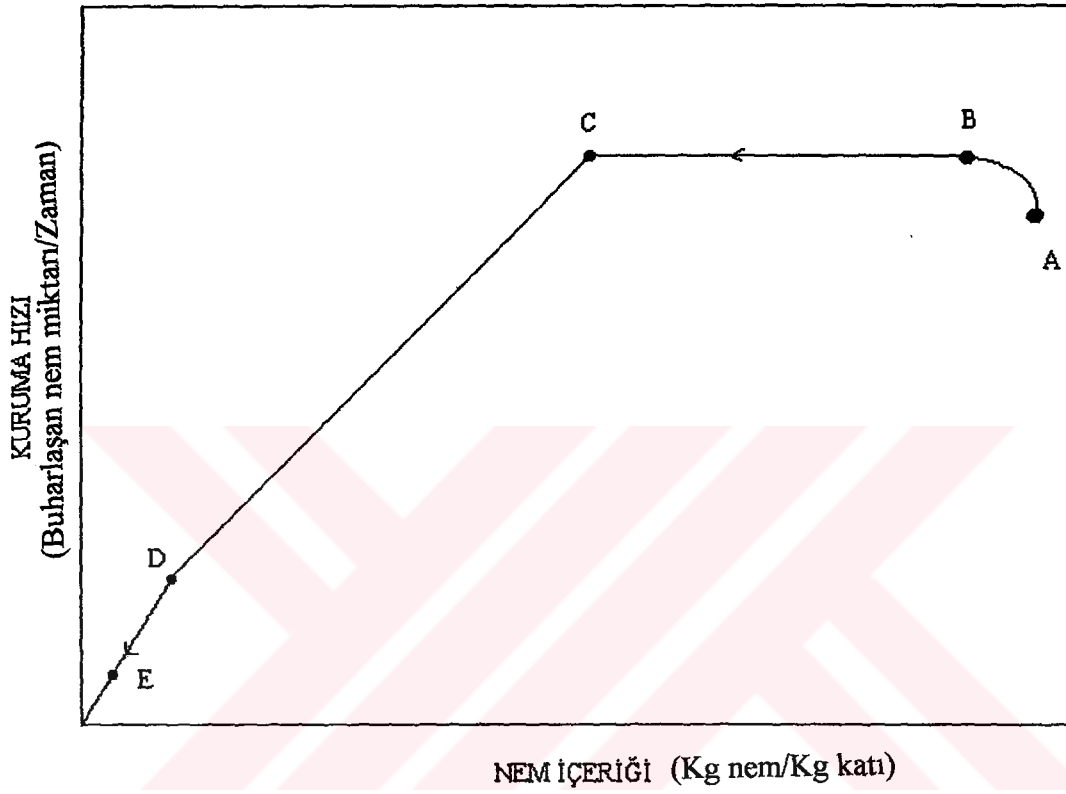
Damlacığın nem içeriği yüzey doygunluğunu devam ettiremeyecek kadar azalınca, kritik nokta olarak bilinen noktaya gelinir ve damlacığın yüzeyinde kuru bir kabuk oluşur. Kuru kabuk artık nem için bir direnç oluşturmaktadır. Bundan sonra evaporasyon, nemin difüzyon hızına bağlıdır.

Kurumanın grafiksel olarak açıklanması Şekil 7-5'te görülmektedir. AB noktaları arasında, damlacıkların hava ile temas etmesiyle birlikte kuruma hızı olayı başlar. Damlacık yüzeyinde hafif bir sıcaklık artışı meydana gelir ve damlacık-hava ara yüzeyinde kuruma hızı artar.

BC noktaları arasında, kurulan dinamik denge koşullarında, kuruma işlemi sabit hızda ilerler. Damlacık yüzeyi, damlacığın içinden yüzeye olan nem hareketiyle doygunluğunu sürdürür.

CD noktaları arasında; C noktası, kritik noktadır ve damlacık yüzeyi doygunlunu daha fazla devam ettiremez. Kuruma hızı düşmeye başlar. Bu aşamaya azalan hızda kuruma aşaması denir. Eğer damlacık yüzeyinde ıslak kalan alanlar varsa, CD noktaları arasındaki bölge ıslak alan kalmayana kadar devam eder.

DE noktaları arasında, kütle transferine direnç sadece kuru tabakadadır. Evaporasyon, havadaki nem ile damlacığın içerdiği nem dengeye gelene kadar sürer. Bu denge noktasına(E) yaklaşma yavaştır. Püskürtmeli kurutma işlemlerinde, ürün genellikle denge nem içeriğine ulaşmadan ortamdan uzaklaştırılır. Azalan hızda kuruma süreci boyunca, damlacık sıcaklığı artar.



Şekil 7-5 : Kuruma hızı eğrisi[54]

Şekil 7-5 bir kuruma diyagramıdır. Kuruma eğrisi gerçekte, kesin noktalara sahip bir eğri değildir. Gösterilen kuruma bölgelerinin bazıları hiç meydana gelemeyebilir. Örneğin, püskürtmeli kurutmada ürünler ısıya duyarlıysa, uygulanan hava sıcaklığı düşüktür ve AB bölümü kritik noktaya kadar uzar.

Şekil 7-6'da, Püskürtmeli kurutucuya 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının beslenmesi sonucunda, püskürtmeli kurutucuda meydana gelen buharlaşma olayı görülmektedir. Burada buharlaşma olayı çeşitli renk skalalarıyla ifade edilmiştir. Şekilden görüleceği üzere, kırmızı rengin görüldüğü yerler, buharlaşmanın en şiddetli olduğu yerlerdir. Daha açık renkler ise, buharlaşma olayının daha az şiddette olduğu yerleri göstermektedir. Koyu mor kısımlarda ise, buharlaşma olayı hemen hemen hiç yoktur. Şekil 7-6'da görüldüğü gibi, atomizörden kurutucu içerisine küçük damlacıklar halinde püskürtülen trona çözeltisi, atomizörün çıkışından itibaren kurumaya başlar. Buna bağlı olarak buharlaşma olayıda bu noktadan itibaren başlar. Buharlaşma olayı, kurutucunun alt kısımlarına doğru devam eder. Ancak yine Şekil 7-6'dan görüldüğü gibi renklerde açılma, alt kısımlara doğru başlar. Yani buharlaşma olayı şiddetini kaybetmeye başlar. İşte bu azalmanın başladığı nokta , kritik nokta olarak bilinen ve kuruma işlemini açısından çok önemli olan noktadır. Bu noktadan sonra, kurutucunun daha alt kısımlarına doğru buharlaşma olayı şiddetini iyice kaybeder ve şekilde de görüldüğü gibi buharlaşma olayı da kuruma olayı ile birlikte sona erer. Farklı giriş sıcaklığına sahip gaz karışımının beslenmesi ile meydana gelen buharlaşma olaylarını gösteren diğer şekiller ise Şekil 7-7 ve Şekil 7-8 'tür. Şekil 7-7'de gaz karışımının giriş sıcaklığı 250°C, Şekil 7-8'te 300°C' tır.

Şekil 7-7 ve Şekil 7-8'teki buharlaşma olayı Şekil 7-6' daki ile biçimsel açıdan benzerlik göstermektedir. Yine kırmızı renk buharlaşmanın şiddetli olduğu kısımları gösterirken, daha açık renklerse buharlaşma şiddetinin daha az olduğu yerleri göstermektedir. Şekil 7-8'te görüleceği üzere, Şekil 7-6 ve Şekil 7-7' ye göre, buharlaşma olayı kurutucunun daha üst kısımlarında bitmektedir. Bunun nedeni, kurutucu için tüm verimin artmış olmasıdır. Tüm verim ; toplam ısı girişinin, kurutma için kullanılan fraksiyonunu gösterir.

$$\text{Tüm verim} = (T_1 - T_2) / (T_1 - T_a)$$

ile ifade edilir. Burada ,

T_1 : Kurutma odasına giren sıcak havanın sıcaklığı

T_2 : Kurutma odasından çıkan havanın sıcaklığı

T_a : Atmosferik sıcaklık

Tüm verimin artmasıyla kuruma şiddeti artar. Dolayısıyla buharlaşma olayında da artış olur. Bu da buharlaşmayı kurutucunun alt kısımlarına gelmeden sona ermesine neden olur. Yani buharlaşma bölgesinde kısalma olur.

Şekil 7-9'te verilen ürün kütle fraksiyonu dağılımında partiküllerin faz değişiminin akış yönünde olduğu ve şiddetinin de kurutucunun alt kısmına kadar hemen hemen aynı kaldığı görülmektedir. Damlacıkların kuruma olayı ile birlikte kuru katı taneciklere dönüşmesinin hangi bölgelerde ve ne şiddette olduğu bu şekilde görülmektedir. Kırmızı renk ile gösterilen bölgede damlacıkların kuru katı taneciklere dönüşme şiddeti en fazladır. Daha açık renkli bölgelerde ise bu dönüşme daha azdır. Şekil 7-9'te dönüşümün şiddetli olduğu bölge, damlacıkların atomizörden çıktığı noktada değil, biraz daha aşağıdaki bir noktada başlamaktadır. Şekil 7-10 ($T=250^{\circ}\text{C}$) ve şekil 7-11($T=300^{\circ}\text{C}$)'e de bakılırsa giriş sıcaklığı arttıkça dönüşümün başlangıç noktası atomizöre yaklaşır. Şekil 7-11'da dönüşümün şiddetli olduğu kırmızı ile gösterilen bölgenin Şekil 7-9 ve Şekil 7-10'dan kısa olması da giriş sıcaklığının artmasının etkisidir. Giriş sıcaklığı arttıkça damlacıklar atomizörden daha yakın bölgelerde kuruyup, kuru katı taneciklere dönüşürler.

Şekil 7-12, Şekil 7-13 ve Şekil 7-14 ise ısı değişikliklerini gösteren şekillerdir. Damlacıkların atomizörden çıktıkları noktaya yakın bir noktada, damlacığa olan ısı transferinin başlamasıyla, ısı değişimi meydana gelir. Şekil 7-12' de kırmızı renk ile temsil edilen bölgede ısı değişiminin fazla olduğu görülür. Kurutucunun alt kısmına kadar ısı değişimi devam eder ancak şiddetini kaybeder. Şekil 7-13'de ısı değişikliğinin fazla olduğu bölge, Şekil 7-12'dekinden daha kısadır. Şekil 7-14'te ise ısı değişikliğinin fazla olduğu bölge Şekil 7-12 ve Şekil 7-13'den daha kısa ancak biraz daha geniştir. Giriş sıcaklığının artmasıyla, ısı transferinin sürücü gücü artar ve bu damlacığa olan ısı akışını artırır dolayısıyla ısı değişimleri daha şiddetli olur. Sabit gaz karışımı besleme hızında, giriş sıcaklığındaki artış püskürtmeli kurutucunun evaporatif kapasitesini artırır. Daha yüksek giriş sıcaklığının anlamı, termal olarak daha verimli kurutma işlemi demektir. Giriş sıcaklığının artmasıyla evaporasyon hızını artırır,

ürünler daha gözenekli ve kırık yapıda olurlar. Ancak deneysel çalışma bölümünde anlatıldığı gibi, sıcaklık artışı SO_2 giderme verimine ters etki yapmaktadır.

Şekil 7-15'te ise kurutucu içindeki hız vektörleri görülmektedir. Hızın en fazla olduğu yer gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya girdiği üst bölümdür. Atomizör çıkışında ise hız gaz karışımının girdiği üst bölümden daha azdır. Bu gaz karışımının besleme hızının , çözelti besleme hızından daha yüksek olduğunu gösterir. Kurutucunun yan bölgelerinde ise bazı türbülanslar meydana gelmektedir. Bu gaz karışımının besleme hızının yüksek olmasından kaynaklanmaktadır. Bu şekil, gaz karışımı ve çözeltinin nasıl temas ettiği hakkında bir fikir verir. Şöyle ki çözeltinin atomizör yardımıyla püskürtmeli kurutucuya dağılış şekli bir koniye benzemektedir. Gaz karışımı da, bu koninin hem içine hem dışına temasta bulunur. Şekil 7-16' da ise kurutucu içerisindeki hız dağılımının düşey hız bileşimini renk skalalarıyla(contour) gösterir. Öte yandan görüldüğü gibi, nozülde yüksek hızla kurutucu gövdesine püskürtülen akışkan, y yönünde parabolik hız vektörleri vermektedir. Kurutucu içindeki akış aşağı doğru gittikçe bu parabolik davranım etkisini kaybetmekte ve çıkış bölgesinde çok daha homojen bir akış profili vermektedir. Elde edilen bu hız dağılımı, şekil 7-17 de gösterilen literatür sonuçları ile mukayese edildiğinde benzer hız profillerine ulaşıldığı gözlemlenmiştir. Oakley, Bahu ve Reay [55] tarafından yapılan ölçüm sonuçları ve k-ε ve Reynolds stress modelleri için uygulanan sayısal analiz sonuçlarını [56] gösteren şekil 7-17'de akışın en çok etkilendiği bölgenin nozül çıkış bölgesi olduğu belirtilmiştir. Tasarım için bu sirkülasyon bölgesinin boyutu ve bu bölgedeki hızın bilinmesi gerekmektedir.



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



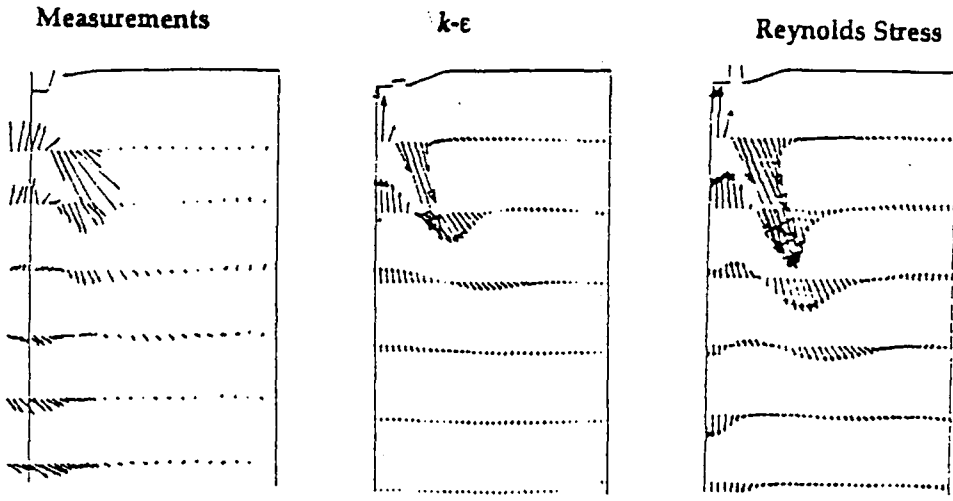
Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.6. 200°C sıcaklığa sahip gaz karışımının püskürtmeli kurutucuya beslenmesi ile elde edilen buharlaşma şiddeti konturları



Şekil 7.17. Püskürtmeli kurutucuda hız vektörleri dağılımı deneysel ve nümerik sonuçlar

BÖLÜM 8 GENEL SONUÇLAR

Deneysel ve Simülasyon çalışmaları sonucu elde edilen genel sonuçlar şunlardır:

1. Trona çözeltisi ile püskürtmeli kurutucuda gerçekleştirilen desülfürizasyon çalışmalarında gaz ve sıvı beslemelerine bağlı olan Na/S oranının desülfürizasyon verimine olumlu etkisi olduğu gözlenmiştir. Na/S oranı arttıkça kükürt dioksit giderme verimi de artmaktadır. %10'luk trona çözeltisi ile yapılan denemelerde Na/S 1'den 2.5'a çıkartıldığında SO_2 giderme veriminde %10'luk bir artış olmuştur. %15 ve %20'lik trona besleme çözeltileri içinse bu arıtma verimi aynı Na/S değerleri için, %15 dolayındadır.
2. Deneyler sonucu elde edilen ürünlerde Na_2CO_3 ve $NaHCO_3$ bulunduğu gözlenmiştir. Besleme çözeltisindeki Na_2CO_3 'ın büyük miktarı Na_2SO_3 'e dönüşmekle beraber, $NaHCO_3$ 'ın karbonata dönüşme verimi düşük olduğundan, ortamda istenmeyen bikarbonat bileşiği bulunmaktadır. Üründeki Na_2SO_3 ve Na_2SO_4 miktarı toplam ürün kütlesinin ortalama %50-60'ını oluşturmaktadır.
3. Püskürtmeli kurutucuda çıkış sıcaklığının arttırılması katı üründeki asıl ürün olan Na_2SO_3 miktarını düşürmektedir. Bu durum kurutma işleminde önemli bir parametre olan gaz-sıvı temas süresi yüksek sıcaklıkta düşmesi ile açıklanabilir. Ayrıca literatürde iki ayrı mekanizma ile yürüdüğü belirtilen SO_2 - Na_2CO_3 reaksiyonunda belli bir dönüşüm oranına ulaşması ile tanelerin parçalanması ve gözenekli yapının değişmesi sonucu yeni aktif yüzeylerin açığa çıkması söz konusudur. Bu durum sıcaklık yükseldikçe reaksiyonun da hızlandığını düşündürebilir. Ancak SO_2 'nin Na_2CO_3 'ün ve Na_2SO_3 'e dönüşümünden sonra SO_2 'nin katıya adsorbsiyonunun hala devam etmesi sonucu $Na_2S_2O_5$ oluşumu

başlamaktadır öte yandan, yapılan mekanizma çalışmalarında $\text{SO}_2\text{-Na}_2\text{CO}_3$ reaksiyon hızının düşük sıcaklıklarda, ortamdaki nemin etkisiyle de arttığı belirtilmektedir. Bu da Na_2SO_3 oluşumunu arttırmaktadır.

4. Na/S oranı ve sıcaklık sabit tutularak, besleme çözeltisi konsantrasyonu artırıldığında katı ürünlerdeki Na_2SO_3 oranı artmaktadır. Aslında besleme çözeltisi konsantrasyonu arttıkça Na/S oranını sabit tutmak amacıyla sıcak gaz beslemesindeki SO_2 konsantrasyonu arttıkça ürünlerdeki $\text{Na}_2\text{SO}_3/\text{Na}_2\text{SO}_4$ oranı artmaktadır (Tablo 5-3). Ancak bu oran ile dönüşüm oranı arasındaki ilişkinin açıklanabilmesi reaksiyon mekanizmasının daha iyi aydınlatılmasına ihtiyaç duymaktadır.
5. Deneysel çalışmalarda, yüksek desülfürizasyon etkinliği için sağlanması gereken şartlardan ilki, bikarbonatın Na_2CO_3 'a dönüşüm yüzdesinin yeterince yüksek olmasıdır. Ancak bikarbonat bozunma kinetiği açısından yüksek sıcaklıkta çalışması gerekirken, yüksek sıcaklık ortamı desülfürizasyon etkinliğini düşürmektedir. Bu nedenle trona çözeltisinin hazırlanması sırasında NaOH eklenmesi bir diğer çözüm olarak denenebilir. Böylece ortama giren sıcak hava ısının bir, kısmını NaHCO_3 'ın dönüştürülmesi için kullanılması da önenebilir. Çalışmalar bu yönde devam ettirilmelidir.
6. Simülasyon çalışmalarında özellikle kuruma etkinliği incelenmeye çalışılmıştır. Sıcak gaz temperaturündeki artış kuruma şiddetini de arttırmaktadır. Kritik nokta olarak bilinen kuruma şiddetinin azalmaya başladığı noktaya, temperatur artışı ile daha kısa sürede erişilmektedir. Toplam ısı girişinin kurutma için kullanılan fraksiyonu artmaktadır.
7. Kuru katı taneciklere dönüşme, sıcaklığın artması ile atomizere daha yakın bölgelerde sona ermektedir. Azalan hızda kuruma aşamasına geçiş daha hızlı olmaktadır. Çünkü gaz sıcaklığının artması, havadaki nemi düşürmekte ve bu nem

ile damlacığın içerdığı nemin dengeye gelme süresi azalmaktadır. Temperatur arttıkça bu denge noktasına gelme ve dolayısı ile kuru katı taneciklere dönüşme hızlanır.

8. Püskürtmeli kurutucuda elde edilen hız vektörleri nozül çıkışındaki yüksek hızını kaybederek kurutucunun çıkışına doğru parabolik dağılım göstermektedir. Nozüle yakın bölgelerde ise yoğun türbülanslar oluşmaktadır. Simülasyon çalışmalarında $k-\epsilon$ türbülans modeli kullanılmıştır. Ancak Reynolds stress modeli ile çalışma tekrarlanarak, nozül yakınındaki bölge için daha hassas çözüm elde edilmelidir.



KAYNAKLAR

- [1] KAYKAYOĞLU, C. R., "Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiğine Giriş", CFD yaz okulu notları, İstanbul, 1994
- [2] SHAW, C. T., "Using Computational Fluid Dynamics", Prentice Hall International, London, 1992
- [3] ANDERSON, D. A., TANNERHILL, J. C., PLETCHER, R. H., "Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer", UK, London, 1984
- [4] FREETH, F. A., "The System $\text{Na}_2\text{O}-\text{CO}_2-\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}$, Considered as Two Four-Component Systems", Roy. Soc. London, Phil. Trans., A 223, 35-87, 1922
- [5] WEGSCHEIDER, R., MEHL, J. "Über Systeme $\text{Na}_2\text{CO}_3-\text{NaHCO}_3-\text{H}_2\text{O}$ und das Existenzgebiet der Trona", Monatsh., v49, p 283, 1928
- [6] BRADLEY, W. H., EUGSTER, H. P., "Geochemistry and Paleolimnology of Trona Deposits and Associated Authigenic Minerals of The Green River Formation of Wyoming", Geological Survey Profess. p 496-B 1969
- [7] EUGSTER, H. P., "Sodium Carbonate-Bicarbonate Minerals as Indicators of PCO_2 ", J. Geophys. Res. v71, p 3369-71, 1966
- [8] HILL, A. E., "Double Salt Formation Among the Carbonates and Bicarbonates of Sodium and Potassium", J. Am. Chem. Soc., v52, p 3813, 1930
- [9] HILL, A. E., BACON, L. R., "Ternary Systems, VI. Sodium Carbonate, Bicarbonate and Water", J. Am. Chem. Soc., v49, p 2487, 1927
- [10] WALDECK, L., LYNN, G., HILL, A. F., "Aqueous Solubility of Salts at High Temperatures IV. The Ternary System $\text{Na}_2\text{CO}_3-\text{NaHCO}_3-\text{H}_2\text{O}$ from 100 to 200°C", J. Am. Chem. Soc., p. 43, 1934
- [11] LINKE, W. F., "Solubilities of Inorganic and Metal Organic Compounds", v11 Amer. Chem. Soc., p 1914, 1965

- [12] MONNIN, C., SCHOTT, J., "Determination of Solubility Products of Sodium Carbonate Minerals and an Application to Trona Deposition in Lake Magadi", *Geochimica et Cosmochimica Acta*, v48, p. 571-581, 1984
- [13] BROWN, C.J., "The Crystal Structure of Sodium Sesquicarbonate", *Acta Cryst.*, v2, p 167, 1949
- [14] CANOLIN, R., "Thermal Changes in the Structure of Sodium Sesquicarbonate", *Acta Cryst.*, 9, 545, 1956
- [15] KANG KUNG, W., BROWN, I.D., "A Neutron Diffraction Study of $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ", *Acta Cryst.* 831, 890, 1975
- [16] DICKENS, B., MAUER, F.A., BROWN, W.C., "A Refinement of the Crystal Structure of $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ", *Journal of Research of the National Bureau of Standards-A Phys. and Chem.* v74A, May-June, 1970
- [17] SUNER, F., "Beypazarı Trona Yatakları", Doktora Tezi, İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü 1988
- [18] ROM, W.N., GREAVES, W., BANG, K.M., HOLTHOUSE, M., CAMPBELL, D., BERNSTEIN, R., "An Epidemiologic Study of the Respiratory Effect of Trona Dust", *Archives of Environmental Health*, v38, p 283, March/April, 1983
- [19] OTHMER, K., "Encyclopaedia of Chemical Technology", 3th Edition, vol.1, John Wiley, Cal. , 1980
- [20] SHAMEL, R. E., HERMANN, B. A., "World Soda Ash Outlook: Supply, Demand, and Trade", *Chemistry Industry*, 1983
- [21] KAYAKIRAN, S., ÇELİK, G., "Beypazarı Trona Yatağı Maden Jeolojisi Raporu", MTA Gn.Md., Maden Etüd ve Arama D. Bşk., Ankara, Temmuz, 1986
- [22] GÜNDOĞDU, N., TENKECİ, Ö., ÖNER, F., DÜNDAR, A., KAYAKIRAN, S., "Beypazarı Trona Yatağının Kil Minerolojisi, Ön Çalışma Sonuçları", II. Kil Sempozyumu, Ankara, 24-27 Eylül, 1985
- [23] ÇETİNKAYA, Ş., "Trona (Tabii Soda)", *Etibank Bülteni*, Ankara, Ocak 1983
- [24] SANIGÖK, Ü., *Ders Notları, İstanbul Üniversitesi Kimya Fakültesi*, 1986

- [25] DPT, "5. Beş Yıllık Kalkınma Planı, 1985-1989", Yayın No. DPT 1974, Sınai Kalkınma Bankası, Ekonomik ve Teknik Dökümantasyon Merkezi, Ankara, 1985
- [26] MTA Enstitüsü, "Beypazarı Soda ve Linyit Çalışmaları Raporu", Ankara, Mart, 1985
- [27] MTA Enstitüsü, "Trona (Tabii Soda) Oluşumu ve Ankara Beypazarı Trona Yatakları", Ankara, 1984
- [28] HELVACI, C., "Beypazarı Trona Yataklarının Jeolojisi, Minerolojisi, Jeokimyası ve Yörenin Trona Potansiyeli" Tübitak Temel Bilimler Araştırma Grubu Proje No. TBAG-685, 1989.
- [29] SAVGUC, A.B., "Beypazarı Trona Yatağından Hafif ve Ağır Soda Üretim Proseslerinin Araştırılması Üzerine Deneysel Çalışmalar ve Teknolojik Değerlendirmeler", Yüksek Lisans Tezi, İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Ocak, 1986
- [30] TOPÇUOĞLU, A. , "Beypazarı Tabii Soda Mineralinden Soda Üretim Yöntemleri Laboratuar Ön Deneme Çalışmaları", Bitirme Ödevi, İTÜ Kimya-Metalurji Fakültesi, Ocak 1986
- [31] ÖZTÜRK, A., "NaHCO₃ Kalsinasyon Kinetiğinin İncelenmesi ve Karbonatlaştırma Prosesi ile Tronadan Soda Üretimi", Yüksek Lisans Tezi, İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Ocak, 1990
- [32] DURMAZ, N., "Trona Mineralinden Ticari Ölçek Soda Üretim Proseslerinin Bilgisayar Destekli Tasarı ve Maliyetlendirilmesi", Yüksek Lisans Tezi, İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Haziran, 1990
- [33] Devlet Planlama Teşkilatı "Altıncı Beş Yıllık Kalkınma Planı 1990-1994", Yayın No. DPT 2174, Sınai Kalkınma Bankası, Ekonomik ve Teknik Dökümantasyon Merkezi 1990
- [34] Mc CABE, W. L., "Unit Operations of Chemical Engineering", 5th Edition, London, 1984
- [35] BANCHERO, J. T., BADLER, W. L., ÇATALTAŞ, İ.(Çeviren), "Kimya Mühendisliğine Giriş", İstanbul, 3. Baskı, 1986
- [36] DOĞU, G., ÖLMEZ, G., DOĞU, T., "Püskürtmeli Kurutucuda Kükürt Dioksitin Tutulması", II.Ul. hava kir. kong. Ankara, 1993
- [37] KAPLAN, S. M., FELSVANG, K., "Spray Dryer Absorption of SO₂ from Industrial Boiler Flue Gases", Alche Symp ser. 54, (201), 23, 1981

- [38] STROMBERG, A.M., KARLSON, H.T., "Limestone Based Spray Dry Scrubbing of SO₂ ", Chem. Eng. Sci., 43, 2095-2102 1983
- [39] KIMURA, S., SMITH, J. M., "Kinetics of Sodium Carbonate-Sulfur Dioxide Reaction", AIChE J., 33, 1522, (1987)
- [40] KESKİN, A., DOĞU, T., DOĞU, G., SMITH, J.M., "Single Pellet Moment Method for Analysis of Gas Solid Reactions", AIChE J., 32, 743, (1988)
- [41] UÇAR, Ç., DOĞU, G., DURMAZ, A., ERCAN, Y., GÜRÜZ, G., "Trona Based Scrubbing of SO₂ in a Spray Drier", 5th Mediterrean Congress on Chemical Engineering 5-7, November, 1990, Barcelona, Spain.
- [42] HARTMAN, M., "Comparison of Various Carbonates for SO₂ Removal", AIChE J., 35, 821-830 (1989)
- [43] SAMUEL, E.A., FURLANG, D.A., Brna, T.G., Ostop, R.L., "SO₂ Removal Using Dry Sodium Compounds", AIChE Symp. Ser., 77, (211), 54-57 (1981)
- [44] DOĞU, T., "Effect of Pore Structure on the Mechanism of SO₂ Sorption on Activated Soda", Frontiers Chemical Reaction Engineering, VII., 152-162, Ed. Doraiswamy, L.K. ve Mashelkar, R.A., John Wiley and Sons, (1984)
- [45] DOĞU, G., Uçar, Ç., "Mechanism of SO₂ Scrubbing with Solution in a Srpay Dryer", 40. kkk Kimya Mühendisliği Kongresi, Chem. Solutions for the Third dssdd, Halifax, Canada 1990
- [46] WANG, H., SMITH, J.M., DOĞU, T., Doğu, G., "Kinetics of NaHCO₃ Decomposition", AIChE J., 32, 1483 (1990)
- [47] AĞCA, S., "Reaction of Sulfur Dioxide with Activated Soda", M.S. Tezi, ODTÜ (1981)
- [48] HEWITT G.F., "Multiphase science and Techlogy", Sphere pub., London, v6, 1982
- [49] DOĞU, G., UÇAR, Ç., DOĞU, T., "Scrubbing of SO₂ with Trona Solution in a Spray Drier", Canadian journal of Chemical Engineering, V70, August, 1992
- [50] SLAVADI and BARON, "Numerical Methods in Engineering", Jr. of Ch. Sci. v25, p.45, 1990

- [51] SMITH, G.D., "Numerical Solution of Partial Differential Equation: Finite Difference Methods", 3rd Edn, Oxford University Press, Oxford, (1985)
- [52] PATANKAR, S.V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere (McGraw Hill), New York, (1980)
- [53] SPALDING, B., "The PHOENICS Beginner's Guide", (December 1989)
- [54] MASTERS, K., Spray Drying Handbook, George Goodwin Ltd., 1979
- [55] OAKLEY, D. E. and BAHU, R. E. "Computational Modelling of Spray Dryers", Computers and Chemical Engineering, V17, n suppl, oct. 1993. p493-498
- [56] OAKLEY, D. E. , BAHU, R. E. and REAY, D. "The Aerodynamics of Co-current Spray Dryers" , Proc. 6th International Drying Symp. , Versailles, 1988.

EK-1

TALK=T;RUN(1, 1);VDU=VGAMOUSE

PHOTON USE

p

use patgeo

text

1

1

Vapour mass fraction

0.22368E+04 0.26119E+04 CR

con vapo z 1 fill

0.01

text

3

Press <return> to continue

0.20368E+04 0.44265E+03 CR

pause

con cl

text cl

red

text

1

1

Velocity vectors

0.22368E+04 0.24817E+04 CR

set vec ref

40

vec z 1

text

1

5

Particle trajectories

0.22368E+04 0.23514E+04 CR

use genuse

text cl

vec off

con off

text

3

Press <return> to continue

0.20368E+04 0.44265E+03 CR

pause

red

text

1

5

Particle trajectories

0.22368E+04 0.24817E+04 CR

GEOMETRY READ

T00001

GEOMETRY READ

T00002

GEOMETRY READ

T00003

GEOMETRY READ

T00004

GEOMETRY READ

T00005

GEOMETRY READ

T00006

GEOMETRY READ

T00007

GEOMETRY READ

T00008

text

3

Press <return> to continue
0.20368E+04 0.44265E+03 CR

pause

text cl

red

text

1

1

Mass deposited by particles

0.21368E+04 0.23514E+04 CR

con mass z 1 fill

0.005

text

3

Press e to end

0.22368E+04 0.44265E+03 CR

enduse

TEXT(Evapor. particl.in spray dryer:G505

TTITLE

DISPLAY

Evaporating particles in spray dryer (BFC)

ENDDIS

* Declare reals defining problem specification

REAL(VIN,HIN,CPGAS,TIN)

CPGAS=993.25;TIN=473;HIN=TIN*CPGAS;VIN=20.0

GROUP 3. X-direction grid specification

NX=18

GROUP 4. Y-direction grid specification

NY=26

GROUP 5. Z-direction grid specification

NZ=1

GROUP 6. Body-fitted coordinates or grid distortion

BFC=T;NONORT=T

GSET(D,18,26,1,1.0000,1.0000,1.0000)

GSET(P,P01,0.0010,0.0000,0.0000)

GSET(P,P02,0.0010,2.5000,0.0000)

GSET(P,P03,0.0010,3.2000,0.0000)

GSET(P,P04,0.0010,3.3000,0.0000)

GSET(P,P05,0.0010,3.6000,0.0000)

GSET(P,P06,0.0010,4.1000,0.0000)

GSET(P,P07,1.0000,3.9500,0.0000)

GSET(P,P08,1.5000,3.7000,0.0000)

GSET(P,P09,1.5000,3.6000,0.0000)

GSET(P,P10,1.5000,3.3000,0.0000)

GSET(P,P11,1.5000,3.2000,0.0000)

GSET(P,P12,1.5000,2.5000,0.0000)

GSET(P,P13,0.5000,0.0000,0.0000)

GSET(L,L01,P01,P02,8,1.0)

GSET(L,L02,P02,P03,6,-1.5)

GSET(L,L03,P03,P04,4,1.0)

GSET(L,L04,P04,P05,4,1.5)

GSET(L,L05,P05,P06,4,1.0)

GSET(L,L06,P06,P08,18,1.2,ARC,P07)

GSET(L,L07,P08,P09,4,1.0)

GSET(L,L08,P09,P10,4,-1.5)

GSET(L,L09,P10,P11,4,1.0)

GSET(L,L10,P11,P12,6,1.5)

GSET(L,L11,P12,P13,8,1.0)

GSET(L,L12,P13,P01,18,-1.5)

GSET(L,L13,P05,P09,18,1.5)

GSET(L,L14,P02,P12,18,1.5)

GSET(F,F01,P01,-,P13,-,P12,-,P02,-)

GSET(F,F02,P02,-,P12,P11,P10,P09,-,P05,P04,P03)

GSET(F,F03,P05,-,P09,-,P08,-,P06,-)

GSET(M,M01,+I+J,1,1,1,TRANS)

GSET(M,M02,+I+J,1,9,1,TRANS)

GSET(M,M03,+I+J,1,23,1,TRANS)

GSET(C,K2,F,K1,1,18,1,26,RY,-0.1,0.0,0.0)

GROUP 7. Variables stored, solved & named

NAME(C6)=VAPO

STORE(UCRT,VCRT,WCRT,DEN1);NCRT=1

SOLVE(P1,U1,V1,H1,VAPO)

STORE(HEAT,MASS)

GROUP 9. Properties of the medium (or media)

* Air Density

PRESS0=1.E+05

```

* Air Laminar Kinematic Viscosity
ENUL=1.52E-5
* Air Turbulent Kinematic Viscosity
ENUT=2.086E-5
* Temperature Derivation
TMP1A=0.0;TMP1B=1./CPGAS
* Air and Vapour Prandtl Numbers
PRNDTL(H1)=0.69
GROUP 10. Inter-phase-transfer processes and properties
GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields
CONPOR(0.0,CELL,1,3,16,16,1,NZ)
* Nozzle Blockage
* Initialization of Enthalpy and Temperature (Commented Out)
FIINIT(H1)=HIN;FIINIT(DEN1)=1.369;FIINIT(MASS)=1.e-10
FIINIT(VAPO)=0.0
RHO1=GRND;DRH1DP=GRND
GROUP 13. Boundary conditions and special sources
* Inlet Boundary Condition
PATCH(INLET,NORTH,1,3,NY,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(INLET,P1,FXFLU,1.369*VIN)
COVAL(INLET,V1,ONLYMS,-VIN);COVAL(INLET,H1,ONLYMS,HIN)
COVAL(INLET,U1,ONLYMS,0.0);COVAL(INLET,VAPO,ONLYMS,0.0)
* Outlet Boundary Condition
PATCH(GXOUT,SOUTH,1,7,1,1,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(GXOUT,P1,1.,0.0);COVAL(GXOUT,H1,ONLYMS,SAME)
COVAL(GXOUT,VAPO,ONLYMS,SAME);COVAL(GXOUT,V1,ONLYMS,SAME)
COVAL(GXOUT,U1,ONLYMS,SAME)
GROUP 15. Termination of sweeps
* Number of Sweeps
LSWEEP=50
* Number of Iterations
LITER(P1)=10;LITER(U1)=1;LITER(V1)=1;LITER(W1)=1
VARMIN(VAPO)=0.0;VARMAX(VAPO)=1.
GROUP 17. Under-relaxation devices
RELAX(P1,LINRLX,3)
RELAX(V1,FALSDT,1);RELAX(U1,FALSDT,1)
RELAX(H1,FALSDT,0.1)
RELAX(VAPO,FALSDT,0.1)
GROUP 22. Spot-value print-out
IXMON=NX/2;IYMON=NY/2;IZMON=NZ/2
GROUP 23. Field print-out and plot control
TRACE=F
RG(78)=-4321.9
*
* GENTRA GROUP 0: PIL variables and default values
* DO NOT MODIFY THIS GROUP
*
INTEGER(IX1,IX2,IX3,IX4,IX5,IX6,IX7,IX8,IX9)
CHAR(CX1,CX2,CX3);REAL(RX1);BOOLEAN(LX1)
CHAR(CDRAG,CKONC,CNUSS,CCPLIQ,CLHEAS,CSOLIN,CSOLST)
CHAR(CKONV,CCPCON,CCPVAP,CMWCON,CMWVAP,CLIQST,CLATVP)
CHAR(CVAPST,CSTPRE,CDTRCT,CHLIQD,CCPSOL,CHSOLD)
INTEGER(GPTYPE,GWALLC);GPTYPE=30;GWALLC=3
REAL(GWREST,GPOROS);GWREST=1.0;GPOROS=0.0
REAL(GGRAY,GGRAY,GGRAY);GGRAY=0.0;GGRAY=0.0;GGRAY=0.0
BOOLEAN(GBUOYA,GSTOCH,GSURPR);GBUOYA=F;GSURPR=F
GSTOCH=F
REAL(GDRAG,GNUSS);GDRAG=GRND1;GNUSS=GRND1
REAL(GLHEAS,GSOLIN);GLHEAS=3.335E+05;GSOLIN=1
REAL(GSOLST,GLIQST);GSOLST=273.15;GLIQST=273.15
REAL(GKONC,GKONV,GPCON,GCPVAP,GCPPLIQ,GMWCON,GMWVAP,GHLIQD)
REAL(GCPSOL)
GKONC=0.0295;GKONV=GRND1;GPCON=975.47;GCPVAP=GRND1
GHLIQD=GRND1;GCPPLIQ=4131.8;GMWCON=30.68;GMWVAP=18
GCPSOL=4131.8
REAL(GVAPST,GSTPRE,GLATVP);GVAPST=GRND1;GSTPRE=GRND1;GLATVP=GRND1
REAL(GDTRCT);GDTRCT=0.0
CHAR(GINFIL);GINFIL=Q1;INTEGER(GINSYS);GINSYS=12
INTEGER(GSWEPI,GSWEPI,GLAGTS);GSWEPI=1;GSWEPI=1;GLAGTS=5
REAL(GTIMMX);GTIMMX=0.0;INTEGER(GSTEMX);GSTEMX=0
REAL(GDTMAX,GRTFRC);GDTMAX=1.0;GRTFRC=1.0
REAL(GLNRLX);GLNRLX=1.0
CHAR(GRSFIL,GHFILE);GRSFIL=NONE;GHFILE=GHIS
INTEGER(GOUTFR,GRESTI);GOUTFR=1;GRESTI=0
INTEGER(NGWSTR,NGWEND,NGWINT,GSWOUT);CHAR(GT1STC,GH1STC)
NGWSTR=0;NGWEND=0;NGWINT=1;GSWOUT=1
GT1STC=NONE;GH1STC=NONE
*

```

```

* GENTRA GROUP 1: Particle physics
*
* Particle type - 60 - VAPORISING_DROPLETS
GPTYPE=60
* Gravity components in GENTRA Cartesian system/buoyancy
GGRAX=0;GGRAY=-9.8000E+00;GGRAZ=0;GBUOYA=F
* Stochastic model of turbulence
GSTOCH=F
* Data for vaporising particles
GDRAG=GRND1;GNUSS=GRND1
GKONV=GRND1;GCPCON=CPGAS;GCPVAP=GRND1
GMWCON=30.68;GMWVAP=18;GLIQST=GRND1
GCPLIQ=GRND1;GHLIQD=GRND1;GVAPST=GRND1
GLATVP=GRND1;GDTRCT=1.E-07
*
* GENTRA GROUP 2: Boundary conditions for particles
*
* Inlet-data file-name
GINFIL=Q1
* Use this space for inlet-data table if GINFIL=Q1
<GENTRA-INLET-DATA>
*  XP  YP  UP  VP  DIAM  LIQDEN  FRATE  TEMP  (NUMB)
0.2 3.20E+00 9.04E+00 8.06E+00 6.0E-05 1000. 5.E-05 300.
0.2 3.20E+00 7.36E+00 3.18E+00 1.1E-04 1000. 5.E-05 300.
0.2 3.20E+00 6.60E+00 6.47E+00 1.1E-04 1000. 5.E-05 300.
0.2 3.20E+00 4.68E+00 5.64E+00 1.1E-04 1000. 5.E-05 300.
0.2 3.20E+00 9.04E+00 -1.06E+00 0.7E-04 1000. 5.E-05 300.
0.2 3.20E+00 4.68E+00 -1.64E+00 1.1E-04 1000. 5.E-05 300.
0.2 3.20E+00 6.60E+00 -6.47E+00 1.1E-04 1000. 5.E-05 300.
0.2 3.20E+00 7.36E+00 -3.18E+00 1.1E-04 1000. 5.E-05 300.
<END-GENTRA-INLET>
* Wall treatment, and rest coefficient if appropriate
GWALLC=3;GWREST=1
* Porosity threshold
GPOROS=0
*
* GENTRA GROUP 3: Numerical controls
*
* 1st GENTRA sweep; frequency of calls
GSWEP1=50;GSWEPP=1
* Maximum Lagrangian time-step; time step size multiplier
GDTMAX=0.001;GRTFRC=100000
* Min # of t-steps per cell; max # of t-steps; timeout
GLAGTS=5;GSTEMX=1000;GTIMMX=5
*
* GENTRA GROUP 4: Output controls
*
* Trajectory-file identifier, history-file identifier
and frequency for output
GT1STC=T;GSWOUT=1;NGWSTR=1;NGWEND=20;NGWINT=1
GOUTFR=10
* Particle number for residence-time calculation
GRESTI=0
*
* GENTRA GROUP 5: Provisions for the GENTRA-Earth run
*
* Storage of Cartesian components in BFC cases
* Storage for interphase sources of momentum
STORE(MOMX)
STORE(MOMY)
* Storage for interphase source of mass and for
vapour mass-fraction
PRNDTL(VAPO)=1;PRT(VAPO)=1
* Interphase sources of heat and momentum
PATCH(GENPAT,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(GENPAT,U1,fixflu,GRND)
COVAL(GENPAT,V1,fixflu,GRND)
COVAL(GENPAT,H1,fixflu,GRND)
COVAL(GENPAT,VAPO,fixflu,GRND)
* Interphase sources of mass
PATCH(GENMAS,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(GENMAS,P1,fixflu,GRND)
* Relaxation of interphase sources
GLNRLX=1.0000E-01
RELAX(MOMX,LINRLX,GLNRLX)
RELAX(MOMY,LINRLX,GLNRLX)
RELAX(HEAT,LINRLX,GLNRLX)
RELAX(MASS,LINRLX,GLNRLX)

```

* Activation of GENTRA GROUND-station
NAMGRD=GNTR

* _____
* GENTRA GROUP 6: Transmission of data to GENTRA-Earth
* DO NOT MODIFY THIS GROUP

* _____
IG(20)=GPTYPE;IG(19)=GWALLC;IG(18)=GSWEP1;IG(17)=GSWEPF
IG(16)=GLAGTS;IG(15)=GSTEMX;IG(14)=GOUTFR;IG(13)=GRESTI
IG(12)=NGWSTR;IG(11)=NGWEND;IG(10)=NGWINT;IG(9)=GSWOUT
RG(100)=GGRAX;RG(99)=GGRAY;RG(98)=GGRAZ;RG(97)=GDRAG
RG(96)=GKONC;RG(95)=GNUSS;RG(94)=GLHEAS;RG(93)=GSOLIN
RG(92)=GSOLST;RG(91)=GLIQST;RG(90)=GKONV;RG(89)=GCPCON
RG(88)=GCPVAP;RG(87)=GMWCON;RG(86)=GMWVAP;RG(84)=GWREST
RG(83)=GTIMMX;RG(82)=GCPLIQ;RG(81)=GPOROS;RG(80)=GDTMAX
RG(77)=GRTFRC;RG(76)=GHLIQD;RG(75)=GVAPST;RG(74)=GLATVP
RG(73)=GDTRCT;RG(72)=GCPSOL;RG(71)=GSTPRE
LG(20)=GBUOYA;LG(19)=GSTOCH
CG(10)=GT1STC;CG(9)=GH1STC;
CG(8)=GINFIL;CG(7)=GRSFIL;
CG(6)=GHFILE;
NOCOPY=T

* _____
* GENTRA GROUP 7: GENTRA test

* _____
* GENTRA auto test. RG(51)–RG(58) are reserved
RG(51)= 5.04E+00;RG(52)= 5.05E+03;RG(53)= 7.99E-03
RG(54)= 4.60E+00;RG(55)= 5.71E+00;RG(56)= 4.00E+00
RG(57)= 1.14E+00;RG(58)= 0.00E+00
LIBREF= 505
STOP

ÖZGEÇMİŞ

1972 yılında Bartın'da doğdu. İlk ve orta öğrenimini Bartın'da tamamladıktan sonra 1990 yılında İ.T.Ü. Kimya Metalurji Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümü'ne girdi. 1995 yılında Kimya Mühendisi olarak mezun oldu. Aynı yıl İ.T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Mühendisliği Programı, Kimya Mühendisliği Ana Bilim Dalı'nda yüksek lisans öğrenimine başladı.



Dr. Öğr. Üyesi Dr. Öğr. Üyesi
Doç. Dr. Öğr. Üyesi Doç. Dr. Öğr. Üyesi