A.Ü.F.F. Döner Sermaye
İşletmesi Yayınları
No: 37

KİMYA MÜHENDİSLİĞİ MATEMATİĞİ

Ayla Çalımlı - Hüseyin Oğuz
Belma Demirel - Emir H. Şimşek - Semra Alıcı

Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi
Kimya Mühendisliği Bölümü

ANKARA-1996

İÇİNDEKİLER

GİRİŞ 1

BÖLÜM 1. MATEMATİKSEL MODELLEME 3
1.1. Adi Türevli Diferansiyel Denklemlerle İlgili Model Oluşturma 3
1.2. Kısmi Türevli Diferansiyel Denklemlerle İlgili Model Oluşturma 34

BÖLÜM 2. SAYISAL YÖNTEMLER 41
2.1. Cebirsel Denklemlerin Sayısal Çözümleri 41
2.1.1. Newton-Raphson Yöntemi 41
2.1.2. Wegstein Yöntemi 46
2.2. Adi Türevli Diferansiyel Denklemlerin Sayısal Çözümleri 48
2.2.1. Euler Yöntemi 48
2.2.2. Modifiye Euler Yöntemi 55

BÖLÜM 3. DEĞİŞKEN KATSAYILI İKİNCİ MERTEBE ADİ TÜREVLİ DİFERANSİYEL DENKLEMLERİN SERİLERLE ÇÖZÜMÜ 59
3.1. Frobenius Yöntemi 59
3.2. Bessel Eşitliği 77
3.3. Modifiye Bessel Eşitliği 78
3.4. Genelleştirilmiş Bessel Eşitliği 84

BÖLÜM 4. KISMİ TÜREVLİ DİFERANSİYEL DENKLEMLERİN ÇÖZÜMÜ 93
4.1. Analitik Yöntemler 93
4.1.1. Değişkenlerine Ayırma Yöntemi 93
4.1.2. Laplace Dönüşümü Yöntemi 96
4.2. Sayısal Yöntem Sonlu Farklar Yöntemi 112

BÖLÜM 5. PROBLEMLER 117

KAYNAKLAR 123

EKLER 125

GİRİŞ

Bir sürecin davranışını incelerken ilgili birimlerin ayrı ayrı ya da bütün olarak denklemlerle gösterimi, bir başka deyişle **matematiksel modellenmesi** kimya mühendisliğinde büyük önem taşır. Kimya, fizik ve matematikten yararlanarak geliştirilen model, sürecin belli koşullarda nasıl davranacağını ortaya koyar. Örneğin;

1. Bir süreçte belli amaçla kullanılacak olan ısı değiştiricinin boyutlarının belirlenmesi,
2. Bir reaktöre beslenen akım ya da akımların sıcaklığı yükseltildiğinde olabilecek değişimlerin öngörülmesi gibi problemlere modelleme yoluyla çözüm bulunabilir.

Modellenecek sürecin analizinde izlenecek adımlar aşağıdaki gibi sıralanabilir.

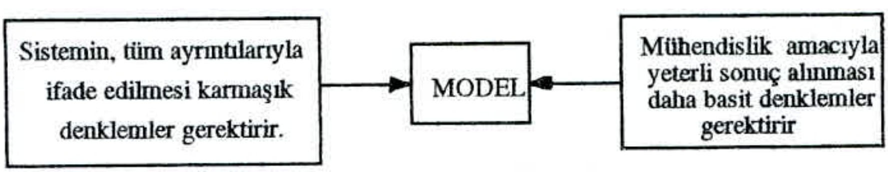
1) Sistemi tanımlayan matematiksel modelin oluşturulması,
2) Modeli çözerek sürecin davranışının belirlenmesi,
3) Model sonuçlarının sistemin gerçek durumu ile karşılaştırılması,
4) Modeldeki sınırlamaların bulunması,
5) Sistem parametrelerinin, sürecin davranışı üzerindeki etkilerinin araştırılması,
6) Çeşitli etkiler altındaki davranışların öngörülmesi ve tasarım,

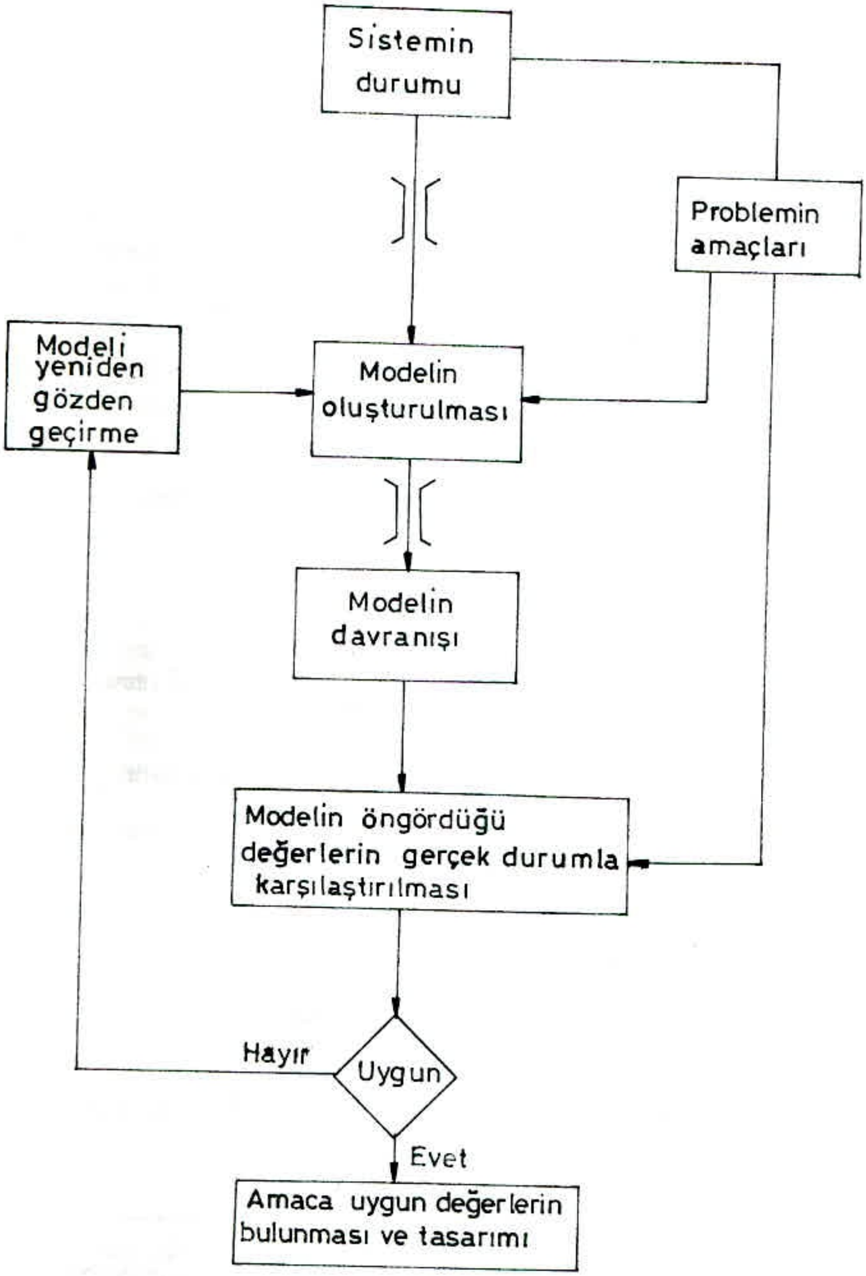
Bu adımlar Şekil 1'deki mantık diyagramında daha açık olarak görülmektedir.

Modellemede yararlanılan Temel Yasalar şunlardır:

1) Momentumun korunumu yasası
2) Enerjinin korunumu yasası
3) Kütlenin korunumu yasası
4) Fizik ve kimyanın diğer yasa ve eşitlikleri.
   Newton yasaları, Termodinamik yasalar, Kimyasal denge,
   Hız eşitlikleri.

Matematiksel modelleme ile, aşağıda özetlenen iki durum arasında, amaca uygun biçimde bir çözüm bulunur.





Şekil 1. Matematiksel modellemenin mantık diyagramı

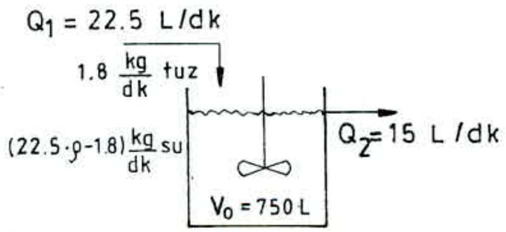
BÖLÜM 1. MATEMATİKSEL MODELLEME

Kimya mühendisliğindeki süreçlerin modellenmesi sırasında; cebirsel, adi türevli ve kısmi türevli diferansiyel denklemlerle karşılaşılır. Burada adi ve kısmi türevli diferansiyel denklemlerle ilgili örnek modeller oluşturulacaktır.

1.1. Adi Türevli Diferansiyel Denklemlerle İlgili Model Oluşturma

Örnek 1.1 : Bir tankın başlangıçta içerdiği 750 L tuz çözeltisinde 45 kg tuz bulunmaktadır. Tanka beslenen tuz çözeltisinin akış hızı 22,5 L/dk, içindeki tuz miktarı 1,8 kg'dır. Karışmanın tam olarak sağlandığı ve yoğunluğun değişmediği varsayılabilir. Tanktan ayrılan tuzlu çözeltinin akış hızı 15 L/dk ise herhangi bir t anında tanktaki tuz miktarını bulunuz.

Çözüm : Tam karışmanın sağlandığı bir sistemde, tank içindeki derişim ile tankı terk eden akımdaki derişim aynı olacaktır.



t anında tanktaki çözeltinin hacmi V litre ve tuz miktarı A kg olsun.

Toplam kütle denkliği:

$$\begin{bmatrix} \text{Kütlenin Sisteme} \\ \text{Giriş Hızı} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Kütlenin Sistemden} \\ \text{Çıkış Hızı} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Kütlenin Sistemde} \\ \text{Birikim Hızı} \end{bmatrix}$$

$$\rho_1 Q_1 - \rho_2 Q_2 = \frac{d(\rho V)}{dt} \tag{1}$$

Burada ρ_1 ve ρ_2 giren ve çıkan tuz çözeltilerinin yoğunluğudur. $\rho_1 = \rho_2 = \rho$ = sabit olduğundan

$$Q_1 - Q_2 = \frac{dV}{dt} \tag{2}$$

yazılabilir. Q_1 ve Q_2 yerine yazılırsa,

$$22.5\ (L/dk) - 15\ (L/dk) = \frac{dV}{dt}\ (L/dk)$$

$$7.5 = \frac{dV}{dt} \tag{3}$$

bulunur. İntegrali alındığında,

$$V = 7.5t + C_1 \tag{4}$$

elde edilir. t=0, V=750 L başlangıç koşulundan C_1 = 750 olarak hesaplanır. (4) denkleminde yerine yazılırsa hacim,

$$\mathbf{V=7.5t+750} \tag{5}$$

bulunur.

Tuz İçin Kütle Denkliği:

$$[\text{Tuzun Giriş Hızı}] - [\text{Tuzun Çıkış Hızı}] = [\text{Tuzun Birikim Hızı}]$$

$$1.8\ (kg/dk) - 15\ (L/dk)\ \frac{A(kg)}{V(L)} = \frac{dA}{dt}\ (kg/dk) \tag{6}$$

(5) eşitliği (6)'da yerine yazılır ve düzenlenirse,

$$1.8 - 15\ \frac{A}{(7.5t + 750)} = \frac{dA}{dt}$$

$$\frac{\mathbf{dA}}{\mathbf{dt}} + \frac{\mathbf{2A}}{\mathbf{t+100}} = \mathbf{1.8} \tag{7}$$

Birinci mertebe lineer diferansiyel denklemi elde edilir. Bu denklem,

$$\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$$

biçimindedir.

$$y = \exp\left(-\int P(x)dx\right)\left[\int Q(x)\exp\left(\int P(x)dx\right)dx + c\right]$$

dönüşümü ile çözülür. (7) eşitliğinde,

$$P = \frac{2}{t+100}$$

ifadesine eşittir. Buna göre denklemin çözümü yapılırsa,

$$A = \exp\left(-\int \frac{2}{t+100}dt\right)\left[\int 1.8\left(\exp\left(\int \frac{2}{t+100}dt\right)\right)dt + c\right] \tag{8}$$

$$A = \exp(-2\ln(t+100))\left[1.8\int \exp(-2\ln(t+100))dt + c\right]$$

$$A = (t+100)^{-2}\left(1.8\int (t+100)^2 dt + c\right)$$

$$A = (t+100)^{-2}\left(\frac{1.8}{3}(t+100)^3 + c\right)$$

$$A = 0.6(t+100) + c\,(t+100)^{-2} \tag{9}$$

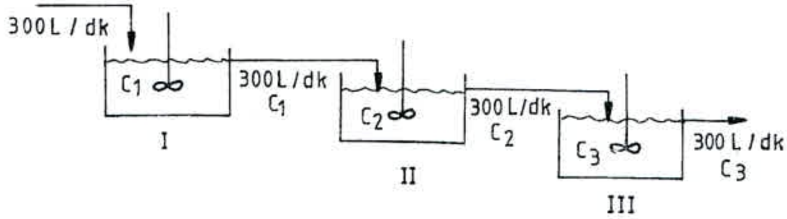
Başlangıç koşulundan ($t = 0 \Rightarrow A = 45$ kg), $c = -1.5 \cdot 10^5$ bulunur. Buna göre,

$$\mathbf{A = 0.6\,(t+100) - 1.5 \cdot 10^5 (t+100)^{-2}} \tag{10}$$

elde edilir.

Örnek 1.2 : Her biri 50 m^3 hacimli karıştırmalı 3 tank seri olarak bağlanmıştır. Birinci tanka besleme yapıldığında üç tankta giriş ve çıkış akış hızları eşit olmaktadır.Her üç tankta da eşderişim ve tam karışma sağlanabilmektedir. Böyle bir sistemdeki her bir tank başlangıçta C_0 derişiminde çözelti ile doldurulsun. Birinci tanka 300 L/dk akış hızı ile su pompalanmaya başlandıktan sonra bu tanktaki derişimin $C_0/10$ değerine ulaşması için geçecek zamanı hesaplayınız. II. ve III. tanktaki derişimlerin zamanla değişimini bulunuz.

Çözüm :



Herhangi bir t anında tanktaki derişimler sırasıyla C_1, C_2, C_3 olsun.

I. Tank İçin Bileşen Kütle Denkliği:

$$\begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sisteme}\\ \text{Giriş Hızı}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sistemden}\\ \text{Çıkış Hızı}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sistemde}\\ \text{Birikim Hızı}\end{bmatrix}$$

$$300C - 300\ C_1 = 50000\ \frac{dC_1}{dt}$$

I. tanka beslenen akımda tuz olmadığından C=0 dır. Buna göre,

$$-300\ C_1 = 50000\frac{dC_1}{dt}$$

olur. Buradan,

$$-C_1 = 167\frac{dC_1}{dt} \qquad (2)$$

birinci mertebe değişkenlerine ayrılabilir diferansiyel denklemi bulunur.

II. Tank için Bileşen Kütle Denkliği:

$$300\ C_1 - 300\ C_2 = 50000\ \frac{dC_2}{dt} \qquad (3)$$

$$300\ (C_1 - C_2)\ =\ 50000\ \frac{dC_2}{dt}$$

$$C_1 - C_2 = 167\frac{dC_2}{dt} \qquad (4)$$

III. Tank için Bileşen Kütle Denkliği:

$$300\ C_2 - 300\ C_3 = 50000\ \frac{dC_3}{dt} \qquad (5)$$

$$300\ (C_2 - C_3)\ =\ 50000\ \frac{dC_3}{dt}$$

$$C_2 - C_3 = 167\ \frac{dC_3}{dt} \qquad (6)$$

(2) eşitliği analitik olarak çözülürse;

$$167 \frac{dC_1}{C_1} = -dt$$

$$167 \int_{C_0}^{C_1} \frac{dC_1}{C_1} = -\int_0^t dt \qquad \Rightarrow \qquad 167 \ln\left(\frac{C_0}{C_1}\right) = -t$$

$$C_1 = C_0\, e^{(-t/167)} \tag{7}$$

bulunur.

$C_1 = C_0/10$ için $\Rightarrow$ $C_0/10 = C_0\, e^{(-t/167)}$

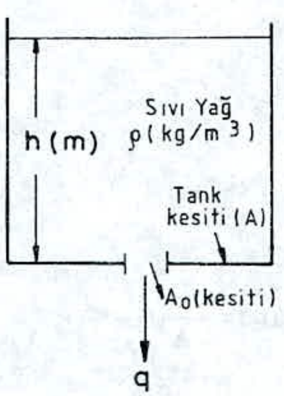
t = 384.5 dk dır.

Not : Bu problemin sayısal çözümü için bilgisayar programı ve sonuçlar Ek 2'de verilmiştir.

Örnek 1.3 : h_0 **yüksekliğinde sıvı yağ ile dolu sabit kesitli bir tank, dibine yerleştirilen orifis yardımıyla boşaltılmaktadır.**

a) Tankın boşalması için gerekli süreyi,
b) Tankdaki sıvı yüksekliğinin zamanla değişimini,
c) Sıvının akış hızının tankdaki sıvı yüksekliği ile ilişkisini
bulunuz.

Çözüm :



Kütle Denkliği:

$$\begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sisteme}\\ \text{Giriş Hızı}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sistemden}\\ \text{Çıkış Hızı}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sistemde}\\ \text{Birikim Hızı}\end{bmatrix}$$

(1) (2) (3)

Tanka giren akım olmadığından (1) terimi sıfırdır.

$$-\rho q = \frac{d(\rho h A)}{dt} \qquad (1)$$

ρ ve A sabit olduğundan,

$$-\rho q = \rho A \frac{dh}{dt}$$

yazılabilir. Yoğunluklar sadeleştirilirse ,

$$-\frac{q}{A} = \frac{dh}{dt} \qquad (2)$$

elde edilir. (2) denkleminde q ve h bilinmediğine göre çözüm için bir denkleme daha gereksinim vardır. Bu noktada; q ve h arasında sezgi, deneyim, boyut analizi vb. yöntemler yardımıyla bir ilişki kurulmalıdır.

$$q = q(\Delta p)$$

Akış hızı(q) orifisteki basınç (Δp) farkının bir fonksiyonudur. Δp de h' e bağlı olduğundan, sonuçta q h' nin bir fonksiyonu biçiminde ifade edilebilir.

Aşağıda karşılaştırma amacı ile q'nun sabit olduğu durum da incelenmiştir:

a) q = C = sabit ise;

(2) eşitliği,

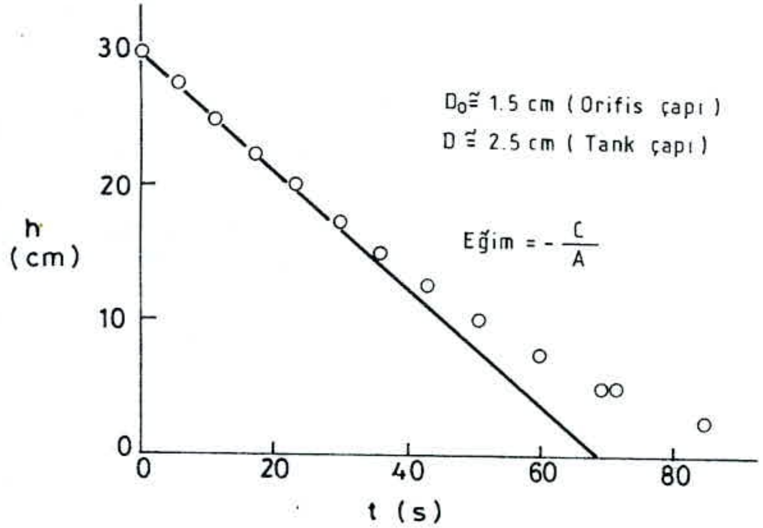
$$-\frac{c}{A} = \frac{dh}{dt} \qquad (3)$$

olur. Çözüm yapılırsa,

$$\int_{h(t_1)}^{h(t_2)} dh = -\int_{t_1}^{t_2} \frac{c}{A} dt \quad \Rightarrow \quad h(t_2) - h(t_1) = -\frac{c}{A}(t_2 - t_1) \qquad (4)$$

Buradaki t_1 : Başlangıç koşulu ($t_1 = 0$)
t_2 : Herhangi bir zaman için (t=t)

$$h(t) = h_0 - \frac{ct}{A} = h_0\left(1 - \frac{ct}{h_0 A}\right) \tag{5}$$



Şekil 1.1

elde edilir. (5) eşitliğinden görüleceği gibi tankdaki sıvı yüksekliği (h) zamanın doğrusal bir fonksiyonudur. Bu doğrunun eğimi -C/A, kayması ise h_0 dır. Bu bulgu Şekil 1.1'deki deneysel sonuçlarla karşılaştırıldığında, (5) eşitliğinin t'nin küçük değerlerinde (t<25) geçerli olduğu görülmektedir. Örneğin 80 ya da 100 saniye gibi büyük değerlerde ise sıvı seviyesini belirlemek için bu denklemi kullanmanın bir anlamı yoktur.

b) q = bh ise,

(2) eşitliği,

$$-\frac{bh}{A} = \frac{dh}{dt} \tag{6}$$

olur. Burada b orantı sabitidir. (6) eşitliği çözülürse;

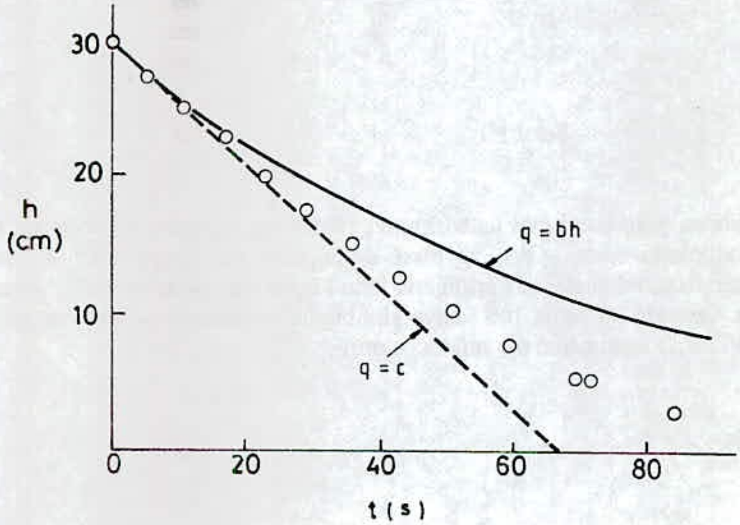
$$\int_{h(t_1)}^{h(t_2)} \frac{dh}{h} = -\int_{t_1}^{t_2} \frac{b}{A} dt \quad \Rightarrow \quad \ln\frac{h(t_2)}{h(t_1)} = -\frac{b}{A}(t_2 - t_1) \tag{7}$$

bulunur. $t = 0$ anından herhangi bir t anına kadar düşünülecek olursa;

$$\ln\frac{h(t)}{h_0} = -\frac{b}{A}t$$

$$h(t) = h_0 e^{(-bt/A)} \tag{8}$$

elde edilir. Bu ilişkinin deneysel verilere uygunluğu karşılaştırıldığında, t'nin büyük değerlerinde sapmalar olduğu açıktır. O halde, q ile h arasındaki ilişki (a) ve (b) durumlarında incelenenden farklı olmalıdır.



Şekil 1.2

c) $q = kh^n$ ise;

Bu eşitlikte k bir sabittir. h'nin üssü n (a) ve (b) durumlarında sırasıyla 0 ve 1'dir. Şekil 1.2' den 0<n<1 olursa, gerçeğe daha yaklaşılacağı anlaşılmaktadır.

(2) eşitliğinde $q = kh^n$ yazılırsa;

$$-\frac{kh^n}{A} = \frac{dh}{dt} \tag{9}$$

elde edilir. **Değişkenlerine ayrılabilen bu diferansiyel denklem** çözülürse;

$$\int_{h_0}^{h(t)} \frac{dh}{h^n} = -\int_0^t \frac{-k}{A} dt$$

$$\frac{h^{1-n}}{1-n} - \frac{{h_0}^{1-n}}{1-n} = \frac{-kt}{A}$$

$$h(t) = h_0 \left[1 - \frac{(1-n)kt}{A{h_0}^{1-n}}\right]^{1/1-n} \tag{10}$$

bulunur. Bu eşitlik karmaşık olmakla birlikte, deneysel sonuçları en iyi şekilde sağlamaktadır. Ancak, k ve n gibi iki parametrenin (n<1 olmak üzere) deneysel olarak saptanması gereklidir.

n = 1/2 alınırsa, (10) eşitliği,

$$h(t) = h_0 \left[1 - \frac{kt}{2A{h_0}^{1/2}}\right]^2 \tag{11}$$

bulunur. Şekil 1.3'de görüldüğü gibi, zamana karşı (11) eşitliğinden hesaplanan $h^{1/2}$ değerleri grafiğe geçirildiğinde deneysel verilerle tam bir uyum sağlamaktadır.

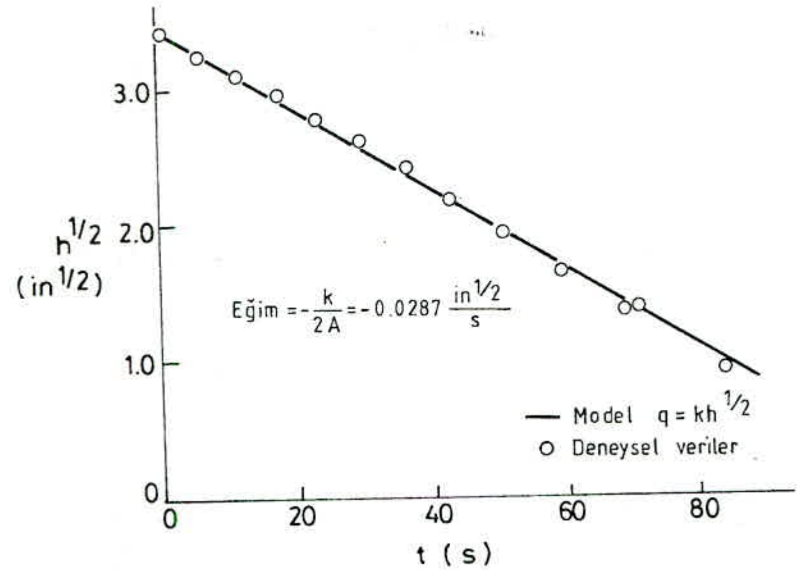
Akış hızı,

$$q = 5.195h^{1/2} \qquad q : (ft^3/s),\ h: (in) \tag{12}$$

ya da

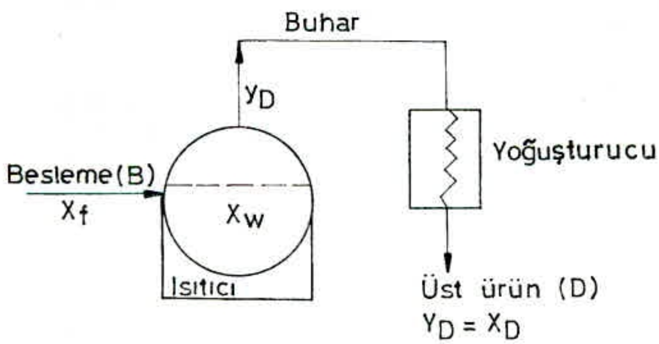
$$q = 42.3h^{1/2} \qquad q : (cm^3/s),\ h: (cm) \tag{13}$$

bulunur. Buraya kadar yapılan işlemlerle, bir sistemin davranışını ifade eden matematiksel model bulunmuş ve modelin parametresi saptanarak bu modelin uygunluğu doğrulanmıştır.



Şekil 1.3

Örnek 1.4 : Akış şeması aşağıda görülen sistemde, benzen ve toluen içeren karışımdan benzen damıtılarak ayrılmaktadır. Kazanda başlangıçta 20 kmol karışım bulunmakta ve karışımda benzenin mol kesri 0.32 dir. Sisteme saatte 10 kmol karışım beslenmekte ve sistemdeki ısıtma hızı, kazandaki karışım mol sayısı 20 değerinde sabit tutulacak şekilde ayarlanmaktadır. Üst üründeki benzen mol kesrinin 0.4 değerine ulaşması için gerekli süreyi hesaplayınız. Bağıl uçuculuk 2.48' dir.



Çözüm :

Veriler:

Besleme hızı : $F = 10$ kmol/h
Kazandaki mol sayısı : $W = 20$ kmol
Üst ürün : D kmol/h

Birikim hızı : $\dfrac{dW}{dt} = 0$

$$\begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sisteme} \\ \text{Giriş Hızı}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sistemden} \\ \text{Çıkış Hızı}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Kütlenin Sistemde} \\ \text{Birikim Hızı}\end{bmatrix}$$

Toplam kütle denkliği:

$$F - D = \frac{dW}{dt} = 0 \tag{1}$$

Benzen için kütle denkliği:

$$Fx_f - Dy_D = \frac{Wdx_w}{dt} \tag{2}$$

(1) eşitliğinden, $D = 10$ kmol ' dür. Bu değer (2)' de yerine konursa,

$$10 \cdot 0.32 - 10y_D = 20\,\frac{dx_w}{dt} \tag{3}$$

bulunur. (3) eşitliği düzenlenirse,

$$dt = \frac{20dx_w}{3.2 - 10y_D} \tag{4}$$

elde edilir. (4) eşitliğinde, x_W ve y_D bilinmemektedir; ancak yasalardan yararlanarak bu büyüklükler arasında bir bağıntı bulunabilir. Kazandaki buhar ve sıvının birbiriyle dengede olduğu gerçeği göz önüne alındığında; Raoult yasası ve bağıl uçuculuk değerlerinden yararlanarak aşağıdaki eşitlik çıkarılabilir.

Açıklama: Bağıl uçuculuk A ve B iki bileşenli bir karışımda şu şekilde tanımlanır.

$$\frac{y_A}{y_B} = \alpha\frac{x_A}{x_B}$$

Birbiriyle dengede olan sıvı-buhar fazları için;

x_A, x_B : A ve B' nin sıvı fazı mol kesirleri
y_A, y_B : A ve B' nin buhar fazı mol kesirleri

İkili bir karışım için;

$$y_A + y_B = 1 \quad , \quad y_B = 1 - y_A$$
$$x_A + x_B = 1 \quad , \quad x_B = 1 - x_A$$

olduğundan;

$$\frac{y_A}{1-y_A} = \alpha \frac{x_A}{1-x_A}$$

(Bağıl uçuculuk bağıntısında; $x_A = x_W$ ve $y_A = y_D$ dir.)

Raoult yasasına göre kazanda kalan sıvı ve kazanı terk eden buhar dengededir.

$$\frac{y_D}{1-y_D} = \alpha \frac{x_w}{1-x_w} \tag{5}$$

(5) eşitliğinden y_D çekilirse;

$$y_D = \frac{2.48x_w}{1+1.48x_w} \tag{6}$$

elde edilir. Bu ifade (4) eşitliğinde yerine yazıldığında,

$$dt = \frac{20(1+1.48x_w)dx_w}{3.2(1+1.48x_w) - 24.8x_w} \tag{7}$$

elde edilir. (7) eşitliği $t = 0 \,;\; x_W = 0.32$
$t = t \,;\; y_D = 0.4,\; x_W = 0.21$ ((6) eşitliğinden)

sınırları arasında integre edilirse;

$$\int_0^t dt = \int_{0.32}^{0.21} \frac{20(1+1.48x_w)dx_w}{3.2(1+1.48x_w) - 24.8x_w}$$

$$t = \frac{20}{20.1} 2.3\log(3.2 - 20.1x_w)\Big|_{0.32}^{0.21} - 29.6\left[\frac{x_w}{20.1} + \frac{3.2}{20.1^2} 2.3\log(3.2 - 20.1x_w)\right]_{0.32}^{0.21}$$

t = 1.58 saat bulunur.