



## Modeling of a fluidized bed gasifier with computational fluid dynamics (CFD) and thermodynamic equilibrium approach and comparative analysis with experimental data

Musa Yazgı<sup>1\*</sup>, Hüseyin Topal<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Turkish Standards Institution, 06100, Çankaya, Ankara, Türkiye

<sup>2</sup>Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Gazi University, 06570, Çankaya, Ankara, Türkiye

### Highlights:

- Modeling with computational fluid dynamic
- Modeling of gasification reactions
- Design of gasifier

### Keywords:

- Biomass
- Gasification
- CFD
- Thermodynamic Equilibrium
- Fluidized bed

### Article Info:

Research Article

Received: 23.04.2020

Accepted: 12.01.2023

### DOI:

10.17341/gazimmfd.722335

### Correspondence:

Author: Musa Yazgı

e-mail: myazgi@tse.org.tr

phone: +90 545 623 7385

### Graphical/Tabular Abstract

In this study, the gasification process, which was carried out experimentally with rice husk, was modeled by Computational Fluid Dynamics (CFD) and Thermodynamic Equilibrium Approach and gas product compositions were determined. Better results were obtained in terms of all components in the modeling with CFD. As seen in Figure A, the CFD method is a method that takes into account both operating time and reactor hydrodynamics. It has been seen that the CFD approach is a more useful and appropriate approach in design, scale-up and optimization studies.

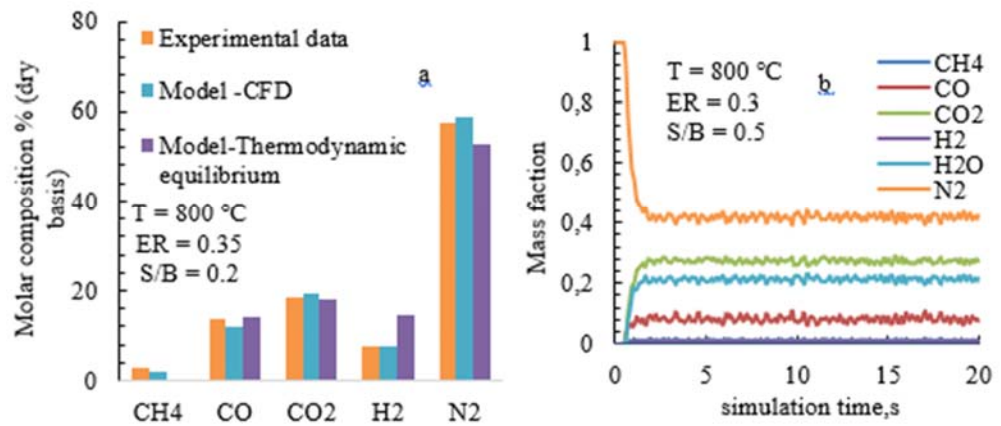


Figure A. a) Comparison of model results with experimental data b) Variation of mass fraction with time at the gasifier outlet in the CFD model

**Purpose:** Computational fluid dynamics and thermodynamic equilibrium approaches in gasifier modeling are comparatively examined by using experimental data.

**Theory and Methods:** In this study, a previously experimental gasifier is modeled in 2D with computational fluid dynamics. The same data were modeled with the thermodynamic equilibrium approach and the results of both models were compared with the experimental data. The temperature was kept in the range of 750 – 900, °C the equivalence ratio (ER) was in the range of 0.3-0.45 and the Vapor/Biomass ratio (S/B) was kept in the range of 0.2-1.

**Results:** As the temperature increases, H<sub>2</sub> composition increases from 12.84% to 14%, CO composition increases from 10.62% to 13.31%, but CO<sub>2</sub> composition decreased from 20.15% to 17.8%. As the ER value increases, the H<sub>2</sub>, CO and CH<sub>4</sub> compositions decreased to 8.73%, 9.22% and 0.68% respectively. The increase in the S/B ratio, on the other hand, increased the H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> composition, while decreased the CO composition.

**Conclusion:** Considering the whole product composition, it was determined that the CFD approach gave closer results to the experimental data compared to the Thermodynamic Equilibrium Approach, the Thermodynamic Equilibrium Approach did not give good results in terms of H<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> composition. As a result of these results, it has been seen that the CFD approach is a more useful and appropriate approach in design, scale-up and optimization studies.



## Akışkan yataklı bir gazlaştırıcının hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) ve termodinamik denge yaklaşımı ile modellenmesi ve deneysel verilerle karşılaştırmalı olarak incelenmesi

Musa Yazgı<sup>1\*</sup>, Hüseyin Topal<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Türk Standardları Enstitüsü, 06100, Çankaya, Ankara, Türkiye

<sup>2</sup>Gazi Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü, 06570, Çankaya, Ankara, Türkiye

### Ö N E Ç İ K A N L A R

- Hesaplamalı akışkanlar dinamiği ile modelleme
- Gazlaştırma reaksiyonlarının modellenmesi
- Gazlaştırıcı tasarımı

### Makale Bilgileri

Araştırma Makalesi  
Geliş: 23.04.2020  
Kabul: 12.01.2023

### DOI:

10.17341/gazimmfd.722335

### Anahtar Kelimeler:

Biyokütle, gazlaştırma,  
Hesaplamalı Akışkanlar  
Dinamiği,  
termodinamik denge,  
akışkan yatak

### ÖZ

Bu çalışmada pirinç kabuğu ile daha önce deneysel olarak gerçekleştirilmiş olan gazlaştırma süreci Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD) ve Termodinamik Denge Yaklaşımı ile modellenmiş ve gaz ürün bileşimleri belirlenmiştir. HAD ile yapılan modellemede tüm bileşenler açısından daha iyi sonuçlara ulaşılmıştır. Sıcaklık 750 – 900°C aralığında, eşdeğerlik oranı (ER) 0,3-0,45 aralığında ve Buhar/Biyokütle oranı (S/B) 0,2-1,0 aralığında tutulmuştur. Sıcaklık 750°C'den 900°C'ye çıkarıldığında, kuru temel üzerinden H<sub>2</sub> bileşimi %12,84'den %14'e, CO bileşimi %10,62'den %13,31'e yükselirken CO<sub>2</sub> bileşimi %20,15'den %17,8'e düşmüştür. Sentez gazı Alt Isı Değeri (AID) ise 3,01 MJ/Nm<sup>3</sup>'den 3,34 MJ/Nm<sup>3</sup> değerine yükselmiştir. ER değeri 0,3'den 0,45'e çıkarıldığında H<sub>2</sub> bileşimi %8,73'e, CO bileşimi %9,22'ye ve CH<sub>4</sub> bileşimi ise %0,68'e düşmüştür. ER değerindeki artış AID değerini 1,75 MJ/Nm<sup>3</sup> e kadar düşürmüştür. S/B oranındaki artış ise H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> ve CH<sub>4</sub> bileşimini artırırken CO bileşimini azaltmıştır. S/B değeri AID değerini etkilemediği görülmüştür. Tüm ürün bileşimi dikkate alındığında HAD yaklaşımının Termodinamik Denge Yaklaşımına kıyasla deneysel verilere daha yakın sonuç verdiği, Termodinamik Denge Yaklaşımının ise H<sub>2</sub> ve CH<sub>4</sub> bileşimi açısından iyi sonuç vermediği belirlenmiştir. Bu sonuçlar sonucunda HAD yaklaşımının tasarım, ölçek büyütme ve optimizasyon çalışmalarında daha kullanışlı ve uygun bir yaklaşım olduğu görülmüştür.

## Modeling of a fluidized bed gasifier with computational fluid dynamics (CFD) and thermodynamic equilibrium approach and comparative analysis with experimental data

### H I G H L I G H T S

- Modeling with computational fluid dynamics
- Modeling of gasification reactions
- Design of gasifier

### Article Info

Research Article  
Received: 23.04.2020  
Accepted: 12.01.2023

### DOI:

10.17341/gazimmfd.722335

### Keywords:

Biomass, gasification,  
Computational Fluid  
Dynamics,  
thermodynamic equilibrium,  
fluidized bed

### ABSTRACT

In this study, the gasification process, which was carried out experimentally with rice husk, was modeled by Computational Fluid Dynamics (CFD) and Thermodynamic Equilibrium Approach and gas product compositions were determined. Better results were obtained in terms of all components in the modeling with CFD. The temperature was kept in the range of 750 – 900,°Cthe equivalence ratio (ER) was in the range of 0.3-0.45 and the Vapor/Biomass ratio (S/B) was kept in the range of 0.2-1.0. When the temperature is increased from 750°Cto 900°C, H<sub>2</sub> composition increases from 12.84% to 14%, CO composition increases from 10.62% to 13.31%, but CO<sub>2</sub> composition decreased from 20.15% to 17.8%. Synthesis gas Lower Heat Value (AID) increased from 3.01 MJ/Nm<sup>3</sup> to 3.34 MJ/Nm<sup>3</sup>. When the ER value was increased from 0.3 to 0.45, the H<sub>2</sub> CO and CH<sub>4</sub> compositions decreased to 8.73%, 9.22% and 0.68% respectively. The increase in ER value decreased the AID value up to 2.35 MJ/Nm<sup>3</sup>. The increase in the S/B ratio, on the other hand, increased the H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> composition, while decreased the CO composition. It was observed that the S/B value did not affect the AID value. Considering the whole product composition, it was determined that the CFD approach gave closer results to the experimental data compared to the Thermodynamic Equilibrium Approach, the Thermodynamic Equilibrium Approach did not give good results in terms of H<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> composition. As a result of these results, it has been seen that the CFD approach is a more useful and appropriate approach in design, scale-up and optimization studies.

\*Sorumlu Yazar/Yazarlar / Corresponding Author/Authors : \*myazgi@tse.org.tr, htopal@gazi.edu.tr / Tel: +90 545 623 7385

## 1. Giriş (Introduction)

Uygun maliyetli, güvenilir ve temiz enerji kaynakları arayışı çağımızın karşılaştığı en önemli problemlerdendir. Zira dünya nüfusu ve enerji ihtiyacının günden güne artması ülkeleri yeni ve alternatif enerji kaynakları arayışına yönlendirmektedir[1]. Orman atıkları, tarımsal atıklar ve organik evsel atıklar gibi biyoküteller sürdürülebilir ısı ve güç üretimi için yenilenebilir enerji kaynaklarıdır. Oluşmaları fosil yakıtlar gibi milyonlarca yıl sürmez ve kısa süre içerisinde yeniden üretilebilir[2]. Fosil yakıt rezervlerinin sınırlı olması, yakıldığında atmosferi kirleten gaz salınımının olması ve gelişmiş ülkelerin baca gazı emisyonları ve küresel ısınma konusunda çevreci politika uygulamaları biyokütleyle yönelimi artırırken, bu alanda yürütülen araştırma faaliyetlerini de önemli derecede artırmıştır[3]. Gazlaştırma bu faaliyetlerin önemli bir kısmını oluşturmaktadır. Biyokütle yakılmak yerine gazlaştırılarak sentez gazı üretilebilmekte ve sentez gazı doğrudan enerji üretimi için kullanılabilmesi gibi değerli kimyasalların (metanol, dizel, doğalgaz gibi) üretiminde girdi olarak kullanılabilir[2]. Biyokütlenin gazlaştırılması ile sentez gazı üretimi günümüzde geniş çapta uygulanmaktadır. Ancak gazlaştırma sürecinin detaylı analizi, tasarımı ve optimizasyonuna ilişkin incelemeleri deneysel yaklaşımlarla yürütmek zordur[4]. Deneysel yaklaşımların yüksek maliyeti de göz önüne alındığında daha ekonomik olması ve daha hızlı sonuç alabilmek adına modelleme yaklaşımı ön plana çıkmaktadır. Modelleme bir gazlaştırıcının tasarlanmasından ölçek büyütme kadar farklı aşamalarda kullanılabilir bir yaklaşımdır. İyi bir model; işletme parametreleri ile tasarım parametrelerinin bir gazlaştırıcının performansına etkilerini tanımlamada yardımcı olur[5]. Modellemeler genel olarak Termodinamik Denge, Kinetik, Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD) ve Yapay Sinir Ağları yaklaşımları ile yapılmaktadır. Termodinamik Denge Yaklaşımında reaktör hidrodinamiği veya reaksiyon süresi değerlendirilmezken doğrudan ürün bileşimi, basit kütle denklemleri ve reaksiyon denge sabitleri kullanılmak suretiyle hesaplanır. HAD yaklaşımında reaksiyon kinetiği ve reaktör hidrodinamiği dikkate alınarak kütle, enerji ve momentum eşitlikleri eş zamanlı çözümlenerek reaktörde ürün bileşimi, sıcaklık dağılımı ve gaz-katı etkileşimine dair birçok parametre belirlenebilir[2]. Gaz-katı akışlı sistemlerde HAD yaklaşımında Euler-Euler ve Euler-Lagrange olmak üzere temel olarak iki yöntem kullanılır. Euler-Euler yönteminde hem katı hem gaz faz sürekli faz olarak kabul edilirken Euler-Lagrange yönteminde gaz faz sürekli, katı faz ise ayrık faz olarak kabul edilir[6]. ANSYS, BARRACUDA, COMSOL gibi ticari yazılım paketleri veya OpenFOAM ve MFIX gibi açık kaynak kod platformlarında HAD yaklaşımı ile modelleme yapılabilmektedir. İsmail vd. [7] yaptıkları çalışmada atmosferik basınçta işletilen bir akışkan yatak reaktörde oksijen zengin hava ile tarımsal atıkların gazlaştırmışlardır. Eşdeğerlik oranı (ER), oksijen içeriği ve akışkanlaşma hızı gibi parametrelerin sürece etkilerini araştırılmıştır. Yürütülen çalışmada aynı zamanda Euler-Lagrange yöntemi ile 2D modellemesi yapılmıştır. Model sonuçlarının deneysel sonuçlarla oldukça uyumlu olduğu, oksijen içeriğindeki artışın sentez gazı kalitesi ve bileşimlerini artırdığını tespit etmişlerdir. Kumar ve Paul [1] kauçuk ağacının aşağı akışlı bir reaktörde hava ile gazlaştırılmasını Euler-Lagrange yöntemi ile 2D olarak modellemişlerdir. Çalışmada biyokütle yukarıdan beslenirken, hava orta kısımdan beslenerek sentez gazı alt kısımdan alınmıştır. ER değerindeki artışın CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub> ve CO derişimini azaltırken CO<sub>2</sub> derişimini artırdığını belirlemişlerdir. Model sonuçları daha önceden yapılan deneysel sonuçlarla karşılaştırdıklarında uyumlu olduğunu gözlemlemişlerdir. Yang vd. [8] pirinç kabuklarının akışkan yatak reaktörde gazlaştırılma sürecini Euler-Lagrange yöntemi ile 3D olarak modellemişlerdir. Yürütülen çalışmada reaktör boyunca sıcaklık dağılımı, dağılıma katsayısının değişimi, boşluk kesri değişimi ve reaksiyon hızlarında değişimi detaylı şekilde incelenmiştir. ER,

buhar/biyokütle oranı ve sıcaklıktaki artışın ürün bileşimine etkileri deneysel verilerle karşılaştırıldığında uyumlu olduğunu belirlemişlerdir. Loha vd. [9] daha önceden deneysel olarak yaptıkları bir çalışmayı Euler-Lagrange yöntemi ile 3D olarak modellemişlerdir. Yürütülen çalışmada laboratuvar ölçekte bir akışkan yatak reaktörde pirinç kabuklarını hava ve su buharı ile gazlaştırmışlardır. Ürün bileşimine sıcaklık, buhar/biyokütle oranı ve ER değerinin etkilerini incelemişlerdir. Model sonuçlarının deneysel sonuçlarla uyumlu olduğunu ve sıcaklıktaki artışın H<sub>2</sub>, CO ve CH<sub>4</sub> bileşimini artırırken ER değerindeki artışın azalttığını ve buhar/biyokütle oranındaki artışın H<sub>2</sub> bileşimini artırırken CO ve CH<sub>4</sub> bileşimini azalttığını belirlemişlerdir. Cheng vd. [10] ağaç atıklarının akışkan yatak reaktörde hava ve CO<sub>2</sub> ile gazlaştırılmasını Euler-Euler yöntemi ile modellemişlerdir. Çalışmada parçacık çapı, CO<sub>2</sub> oranı ve nem içeriğinin gazlaştırma performansını önemli derecede etkilediği ve CO<sub>2</sub> emisyonlarının azaltılmasında bu tarz bir gazlaştırma prosesinin kullanılabilmesini önermişlerdir. Xue ve Fox [11] odunun akışkan yatak reaktörde hava ile gazlaştırılması Euler – Euler yöntemi ile modellemişlerdir. Gaz-katı fiziksel ve kimyasal özellikler ile reaksiyon hızlarının detaylı şekilde incelenebileceği gösterilmiştir. Shirke vd. [12] 4 farklı biyokütlenin gazlaştırılmasını stokiyometrik denge modeli ile incelemişlerdir. Yapılan çalışmada sıcaklık, buhar/biyokütle ve oksijen/biyokütle oranının sentez gazı bileşimi ve kalorifik değerine etkilerini incelemişlerdir. Gerorge vd. [13] farklı biyokütlerin gazlaştırma performansına sıcaklık, buhar/biyokütle ve hava/biyokütle oranlarının etkilerini stokiyometrik denge modeli ile incelemişlerdir. Hidrojen verimi açısından deneysel sonuçlarla model sonuçlarının uyum sağladığı ve yüksek hidrojen verimi için biyokütlerde H/C oranının yüksek, O/C oranının ise düşük olması gerektiği tespit edilmiştir. Sharma vd. [14] mobilya atıklarının hava ve su buharı ile gazlaştırılmasını yukardan aşağı akışlı bir reaktörde deneysel olarak incelemişlerdir. Geliştirilen bir stokiyometrik termodinamik denge yaklaşımı ile modelini hem yürütülen çalışma hem de literatür verileri ile karşılaştırmalı olarak değerlendirmişlerdir. Modelin literatür verileri uyumlu olduğu ancak mevcut çalışma ile karşılaştırıldığında uyumlu olmadığı değerlendirilmiştir.

Bu çalışmada Loha vd. [15] tarafında deneysel olarak yürütülen bir çalışma Euler – Euler yöntemiyle ve termodinamik denge yaklaşımı ile modellenmiştir. Literatürde hem HAD hem de Termodinamik Denge yaklaşımının birlikte ele alındığı bir çalışmaya ulaşılamamıştır. İlgili deneysel çalışmanın açık kaynak kod yazılımı olan MFIX ile Euler-Euler veya 2 Akışkan Modeli (TFM) kullanılarak yapılmadığını görülmüştür. Loha vd. [15] tarafından yapılan deneysel çalışmanın Yang vd. [8] tarafından gazlaştırıcı normalde borsal olmasına rağmen diktörtgen prizması gibi varsayıp FLUENT programını kullanarak CFD-DEM modeli ile 3D çözüm yapmıştır. Yine Loha vd. [9] ticari yazılım programları olan cfd (BARACUDA) kullanılarak Euler-Lagrange modeli ile 3D çözüm yapmıştır. Bu çalışmada ise diğer çalışmalardan farklı olarak en basit model olan iki akışkan modeli (TFM) kullanılıp türbülans akışın olmadığı kabulü ile 2D olarak model çözümü gerçekleştirilmiştir. Modelleme çalışmalarında çoğunlukla sürecin ilk aşaması olan piroliz basamağının biyokütlenin reaktöre girişinde gerçekleştiği kabul edilir. Bu sebeple reaktöre orijinal biyokütle yerine çar, nem ve uçucu madde ayrı ayrı beslenebilmektedir[9]. Bu çalışmada ise Loha vd. [15] ile Yang vd. [8]'den farklı olarak nem ve hem de uçucu maddenin salınımı kimyasal tepkime olarak modellenmiştir. Elde edilen bulgulara bakıldığında bu çalışmanın diğer iki çalışmada elde edilen bulgularda olduğu gibi deneysel verilerle model verilerinin uyumlu olduğu, MFIX yazılımı ve uygulanan model ile hesaplama maliyetinin (programın ticari olmaması ve çözüm süresinin diğer çalışmalara istinaden çok daha kısa olması) minimize edilebileceği gösterilmiştir. Her ne kadar söz konusu diğer modelleme çalışmaları 3D olarak daha gerçekçi gibi görünse de 2D olarak yapılan bu çalışma; MFIX açık

kaynak kod yazılım programının akışkan yatak gazlaştırıcıların optimizasyonu, tasarım ve ölçeklendirme çalışmalarında kullanılabilmesini de göstermektedir. Bununla birlikte bu çalışmada HAD ile Termodinamik Denge Yaklaşımı kıyaslanmıştır. Her iki yaklaşımın deneysel verilerle uyumunu göstermek ve bir gazlaştırıcı tasarımında hangi yaklaşımın hangi aşamada kullanılabilmesini değerlendirilmiştir. Bu çalışmanın literatüre katkısının yanında sanayicilere veya girişimcilere yol gösterici olduğu açıktır. Zira yapılan literatür araştırmasında bu tarz bir değerlendirmenin Türkiye’de yapılmadığı veya yetersiz kaldığı bununla beraber özellikle Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği yaklaşımı ile gazlaştırıcı performansını değerlendirilmesi üzerine fazla bir çalışmanın olmadığı da görülmüştür.

## 2. Teorik Metot (Theoretical Method)

### 2.1. Termodinamik Denge Yaklaşımı ile Modelleme (Modeling by Thermodynamic Equilibrium Approach)

Termodinamik yaklaşımda tepkimelerin dengeye ulaştığı kabul edilir. Bu yaklaşımda reaktör hidrodinamiği veya boyutları hakkında değerlendirme yapılmaz. Ancak belirli bir sıcaklıkta belirli bir biyokütle/hava veya biyokütle/buhar oranları ile hangi bileşimde ürün elde edileceği yaklaşık olarak tahmin edilebilmektedir [5].

Termodinamik yaklaşıma göre 1 Nm<sup>3</sup> gaz üretimi için aşağıdaki eşitlikler yazılabilir;

$A$	: kg Kuru Hava/kg Kuru Yakıt
$F$	: kg Kuru Yakıt/1 Nm <sup>3</sup> Gaz Ürün
$S$	: kg Su Buharı/kg Kuru Yakıt
$W$	: kg Su/kg Kuru Yakıt
$X_C$	: kg °C/kg Kuru Yakıt (Kimyasal Analiz – Ultimate Analiz)
$X_H$	: kg H/kg Kuru Yakıt (Kimyasal Analiz – Ultimate Analiz)
$X_O$	: kg O/kg Kuru Yakıt (Kimyasal Analiz – Ultimate Analiz)
$X_N$	: kg N/kg Kuru Yakıt (Kimyasal Analiz – Ultimate Analiz)
$y_i$	: $i$ gaz ürünü mol kesri

Normal Koşullar : 273,15 K ve 101325 Pa İdeal Gaz Kanununa göre 1 Nm<sup>3</sup> gaz 0,0446 (1/22,4) kmol gaza eşdeğerdir.

$C$  denkliği;

$$F * \frac{X_C}{12} = \frac{(y_{CO_2} + y_{CO} + y_{CH_4})}{22,4} \quad (1)$$

$H_2$  denkliği;

$$F * \left( \frac{X_H}{2} + \frac{S}{18} + \frac{W}{18} \right) = \frac{(y_{H_2} + y_{H_2O} + 2 * y_{CH_4})}{22,4} \quad (2)$$

$O_2$  denkliği;

$$F * \left( \frac{X_O + A * 0,233}{32} + \frac{S + W}{36} \right) = 0,0446 * (0,5 * y_{CO} + y_{CO_2} + 0,5 * y_{H_2O}) \quad (3)$$

$N_2$  denkliği;

$$F * \left( \frac{X_N}{28} + \frac{A * 0,767}{28} \right) = 0,0446 * (y_{N_2}) \quad (4)$$

$$y_{CO_2} + y_{CO} + y_{CH_4} + y_{N_2} + y_{H_2} + y_{H_2O} = 1 \quad (5)$$

Bilinmeyen sayısı 7 dir. Yukarıda ise 5 eşitlik vardır. Diğer 2 eşitlik Kimyasal Denge Sabiti - Denge Bileşimi ilişkisinden elde edilebilir. Yüksek sıcaklıkta hızlıca dengeye ulaştığından aşağıda verilen şift ve

metan reformasyon tepkimelerinin denge sabiti – sıcaklık ilişkisinden faydalanılmıştır[16].

$$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2 \gg K_{psift} = \frac{y_{CO_2} * y_{H_2}}{y_{CO} * y_{H_2O}} \quad (6)$$

$$CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3H_2 \gg K_{pref} = \frac{y_{CO} y_{H_2}^3}{y_{CH_4} y_{H_2O}} \quad (7)$$

$$\ln(K_{psift}) = \frac{4160}{T} - 3,798 \quad (8)$$

$$\ln(K_{pref}) = \frac{-27106}{T} + 30,42 \quad (9)$$

Eş. 8 ve Eş. 9’dan faydalanılarak Eş. 1-Eş. 7 sayısal olarak MATLAB ortamında yazılan bir algoritma (Şekil 1) ile çözülmüştür. Algoritma Newton – Rapsion Yöntemine göre sayısal olarak 7 denklemi çözmektedir. Bu yöntemde hesaplanacak değerleri içeren  $x(i)$  değişkenler vektörü,  $f(x)$  fonksiyon vektörü ve  $J(x)$  jacobian matrisidir.

### 2.2. HAD Yaklaşımı ile Modelleme (Modeling by CFD Approach)

#### 2.2.1. Reaktör geometrisi ve model oluşturma (Reactor geometry and model setup)

Hesaplamada kullanılan akışkan yatak reaktörün şematik gösterimi ve 2D ızgara modeli Şekil 2’de verilmiştir. Loha vd. [15] ve Loha vd. [9] verilen bilgilere göre biyokütle reaktörün yan tarafından ve dağıtıcının 0,05 m üzerinden 0,04 m çapında bir borudan beslenmektedir. Reaktör başlangıçta 0,1 m’ye kadar silika kum ile doludur. Silika kumun parçacık çapı sabit 0,5 mm olarak alınmıştır. Diğer simülasyon koşulları Tablo 1’de verilmiştir.

#### 2.2.2. Temel eşitlikler (Governing equations)

HAD yaklaşımı ile modelleme açık kaynak MFIX-TFM kod platformu kullanılarak yapılmıştır. Modellemede Eş. 10-Eş. 22 kullanılmıştır [17].

$$\epsilon_g + \epsilon_s = 1 \text{ (gaz ve katı boşluk kesirleri)} \quad (10)$$

$$\frac{\partial \epsilon_g \rho_g}{\partial t} + \nabla(\epsilon_g \rho_g u_g) = -r_{gs} \text{ (Süreklilik, gaz)} \quad (11)$$

$$\frac{\partial \epsilon_s \rho_s}{\partial t} + \nabla(\epsilon_s \rho_s u_s) = r_{gs} \text{ (Süreklilik, katı)} \quad (12)$$

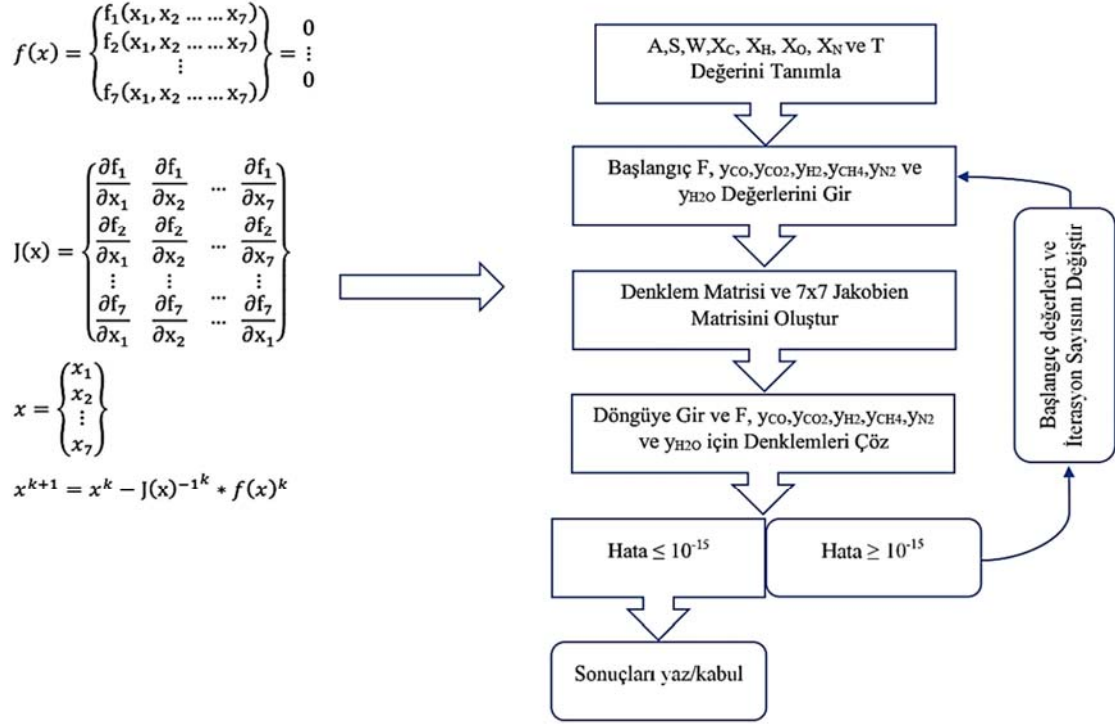
$$\frac{\partial \epsilon_s \rho_s u_s}{\partial t} + \nabla(\epsilon_s \rho_s u_s u_s) = \nabla \sigma_s + f_{gs} + \epsilon_s \rho_s + m_{gs} \text{ (Momentum, katı)} \quad (13)$$

$$\frac{\partial \epsilon_g \rho_g u_g}{\partial t} + \nabla(\epsilon_g \rho_g u_g u_g) = \nabla \sigma_g - f_{gs} + \epsilon_g \rho_g g - m_{gs} \text{ (Momentum, gaz)} \quad (14)$$

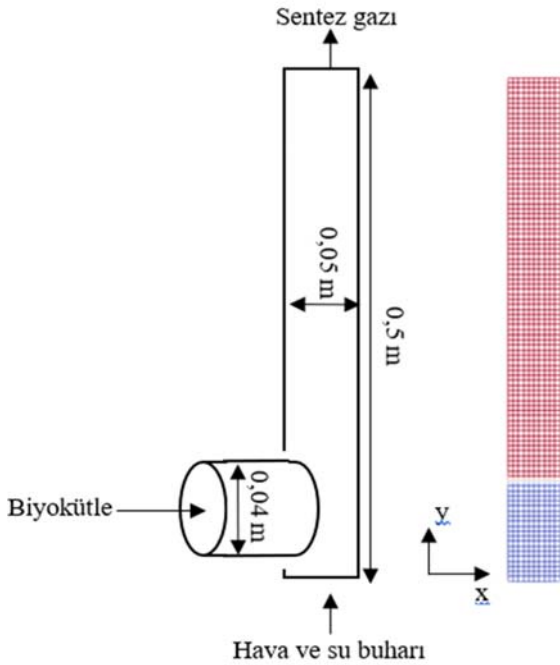
$$f_{gs} = \epsilon_s \nabla p_g + \beta_{gs} (u_g - u_s) \quad (15)$$

Çalışmada Drag Model olarak Gidaspow kullanılmıştır.

Gidaspow Model Parametreleri[18];



Şekil 1. Termodinamik yaklaşımla çözüm algoritması (Solution algorithm by thermodynamic approach)



Şekil 2. Akışkan yatak reaktör geometrisi ve 2D modeli (Fluidized bed reactor and 2D model)

$$\beta_{gs} = \begin{cases} \frac{3}{4} C_D \frac{\varepsilon_s \varepsilon_g \rho_g |u_g - u_s|}{d_{ps}} \varepsilon_g^{-2,65} & \varepsilon_g \geq 0,8 \\ \frac{150 \varepsilon_s (1 - \varepsilon_g) \mu_g}{\varepsilon_g d_{ps}^2} + \frac{1,75 \rho_g \varepsilon_s |u_g - u_s|}{d_{ps}} & \varepsilon_g < 0,8 \end{cases} \quad (16)$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re(1 + 0,15Re^{0,687})} & Re < 1000 \\ 0,44 & Re \geq 1000 \end{cases} \quad (17)$$

$$Re = \frac{\varepsilon_g \rho_g |u_g - u_s| d_{ps}}{\mu_g} \quad (18)$$

$$\varepsilon_g \rho_g C_{pg} \left( \frac{\partial T_g}{\partial t} + u_g \nabla(T_g) \right) = -\nabla q_g - Q_{gs} - \Delta Q_{rg} + Q_r \text{ (Enerji, gaz)} \quad (19)$$

$$\varepsilon_s \rho_s C_{ps} \left( \frac{\partial T_s}{\partial t} + u_s \nabla(T_s) \right) = -\nabla q_{gs} + Q_{gs} - \Delta Q_{rs} - Q_r \text{ (Enerji, katı)} \quad (20)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_g \rho_g X_{gi}}{\partial t} + \nabla(\varepsilon_g \rho_g X_{gi} u_g) = \nabla(D_{gi} \nabla X_{gi}) + R_{gi} \text{ (i bileşen kütle denkliği, gaz)} \quad (21)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s \rho_s X_{si}}{\partial t} + \nabla(\varepsilon_s \rho_s X_{si} u_s) = \nabla(D_{si} \nabla X_{si}) + R_{si} \text{ (i bileşen kütle denkliği, katı)} \quad (22)$$

### 2.2.3. Kimyasal tepkime modelleri (Chemical reactions model)

Biyokütle yüksek sıcaklıkta işletilen reaktöre girdiğinde çok hızlı şekilde nem ve uçucu maddesini bünyesinden uzaklaştırır[9]. Yapılan araştırmalar yüksek sıcaklıkta saliseler içinde biokütlenin pirolize uğradığını ve uçucu bileşenlerin açığa çıktığını göstermektedir [22]. Modelleme çalışmalarında ise çoğunlukla sürecin ilk aşaması olan

**Tablo 1.** HAD simülasyon koşulları ve biyokütle özellikleri (CFD simulation conditions and biomass properties) [9]

Pirinç Kabuğu Kısa ve Elementel Analiz Sonuçları		Elementel Analiz % (Kuru Temel)	
Kısa Analiz %			
Nem	9,95	C	38,43
Sabit Karbon	14,99	H	2,97
Uçucu Madde	55,54	O	36,36
Kül	19,52	N	0,49
Toplam	100	S	0,07
		Kül	21,68
		Toplam	100
Biyokütle Besleme Hızı, kg/h			0,4
Parçacık Çapı, mm			0,30
Parçacık Yoğunluğu, kg/m <sup>3</sup>			750
ER			0,3-0,4
Buhar/Biyokütle (kg/kg)			0,2-0,8
Sıcaklık, °C			750 - 900
Basınç, Pa			101325
Yatak Malzemesi Yoğunluğu, kg/m <sup>3</sup>			2300
Yatak Malzemesi Parçacık Çapı, mm			0,50

piroliz basamağının biyokütlenin reaktöre girişinde gerçekleştiği kabul edilir. Bu sebeple reaktöre orijinal biokütle yerine çar, nem ve uçucu madde beslenebilmektedir[9]. Bu çalışmada ise hem nem ve hem de uçucu maddenin salınımı kimyasal tepkime olarak modellenmiştir. Diğer bir ifade ile içeriği bilinen biyokütlenin neminin buhar faza, uçucu maddenin ise H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> ve CH<sub>4</sub>'e bir tepkime ile dönüştüğü kabul edilmiştir. Katran oluşumu ve diğer C<sub>n</sub>H<sub>m</sub> oluşumu ihmal edilmiştir. Piroliz sonucu oluşan H<sub>2</sub>,CO,CO<sub>2</sub> ve CH<sub>4</sub> oranları ise Waheed vd. [23] çalışmasında farklı biyokütle ve piroliz gazları dikkate alınarak kimyasal içerikten teorik olarak hesaplanabilen uçucu madde C,H ve O oranları dikkate alınarak bu çalışmaya adapte edilmiştir. Piroliz gaz bileşiminin Loha vd. [9] 2014 yılında rapor ettikleri deneysel veriler ile de uyumlu olduğu görülmüştür. Reaktörde toplamda 11 tepkimenin gerçekleştiği kabul edilmiştir. Bunlar nem uçurma, piroliz, gaz-katı tepkimeler, gaz faz reformasyon ve yanma tepkimeleridir. Tepkimelere ilişkin kinetik modeller Tablo 2'de verilmiştir. Gazlaştırıcıya beslenen biyokütlenin sabit karbon, kül, nem ve uçucu maddeden oluştuğu, sabit karbonun (C) su buharı, O<sub>2</sub> gazı ve oluşan CO<sub>2</sub> gazı ile gaz-katı tepkimelerini verdiği, nem ve uçucu maddenin Tablo 2'de verilen hız modellerine göre gaz faza geçtiği ve eş zamanlı olarak Tablo 2'de verilen tepkimeleri gerçekleştiği kabul edilmiştir. Sabit karbon, nem, uçucu madde ve kül için molekül ağırlıkları ve ısı kapasite değerlerinin sıcaklığa bağlılığı Amerika Ulusal Enerji Teknolojileri Laboratuvarı tarafından geliştirilen C3M (Carbonaceous Chemistry for Computational Modeling) yazılımı kullanılarak belirlenmiştir.

#### 2.2.4. Başlangıç, sınır koşullar ve çözüm prosedürü (Initial, boundary conditions and solution procedure)

Kullanılan MFIX Yazılımı gaz-katı etkileşimli sistemlerin tasarımı ve modellenmesinde kullanılmaktadır. İlgili yazılımda proje oluşturulurken ilk olarak Şekil 3'de görüldüğü üzere model seçimi yapılmaktadır.

Bu modeller sırasıyla Single Phase Model, Two Fluid Model (TFM), Particle in Cell Model (PIC), Discrete Element Model (DEM), Hybrid Model (TFM + DEM) olarak verilmiştir. Çalışma kapsamında İki Akışkan Model (TFM) tercih edilmiştir ve tercihe bağlı olduğundan modelde türbülans mod kapalı tutulmuştur. Daha sonra Geometry be mesh bölümünden 2D olarak Şekil 2'de verilen geometri ve mesh (ağ) tasarımları gerçekleştirilmiştir. Bölgeler (regions) bölümünden, gazlaştırıcı duvarları (sabit sıcaklığın sağlandığı), gaz giriş bölümü, gaz çıkış bölümü, katı giriş bölümü ile yatak ve serbest taşınım bölümleri tanımlanmıştır. Akışkan(fluid) bölümünden, gazlaştırıcıya giren ve çıkan/oluşan tüm gaz bileşenler tanımlanmıştır. 130

Katılar(solids) bölümünden ise silika kumun fiziksel ve kimyasal özellikleri tanımlanmıştır. Yine solids bölümünde gazlaştırıcı sol taraftan sürekli olarak beslenen biyokütlenin fiziksel ve kimyasal özellikleri ile içeriği (sabit karbon, uçucu madde, nem ve kül) tanımlanmıştır. Başlangıç ve sınır koşullar (initial ve boundary conditions) bölümlerinden ise sınır ve başlangıç koşullar tanımlanmıştır. Başlangıç ve sınır koşulları regions bölümünde tanımlanan her bir bölge için ayrı ayrı tanımlanmıştır. Örneğin yatak bölgesinde başlangıçta hiç biyokütle olmadığı ve sadece silika kumun olduğu ve katı kesrinin 0,45 olduğu şekilde tanımlama yapılmıştır. Son olarak Kimya (chemistry) bölümünden sistemde gerçekleşen reaksiyonlar tanımlanmış ve ilgili editör sayfasında bu reaksiyonlara ait Tablo 2'de verilen kinetik hız modelleri kodlanmıştır. Şekil 2'de görüldüğü üzere uygulanan modelde başlangıçta silika kumun dağıtıcandan (gazlaştırıcı alt noktasından) itibaren 0,1 m kadar dolu olduğu, boşluk hacim kesrinin 0,55 ve katı kesrinin 0,45 olduğu kabul edilmiştir. Bu değerler MFIX yazılımına ayrı ayrı tanımlanmıştır. Gazlaştırıcıda başlangıçta sıcaklığın tepkime sıcaklığında olduğu ve inert gaz ortamı (N<sub>2</sub>) olduğu kabul edilmiştir. Her bir simülasyon için duvar sıcaklığının sabit olduğu, biyokütlenin 300 K, akışkanlaştırma gazının ise 473 K sıcaklıkta gazlaştırıcıya girdiği kabul edilmiştir. Tüm çalışmalarda biyokütle 0,4 kg/h hızla gazlaştırıcıya sürekli olarak beslenmiştir. Akışkanlaştırma gazının içeriğine bağlı olarak her bir çalışma için gaz giriş hızı hesaplanmış ve her bir çalışmada belirlenen hızda alt bölümden gazlaştırıcıya beslenmiştir. Zaman adımı aralığı ilgili yazılımda numerics bölümünde 10<sup>-8</sup> ile 8\*10<sup>-5</sup> arasında girilerek tüm çalışmalarda sabit tutulmuştur. Bu değer daha önce yapılan Yin vd. [4], Kumar vd. [1] Xue vd. [11] ve Liu vd. [19] çalışmalara istinaden belirlenmiştir. Hesaplama ağı (mesh) oluşturulmasında hücre boyutu 5 mm olarak toplamda 1000 hücre kullanılmıştır. 1000 hücreli ağ kullanımı grid bağımsızlığı çalışması ile belirlenmiştir. Grid bağımsızlığı çalışması Yin vd. [4]'nin yaptığı gibi basınç yatak boyunca basınç profili kullanılarak veya Kumar vd. [1] ürün bileşimi kullanılarak belirlenebilmektedir. Bu çalışmada kaba (455), orta (1000) ve ince ağ (2250) yapılarında basınç kaybı profilleri elde edilmiştir. Şekil 4'te grid bağımsızlığı çalışması sonuçları verilmiştir. Önemli bir değişim olmaması sebebiyle orta ağ yapısı tercih edilmiştir. Yürütülen çalışmada enerji korunum eşitliklerinde radyasyon dikkate alınmamıştır.

### 3. Sonuçlar ve Tartışmalar (Results and Discussions)

Yürütülen çalışmada reaktör çıkışı ürün bileşimine sıcaklık (T), buhar/biyokütle oranı (S/B) ve hava/stokiyometrik hava oranı (ER) etkileri incelenmiştir. Termodinamik yaklaşım reaktör

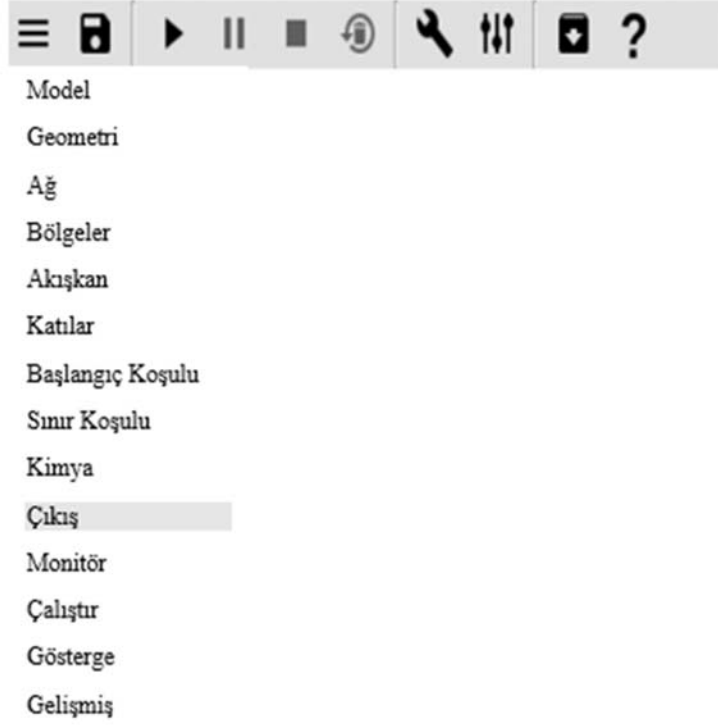
**Tablo 2.** Model tepkimeler ve hız ifadeleri (Model reactions and rate equations)

No	Stokiyometrik Denklem	Hız ifadesi	Kaynak
R1	$Nem \rightarrow H_2O$	$R = 5,13 * 10^6 * \exp\left(-\frac{10585}{T_p}\right) * [Nem]$ (kmol/m <sup>3</sup> .s)	Xu vd. [17]
R2	$UM \rightarrow 0,11CO_2 + 0,48CO + 0,10CH_4 + 0,31H_2$	$R = 1,49 * 10^5 * \exp\left(-\frac{1340}{T_p}\right) * [UM]$ (kmol/m <sup>3</sup> .s)	Liu vd. [19]
R3	$C + 0,5O_2 \rightarrow CO$	$r = \epsilon_s * T * 4,34 * 10^7 * \exp\left(-\frac{13590}{T}\right) * [O_2]$ (mol/m <sup>3</sup> .s)	Xie vd. [20]
R4	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$R = A_p * P_{H_2O} * \frac{r_{diff,H_2O} * r_{kin,H_2O}}{r_{diff,H_2O} + r_{kin,H_2O}}$ (kg/s) $r_{diff,H_2O} = 5 * 10^{-12} * \frac{\left(\frac{T_p + T_g}{2}\right)^{0,75}}{d_p}$ $r_{kin,H_2O} = 2 * T_p * \exp\left(-\frac{1,96 * 10^8}{8314 * T}\right)$	Yin vd. [4]
R5	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$R = A_p * P_{CO_2} * \frac{r_{diff,CO_2} * r_{kin,CO_2}}{r_{diff,CO_2} + r_{kin,CO_2}}$ (kg/s) $r_{diff,CO_2} = 5 * 10^{-12} * \frac{\left(\frac{T_p + T_g}{2}\right)^{0,75}}{d_p}$ $r_{kin,CO_2} = 0,3 * T_p * \exp\left(-\frac{2 * 10^8}{8314 * T}\right)$	Yin vd. [4]
R6	$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	$R = 2,78 * 10^3 * \exp\left(-\frac{1510}{T}\right) * [CO] * [H_2O]$ (kmol/m <sup>3</sup> .s)	Loha vd. [9]
R7	$CO_2 + H_2 \rightarrow CO + H_2O$	$R = \frac{2,78 * 10^3 * \exp\left(-\frac{1510}{T}\right) * [CO_2] * [H_2]}{0,0265 * \exp\left(\frac{3968}{T}\right)}$ (kmol/m <sup>3</sup> .s)	Loha vd. [9]
R8	$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	$R = 1,48 * 10^{11} * \exp\left(-\frac{31236}{T}\right) * [CH_4] * [H_2O]$ (kmol/m <sup>3</sup> .s)	Boujjat vd. [21]
R9	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	$R = 5,16 * 10^{13} * T^{-1} * \exp\left(-\frac{15636}{T}\right) * [CH_4] * [O_2]$ (kmol/m <sup>3</sup> .s)	Yin vd. [4]
R10	$CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2$	$R = 10^{10} * \exp\left(-\frac{15155}{T}\right) * [CO] * [O_2]^{0,5} * [H_2O]^{0,5}$ (kmol/m <sup>3</sup> .s)	Yin vd. [4]
R11	$H_2 + 0,5O_2 \rightarrow H_2O$	$R = 1,08 * 10^{12} * \exp\left(-\frac{15035}{T}\right) * [H_2] * [O_2]$ (kmol/m <sup>3</sup> .s)	Yin vd. [4]

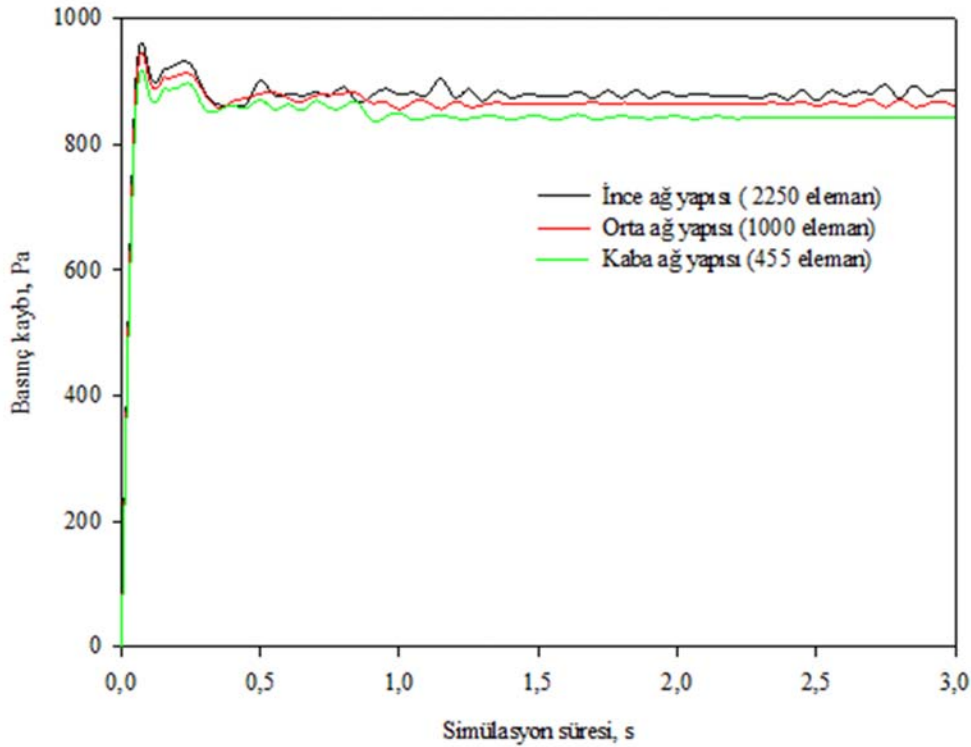
hidrodinamiğini içermediği için sonuç odaklı bir yaklaşımdır. T, S/B ve ER değerlerine karşılık doğrudan ürün bileşimini hesaplamaya olanak sağlamaktadır. Ancak bu yaklaşımda reaktör hidrodinamiği dikkate alınmadığından her zaman deneysel sonuçlara yakın değerler elde edilmesi beklenmez [14]. Bunun sebebi reaksiyonların dengeye ulaşması için uygun koşulların (reaksiyon süresi, reaktör hacmi) sağlanamamasıdır. HAD yaklaşımında ise reaktör hidrodinamiği ve boyutlar dikkate alındığından daha uygun sonuçlar elde edilebilmektedir. Şekil 5'de HAD yaklaşımı ile yapılan modellemelerde reaktör çıkışı bileşen kütle kesrinin zamanla değişimi verilmiştir. Yürütülen çalışma dinamik bir çalışmadır. Biyokütle ve Gazlaştırıcı/akışkanlaştırıcı gaz t = 0 anında sisteme beslenmekte ve kimyasal tepkimelerin oluşması sağlanmaktadır. Tablo 2'de verilen kimyasal tepkimelerin gerçekleşmesi ve gaz ürünlerin reaktör çıkışına ulaşması yaklaşık 1 saniye sürmektedir. Sistem sürekli işletildiğinden (Biyokütle ve Gazlaştırıcı/akışkanlaştırıcı gaz sisteme sürekli

beslendiğinden) 4. ve 5. saniyeden itibaren çıkış akımında gaz ürün bileşiminin yaklaşık aynı olduğu ve zamanla değişmediği kabul edilmektedir. Dolayısıyla 5. Saniyeden itibaren ürün bileşimi zamanla değişmediğinden sistemin dinamik halden yataşkın hale geldiği kabul edilebilir. 5. Saniyeden sonra ürün bileşiminde bir değişimin olmadığı kabul edildiğinden simülasyon çalışması 20. Saniyede sonlandırılmıştır. Literatürde bu süre daha uzun veya daha kısa sürebilmektedir. Önemli olan sistemin yataşkın hale gelip gelmediğinin belirlenmesidir. Yataşkın hal çıkış bileşimi 5.saniye ile 20.saniye arasındaki değerlerin ortalaması alınarak hesaplanmıştır.

Şekil 6'da ise her iki yaklaşımında model sonuçlarının deneysel verilerle doğrulanması adına Loha vd. [15] yaptığı çalışma sonuçları ve model sonuçları verilmiştir. Model sonuçlarının deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir. Termodinamik yaklaşımın yüksek sıcaklıklarda daha iyi sonuç verdiği söylenebilir. Zira bir



Şekil 3. MFiX yazılımı Türkçeye çevrilmiş proje tasarlama ekran görüntüsü (Project desing screen in MFiX software in Turkish)

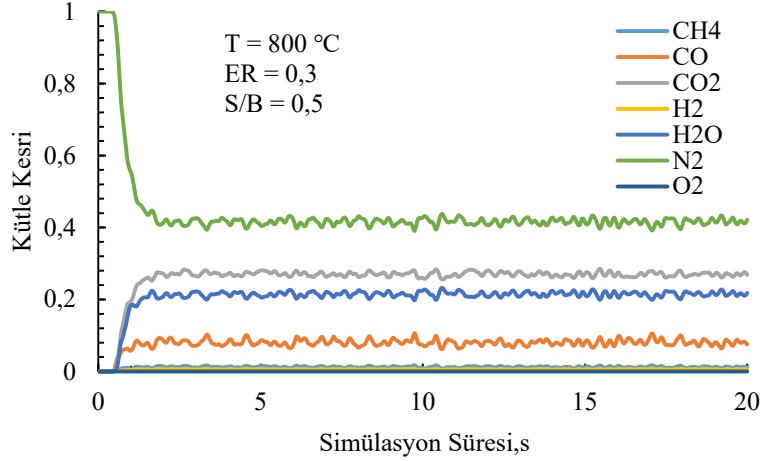


Şekil 4. Farklı ağ yapısında (hücre sayısı) yataktaki basınç kaybının zamanla değişimi ( $d_p = 3 \cdot 10^{-4}$  m, akışkanlaştırma gazı kütlece % 44.2 H<sub>2</sub>O, % 22.32 N<sub>2</sub> ve % 33.48 O<sub>2</sub> içermektedir, T = 1073 K ve U = 0.09 m/s)  
(Variation of pressure drop in bed with time in different grid structure (number of cells))

reaksiyonun yüksek sıcaklıkta daha hızlı dengeye ulaştığı düşünüldüğü bu beklenen bir sonuçtur. Modeller kendi aralarında

karşılaştırıldığında genel olarak HAD yaklaşımının daha iyi sonuç verdiği görülmektedir. Termodinamik Denge Yaklaşımının ise CH<sub>4</sub>





Şekil 5. Reaktör çıkışı bileşen kütle kesrinin zamanla değişimi (Change of component mass fractions over time at reactor outlet)

gaz bileşimini tahmin edemediği, H<sub>2</sub> gaz bileşimi açısından ise deney verilerden oldukça saptığı görülmektedir. HAD yaklaşımında reaktör boyutu, besleme noktası, akışkan yatak hidrodinamiği ve reaksiyonların kinetik modelleri dikkate alınarak daha gerçekçi bir modelleme yapılmaktadır ve tüm veriler reaktör boyunca görsel ve grafiksel olarak elde edilebilmektedir. Deneysel koşulların bire-bir şekilde tanımlanabildiği bir model olması sebebiyle HAD yaklaşımının tüm bileşenler açısından çok daha iyi sonuçlar verdiği söylenebilir. HAD modelinin özellikle CH<sub>4</sub> ve H<sub>2</sub> gazının bileşimini çok iyi tahmin ettiği görülmektedir. Bu yönüyle Termodinamik Denge Yaklaşımından daha iyi modelleme yaptığı ve ürün bileşimini daha iyi tahmin ettiği görülmektedir. sabit ER ve S/B değerlerinde 750°C sıcaklıktan 850°C'ye çıkıldığında HAD model verileri ile deneysel verilerde uyumun zayıfladığı görülmektedir. Bunun sebebinin modelde tüm sıcaklıklarda Tablo 2'de R2 olarak verilen piroliz basamağının sabit ürün bileşimi oluşturduğunun kabul edilmesidir. Oysa gerçekte yüksek sıcaklıklarda piroliz ürün bileşimi değişebilmektedir. Şekil 7 ve Şekil 8'de reaktör boyunca gaz ürün kütle bileşim dağılımları ve boşluk kesri dağılımı verilmiştir. Şekil 8'de görüldüğü üzere kabarcık yatak rejiminin sağlandığı görülmektedir. Şekil 7 ve Şekil 8'de sunulan 20 s simülasyonun 20. saniyesini göstermektedir. Yani 20. saniyede reaktör boyunca gaz ürün bileşimini ve boşluk kesrinin dağılımını ifade etmektedir. Şekil 7'de görüldüğü üzere biyokütlenin reaktöre beslendiği noktada ilk etkileşime bağlı olarak tepkimelerin şiddetle gerçekleştiği ve H<sub>2</sub> bileşiminin reaktörün o konumunda en yüksek değerlere ulaştığı görülmektedir. O<sub>2</sub> bileşiminin ise reaktörün yatak bölgesinde neredeyse tamamen tepkimelerle tükendiği görülmektedir. Şekil 8'de ise t = 0 anında yatak bölgesinde boşluk kesrinin homojen olduğu, simülasyon başlatıldıktan sonra ise yatağın bazı bölgelerinde boşluk kesrinin 1 e ulaştığı yani kabarcık yatak rejiminin sağlandığı görülmektedir.

### 3.1. Sıcaklık Etkisi (Temperature Effect)

Sıcaklığın reaksiyonlar üzerine temel olarak iki tür etkisi vardır, birinci etkisi sıcaklıktaki artış endoterm, ekzoterm, tersinir veya tersinmez tüm reaksiyonların hızını artırır. Diğer etkisi ise denge sabiti veya denge dönüşümü üzerine etkisidir. Tersinir kabul edilen ekzoterm tepkimelerde sıcaklıktaki artış denge dönüşümünü veya denge sabiti sayısal değerini azaltırken endoterm reaksiyonlarda artırıcı etki yapmaktadır. Gazlaştırma proseslerinde su-gaz (R4), boudouard (R5), şift (R6) ve yanma reaksiyonları ürün bileşimini temel olarak belirleyen reaksiyonlardır. Şekil 9'da görüldüğü üzere sıcaklıktaki artış genel olarak H<sub>2</sub> ve CO bileşimini artırırken CO<sub>2</sub>

bileşimini azaltmıştır. Burada sıcaklıktaki artış, su-gaz (R4) ve boudouard (R5) reaksiyonları ve kısmi yanma (R3) reaksiyon hız ve verimlerini artırırken, şift (R6) reaksiyonu ekzoterm denge reaksiyonu olduğundan yüksek sıcaklıkta verimi düşmüştür. Bu durum H<sub>2</sub> ve CO bileşimini artırırken CO<sub>2</sub> bileşimini azaltmıştır. AID değerinin (Eş. 23.[15]) sıcaklıkla değişimi ise H<sub>2</sub> ve CO bileşimindeki artışa bağlı olarak genel olarak artan bir davranış göstermiştir.

AID (MJ/Nm<sup>3</sup>) =

$$(25,7 * H_2\% + 30 * CO\% + 85,4 * CH_4\%) * \left( \frac{4,2}{1000} \right) \quad (23)$$

### 3.2. ER Etkisi (ER Effect)

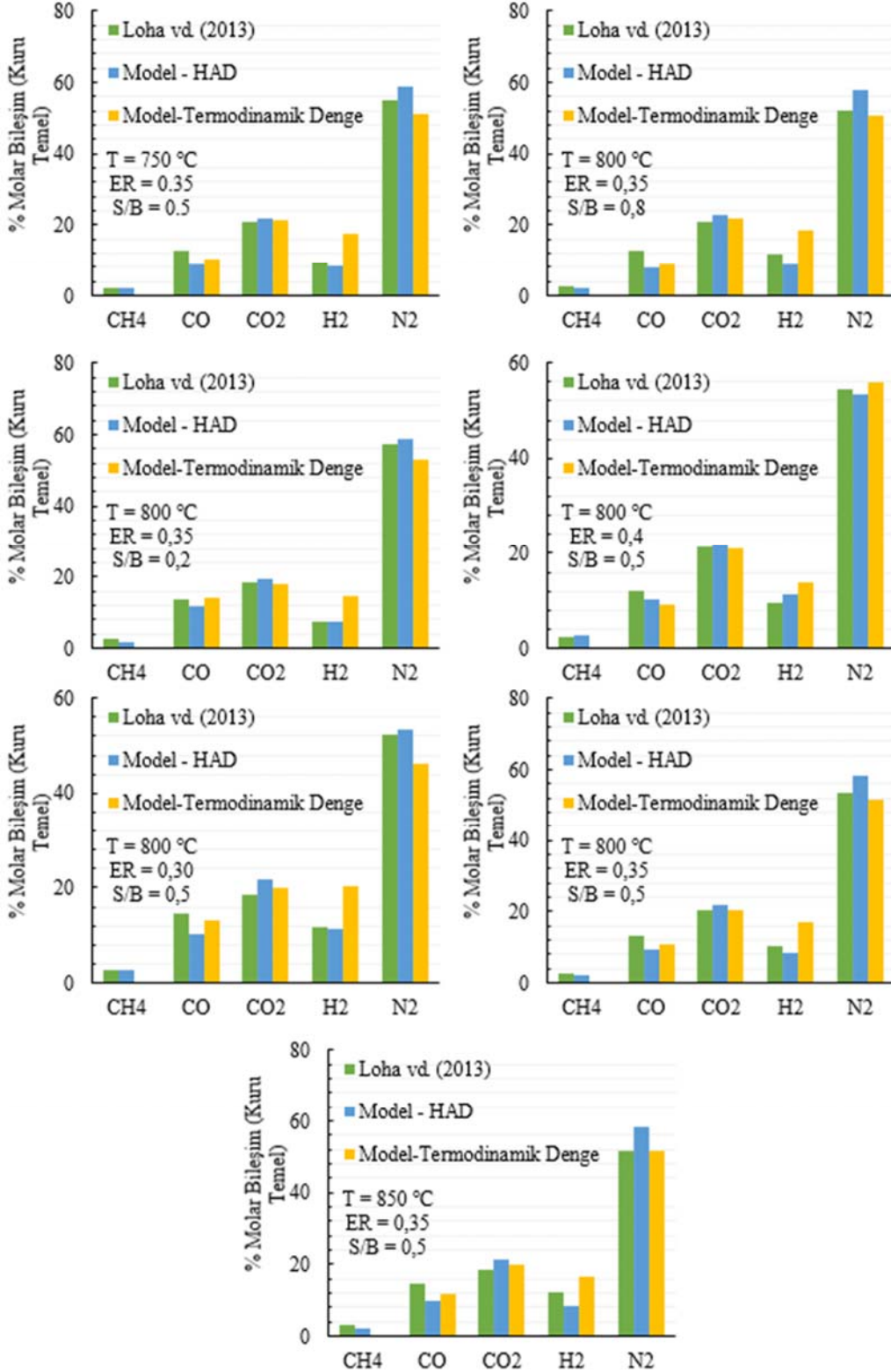
ER değerindeki artış biyokütle başına hava veya oksijen oranındaki artış anlamına gelmektedir. Bu değer artışı hem katı faz hem de gaz faz yanma reaksiyonlarının hızını ve verimini artırır. Diğer bir ifade ile hem sabit karbon ve üretilen sentez gazının daha fazla oranda yanmasına sebep olmaktadır. Buna bağlı olarak Şekil 10'da görüldüğü üzere H<sub>2</sub>, CO ve CH<sub>4</sub> bileşimi azalırken genel olarak CO<sub>2</sub> bileşimi de genel olarak azalmıştır. ER oranının artması reaktöre gönderilen N<sub>2</sub> oranını da arttırdığından CO<sub>2</sub> oranı da azalan bir davranış göstermiştir. Bununla beraber Şekil 10'da görüldüğü üzere ER oranının artması CO, CH<sub>4</sub> ve H<sub>2</sub> oksidasyonunu arttırdığından AID değeri ciddi şekilde azalan bir davranış göstererek 3,49 MJ/Nm<sup>3</sup> değerinden 1,77 MJ/Nm<sup>3</sup> değerine düşmüştür.

### 3.3 Buhar/Biyokütle Oranı Etkisi (Steam/Biomass Ratio Effect)

Biyokütle başına buhar miktarındaki artış su-gaz (R4) ve şift (R6) reaksiyonlarının hız ve veriminin artmasını sağlamaktadır. Bu durum H<sub>2</sub> ve CO üretimini artırırken aynı zamanda şift reaksiyonu ile CO tüketimini de arttırmaktadır. Buna bağlı olarak Şekil 11'de görüldüğü üzere S/B oranındaki artış H<sub>2</sub> ve CO<sub>2</sub> bileşimini artırırken, CO bileşimini azaltmıştır. CH<sub>4</sub> bileşiminin ise S/B arttıkça arttığı görülmektedir. AID değeri ise S/B oranı arttıkça her ne kadar H<sub>2</sub> ve CH<sub>4</sub> oranı artmış olsa da CO oranındaki azalmaya bağlı olarak azalan bir davranış göstermiştir.

## 4. Simgeler (Symbols)

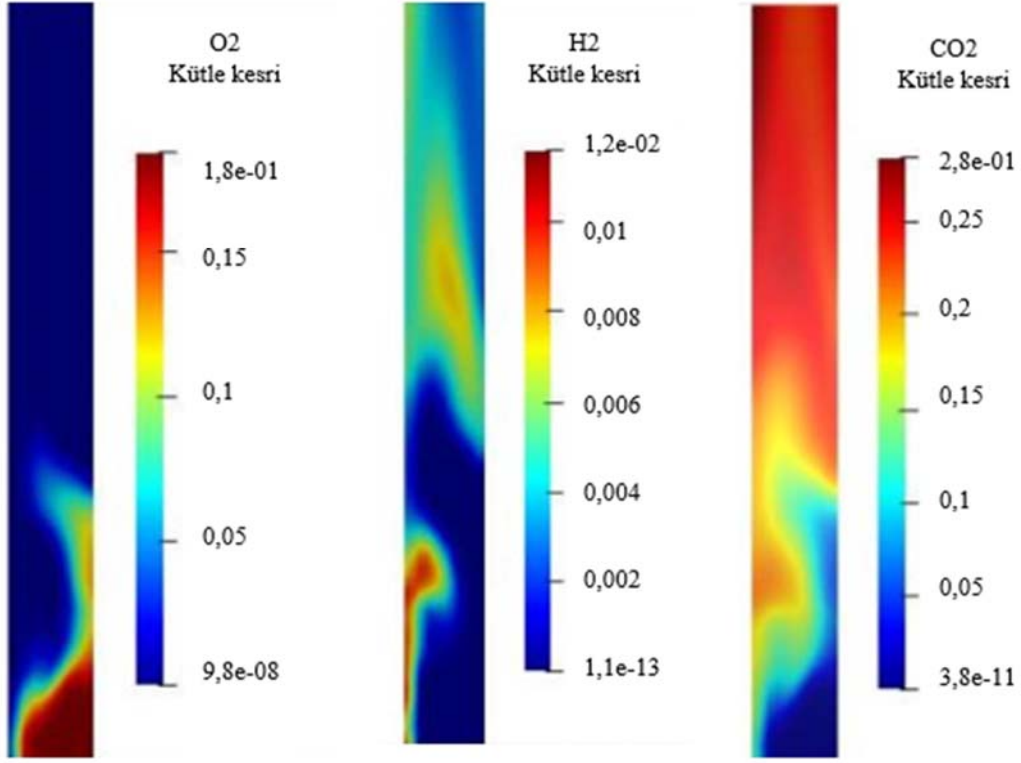
Ap	: Biyokütle parçacık yüzey alanı (m <sup>2</sup> )
D	: Difüzyon katsayısı
dp	: Biyokütle parçacık çapı (m)
ER	: kg hava/kg stokiometrik hava



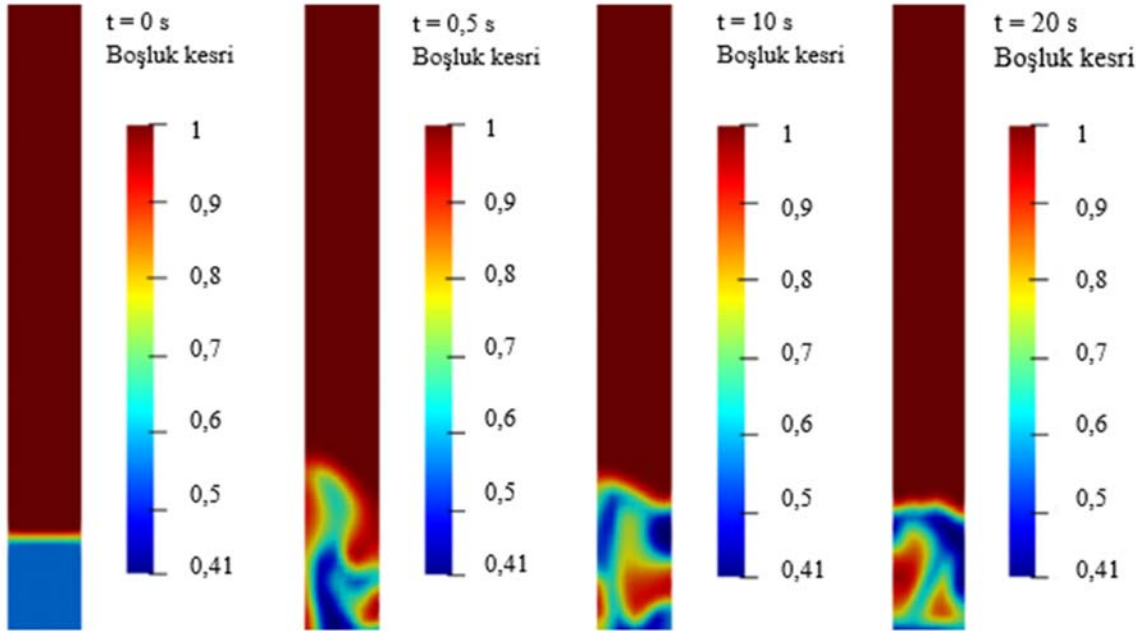
Şekil 6. Model sonuçlarının deneysel CH4 sonuçlarla karşılaştırılması (Comparison of model results with experimental data)

fgs : Gaz-katı arayüzey etkileşim kuvveti  
 g : Gaz  
 mgs : Momentum transferi

P : Basınç (Pa)  
 Q : Gaz-katı faz arası ısı akısı  
 q : Kondüktif ısı akısı



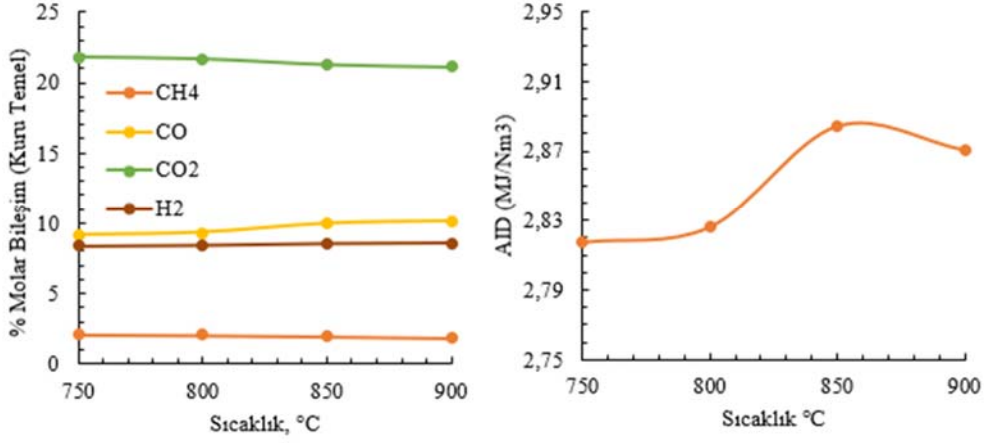
Şekil 7. HAD Yaklaşım modeline göre reaktör boyunca sentez gazı kütle bileşiminin değişimi (  $T = 750^{\circ}\text{C}$ ,  $ER = 0,35$  ve  $S/B = 0,50$ )  
(Change of synthesis gas mass fractions in reactor according to CFD Approach model)



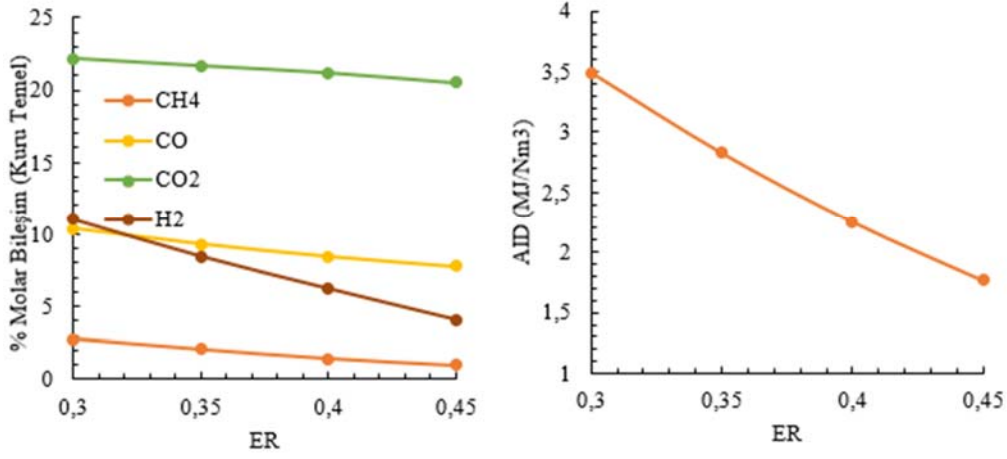
Şekil 8. HAD Yaklaşım modeline göre reaktör boyunca boşluk kesri değişimi (  $T = 750^{\circ}\text{C}$ ,  $ER = 0,35$  ve  $S/B = 0,50$ )  
(Change of void fraction in reactor according to CFD Approach model)

$Q_r$  : Radyasyon kaynaklı ısı akışı  
 $R$  : Tepkime hızı  
 $rgs$  : Kütle aktarım hızı

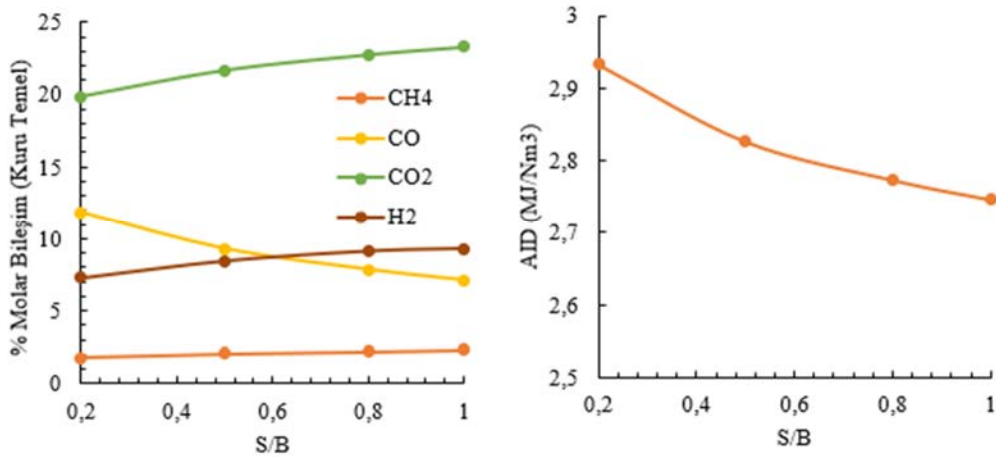
$r_{kin}$  : Kinetik(reaksiyon) hız (s/m)  
 $rdiff$  : Difüzyon hızı (s/m)  
 $S$  : Katı



Şekil 9. HAD Yaklaşım modeline göre reaktör çıkışı sentez gazı bileşiminin ve AID değerinin sıcaklıkla değişimi (Change of synthesis gas composition and AID value to temperature at reactor outlet according to CFD Approach model)



Şekil 10. HAD Yaklaşım modeline göre reaktör çıkışı sentez gazı bileşiminin ve AID değerinin ER ile değişimi (Change of synthesis gas composition and AID value to ER at reactor outlet according to CFD Approach model)



Şekil 11. HAD Yaklaşım modeline göre reaktör çıkışı sentez gazı bileşiminin ve AID değerinin buhar/biyokütle oranı ile değişimi (Change of synthesis gas composition and AID value to steam/biomass ratio at reactor outlet according to CFD Approach model)

S/B	: Buhar/biyokütle oranı
T	: Sıcaklık
$\xi$	: kütle kesri
W	: Duvar

#### 4.1. Yunan Simgeleri (Greek Symbols)

$\varepsilon$	: Hacim kesri
$\sigma$	: Stress tensör
$\rho$	: Yoğunluk (kg/m <sup>3</sup> )
$\Delta Q_{rg}$	: Tepkime ısı

#### 5. Sonuçlar (Conclusions)

Yürütülen çalışmada biyokütlelerin (pirinç kabuğu) gazlaşma performansı HAD ve Termodinamik yaklaşımla incelenmiştir. Model sonuçları deneysel verilerle karşılaştırılmış ve özellikle HAD model sonuçlarının tüm gaz ürün bileşimleri göz önüne alındığında daha iyi uyum sağladığı görülmüştür. Termodinamik yaklaşımın H<sub>2</sub> ve CH<sub>4</sub> açısından çok uygun sonuçlar vermediği görülmektedir. Ancak ön tasarım açısından bu yaklaşımın değerli olduğu herhangi bir sıcaklıkta, herhangi bir S/B ve ER oranında ürün bileşimini yaklaşık olarak tahmin etmekte kullanışlı olduğu değerlendirilebilir. Termodinamik yaklaşım, reaktör hidrodinamiği ve boyutlarının dikkate alındığı HAD yaklaşımı ile birlikte kullanılması daha doğru olacaktır. Yapılan bu çalışma termodinamik yaklaşımla istenen ürün bileşimi açısından belirlenebilecek ER, SB ve T parametrelerinin, HAD yaklaşımı ile test edildiğinde, reaktör çapı, yüksekliği, besleme noktası konumu gibi fiziksel boyutların ve gazlaştırma parametre konfigürasyonunun gazlaştırma verimi ve ürünleri bakımından tutarlı verilerin elde edilebileceğini göstermesi oldukça önemlidir. Dolayısı ile HAD (Euler-Euler) yaklaşımı ile modellemenin reaktör tasarımından işletme koşullarının optimizasyonuna kadar oldukça kullanışlı bir yöntem olduğu ortaya çıkmaktadır.

#### Kaynaklar (References)

- Kumar U., Paul M., CFD modelling of biomass gasification with a volatile break-up approach, *Chemical Engineering Science*, 195, 413-422, 2019.
- Basu P., *Biomass Gasification and Pyrolysis Practical Design and Theory*, Elsevier, Burlington, MA 01803, USA, 2010.
- Gerber S., Behrendt F., Oevermann M., An Eulerian modeling approach of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor using char as bed material, *Fuel*, 89, 2903-2917, 2010
- Yin W., Wang S., Zhang K., He Y., Investigation of oxygen-enriched biomass gasification with TFM-DEM hybrid model, *Chemical Engineering Science*, 211, 1-8, 2020.
- Basu P., *Combustion and Gasification in Fluidized Bed*, Taylor and Francis Group, London, 2006.
- Askarishahi M., Salehi M., Godini H., R., Wozny G., CFD study on solids flow pattern and solids mixing characteristics in bubbling fluidized bed: Effect of fluidization velocity and bed aspect ratio, *Powder Technology*, 274, 379-392, 2015.
- Ismail T., Ramos A., Monteiro E., Abd El-Salam M., Rouboa A., Parametric studies in the gasification agent and fluidization velocity during oxygen-enriched gasification of biomass in a pilot-scale fluidized bed: Experimental and Numerical Assessment, *Renewable Energy*, 147, 22429-2439, 2020.
- Yang S., Wang H., Wei Y., Hu J., Chew J.W., Eulerian-Lagrangian simulation of air-steam biomass gasification in a three-dimensional bubbling fluidized gasifier, *Energy*, 181, 1075-1093, 2019.
- Loha C., Chattopadhyay H., Chatterjee P., K., Three dimensional kinetic modeling of fluidized bed biomass gasification, *Chemical Engineering Science*, 109, 53-64, 2014.
- Cheng Y., Thow Z., Wang C., Biomass gasification with CO<sub>2</sub> in a fluidized bed, *Powder Technology*, 296, 87-101, 2016.
- Xue O., Fox R., Multi-fluid CFD modelin of biomass gasification in polydisperse fluidized-bed gasifiers, *Powder Technology*, 254, 187-198, 2014.
- Shirke V., Ranade S., V., Bansal R., Equilibrium Model for Biomass Gasification: Study of effect of Biomass properties and Operating parameters, *materialstoday:PROCEEDINGS*, 5, 22983-22992, 2018.
- George J., Arun P., Chandrasekharan M., ScienceDirect Stoichiometric Equilibrium Model based Assessment of Hydrogen Generation through Biomass Gasification, *Procedia Technology*, 25, 982-989, 2016.
- Sharma S., Sheth P., Air-steam biomass gasification: Experiments, modeling and simulation, *Energy Conversion and Management*, 110, 307-318, 2016.
- Loha C., Chattopadhyay H., Chatterjee P., K., Energy generation from fluidized bed gasification of rice husk. *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, 5, 043111-1-10, 2013.
- Michigan Technological University, CACHE Modules on Energy in the Curriculum Fuel Cells, Equilibrium Simulation of a Methane Steam Reformer, [http://pages.mtu.edu/~jmkeith/fuel\\_cell\\_curriculum/kinetics/module7/ALL.doc](http://pages.mtu.edu/~jmkeith/fuel_cell_curriculum/kinetics/module7/ALL.doc), Yayın tarihi Ekim, 14, 2008. Erişim tarihi Kasım 20, 2019.
- Xu, Y., Shahnam M., Fullmer W., D., Rogers W., A., CFD-Driven Optimization of a Bench-Scale Fluidized Bed Biomass Gasifier using MFiX-TFM and Nodeworks-OT, NETL Technical Report Series, U.S. Department of Energy, National Energy Technology Laboratory: Morgantown, WV, 2019.
- Benyahia S., Syamlal M., O'Brien T., J., Summary of MFiX Equations 2012-1, From URL <https://mfix.netl.doe.gov/documentation/MFiXEquations2012-1.pdf>, January 2012.
- Liu H., Cattolica R., Seiser R., Liao C., Three-dimensional full-loop simulation of a dual fluidized-bed biomass gasifier. *Applied Energy*, 160, 489-501, 2015.
- Xie J., Zhong W., Jin B., Shao Y., Huang Y., Eulerian-Lagrangian method for three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification, *Advanced Powder Technology*, 24, 382-392, 2013.
- Boujjast H., Rodat S., Chuayboon S., Abanades S., Numerical simulation of reactive gas-particle flow in a solar jet spouted bed reactor for continuous biomass gasification, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 144, 1-15, 2019.
- Dupont C., Commandré J., M., Gauthier-Maradei P., Boissonnet G., Sylvain S., Schweich D., Biomass pyrolysis experiments in an analytical entrained flow reactor between 1073 K and 1273 K, *Fuel*, 87, 1155-1167, 2008.
- Waheed Q., M., K., Nahil M., A., Williams P., T., Pyrolysis of waste biomass: investigation of fast pyrolysis and slow pyrolysis process conditions on product yield and gas composition, *Journal of the Energy Institute*, 86 (4), 233-241, 2013.

