



Proses Akım Diyagramı Ünite Hesaplamalar

Kütle ve enerji denkliklerinden akımların miktarları ve bileşimleri hesaplanır ve akım şeması üzerine yazılır.

Kütle korunum denklemleri → akımların akış hızları ve bileşimleri
Enerji korunum denklemleri → akımların sıcaklıkları

Tasarım çalışmalarında iki tür kısıtlama vardır.

Dış kısıtlamalar: Tasarımcının kontrolünde değildir.

- Müşteri talebine göre belirlenen ürün spesifikasyonları
- Alevlenme limiti vb.. temel güvenlik konuları
- Hükümet tarafından saptanan atık spesifikasyonları

İç Kısıtlamalar: Proses ve ekipmanların fonksiyonlarına bağlıdır.

- Proses stokiyometrisi, dönüşüm oranı ve verim
- Kimyasal denge
- Sıvı-sıvı ve gaz-sıvı ayırma işlemlerinde faz dengesi
- Azeotropik karışımlar
- Enerji denliğinde karşılaşılan kısıtlamalar
- Ekipman tasarımında karşılaşılan kısıtlamalardır.



Hesaplamalarda Kullanılan Temeller

Akım şeması üzerine yazılan değerlerin hesaplanmasında kullanılan temeller akım şeması üzerinde belirtilmelidir.

Bu temeller içerisinde;

- Yıllık işletme süresi,
- Reaksiyon verimi ve fiziksel verimler,
- Ortam sıcaklığı,
- Kullanılan varsayımlar yer almalıdır.

Farklı **durumlar** için farklı akım şemaları oluşturulmalıdır.

Zaman:

Tesisleri hiç durmadan **SÜREKLİ** işletmek mümkün değildir.

- Ekipmanların temizlenmesi,
- Katalizörün yenilenmesi
- Kolon dolgu maddelerinin değiştirilmesi gibi

benzeri işler için önceden planlanmış duruşlar olur.

Çoğu kimya ve petrokimya tesisinde yıllık işletme süresi,

Bir **yılın %90-95** i olup, genellikle **8000 saat** kabul edilir.



Ölçek faktörü:

- Akım şemasındaki hesaplamaları prosesde yer alan ekipman sırasına uyarak yapmak kolaylık sağlar.
- İstenilen üretim hızı girdi üzerinden değil ürün üzerinden verilir.
- Bu nedenle bir **TEMEL** seçilmelidir. **Örneğin, 100 kmol/st hammadde** temel olarak alınabilir.
- Bu durumda akımların gerçek değerleri, her bir akımı, istenilen üretim hızı üzerinden hesaplanmış ölçek faktörüyle çarparak elde edilir.

$$\text{Ölçek faktörü} = \frac{\text{mol/h ürün}}{100 \text{ mol/h temel alınan girdi için elde edilen ürün mol miktarı}}$$



Proses akım şemasında yer alan çeşitli ünitelerin sabit akımlarının bileşimlerinin hesaplanması için yapılan hesaplamalar, reaktörde ve denge kademelerinde, kütle ve enerji denkliklerinin birlikte kullanılması için izlenen yöntemleri kapsar.

Reaktörlerde

- verim ve dönüşüm belirlenir (literatürden)
- tersinir tepkime için denge dönüşümü – reaktör işletim sıcaklık ve basıncı için – hesaplanır

Denge kademelerinde (Absorpsiyon, Damıtma, Ekstraksiyon)

- çıkış akımlarının hızı kademeleri terkeden akımların dengede olduğu varsayımı ile hesaplanır

Sabit akımların bileşimlerinin hesaplanmasında

- iç ve dış kısıtlamalar tarafından akımların akış hızı ya da bileşimleri belirlenebilir

Kütle ve enerji korunum denklemlerinin birlikte kullanılması

- sıcaklık belirli ise aktarılacak ısı hesaplanır

Örnek

Hidrojen gazı üretim yöntemlerinden biri, petrol rafinerilerinde reforming ünitesinden çıkan gaz akımını shift reaktöründe su-gaz reaksiyonuna sokarak hidrojen zengin gaz elde etmektir.

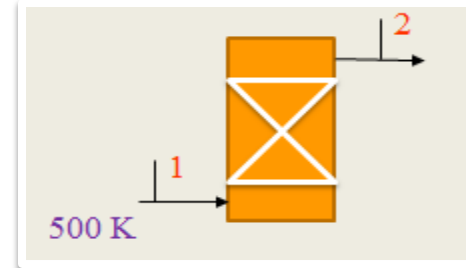


Bu örnekte, reaktöre giren gaz akımının bileşimi ve buhar/gaz oranı bilindiği durumda, reaktörü terk eden akımın bileşiminin hesaplanması istenmektedir. Reaktörde, tepkime katalitik ortamda gerçekleştirilmekte ve çıkan akımın kimyasal dengeye ulaştığı kabul edilmektedir. Reforming ünitesinden çıkan gaz akımı içerisinde kuru gaz üzerinden mol olarak; %8.5 CO₂, %11 CO, %76.5 H₂ bulunmaktadır. Reaktöre giren akımın sıcaklığı 500 K olup reaktöre giren 1 mol CO başına 3 mol H₂O buharı gönderilmektedir. **REAKTÖR ÇIKIŞ AKIMININ SICAKLIĞINI VE BİLEŞİMİNİ HESAPLAYINIZ**

Çözüm

TEMEL: 100 kmol/st kuru gaz (girdi)

Girdi akımındaki su buharı = $3 \times 11 = 33$ kmol;



Karbonmonoksidin dönüşüm oranı, C ise tepkimeye giren karbonmonoksit mol sayısı, tepkimenin stokiyometrisi de göz önüne alındığında $11C$ dir. Aşağıda stokiyometrik tablo ve bileşenlerin özgül ısıları verilmiştir

Bileşen	Girdi akımı, Mol sayısı	Çıkan akım Mol sayısı	C_p^o kJ/kmol K			
			A	b	c	d
CO_2	8.5	$8.5 + 11C$	19.80	$7.34 E-2$	$-5.6 E-5$	$17.15 E-9$
CO	11.0	$11(1-C)$	30.87	$-1.29 E-2$	$27.9 E-6$	$-12.72 E-9$
H_2O	33.0	$33 - 11C$	32.24	$19.24 E-4$	$10.56 E-6$	$-13.60 E-9$
H_2	76.5	$76.5 + 11C$	27.14	$9.29 E-3$	$-13.81 E-6$	$7.65 E-9$

Reaktörden çıkan gaz akımının ideal olduğu ve termodinamik dengeye ulaştığı varsayılmaktadır. Ayrıca, tepkimenin stokiometrisinden dolayı denge sabiti üzerine basıncın etkisi yoktur.



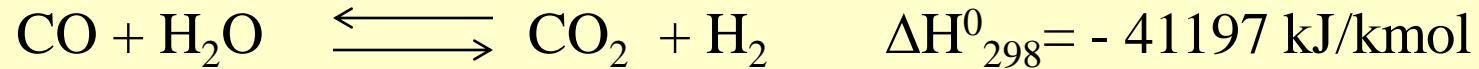
$$K_p = \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{P_{CO} P_{H_2}}$$

$$K_p = \frac{(8.5 + 11C)(76.5 + 11C)}{11(1 - C)(33 - 11C)} \quad (1)$$

K_p , aynı zamanda sıcaklığa bağlı bir sabittir. Çeşitli tepkimelerin sıcaklığa bağlı olarak

denge sabitleri değişik kaynaklardan yararlanarak bulunabilir. Örneğin tepkimenin serbest enerji değişimi ΔG biliniyorsa, $\Delta G = -RT \ln K_p$ bağıntısından yararlanarak hesaplanabilir. Veya termodinamik kitaplarında $1/T$; $\log K_p$ şeklinde verilen nomogramlardan yararlanarak bulunabilir.

Bu örnekte, *Technical Data on Fuel, Spiers* adlı kaynaktan



tepkimesi için sıcaklığa bağlı olarak verilen K_p değerleri kullanılmıştır.

O nedenle; 1 nolu bağıntı,

$$(121 K_p - 121) C^2 + (935 K_p + 484) C + (650 K_p - 363) = 0$$

şeklinde yazılabilir



Tepkime ekzoterm olduđu için adyabatik işletim tercih edilmiştir. Soğutma yapılmayıp, dışarıya olan ısı kayıpları en aza indirilecektir. Reaktörden çıkan gazların sıcaklığı da dönüşüm oranına bağlı olduğundan, reaktör çıkış sıcaklığı denge bağıntısını ve adyabatik işletim için enerji denkleğini sağlamalıdır.

Bu amaçla aşağıda verilen çözüm algoritması uygulanabilir.

1. Dönüşüm oranı, C için bir varsayım yapılır.
2. Bu dönüşüm oranı için 1 nolu bağıntıdan K_p değeri hesaplanır.
3. $K_p = F(T)$ den (termodinamik bağıntılar veya nomogramlardan) T çıkış sıcaklığı bulunur.
4. Adyabatik işletim için enerji denkleğinden dışarıya verilen Q ısısı hesaplanır.
5. $Q=0$ olup olmadığı kontrol edilir. Hesaplamalara (iterasyona) $Q=0$ olana dek devam edilir.



Çözüm için bir bilgisayar programı yazarak basit enerji denkliğinin çözümü yapılabilir. Veya algoritma izlenerek ve hesap makinesi kullanarak çözüme ulaşılır.

Sonuçlar :

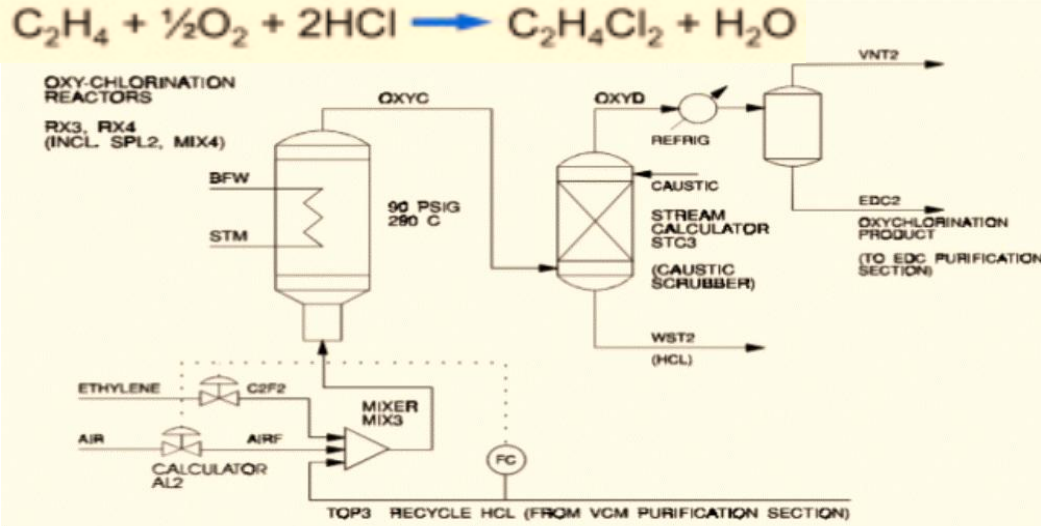
Dönüşüm Oranı, C	$K_p \cdot 10^2$	Çıkan akım sıcaklığı 1 K	Çıkan akımın bileşimi, Mol				Aktarılan Isı, Q
			CO	CO ₂	H ₂ O	H ₂	
0.88	1.86	550	1.32	18.18	23.32	86.18	-175268
0.79	3.69	600	2.31	17.19	24.31	85.19	76462
0.68	6.61	650	3.52	15.98	25.52	83.98	337638

Referans sıcaklık 298 K alınmıştır.

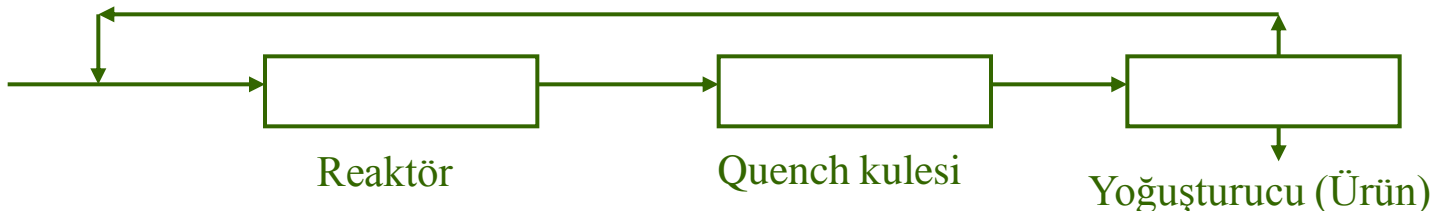
Yapılan üç iterasyondan sonra Q; T grafiği çizilerek , Q=0 için T=580 K bulunur.

Örnek :Faz Dengesi

Proses Akış Diyagramları için kütle denklığı hesaplamalarında faz dengesi bağıntıları da kullanılabilir. Buhar-sıvı ve sıvı-sıvı dengesinin kullanıldığı hesaplamaya örnek olarak etilenin klorlanması verilebilir. Etilen oksihidroklorasyonu (oksijen/hava atmosferinde) klorlanarak 'Etilen Diklorür (Ethylene Dichloride, EDC) elde edilmektedir.

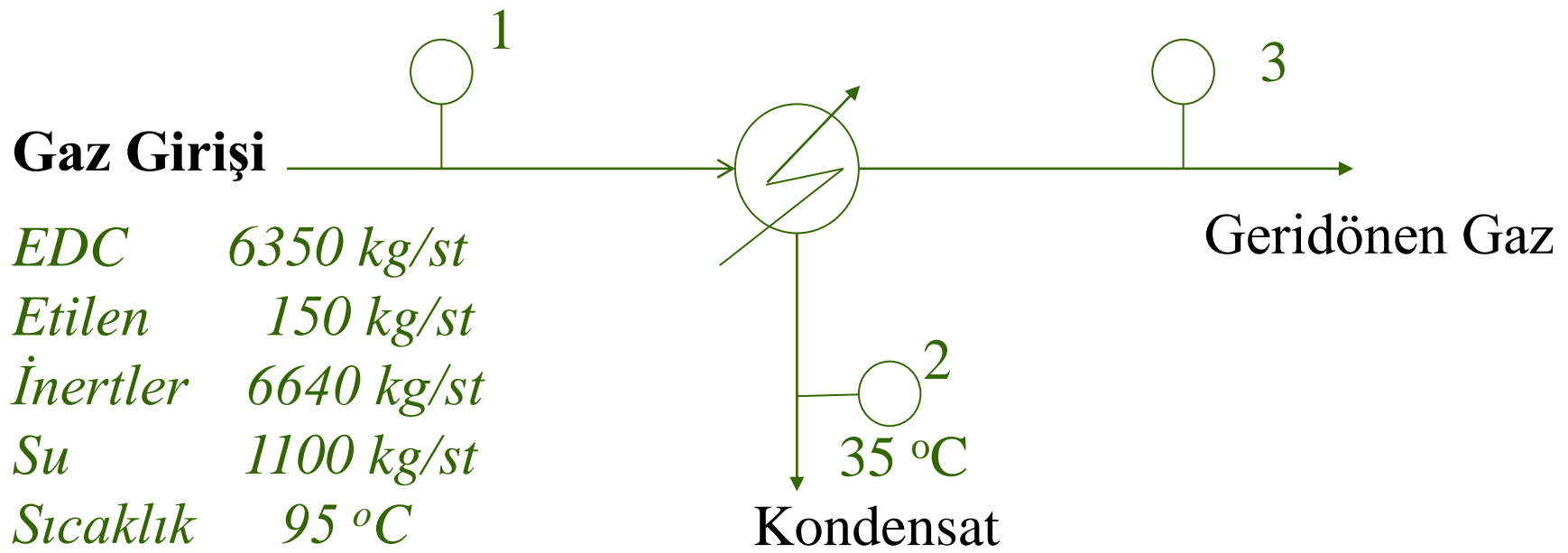


Proses de EDC reaktörünü terk eden ürün karışımı seyreltik kostik ile karıştırılarak reaksiyon durdurulur. Bu işleme QUENCH (söndürme), işlemin yapıldığı ekipmana ise QUENCH KULESİ adı verilir. Quench kulesinden çıkan gaz akımı bir yoğuşturucuya gönderilerek burada yoğunlaşmayan gaz akımı reaktöre devir ettirilir. Yoğuşturucuyu terk eden akımların bileşimlerini hesaplayınız.





Yoğuşturucu 4 bar basınç altında işletilmekte olup yoğuşturucuya giren gaz akımının özellikleri aşağıda verilmiştir. Ayrıca, EDC akımı bazı organik safsızlıkları ve eser miktarda HCl içermektedir. İnerterler esas olarak N_2 , CO , O_2 'dir.



Kısmi Yoğuşturucu

Çözüm

Bir yoğuşturucuda çıkış akımının bileşimini hesaplamak için çıkış sıcaklığında gaz ve sıvı akımlarının dengede olduğu varsayılır. Saf sıvıların buhar basınçları Antoine eşitliğinden hesaplanarak Çizelge-1 'de verilmiştir. Çizelge-2 'de yoğuşturucuyu terk eden akımdaki bileşenlerin akış hızları verilmiştir.

$$\log_{10} p = A - \frac{B}{C + T}$$

Çizelge-1 Saf Sıvıların Buhar Basınçları

Çizelge-2 Akış Hızları

Bileşen	35°C'de P^o_i, bar		Mol ağırlığı	Akış hızı Kmol/st
EDC	0.16		99	64
Etilen	70.7		28	5.4 *
H ₂ O	0.055		18	61
İnert gazlar			32	208 *



Yoğunlaşmayan ve gaz fazda kalan bileşenlerin toplam akış hızı:

$$5.4+208=213.4 \text{ mol/st}$$

Yoğunlaşmayan bileşenler (etilen ve inertler) bağlantı bileşeni olarak alınır. Gaz fazın ideal olduğu ve yoğunlaşmış olan EDC ve suyun birbirleri ile karışmadığı kabul edilir.

(Yoğunlaşmayanların kısmi basıncı) = Toplam basınç -
EDC'nin buhar basıncı + Suyun buhar basıncı

$$= 4-0.16-0.055 = 3.79 \text{ bar}$$

$$\begin{aligned} \text{Buhar içindeki EDC'nin akış hızı} &= \frac{\text{EDC'nin buhar basıncı}}{\text{Yoğunlaşmayanların kısmi basıncı}} \quad (\text{Yoğunlaşmayanların akış hızı}) \\ &= (0.16/3.79)213.4 \\ &= 9 \text{ kmol/st} \end{aligned}$$



Benzer şekilde buhar fazdaki suyun akış hızı $= (0.055/3.79)213.4=3.1$ kmol/st

Bu hesaplamaların sonucu olarak gaz akımının bileşimi aşağıdaki çizelgede verilmiştir.

Bileşen	Kmol/st	% mol	Kg/st
EDC	9	4.0	891
Su	3.1	1.4	56
İnertler	208	92.3	6640
Etilen	5.4	2.3	150



Etilenin Çözünürlüğünün kontrol edilmesi:

Etilenin kısmi basıncı=(toplam basınç).(mol kesri)=4(2.3/100)=0.092 bar

EDC ve C_2H_4 'ün ideal çözelti olduğu varsayılarak sıvı içinde çözünmüş olan etilenin mol kesri Raoult Yasasından hesaplanabilir.

$$y_A = \frac{X_A P_A^o}{P} = \frac{2.3}{100} = \frac{X_A 70.7}{4}$$

$$X_A = 1.3 * 10^{-3}$$

Böylece sıvıdaki etilen miktarı = (kmol EDC) X_A
= (64-9) $1.3 * 10^{-3}$ =0.07 kmol/st

Sonuçta gaz fazda kmol etilen = 5.4-0.07 = 5.33 kmol/st



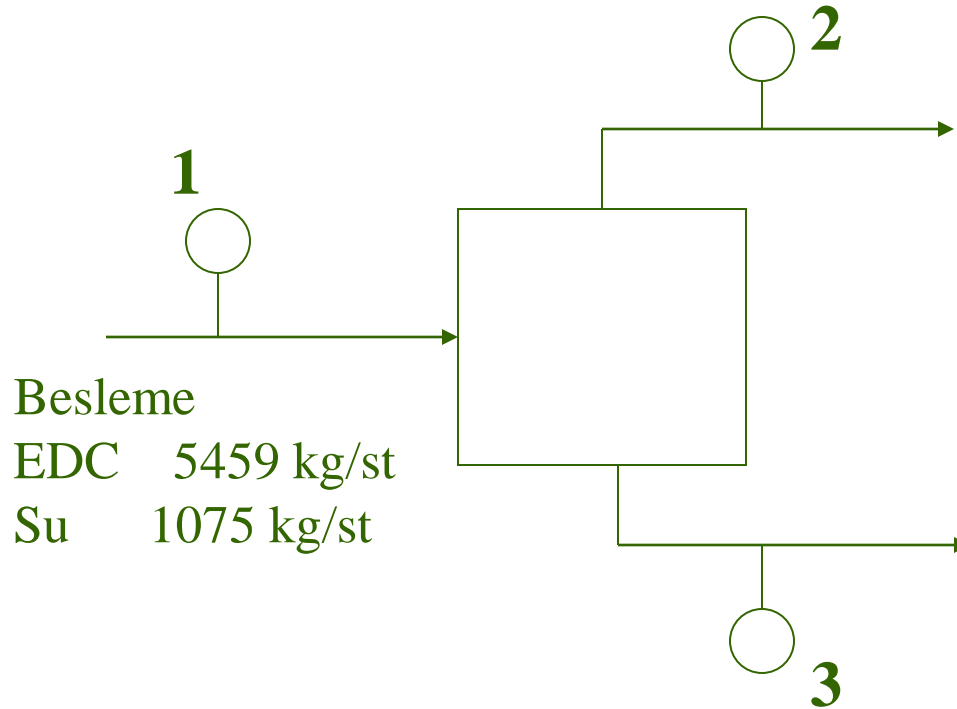
Bu deęer, hesaplanan deęerden biraz farklıdır ve yoęuřmuř veya çözünmüř etilenin olmadığı bařlangıç varsayımının geçerli olduęunu gösterir; özetle sıvı fazdaki etilen eser miktardadır.

Kütle denklięi sonuçları.

Akım No	Akıř hızları (kg/st)		
	1	2	3
Bileřen	Kondenser beslemesi	Kondensat	Geri dönen gaz
EDC	6350	5459	891
Su	1100	1044	56
Etilen	150	Eser	150
İnertler	6640		6640
Toplam	14.240	6503	7737
Sıcaklık °C	95	35	35
Basınç, Bar	4	4	4

Örnek

Bu örnekte, bileşen kütle dengesi hesaplamalarında sıvı-sıvı faz dengesinin kullanılması açıklanmıştır. Önceki örnekte tanımlanan kondenserden çıkan kondensat akımı, yoğuşmuş su ve EDC ayırmak için bir dekantöre beslenmektedir. Dekantör çıkış akımının bileşimini hesaplayınız.





Dekantörü terk eden akımların dengede olduklarını varsayalım.
20°C’de bileşenlerin çözünürlükleri

EDC'nin su içindeki çözünürlüğü	0.86 kg/100 kg
Suyun EDC içindeki çözünürlüğü	0.16 kg/100 kg

Su fazı içinde az miktarda çözünmüş HCl asitte bulunur, fakat EDC'nin seyreltik HCl çözeltisi içindeki çözünürlüğü bilinmediği için EDC'nin su içindeki çözünürlüğü kullanılacaktır.

EDC ve Su içindeki çözünürlükleri küçük olduğundan, denklemleri kurarak ve çözerek bilinmeyen derişimleri hesaplamak yerine uygun bir yaklaşım yapmak kolaylık sağlar.



İlk yaklaşım: **Organik fazın akış hızı=Dekantöre giren EDC akış hızı**
(Dekantöre giren EDC'nin tamamının organik faza geçtiği varsayılıyor)

EDC içinde çözülmüş su miktarı = $(0.16/100)*5459=8.73$ kg/st

Dekantörü terk eden su miktarı = $1075-8.73 = 1066.3$ kg/st

Sıvı faz içerisinde çözülmüş EDC miktarı= $(1066.3/100)*0.86=9.2$ kg/st

Organik fazın akış hızı tekrar hesaplanırsa = $5459-9.2 = 5449.8$ kg/st

Organik faz içerisindeki su miktarı = $(5449.8/100)*0.16=8.72$ kg/st

Görüldüğü gibi sonuç ilk yaklaşımdan çok farklı değildir.

Sonuçlar

Akım no	1	2	3
Bileşen	Dekantöre Giren akım	Organik Faz	Sulu Faz
EDC	5459	5449.8	9.2
H ₂ O	1075	8.7	1066.3
Toplam	6534	5458.5	1075.5



Örnek: Nitrik Asit Üretimi

Bu örnekte, çeşitli proses üniteleri içeren nitrik asit üretim prosesi için kütle ve enerji denkliklerinin kurulması ve bilgisayar kullanılmaksızın hesap makinesiyle çözümü açıklanmıştır.

Amaç; Susuz amonyaktan çıkarak yılda 20 000 ton %100 saflıkta nitrik asit üretmek ve daha sonra bu asidi %50-60 sulu çözeltisi haline getirmektir. Proses için akım şemasının çizilmesi isteniyor (tabii ki kütle ve enerji denkliklerinin sonuçlarını da içeren bir akım şeması).

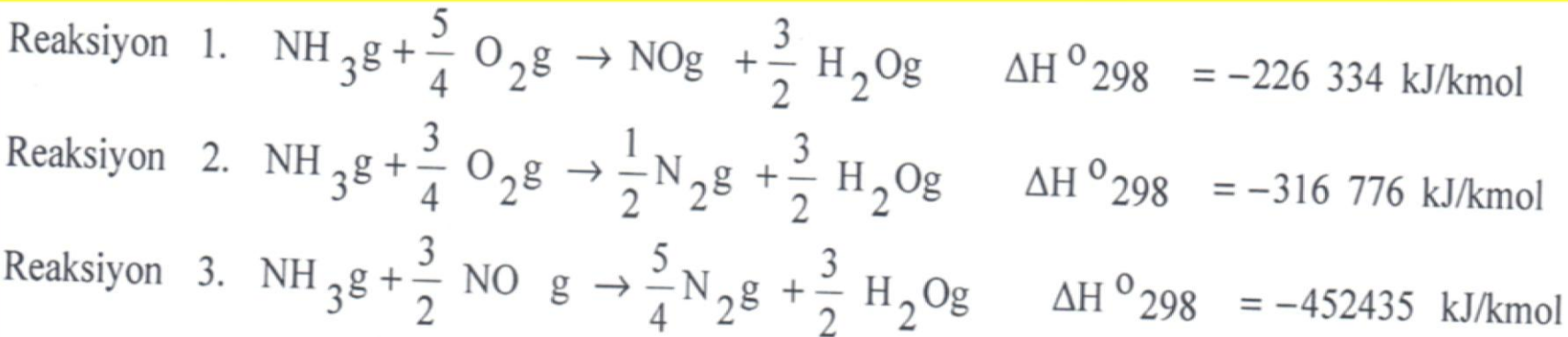
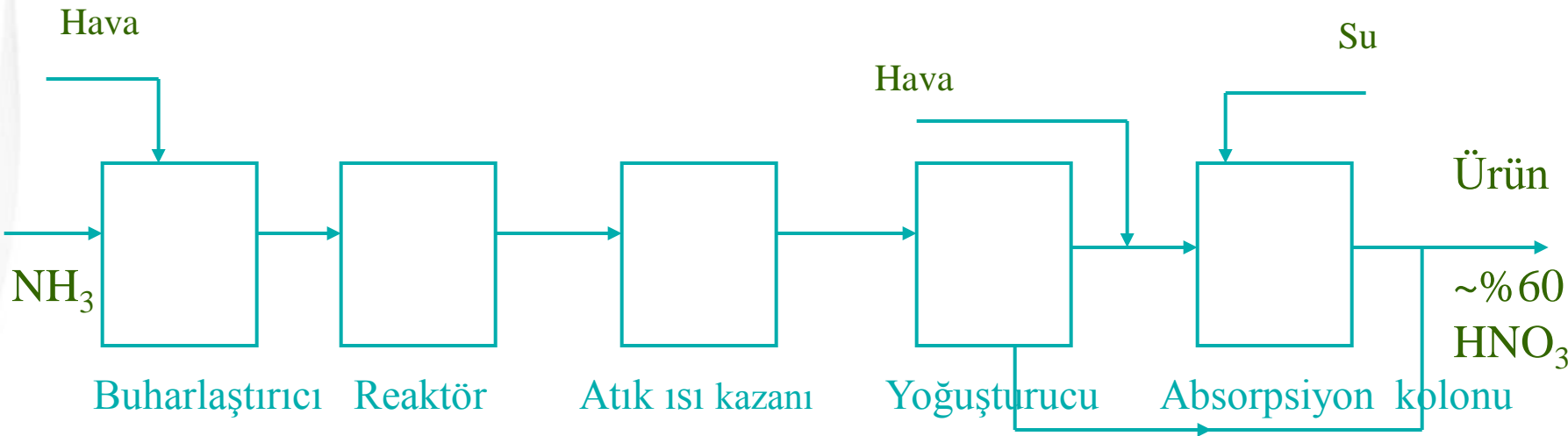
Nitrik asit üretimi; esas olarak, amonyağın oksidasyonu ile oluşan gazlar içerisindeki azot monoksidin suyla absorbe edilerek nitrik asite dönüştürülmesinden ibarettir. Kaynaklarda, nitrik asit üretimi için üç değişik proses önerilmektedir. Bunlar;

1. Atmosferik basınçta oksidasyon ve absorpsiyon
2. Yüksek basınçta oksidasyon ve absorpsiyon (yaklaşık 8 atm)
3. Atmosferik basınçta oksidasyon ve yüksek basınçta absorpsiyon

Bu çalışmada 2 nolu alternatif yani yüksek basınçta oksidasyon ve absorpsiyon'un yapıldığı proses tercih edilmiştir.



Başlangıç olarak, sadece prosesinde yer alan ekipmanları gösteren ve blok diagramlara çizilmiş bir akım şeması oluşturulur.



Kaynaklarda, reaktörde, Pt-Rodyum katalizör kullanıldığı takdirde seçimlilik yönünden 1 nolu reaksiyonun veriminin yaklaşık %95-96 olduğu belirtilmektedir.



Bilgisayar Destekli Akım Şemaları

Proses tasarımında akım şemalarının hazırlanmasında yararlanılan bilgisayar programları iki ana grupta toplanır.

- Güçlü hesaplama olanaklarına sahip tam benzetim (simülasyon) programları
Eşanlı (Simultaneous /Equation oriented) benzetim programları
- Basit kütle denkliği programları
Ardıl- birimsel (Sequential Modular) benzetim programları

Benzetim programlarını kullanarak tüm prosesinin tasarımını yapmak mümkündür.

Bir proje çalışmasının başlangıcında tam benzetim programı kullanmak yerine basit madde denkliği programları kullanılması tercih edilir. Böylece çabuk ve ucuz bir şekilde elementer bir akım şeması ortaya konulabilir.



Proses Benzetim (Simülasyon) Programları

Çeşitli firmalar tarafından geliştirilmiş **Proses benzetim programları**, prosesleri benzetmek (simüle etmek) ve akım şeması için kullanılmaktadır. Bunlardan bazıları :

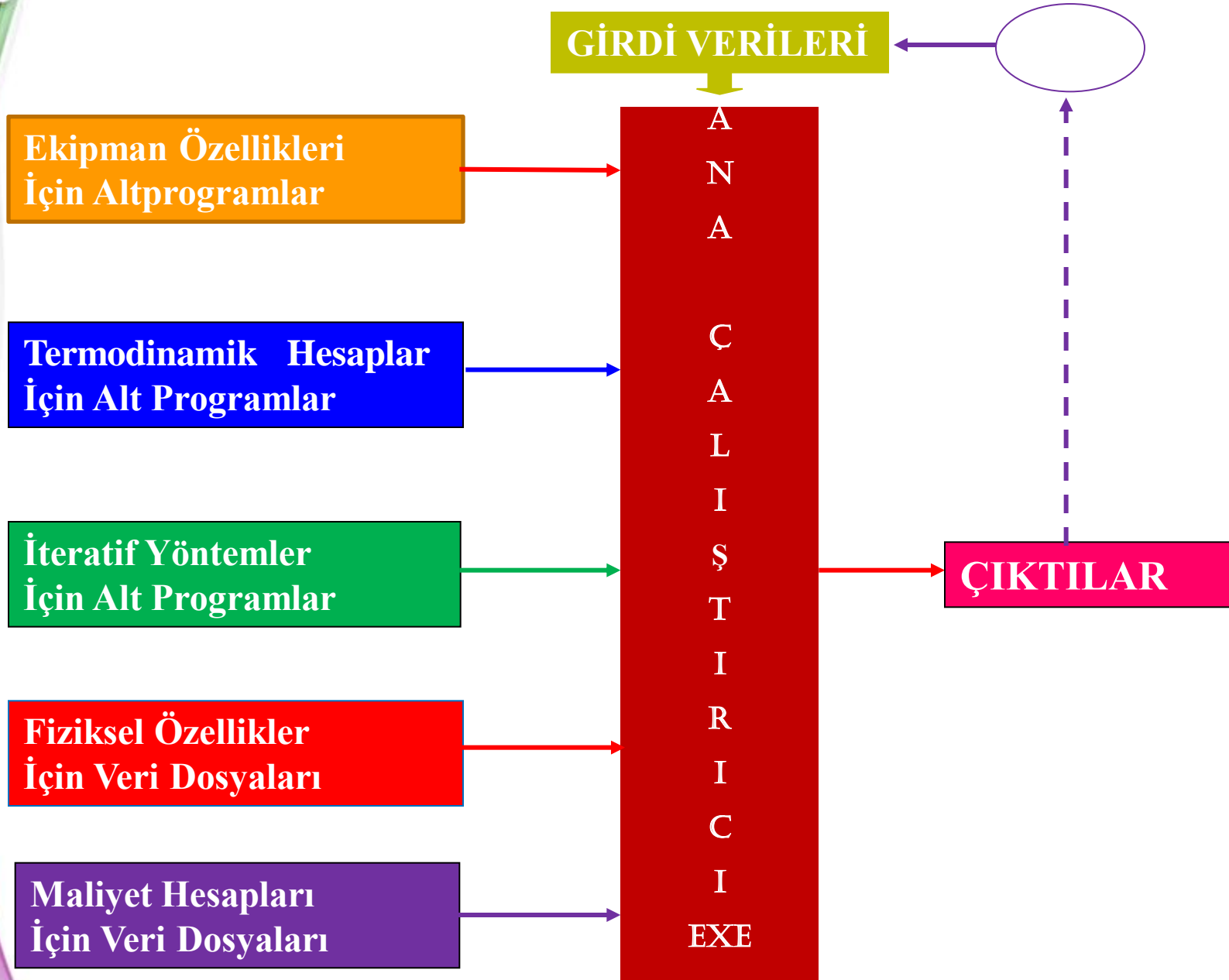
<u>ADI</u>	<u>TİPİ</u>	<u>KAYNAK</u>
Aspen Plus	yatışkın hal	USA (Aspen Tech.)
CHEMCAD	yatışkın hal	USA (Chemstations)
DESIGN II	yatışkın hal	USA (WinSim Inc.)
ASPEN HYSYS	yatışkın ve dinamik hal	USA (Aspen Tech.)
PRO/II and DYN SIM	yatışkın ve dinamik hal	USA (SimSci-Esscor)
UniSim Design	yatışkın ve dinamik hal	CANADA(Honeywell)

Ayrıca, üniversitelerde proses tasarım dersleri çerçevesinde de benzetim ve akım şeması programları kullanılmaktadır.

Örnekler: CHEMCAD, GEMCS, FLOWPACK, FLOWTRAN, CONCEPT, PROCESS, HYSIM ve ASPEN gibi.



Tipik Bir Benzetim (Simülasyon) Programının İçeriği





Tüm bu proses benzetim paket programlarının içerikler temel olarak şu şekilde özetlenebilir.

1. **Ana çalıştırıcı programı (executive program) 'EXE'**
2. Ekipman performans alt programlarını içeren kütüphane (**MODULES**)
3. Fiziksel özellikleri içeren veri bankası
4. Akımların entalpileri, buhar-sıvı denge sabitleri gibi termodinamik özelliklerin hesaplanması için kullanılan altprogramlar
5. Maliyet hesaplamaları için gerekli veri bankası ve alt programlar.

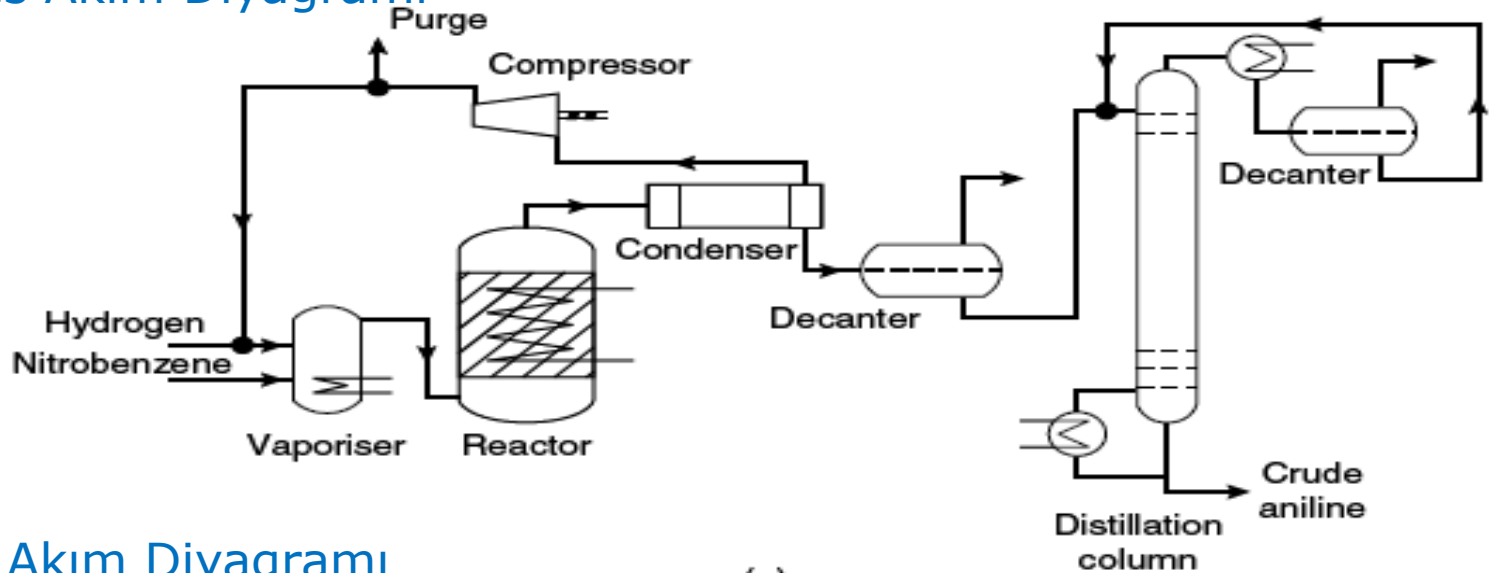
Proses akım diyagramlarının oluşturulmasında kullanılan programlarda kütle ve enerji denkliklerinin çözümü, iterasyon yöntemleri kullanılarak yapılır. İterasyon sırasında uygun parametrelere belirli artışlar verilerek geri döngüler yapılır. İstenilen değere ulaşılmınca döngüden çıkılmış olur.



- Bilgisayara problemi tanıtmak için, temel işlemlerin ve akım bağlantılarının sırasını gösteren elementer bir proses akış diyagramı hazırlanır ve daha sonra bir ***bilgi akış diyagramına*** dönüştürülür.
- Bilgi akış diyagramında yer alan her bir blok benzetim programındaki hesaplama modüllerinden birine karşılık gelir.
- Bileşim, sıcaklık, veya basıncın değişime uğramadığı üniteler bilgi akış diyagramlarına dahil edilmezler. Diğer taraftan bileşim, sıcaklık veya basınç değişimine neden olan her ünite ve her ünite parçası diyagram içerisinde yer almalıdır.
- Bu diyagramda blokları birleştiren çizgi ve oklar bir alt programlardan diğer bir alt programa bilgi akımını ve yönünü göstermektedir.

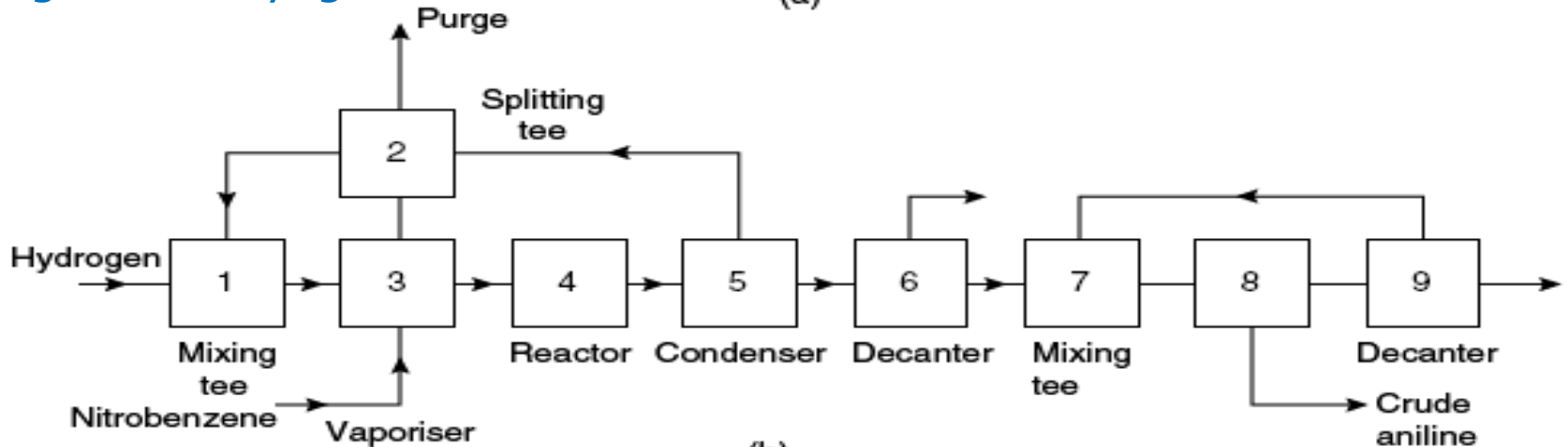
Nitrobenzenin hidrojenasyonu ile anilin üretim prosesi akım diyagramı

Proses Akım Diyagramı



(a)

Bilgi Akım Diyagramı



(b)



Fraksiyon Katsayıları Kavramı ve Kolay Çözümler

Bir prosesin tasarımının veya geliştirilmesinin ilk aşamasında kaba ve yaklaşık bir kütle denkliği hesaplamaları için basit programlar kullanarak akım diyagramlarını oluşturmak olasıdır. Özellikle devir akımı içeren prosesler ve kütle denklileri ve enerji denklilerinin birlikte çözümünü gerektirmeyen tasarım çalışmaları için bu tip basit programların kullanılması önerilir. Bu tür programların en önemli özelliği kişisel bilgisayarlarda uygulanabilmesidir.

Kimyasal proseslerde yer alan ünitelerin yani temel işlemlerin yapıldığı ekipmanların çoğunda üniteye giren akım kolon çıkışında üst ve dip ürün olarak iki akıma ayrılır. Örnek:

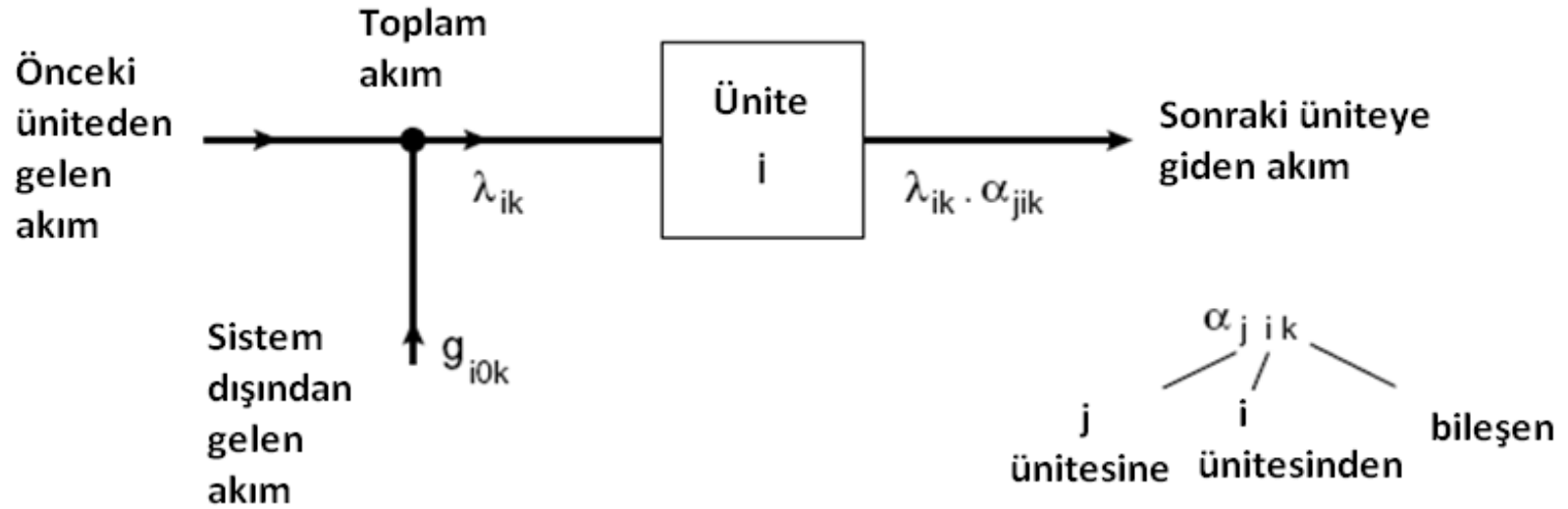
- Damıtma kolonuna giren akım kolon çıkışında üst ve dip ürün olarak ikiye ayrılır.
- Bir yoğuşturucuya giren akım yoğuşturucu çıkışında sıvı ve gaz faz olmak üzere iki akıma ayrılır.

O nedenle, Bilgi Akım diyagramında yer almış olan bir temel işlemler ünitesinden çıkan akımdaki herhangi bir bileşenin akış hızı, bu bileşenin üniteye giren akış hızının belirli bir kesri kadardır.

Bileşenin adı geçen üniteye giriş akış hızını bir **katsayı** ile çarparak üniteden çıkıştaki akış hızını bulmak mümkündür.

Bu katsayıya **FRAKSİYON KATSAYISI** denir.

Kütle denkliğinin oluşturulmasında kullanılan simgelerin gösterimi



i, j : Ünite numaraları

λ_{ik} : i ünitesine giren k bileşenin toplam akış hızı

α_{jik} : i ünitesinden çıkıp j ünitesine giden akım içerisindeki k bileşenin toplam akış hızına oranı. Fraksiyon katsayısı

g_{i0k} : i ünitesine sistem dışından gelen akım içerisindeki k bileşenin akış hızı

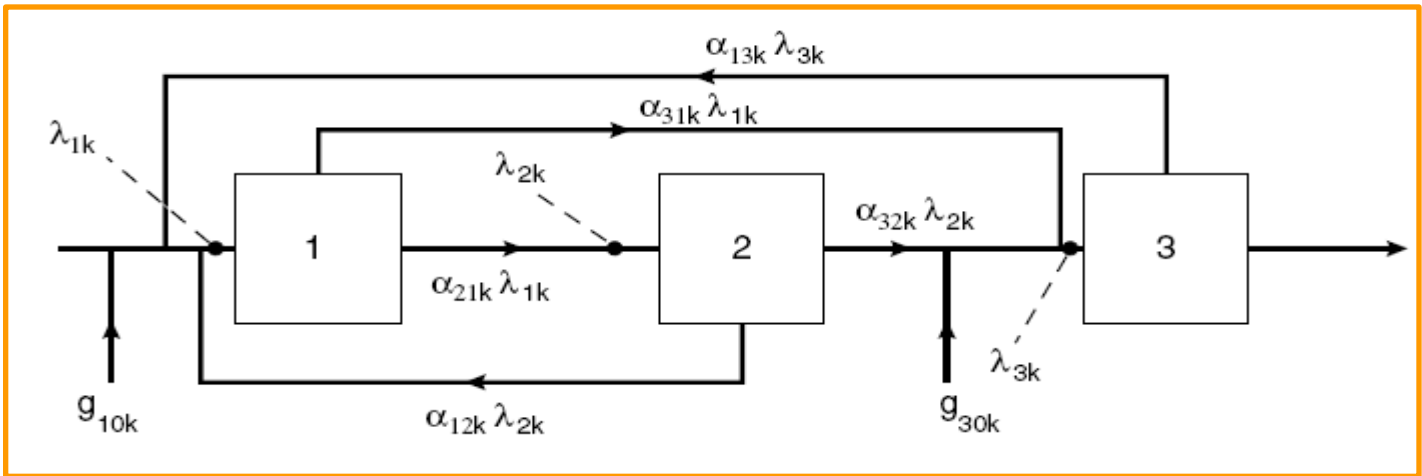


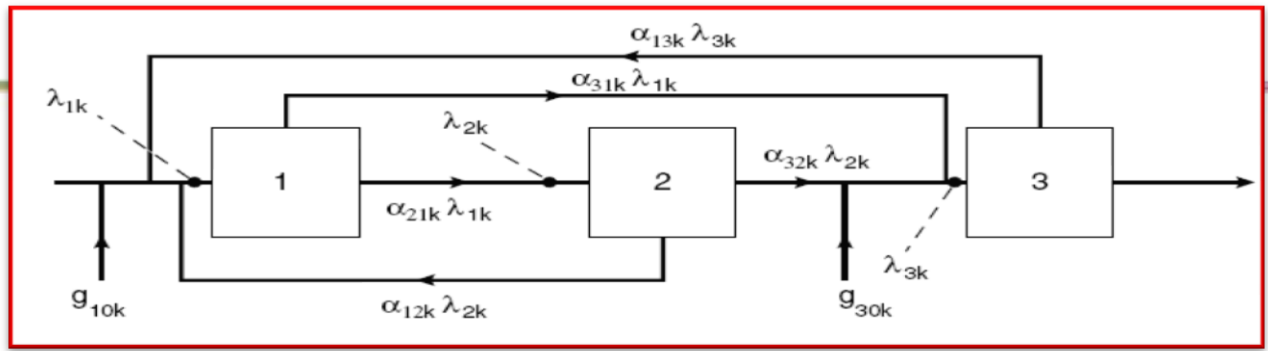
Bir üniteden çıkan bileşenin akış hızı üniteye giriş akış hızı ile fraksiyon katsayısının çarpımına eşittir. Yani, i ünitesinden çıkan ve j ünitesine giden k bileşenin akış hızı (λ_{jk}), üniteye giriş akış hızı (λ_{ik}) ile fraksiyon katsayısının (α_{jik}) çarpımına eşittir.

$$\lambda_{jk} = \alpha_{jik} \lambda_{ik}$$

Fraksiyon katsayısı, ünitenin tasarım özelliklerine ve üniteye giren akımın özelliklerine bağlıdır.

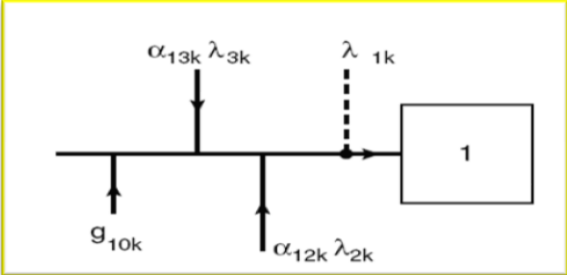
Üç adet temel işlem ünitesi ve çeşitli devir akımları içeren bir proses için bilgi akım diyagramı ve kütle denkliklerini oluşturmak için kullanılan simgeler aşağıda verilmiştir.





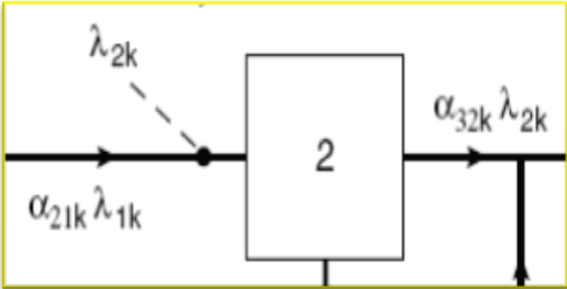
1 Nolu ünite için kütle denklği:

$$\lambda_{1k} = g_{10k} + \alpha_{12k} \lambda_{2k} + \alpha_{13k} \lambda_{3k}$$



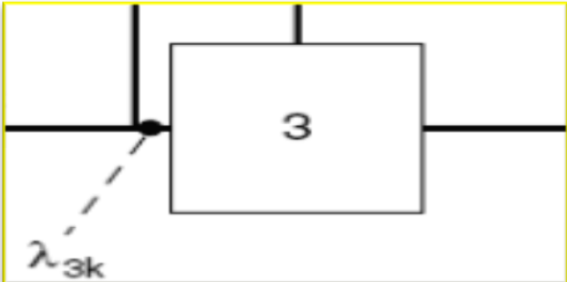
2 Nolu ünite için kütle denklği:

$$\lambda_{2k} = \alpha_{21k} \lambda_{1k}$$



3 Nolu ünite için kütle denklği:

$$\lambda_{3k} = g_{30k} + \alpha_{32k} \lambda_{2k} + \alpha_{31k} \lambda_{1k}$$





Denklemler düzenlenip matris formunda yazılabilir

$$\begin{aligned} \lambda_{11k} - \alpha_{12k} \lambda_{2k} - \alpha_{13k} \lambda_{1k} &= g_{10k} \\ \alpha_{21k} \lambda_{1k} + \lambda_{2k} &= 0 \\ -\alpha_{31k} \lambda_{1k} - \alpha_{32k} \lambda_{2k} + \lambda_{3k} &= g_{30k} \end{aligned}$$



$$\begin{bmatrix} 1 & -\alpha_{12k} & -\alpha_{13k} \\ -\alpha_{21k} & 1 & 0 \\ -\alpha_{31k} & -\alpha_{32k} & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \lambda_{1k} \\ \lambda_{2k} \\ \lambda_{3k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{10k} \\ 0 \\ g_{30k} \end{bmatrix}$$

Her bir bileşen (k) için bu denklem takımı yazılır. Bazı ünitelerin çıkış akımında giriş akımında yer almayan bileşenler bulunabilir. Bu bileşen sanki üniteye dışarıdan giriyormuş gibi gösterilir.

GENEL : n tane ünite için denklemler düzenlenip matris formunda genel eşiklikler yazılabilir

$$\begin{bmatrix} (1 - \alpha_{11k}) - \alpha_{12k} & -\alpha_{13k} & \dots & -\alpha_{1nk} \\ -\alpha_{21k} & (1 - \alpha_{22k}) - \alpha_{23k} & \dots & -\alpha_{2nk} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\alpha_{n1k} & \dots & \dots & (1 - \alpha)_{nnk} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \lambda_{1k} \\ \lambda_{2k} \\ \dots \\ \lambda_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{10k} \\ g_{20k} \\ \dots \\ g_{n0k} \end{bmatrix}$$



Örnek : İzopropil Alkol'den Aseton Üretimi

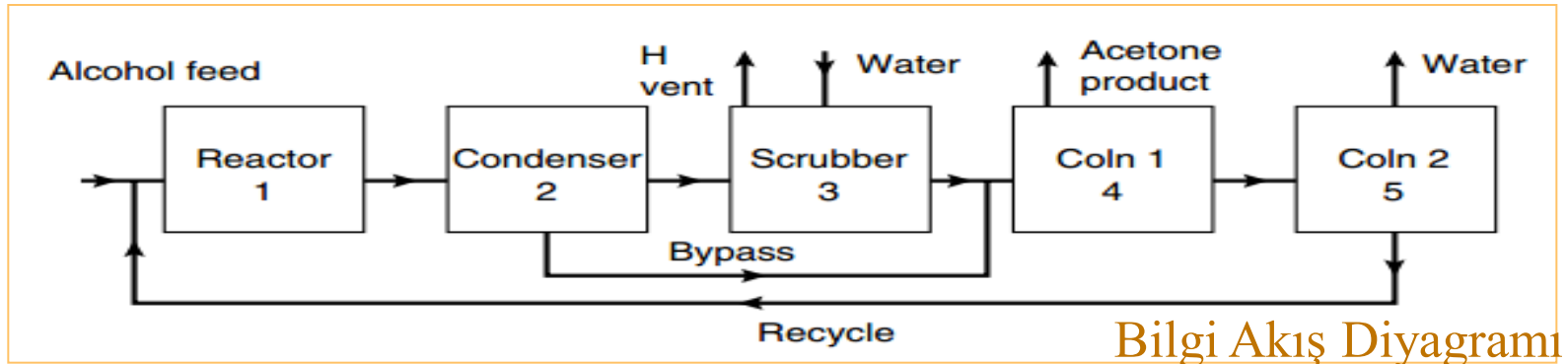
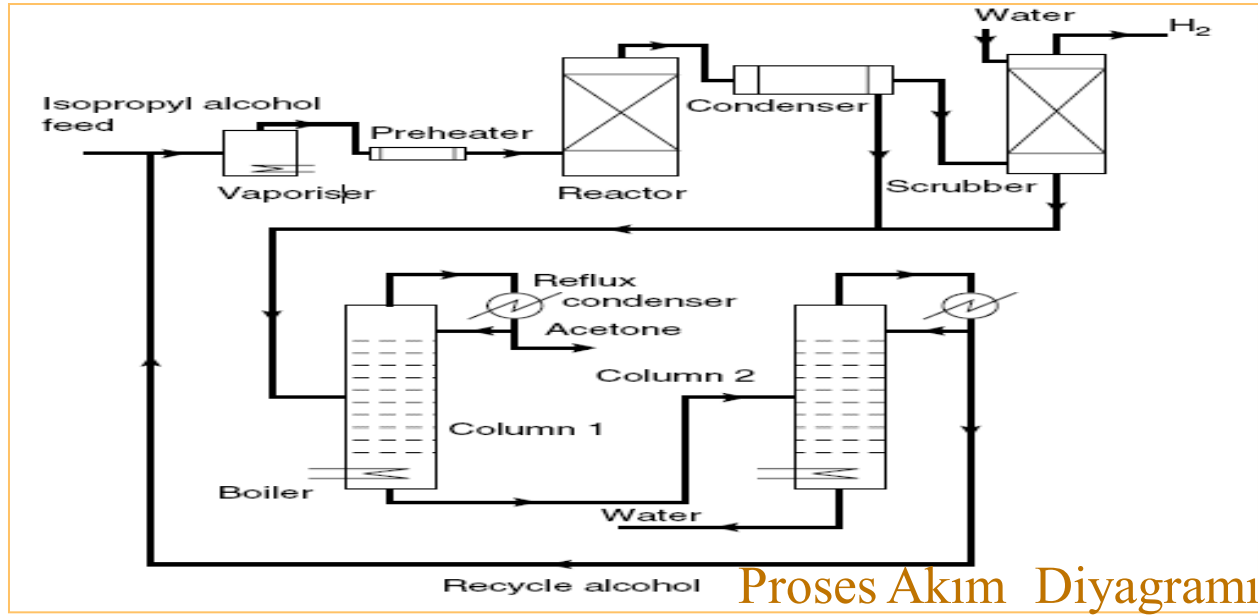


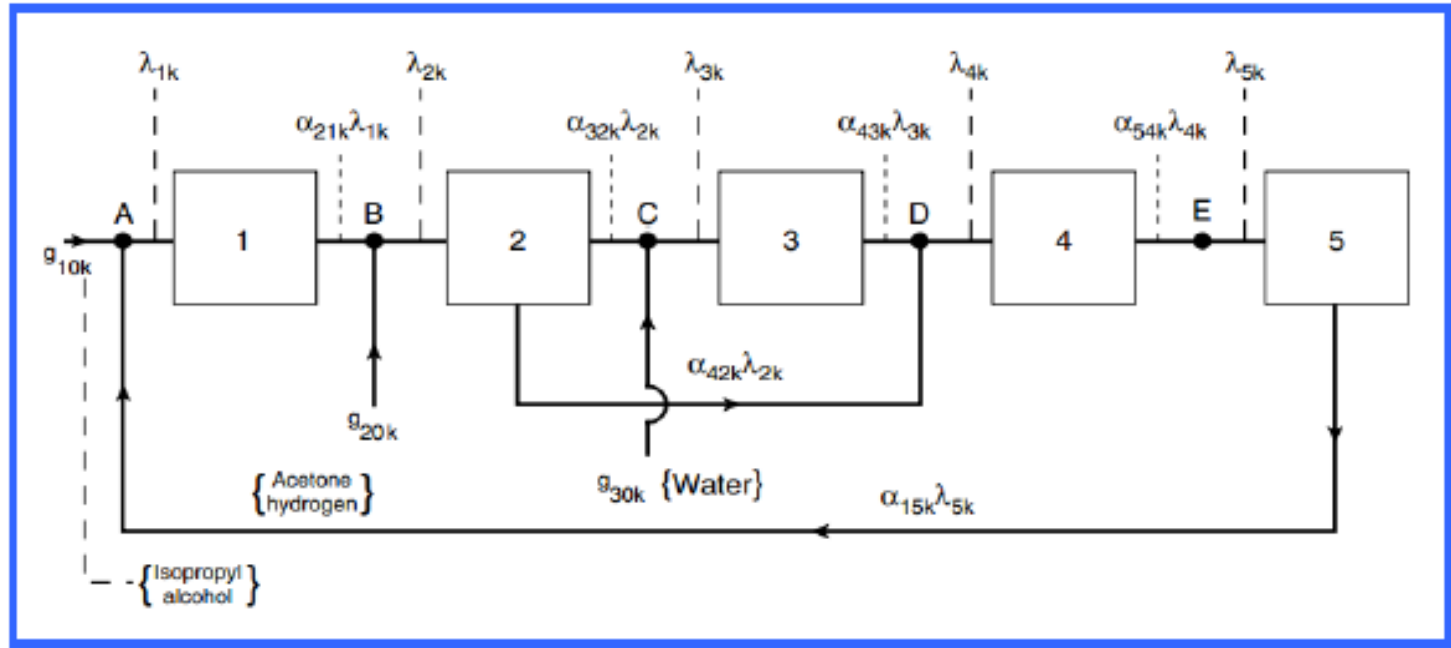
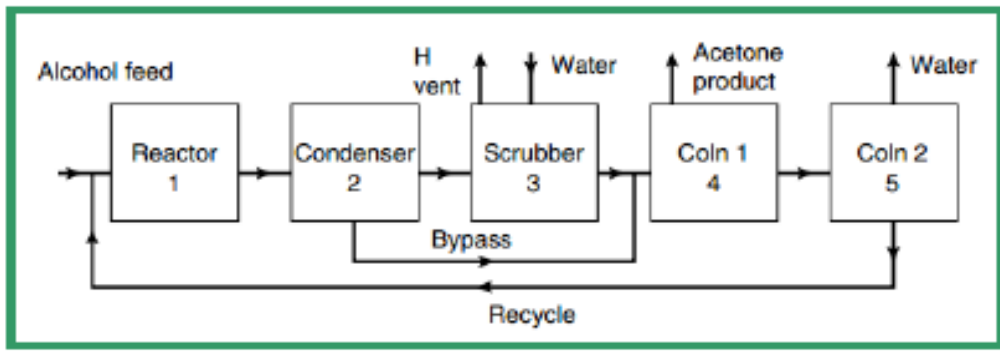
İzopropil alkol buharlaştırıldıktan sonra reaktöre gönderilmekte ve katalitik dehidrojenasyon sonucu aseton oluşmaktadır. Reaktörden çıkan gaz akımı (aseton, su, hidrojen, izopropil alkol) bir yoğuşturucuya gönderilerek akım içerisindeki asetonun çoğu, su ve izopropil alkol yoğunlaştırılır. Yoğuşturucuyu terk eden gaz akımı içerisinde az miktarda aseton ve izopropil alkol bulunduğundan bu akım bir absorpsiyon kolonunda su ile yıkanmakta ve aseton ve alkol absorbe edilmektedir. Yıkayıcının (absorpsiyon kolonu) altından alınan akım ve yoğuşturucudan alınan sıvı akım (kondensat) birleştirilerek saf aseton elde etmek amacıyla destilasyon kolonuna gönderilir. Destilasyon kolonunun üstünden saf aseton alınır. Bu kolonun altından ise su ve izopropil alkol içeren akım alınarak ikinci bir destilasyon kolonuna gönderilir. 2 nolu destilasyon kolonunun üst akımı %91 alkol içeren azeotrop su-alkol karışımıdır. Bu akım reaktöre devir ettirilir.

Reaktörde ZnO-Cu katalizör kullanılmakta, tepkime 400-500 °C sıcaklık ve 4.5 bar basınç altında yapılmaktadır. Proseste aseton verimi %98'dir. İzopropil alkolün reaktörden her geçiş dönüşüm oranı %85-90 civarındadır.

1. Proses akım şemasını çiziniz.
2. Bilgi akım şemasını çiziniz.
3. Bileşenler için kütle denkliklerini kurarak matris formunda yazınız.
4. Proseste mevcut bileşenler için ayrıık fraksiyon katsayılarını belirleyiniz ve her bir bileşen için matris formundaki kütle denkliklerini tekrar yazınız.

İzopropil alkolden aseton üretim Proses akım diyagramı ve bilgi akım diyagramı aşağıdaki gibidir. Bu proses için kütle denkliklerinin kurulmasında kullanılan simgeler ise aşağıdaki şekilde verilmiştir.





Fraksiyon katsayıları ve taze besleme akımları



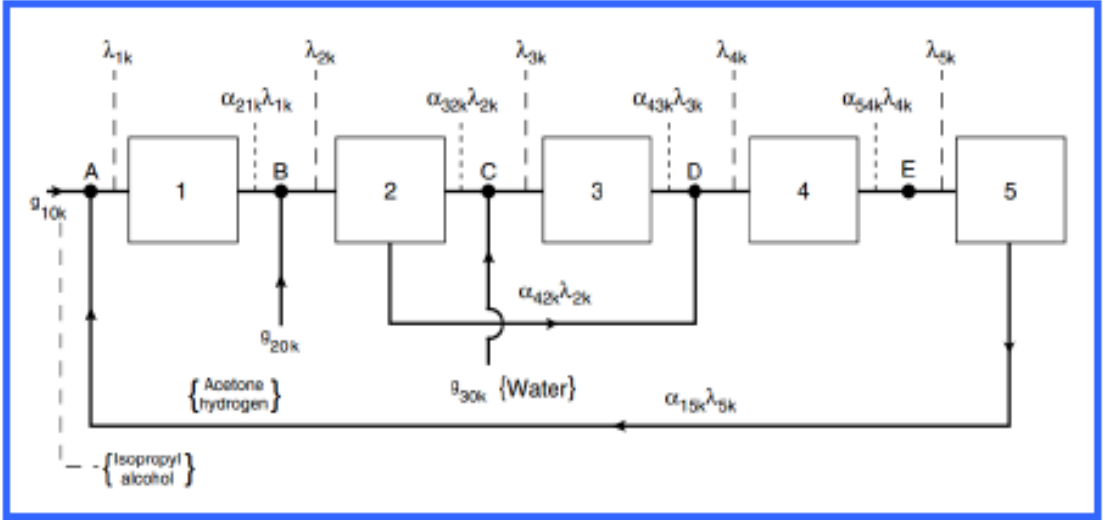
$$\lambda_{1k} = g_{10k} + \alpha_{15k} \lambda_{5k}$$

$$\lambda_{2k} = g_{20k} + \alpha_{21k} \lambda_{1k}$$

$$\lambda_{3k} = g_{30k} + \alpha_{32k} \lambda_{2k}$$

$$\lambda_{4k} = \alpha_{42k} \lambda_{2k} + \alpha_{43k} \lambda_{3k}$$

$$\lambda_{5k} = \alpha_{54k} \lambda_{4k}$$



Denklemler düzenlenerek matris formda yazılırsa

$$\lambda_{1k} - \alpha_{15k} \lambda_{5k} = g_{10k}$$

$$\lambda_{2k} - \alpha_{21k} \lambda_{1k} = g_{20k}$$

$$\lambda_{3k} - \alpha_{32k} \lambda_{2k} = g_{30k}$$

$$\lambda_{4k} - \alpha_{43k} \lambda_{3k} - \alpha_{42k} \lambda_{2k} = 0$$

$$\lambda_{5k} - \alpha_{54k} \lambda_{4k} = 0$$

	1	2	3	4	5				
1	1	0	0	0	$-\alpha_{15k}$	×	$\begin{bmatrix} \lambda_{1k} \\ \lambda_{2k} \\ \lambda_{3k} \\ \lambda_{4k} \\ \lambda_{5k} \end{bmatrix}$	=	$\begin{bmatrix} g_{10k} \\ g_{20k} \\ g_{30k} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$
2	$-\alpha_{21k}$	1	0	0	0				
3	0	$-\alpha_{32k}$	1	0	0				
4	0	$-\alpha_{42k}$	$-\alpha_{43k}$	1	0				
5	0	0	0	$-\alpha_{54k}$	1				



Fraksiyon katsayılarının belirlenmesi:

• Bileşenler k=1 İzopropil alkol, k=2 Aseton, k=3 Hidrojen, k=4 Su

• Proses üniteleri(i,j) 1 = Reaktör 2 =Yoğrıştırurucu
3 = Yıkayıcı 4 = Birinci distilasyon kolonu
5 = İkinci distilasyon kolonu

Tasarımcı, fraksiyon katsayılarını belirlemeden önce yapmış olduğu proje çalışmasına özgün olarak bazı proses ve ekipman spesifikasyonlarını belirlemelidir. Bu değerler, tasarımcının istediği sonuçlara ulaşabilmesi için defalarca değiştirebileceği değerlerdir. Diğer adıyla tasarım değişkenleridir.

İzopropil alkolden aseton üretim prosesinde tasarım değişkenleri için başlangıç değerleri olarak aşağıdaki veriler göz önüne alınmıştır.

1. Reaktörden her geçişte izopropil alkol dönüşüm oranı %90'dır.
2. Yoğrıştırurucuda izopropil alkolün %90'ı yoğrışmaktadır.
3. Yıkayıcıda izopropil alkolün %99'u absorplanarak sıvı faza geçmektedir.
4. Üretilen aseton içerisinde safsızlık olarak en fazla %1 oranında izopropil alkol bulunmasına izin verilmektedir.
5. Yoğrıştırurucuya giren akımdaki asetonun en az %80'inin yoğunlaşması istenmektedir.
6. Yıkayıcıda asetonun %99'u absorplanmalıdır.
7. Suyun yoğrıştırurucuda %95'i yoğrışmaktadır.
8. Yıkayıcıya giren suyun en fazla %1'i gaz faza sürüklenmektedir
9. I.Distilasyon kolonunda asetonun %99'u üst ürün olarak alınsın



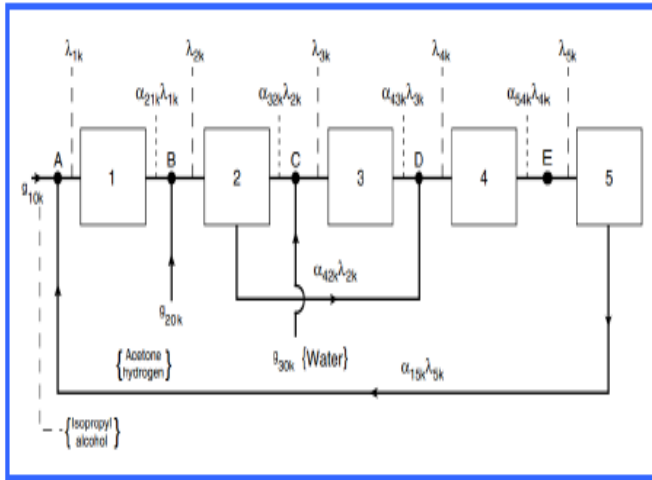
Ek olarak :

- Reaktöre giren akımda bulunan aseton, su ve hidrojenin tepkimeye girmeden reaktörü terk ettiği,
- Hidrojenin, yoğuşturucuda yoğuşmadığı, yıkayıcıda absorplanmadığı ve dolayısıyla sürekli gaz fazda olduğu, distilasyon kolonuna gitme olasılığı olsa bile kolonun tepe ürününe geçeceği;
- İkinci distilasyon kolonunu terk eden ve reaktöre devir ettirilen akımın %91'lik alkol-su azeotrop karışımı olduğu tarafımızdan bilinen olgulardır.

Temel olarak 100 kmol/h izopropil alkol alınırsa; $g_{101} = 100$

Reaktörde aseton verimi %98 olduğu için $g_{202} = 98$

Reaktörde hidrojen verimi de %98'dir. $g_{203} = 98$



Fraksiyon katsayıları ve prosese dışardan verilen akımların sayısal değerleri aşağıda toplu olarak verilmiştir.

Fraksiyon Katsayıları;

$\alpha_{211} = 0,1$	$\alpha_{421} = 0,9$	$\alpha_{321} = 0,1$	$\alpha_{431} = 0,99$	$\alpha_{541} = 0,99$	$\alpha_{151} = 0,99$
$\alpha_{212} = 1$	$\alpha_{422} = 0,8$	$\alpha_{322} = 0,2$	$\alpha_{432} = 0,99$	$\alpha_{542} = 0$	$\alpha_{152} = 0,00$
$\alpha_{213} = 1$	$\alpha_{423} = 0$	$\alpha_{323} = 1$	$\alpha_{433} = 0$	$\alpha_{543} = 0$	$\alpha_{153} = 0$
$\alpha_{214} = 1$	$\alpha_{424} = 0,95$	$\alpha_{324} = 0,05$	$\alpha_{434} = 0,99$	$\alpha_{544} = 0,99$	$\alpha_{154} = 0,05$

α	1	2	3	4
21k	-0,1	-1	-1	-1
32k	-0,1	-0,2	-1	-0,05
42k	-0,9	-0,8	0	-0,95
43k	-0,99	-0,99	0	-0,99
54k	-0,99	0,0	0,0	-0,99
15k	-0,91	0,0	0,0	-0,05
	ξ_{101}	ξ_{202}	ξ_{203}	ξ_{304}
Mol	100	98	98	*

* Absorbsiyon kolonuna dışardan gönderilen su miktarı kolon tasarımına bağlıdır. O nedenle kolona gönderilen su miktarı (kmol/st) = $g_{304} = 200$ mol alınmıştır.



$$\begin{matrix} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & -\alpha_{15k} \\ -\alpha_{21k} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_{32k} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_{42k} & -\alpha_{43k} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha_{54k} & 1 \end{bmatrix} & \times & \begin{bmatrix} \lambda_{1k} \\ \lambda_{2k} \\ \lambda_{3k} \\ \lambda_{4k} \\ \lambda_{5k} \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} g_{10k} \\ g_{20k} \\ g_{30k} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

İzlenecek Yol

- 1. Her bir bileşen (k) için her bir üniteadaki fraksiyon katsayıları ve taze besleme akımları belirlenir.*
- 2. Her bir bileşen (k) için fraksiyon katsayıları matris formunda yazılarak denklem takımı çözümünden ilgili bileşenin her üniteye giriş akış hızı hesaplanır.*
- 3. Hesaplanan değerler tasarım kısıtlamaları sağlanana kadar fraksiyon katsayıları ve taze besleme akımları değiştirilerek tekrar hesaplanır.*



Not: *Bu ders notlarının hazırlanmasında aşağıdaki kaynaklardan yararlanılmış olup ticari bir amaç gütmemektedir. Ticari olarak kullanılamaz.*

KAYNAKLAR

1. J.M. Coulson, J.F. Richardson ve R.K. Sinnott, 1983. Chemical Engineering V: 6, Design, 1st Ed., Pergamon, Oxford.
2. M.S. Peters ve K.D. Timmerhaus, 1985. Plant Design and Economics for Chemical Engineers, 3rd Ed., McGraw-Hill, New York.
3. R.H. Perry, D. Green, 1984. Perry's Chemical Engineers' Handbook, 6rd Ed., McGraw-Hill, New York.
4. R. Turton, R.C.Bailie, W.B.Whiting, J.A. Shaeiwitz, 1998. Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes, 1st Ed., Prentice Hall, New Jersey.