

I. VE II. KANUN ANALİZLERİNDE
KULLANILMAK ÜZERE TERMODİNAMİK BİR VERİ TABANI
VE KULLANICI PROGRAMININ GELİŞTİRİLMESİ#

Tez Savunma tarihi : 20/01/1993

Tez Yöneticisi : Doç.Dr.Z.Sema Baykara

Jüri Üyeleri : Prof.Dr.Salih Dinçer

Doç.Dr.Z.Sema Baykara

Doç.Dr.Eser Kılıç

: Bu proje, Yıldız Teknik Üniversitesi Araştırma Fonu tarafından desteklenmiştir (Fon Proje No: 91-B-04-08-04).

**T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**I. VE II. KANUN ANALİZLERİNDE
KULLANILMAK ÜZERE TERMODİNAMİK
BİR VERİ TABANI VE KULLANICI
PROGRAMININ GELİŞTİRİLMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KİMYA MÜH. FUAT DOYMAZ

İSTANBUL – 1993

TEŞEKKÜR

Tez Çalışmalarımı yöneten ve her türlü yardımı esirgemeyen tez danışmanım Doç.Dr.Z.Sema Baykara'ya, bölümde gerekli araştırma ortamının yaratılmasında öncülük eden ve çalışmalarım esnasında bana yardımcı olan bölüm başkanımız, YÜAF destekli projemizin danışmanı ve jüri başkanım Prof.Dr. Salih Dinçer'e en içten duygularıyla teşekkür ederim. Bu arada, yardımlarından dolayı asistanlığını yaptığım termodinamik dersinin öğretim üyesi Doç.Dr.Eser Kılıç'a, projeyi mali yönden destekleyen YÜAF'a, satınalma işlemlerindeki ilgilerinden dolayı Prof.Dr.Şeniz Kaban ile Prof.Dr. Zekiye Çınar'a, proje teklifini değerlendirmiş olan Prof.Dr. Neşet Kadirgan'a,Prof. Dr.Doğan Özgür'e ve Prof.Dr. Tahir Şişman'a, teknik donanım konusundaki ilgi ve yardımlarından dolayı Prof.Dr.Yahya Karslıgil ile asistanları Tefvik ve Gökhan'a, bilgisayarla çalışmalar esnasındaki yardımlarından dolayı Matematik Bölümü öğretim üyelerinden Doç.Dr.Ayşe Kuruüzüm ile asistanlar Işım ve Ünsal'a, telefon hattı tahsis işlemleri için de PTT İstanbul yakası çalışanlarına teşekkür borçluyum.

Benden bugüne kadar ki her türlü maddi/manevi desteklerini esirgemeyen aileme, arkadaşlarıma ve yakınlarıma da en içten duygularıyla teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
Sembol Listesi	v
Şekil Listesi	vii
Tablo Listesi	viii
Özet	ix
Abstract	x
BÖLÜM 1 Giriş.....	1
BÖLÜM 2 Termodinamik Hal Fonksiyonu Hesaplamaları	
İçin Model.....	3
2.1. I. Kanun ile ilgili Parametreler....	3
2.2. II. Kanun ile ilgili Parametreler....	6
2.3. Ekserji.....	9
BÖLÜM 3 Kimyasal Denge Hesaplamaları İçin Model...	14
BÖLÜM 4 Bilgisayar Programının Akış Şeması.....	20
BÖLÜM 5 Uygulamalar	21
BÖLÜM 6 Tartışma ve Sonuç	32
KAYNAKÇA	38
EKLER	
EK-1. Bazı Maddelerin J ve I sabitleri ..	39
EK-2. Bilgisayar Program	40
EK-3. Uygulamaların Bilgisayar Çıktısı ...	63
ÖZGEÇMİŞ	75

SEMBOL LİSTESİ

$\hat{a}_i$	i bileşeninin çözelti içindeki aktivitesi
a_{ik}	i kimyasal türünün her molekülündeki atom sayısı
A_k	Sistem içindeki herhangi bir elementin toplam atomik kütlesi
C_p	Sabit basınçtaki ısı kapasitesi
C_v	Sabit hacimdeki ısı kapasitesi
E	Enerji (genel anlamda)
f	karişımın fugasitesi
$\hat{f}_i$	i saf bileşeninin fugasitesi
f_i	i bileşeninin çözelti içindeki fugasitesi
G	Gibbs enerjisi = $H - T S$
ΔG°	Standart Gibbs serbest enerjisi değişimi
ΔG°_r	Oluşum standart Gibbs serbest enerjisi değişimi
G°	Toplam Gibbs enerjisi
H	Entalpi = $U + P V$
ΔH°	Standart entalpi değişimi
ΔH°_r	Oluşum standart entalpi değişimi
K	Kimyasal-reaksiyon denge sabiti
n	Mol sayısı
N	Kimyasal tür sayısı
P	Basınç
Q	Isı
R	Gaz sabiti
S	Entropi
ΔS°	Standart entropi değişimi

ΔS°	Oluşum standart entropi değişimi
T	Mutlak sıcaklık
T_a	Çevre sıcaklığından farklı bir noktadaki sıcaklık
T_∞	Çevre sıcaklığı
U	iç enerji
V	Hacim
W	iş
x_i	i bileşeninin mol kesri (genellikle sıvı fazında)
y_i	i bileşeninin mol kesri (gaz veya buhar faz içinde)
α	Ekserji oranı
β	Hacim genleşmesi
Δ	ilk ve son durum arasındaki fark
ξ	Reaksiyon koordinatı
μ_i	i bileşeninin kimyasal potansiyeli
$\emptyset$	Ekserji
$\emptyset^\circ$	Standart haldeki ekserji
$\hat{\Phi}$	i bileşeninin fugasite katsayısı
λ	Lagrange çarpanı

ŞEKİL LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 1 Enerjinin kullanılabilirliğine ait akış şeması	9
Şekil 2 Reaksiyon koordinatına göre toplam Gibbs enerjisindek değişim	14
Şekil 3 Bilgisayar programının akış şeması	20
Şekil 4 Bir yanma tepkimesi	23
Şekil 5 Bir yanma tepkimesi	24
Şekil 6 Metanın subuharıyla tepkimesi	27

TABLO LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Tablo 1.1 Maddelerin 1 atm, 298.16 K, 700 K ile 1400 K'deki C_p , ΔS , $H-H^\circ$, ΔG_f değerleri..	22
Tablo 2.1 Maddelerin mol, mol kesirleri ve kısmi basınçları	24
Tablo 2.2 Reaktan ve ürünlerin ekserjileri	26
Tablo 3.1 Elementlerin toplam atomik kütleleri ve atom sayıları	28
Tablo 3.2 Fonksiyonların her bir değişkene göre türevleri	31
Tablo A.1 C_p 'lerin karşılaştırılması	32
Tablo A.2 Entropilerin karşılaştırılması	33
Tablo A.3 Entalpilerin karşılaştırılması	33
Tablo A.4 Gibbs enerjilerinin karşılaştırılması	34
Tablo B.1 Reaktif ve ürünlerin toplam ekserjileri- nin karşılaştırılması	35
Tablo C.1 Mol kesirlerinin ve toplam mol sayısının (43) No'lu denklemden elde edilen ΔG_f de- ğerleri baz alınarak) karşılaştırılması ..	36
Tablo C.1 Mol kesirlerinin ve toplam mol sayısının (Referanstaki ΔG_f değerleri baz alınarak) karşılaştırılması	36

ÖZET

Bu çalışmada, kimyasal proseslerin, termodinamiğin I. ve II. kanunu açısından incelenmesi için enerji ve ekserji hesaplarının yapılması amacıyla şimdilik sadece O_2 , H_2 , N_2 , CO , CO_2 , H_2O ve CH_4 gazlarına* ait hal fonksiyonlarıyla ilgili bilgileri içeren bir veri tabanı ve bu veri tabanını kullanan genel amaçlı bir bilgisayar programı geliştirilmiştir.

Programı kullanarak hal fonksiyonu değişimi ve kimyasal denge hesapları yapmak mümkündür. Programın birinci kısmında, maddelere ait hal fonksiyonu hesabı için ısı kapasitesinin sıcaklığa bağlı fonksiyonu baz alınarak buradan entalpi, entropi, Gibbs enerjisi ve dolayısıyla ekserji hesabı, % 2-4 hata ile yapılabilir.

Kimyasal denge hesabı kısmında ise denge kompozisyonunu belirlemek için Gibbs enerjisinin minimizasyonu yöntemi seçilmiş, ortaya çıkan lineer olmayan diferansiyel denklemler Newton-Raphson metodu ile çözülmüş, elde edilen sonuçların gerçek değerlerle uyum sağladığı görülmüştür.

* : Bölümümüzde hidrokarbon yakıtlarının yakılması ve kömürle ilgili çalışmalar yapıldığından dolayı bu maddelere öncelik verilmiştir.

ABSTRACT

In this study, a data base which contains data related to state functions of gases, and a user program have been developed with the aim of studying chemical processes from the points of thermodynamics' first and second law. In order to perform energy and exergy calculations for gases (O_2 , H_2 , N_2 , CO, CO_2 , H_2O , CH_4 to begin with), calculations of changes in state function and chemical equilibrium are possible by using this program. In the first section of the program, based on temperature dependent heat-capacity function, enthalpy, entropy, Gibbs energy and exergy calculations can be done by $\pm 2-4$ % error.

In the other section, in order to determine equilibrium compositions Gibbs-energy minimization method has been choosen and non-linear differential equations are solved via Newton-Raphson method. Results obtained are in agreement with the Thermochemical Tables.

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Günümüzde, enerjinin daha etkin kullanımı için çeşitli yöntemler ve çalışmalar üzerinde durulmaktadır. Bu amaçla, özellikle 1970'li yıllardan sonra, ham petrol, doğal gaz, elektrik ve diğer enerji kaynaklarının maliyetlerindeki artışlar çeşitli enerji dönüşümlerini içeren süreçlerde verimliliğin arttırılmasına yönelik yeni tasarımların yapılmasını ve bunların mevcut sistemlerle karşılaştırılmasını büyük ölçüde gerekli kılmıştır [1,2,3,4].

Geleneksel süreç tasarımının temelini genellikle termodinamiğin birinci kanununun, diğer bir deyişle enerji sakınımı ilkesinin uygulanması oluşturur. Fakat enerjinin maliyeti sadece kullanılan enerjinin miktarına değil, aynı zamanda kalitesine de bağlıdır. Enerjinin kalitesi ise o enerjiden elde edilebilecek iş miktarıyla ölçülür. Örneğin 1000 J'luk enerji değerine sahip elektrik, kuramsal olarak tamamen işe dönüştürülebilir. Diğer yandan 1000 J'luk enerji değerine sahip buhardan ancak 500 J'lun altında bir iş elde edilebilir. Diğer bir deyişle, bütün enerji türleri aynı kalitede değildir. Enerji kalitesindeki bu farklılaşma süreç tasarımında süreçlerin, termodinamiğin birinci kanununun yanısıra ikinci kanunuyla da analizini gerektirir [5].

1940'larda ortaya atılan kullanılabilirlik (ekserji) kavramı, değişik enerji kaynakları kullanarak değişik ürün-

ler üreten süreçlerin, enerjinin verimli kullanımı açısından değerlendirilebilmesi ve karşılaştırılabilmesi için oldukça sık kullanılmaya başlanmıştır. Herhangi bir enerji akışından elde edilebilecek iş, ekserji olarak nitelendirilen termodinamik özellikle ölçülebilir. Ekserji, enerjinin değişik sıcaklık, basınç ve kimyasal potansiyel koşullarındaki farklılaşmasını yansıtır. Ekserji analizi, enerji kullanımında ekonomik analiz ile birleştirildiğinde en uygun tasarım aracını oluşturur. Ekserji analizi ile değişik süreçler, ortak bir temele dayandırılarak tutarlı bir şekilde değerlendirilebilmekte ve her süreçteki en verimsiz aşamalar ile bunların nedenleri ortaya çıkarılabilmektedir.

Konuyla ilgili hesaplamaların kısa zamanda ve doğru olarak yapılması, gerek benzeşim programları için ve gerekse herhangi bir zamanda ortaya çıkan problemin çözümü için olsun bu amaca uygun bir bilgisayar programı, en güvenilir yol olarak gözükmektedir. Bunun için yapılması gereken şey, birinci ve ikinci kanun parametrelerinin hesabı ile ilgili fonksiyonlar dizisini ortaya çıkarmaktır. Bu fonksiyonlar dizisi, hem klasik termodinamik hem de istatistiksel termodinamikten faydalanmak suretiyle oluşturulabilir. Bu aşamada genel amaçlı bir program oluşturulursa, programın kullanılabilirliği daha da artacaktır.

Sonuç olarak, bu yönde bir program oluşturma yoluna gidilerek geniş bir kullanıcı kitlesine ulaşılacak hedeflenmiştir.

BÖLÜM 2

TERMODİNAMİK HAL FONKSİYONLARI HESAPLAMALARI İÇİN MODEL

2.1. I. KANUN İLE İLGİLİ PARAMETRELER

Enerjinin korunumu kanunu olarak bilinen termodinamiğin I. kanunu, doğal süreçlerde değişik enerji türlerinin sabit kaldığını vurgular, fakat bu dönüşümlerin yönü ve verimliliği üzerinde herhangi bir kısıt öngörmez [6] . Halbuki gözlemler, değişik enerji türlerinin birbirlerine dönüştürülmesinde verimliliğin farklı olduğunu göstermektedir.

Kapalı bir sistem için Termodinamiğin I. kanunu, matematiksel olarak şöyle ifade edilir.

$$\Delta E = Q - W \quad (1)$$

ΔE , sistemin toplam enerji değişimini; Q , sisteme verilen ısıyı ve W ise sistemin yaptığı işi göstermektedir.

Toplam enerji değişimi (ΔE) herbiri değişik bir enerji türünü gösteren terimlerle ifade edilebilir.

$$\Delta E = \Delta(KE) + \Delta(PE) + \Delta U \quad (2)$$

Burada, $\Delta(KE)$, kinetik enerji değişimini; $\Delta(PE)$ potansiyel enerji değişimini ve ΔU iç enerji değişimini göstermektedir.

Kapalı sistemler, genelde iç enerji hariç kinetik ve potansiyel enerjilerinde değişim olmayan sistemlerdir. Yalnızca iş ve ısı alışverişi olan bir işlemde sistemin iç enerji değişimi için

$$\Delta U = Q - W \quad (3)$$

ve diferansiyel olarak

$$dU = dQ - dW \quad (4)$$

ifadeleri yazılabilir. İş alışverişi $dW = d(PV)$ şeklinde ifade edildiğinde entalpi fonksiyonu

$$dH = dU + d(PV) \quad (5)$$

biçiminde yazılabilir. İş alışverişinin salt hacim işinden ibaret olması durumunda ise entalpi değişimi aşağıdaki halini alır:

$$dH = dU + P.dV \quad (6)$$

Entalpi, sıcaklık ve basıncın fonksiyonu olduğundan homojen faz ve sabit kompozisyon durumunda toplam diferansiyel ile bazı türetmeler aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P dT + \left(\frac{\partial H}{\partial P} \right)_T dP \quad (7)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P = C_p \quad \left(\frac{\partial H}{\partial P} \right)_T = V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P$$

$$dH = C_p dT + \left[V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \right] dP \quad (8)$$

$$dH = C_p dT + (1 - \beta T) V dP \quad (9)$$

(9) No'lu denklemdaki C_p , herhangi bir maddenin ısı kapasitesini, β ise o maddenin hacim genleşme katsayısını ifade etmektedir [6]. Bu denklemin sağ tarafının ikinci terimi, ideal haller için sıfırdır. Bundan dolayı (9) No'lu denklem

$$dH = C_p dT \quad (10)$$

halini alır. Bir proseste ısı alışverişi, sabit basınç veya sabit hacimde yapılacak olursa aynı sıcaklık aralığında mad-

denin absorbladığı ısı miktarı farklı olur. Dolayısıyla sabit hacim ve basınçtaki ısı kapasiteleri aşağıdaki gibidir:

$$C_v = dQ_v / dT$$

$$C_p = dQ_p / dT$$

Bir maddenin iç enerji ve entalpi hesaplarında ısı kapasitesinin sıcaklığa bağlı fonksiyonlarından yararlanılır.

$$\Delta U = \int_{T_1}^{T_2} C_v dT \quad (10a)$$

$$Q_p = \Delta H = \int_{T_1}^{T_2} C_p dT \quad (10b)$$

İdeal gazların ısı kapasitelerinin belirlenmesinde kullanılan sıcaklığa bağımlı empirik denklem, doğru sonuç vermesinin yanında basit ve pratik oluşundan dolayı çok yaygın olarak kullanılabilmektedir.

$$C_p / R = A + BT + CT^2 + DT^{-2} \quad (11)$$

Burada A, B, C ve D, ilgili gaza ait karakteristik sabitlerdir.

Her ne kadar ideal gaz ısı kapasiteleri, gerçek gazlar için sadece sıfır basınçta doğru değerleri veriyorsa da basıncın birkaç bar'a çıkmasıyla doğruluk derecesinde oldukça sapmalar görülür. Dolayısıyla C_p düşük basınçlarda gerçek gazlar için genelde iyi bir yaklaşımdır. Buna göre entalpi hesabında kullanılacak denklem

$$H - H^0 = \int_{T_2}^{T_1} C_p^{\text{ig}} dT \quad (12a)$$

halini alır. (12a) No'lu denklem bir reaksiyon için aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\begin{aligned} \Delta H_{r.t} &= \Delta H_{\text{ürünler}} - \Delta H_{\text{reaktanlar}} \\ &= \sum (H_{298.15} + \Delta H)_{\text{ürünler}} - \sum (H_{298.15} + \Delta H)_{\text{reaktanlar}} \end{aligned} \quad (12b)$$

2.2. II. KANUN İLE İLGİLİ PARAMETRELER

Termodinamiğin I. kanunu, doğadaki enerji dönüşümlerinde azalan bir enerji çeşidi yerine, bir başka enerji çeşidinin eşit miktarda meydana geldiğini, toplam enerjinin sabit kaldığını/korunduğunu ve bir sistemin ilk ve son hallerinin enerjileri arasındaki farka eşit olduğunu bildirir. Fakat olayların hangi yönde geliştiğini, hangilerinin kendiliğinden, hangilerinin ise ancak dışarıdan bir zorlama ile meydana gelebileceği hakkında bilgi vermez. Halbuki doğal süreçler yakından incelendiğinde, bir çoğunun tek yönlü cereyan ettiği gözlenir

Nicelik bakımından bütün enerji çeşitleri, bu arada ısı ve iş enerjisi de, birbirine dönüştükleri zaman dönüşen miktarlar, daima birbirine eşit oldukları halde ısı ve iş enerjileri nitelik bakımından birbirinden ayrılırlar. Mekanik iş veya elektrik enerjisinde olduğu gibi iş şeklindeki enerjiler ısı enerjisine ($\sim 100\%$) dönüştükleri halde, ısı enerjisinin iş enerjisine dönüşmesi (maksimum 40%) kolay olmamakta ve dönüşüm hiç bir zaman tam, kendiliğinden ve sürekli olarak meydana gelmemektedir. Sıcaklık ne kadar yüksek olursa ısı

işe dönüşmesi o kadar kolaylaşmakta, dolayısıyla ısıнын kalitesi o derecede yükselmektedir.

Doğada meydana gelen olayların hangi koşullarda kendiliğinden olup olamayacağını Termodinamiğin II. kanunu belirler. II. kanun aynı zamanda, "evrende herhangi bir şey değiştirmeden bir kaynaktan alınan ısı, tümüyle işe çevrilemez" şeklinde Kelvin'in tanımlamasıyla da ifade edilebilir.

II. kanunun tanımlanması için, entropi adı verilen bir büyüklüğün varolduğu kanıtlanır. Buna göre,

- 1- Tersinir süreçlerde, kapalı bir sistemin, entropisi ile sıcaklığı ve çevre ile yaptığı ısı alış verişi arasında

$$dQ_{\text{ter}} = T dS \quad (13)$$

ilişkisi geçerlidir.

- 2- Doğal süreçlerde evrenin entropisi her zaman artar.

$$\Delta S_{\text{evren}} > 0$$

Denge durumunda olan kapalı sistemler ele alındığında,

$$\Delta S_{\text{evren}} = \Delta S_{\text{sistem}} + \Delta S_{\text{çevre}} = 0$$

sonucu elde edilir.

Entropi, tıpkı entalpi gibi sıcaklık ve basıncın fonksiyonudur. Homojen faz ve sabit kompozisyon için toplam diferansiyel;

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P dT + \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T dP \quad (14)$$

şeklindedir. Bu şartlar altında entalpi;

$$dH = T dS + V dP \quad (15)$$

olarak yazılabilir [6]. (15) No'lu denklem sabit basınç altında dT terimine bölünürse;

$$\left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P = T \cdot \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P \quad (16)$$

$$T \cdot \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P = C_p \quad \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P = \frac{C_p}{T} \quad (17)$$

sonucu elde edilir. Aynı şekilde (14) No'lu denklemin sağ tarafının ikinci terimi, Maxwell bağıntılarından faydalanarak

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P$$

olduğu görülür. Bu, aynı zamanda ideal gaz durumunda,

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T = - \frac{R}{P}$$

eşitliğiyle eş anlamlıdır. Bu durumda dS için

$$dS = \frac{C_p}{T} dT - \frac{R}{P} dP \quad (18)$$

ifadesi yazılabilir. (18) No'lu bağıntı, faz değişimlerini içermemekle birlikte ideal gazların entropi değişimlerinin hesabında genel bir eşitliktir. Eşitlik entegre edilirse,

$$S = S^\circ + \int (C_p \frac{dT}{T}) - R \int \frac{dP}{P} \quad (19a)$$

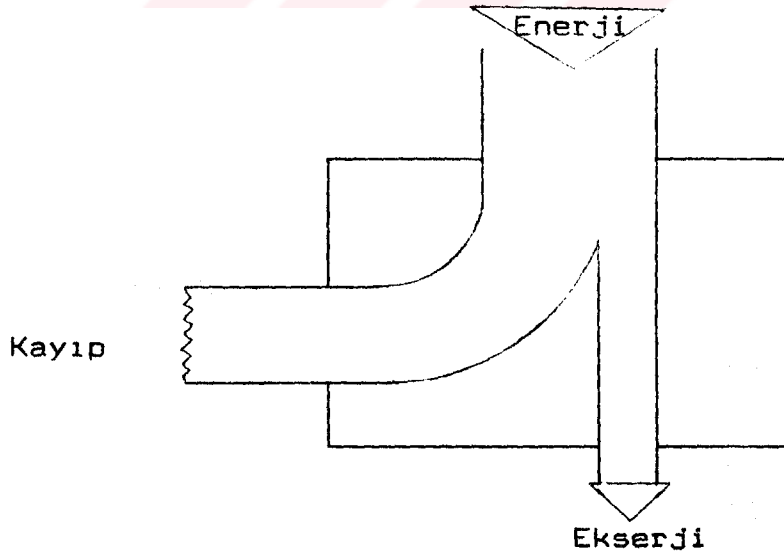
sonucu elde edilir. (19a) No'lu ifade bir reaksiyon için aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\begin{aligned} \Delta S_{r.t} &= \Delta S_{\text{ürünler}} - \Delta S_{\text{reaktanlar}} \\ &= \sum (S_{298.15} + \Delta S)_{\text{ürünler}} - \sum (S_{298.15} + \Delta S)_{\text{reaktanlar}} \end{aligned} \quad (19b)$$

2.3. EKSERJİ

Potansiyel enerjinin bir şekli olan kullanılabilir enerji (ekserji), bir maddenin (çevre ile dengede olmadığından dolayı) değişim yaratacak maksimum kapasitesini ölçen bir özelliktir. Bir yakıtın, bu yakıt ister kömür, buhar, elektrik veya yüksekte bulunan su olsun, ister diğer bir enerji türü olsun kullanılabilirliği, yakıtın kalitesini belirlemede önemli bir temel oluşturur. Bir süreçteki potansiyelin (voltaj, basınç, kimyasal, ısı, vs.) başka bir yerde kendisine eşdeğerde bir potansiyel artışı olmaksızın azalmasına izin verilirse kullanılabilir enerji yok olur, böylelikle de yakıtın kullanım verimliliği düşer [7] .

$$\text{Enerji} = \underbrace{\text{ekserji}}_{\text{iş e yarar}} + \underbrace{\text{anerji}}_{\text{iş e yaramaz}}$$



Şekil 1. Enerjinin kullanılabilirliğine ait akış şeması.

Termodinamikte kullanılabilirlik, bir enerji kaynağından, bu kaynakta bulunan bir cismin atmosferde denge haline getirilmesiyle elde edilebilecek maksimum (tersinir) iş ile aynı anlamda kullanılır [3]. Tam tersinir süreçler, ısı aktarımının, sistem sıcaklığı ancak çevre sıcaklığıyla aynı olduğunda, kütle aktarımının da sistem , ancak çevre ile aynı konsantrasyona ulaştığında meydana geldiği, bütün mekanik iş etkilerinin sürtünme olmadan ve sonsuz küçük kuvvet dengesizliğinde olduğu süreçlerdir.

Tersinir bir sürecin T_0 sıcaklığındaki bir çevrede bulunduğu varsayılırsa sistemle çevresi arasındaki ısı aktarımı T_0 sıcaklığında olacağından termodinamiğin ikinci kanununa göre (13) No'lu eşitlikten

$$Q_{r,1-0} = T_0 \Delta S_{1-0} \quad (\Delta S_{1-0} = S_0 - S_1) \quad (20)$$

yazılabilir. Burada, "0" alt indisi standart çevre koşulunu, "1" alt indisi ise herhangi bir koşulu göstermektedir. (20) No'lu denklem, hem akışsız hem de akışlı sistemler için geçerlidir.

"1" koşulunda bulunan yatışkın haldeki bir sistemin "0" çevre koşuluna getirilmesiyle elde edilecek ideal iş, (1) ile (20) No'lu denklemlerin birleştirilmesi ve kinetik enerji ile potansiyel enerji terimlerinin ihmal edilmesiyle 1 mol madde için

$$W_{10,1-0} = T_0 \Delta S_{1-0} - \Delta H_{1-0} \quad (21)$$

ifadesi yazılabilir. Ekserji ($\emptyset$) 'nin tanımından faydalanarak $\emptyset = W_{12}$ olduğu, buradan da "1" koşulundaki akışlı bir sistemin ekserjisini

$$\emptyset_1 = T \Delta S_{1-0} - \Delta H_{1-0} \quad (22)$$

şeklinde yazmak mümkündür. Bir mol madde kararlı halde, sürecin yardımıyla "1" halinden "2" haline geçerse ekserji fonksiyonundaki değişim aşağıdaki şekilde yazılabilir [5]:

$$\begin{aligned} \emptyset_{1-2} &= \emptyset_2 - \emptyset_1 \\ &= [T_0 \Delta S_{2-0} - \Delta H_{2-0}] - [T_0 \Delta S_{1-0} - \Delta H_{1-0}] \\ &= [T_0 (S_2 - S_0) - (H_2 - H_0)] - [T_0 (S_1 - S_0) - (H_1 - H_0)] \\ &= H_2 - H_1 - T_0 (S_2 - S_1) \\ &= \Delta H_{1-2} - T_0 \Delta S_{1-2} \end{aligned} \quad (23)$$

veya

$$\emptyset = \Delta H - T_0 \Delta S \quad (24)$$

Standart çevre sıcaklığı genellikle 298.16 K olarak alınır. Asıl çevre sıcaklığı T_a , 298.16 K'den farklıysa akışlı bir süreçte ekserji değişimi:

$$\Delta \emptyset_{1-2} (\text{asıl}) = \Delta H_{1-2} - T_a \Delta S_{1-2} \quad (25)$$

ΔH_{1-2} ve ΔS_{1-2} , özellik değişimi olduklarından T_a 'nın fonksiyonu değildirler. Ancak $\Delta \emptyset_{1-2}$, T_a 'nın bir fonksiyonudur. (24) denklemi (25) No'lu denklemle birleştirilirse

$$\Delta \emptyset_{1-2} (\text{asıl}) = \Delta \emptyset_{1-2} (T \text{ sıcaklığında}) + (T - T_a) \Delta S_{1-2} \quad (26)$$

elde edilir.

Bir sürecin Gibbs serbest enerjisi değişimi aşağıdaki denklemle belirtilir.

$$\Delta G = \Delta H - \Delta(TS) \quad (27)$$

Sıcaklığın sabit kalması halinde

$$\Delta G_T = \Delta H - T \Delta S$$

yazılır. $T = T_o$ olursa

$$\Delta G_{T_o} = \Delta H - T_o \Delta S \quad (28)$$

elde edilir. Bu durumda,

$$\Delta \emptyset = \Delta G_{T_o} \quad (29)$$

olur. Diğer bir deyişle T_o sabit sıcaklığında gelişen bir sürecin Gibbs serbest enerjisi değişimi, kullanılabilirlik fonksiyonundaki değişimle aynı değere sahiptir [5].

Kimyasal tepkimelerin olduğu süreçlerde kullanılabilirliği hesaplayabilmek için H_2O (l), CO_2 (g) ve SO_2 (g) gibi yanma ürünlerinin 298.16 K ve 1 atm basıncındaki saf hallerinden oluşan bir referans seçilir. Yanma ile ilgili enerji çizelgelerinde de kullanılan standart veya referans hal böyledir. Bu durumda saf bir kimyasal maddenin veya bileşiğin standart kimyasal kullanılabilirliği ($\emptyset^\circ$);

$$\emptyset^\circ = \Delta G^\circ(\text{oluşum tepkimesi}) -$$

$$\sum_i n_i \Delta G_{f,i}^\circ \quad (\text{yanma ürünlerinin oluşum tepkimeleri}) \quad (30)$$

Böylece standart kimyasal kullanılabilirlik, saf madde ve bi-

leşikler için 1 atm basınç ve 298.16 K sıcaklıkta tam yanma sonunda ortaya çıkan ürünlere göre tanımlanır. Diğer bir deyişle,

$$\emptyset^{\circ} = - \text{standart yanma Gibbs serbest enerjisi değişimi} \quad (31)$$

yazılır. Şayet element veya bileşik, standart koşullardan farklı bir koşuldaysa ekserji;

$$\emptyset_1 = \emptyset^{\circ} + \Delta \emptyset_{\sigma-1} \quad (32),$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu durumda standart kimyasal kullanılabilirliğin hesaplanması için (30) No'lu denklem bileşikler ve elementler için aşağıdaki şekilde yeniden yazılabilir:

$$\emptyset^{\circ}(\text{C}_a \text{H}_b \text{O}_c) = \Delta G_f^{\circ}(\text{C}_a \text{H}_b \text{O}_c) - [a \Delta G_f^{\circ}(\text{CO}_2(\text{g})) + b/2 \Delta G_f^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{l}))] \quad (33)$$

Bir sürecin ekserji analizi değil de salt 1. kanundan yararlanarak enerji analizi yapılacaksa akışlı bir sistem için kinetik ve potansiyel enerji terimleri ihmal edilerek,

$$\Delta E = \Delta H$$

yazılır. Herhangi iki nokta arasındaki E ve $\emptyset$ değişimlerinin birbirlerine oranı (α_E):

$$\alpha_E = \frac{\Sigma \Delta \emptyset}{\Sigma \Delta E} = \frac{\Sigma \Delta \emptyset}{\Sigma \Delta H} \quad (34)$$

ekserji oranı olarak tanımlanır.

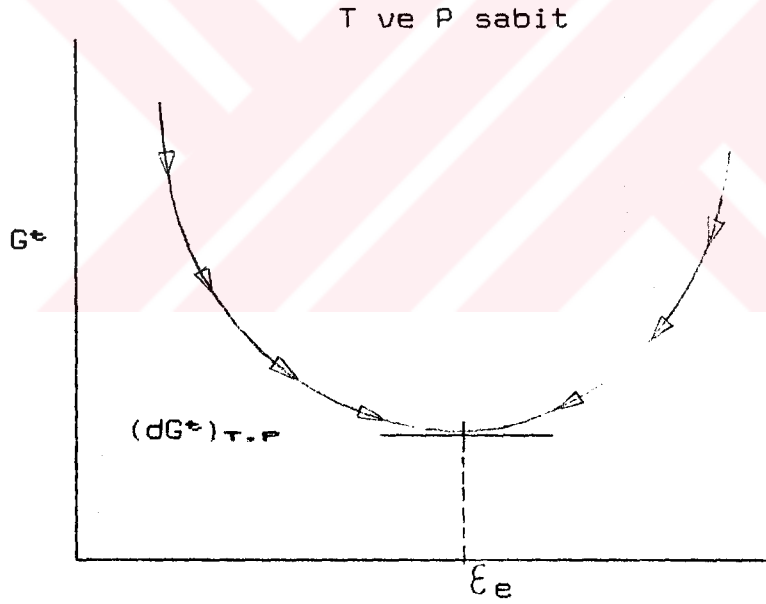
BÖLÜM 3

KİMYASAL DENGİ HESAPLAMALARI İÇİN MODEL

Tersinmez bir süreçte, kapalı bir sistemin sabit T ve P 'deki toplam Gibbs serbest enerjisinin azalma zorunluluğu vardır. Gibbs enerjisindeki bu değişim, denge durumunda sifıra eşit olur.

$$(dG^e)_{T,P} = 0 \quad (35)$$

Bunun ne anlama geldiği aşağıdaki şekilde gösterilmektedir [6].



Şekil 2. Reaksiyon koordinatına göre toplam Gibbs enerjisindeki değişim.

Reaksiyon koordinatı ξ , reaksiyonun ilerleyişini, dolayısıyla sistemin kompozisyonunu karakterize ettiğinden dolayı Gibbs enerjisi sabit T ve P 'de, ξ ile tayin edilir. Reaksiyon koordinatı, denge değerine eğrinin minimum noktasında ulaşır.

herhangi bir deęişim olmaksızın kimyasal reaksiyonda diferansiyel deęişimler olabileceğidir. Bundan amaç, bu kriter yardımıyla ξ_e deęerini ve buradan da kimyasal denge kompozisyonunu hesaplayabilmektir.

Diđer yandan, standart şartlardaki sıcaklık, denge sıcaklığı olduğundan reaksiyonun ΔG° ve ΔH° gibi standart özelliklerindeki deęişimler, denge sıcaklığı ile deęişir. ΔG° için sıcaklığa bağımlı denklem şöyledir:

$$\frac{d(\Delta G^\circ / (RT))}{dT} = \frac{-\Delta H^\circ}{R T^2} \quad (36)$$

Denge sabiti için,

$$\frac{\Delta G^\circ}{R T} = - \ln K \quad (37)$$

yazılarak (36) ve (37) Nolu eşitliklerden

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H^\circ}{R T^2} \quad (38)$$

eşitliği elde edilir. Şayet reaksiyonun standart entalpisi, sıcaklığın fonksiyonu olarak bilinirse (38) Nolu denklemin entegrasyonu

$$\ln K = \int \frac{\Delta H^\circ}{R T^2} dT + I \quad (39)$$

şeklini alır. Burada, I, entegrasyon sabitidir. Entalpi için genel ifade ise aşağıdaki şekilde verilebilir:

$$\Delta H^\circ = J + \int \Delta C_p dT \quad (40)$$

Buradaki J bir diğer entegrasyon sabitidir. (11) No'lu eşitlikteki C_p ifadesi (40) No'lu eşitlikte yerine konulup entegrasyon alınırsa

$$\frac{\Delta H^\circ}{R} = \frac{J}{R} + (\Delta A)T + \frac{\Delta B}{2} T^2 + \frac{\Delta C}{3} T^3 - \frac{\Delta D}{T} \quad (41)$$

denkliği elde edilir. Bu ifade (39) No'lu eşitlikte yerine konulursa

$$\ln K = \frac{-J}{RT} + (\Delta A)\ln T + \frac{\Delta B}{2} T + \frac{\Delta C}{6} T^2 + \frac{\Delta D}{2T^2} + I \quad (42)$$

yazılabilir ve (37) No'lu eşitlik yardımıyla Gibbs enerjisi değişimi için

$$\Delta G^\circ = J - RT \left[(\Delta A)\ln T + \frac{\Delta B}{2} T + \frac{\Delta C}{6} T^2 + \frac{\Delta D}{2T^2} + I \right] \quad (43)$$

ifadesi elde edilir. Her maddeye ait hesaplanmış J ve I sabitleri **EKLER** kısmında verilmiştir.

Tekil reaksiyonlarda denge kompozisyonunun belirlenmesi için yapılanlar Çoklu reaksiyonların denge durumlarına da uygulanabilir.

Tek fazlı bir sistemin toplam Gibbs enerjisi, aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$(dG^*)_{T,P} = G(n_1, n_2, \dots, n_N) \quad (44)$$

Buradaki problem, G^* değerini belirli T ve P değerinde minimize eden n_i değerlerini bulmaktır. Bu tip bir problemin standart çözümü, Lagrange'ın belirsiz Çarpanları metoduna dayanır.

Gaz fazı reaksiyonları için uygulanacak yol şöyledir[7]:

- Birinci adım, bağ koşulu denklemlerinin (örneğin madde dengeleri) formülasyonudur. Her ne kadar reaktif moleküler türler, kapalı bir sistemde korunmasalar da her bir elementin toplam atom sayısı sabittir. k alt indisi, sistemdeki her bir atom türü tanımlasın. Bu durumda A_k , sistem içindeki k Nolu elementin toplam atomik kütlesi şeklinde ifade edilebilir. Ayrıca, a_{ik} da i kimyasal türünün her molekülündeki atom sayısı olarak tanımlandığında k 'inci element için kütle dengesi şöyle yazılabilir:

$$\sum_i n_i a_{ik} = A_k \quad (k = 1, 2, \dots, w)$$

veya

$$\sum_i n_i a_{ik} - A_k = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, w) \quad (45)$$

- İkinci adımda, her bir element için Lagrange Çarpanı (λ_k) tanımlanarak ilgili elementin denge değeri ile çarpılır.

$$\lambda_k (\sum_i n_i a_{ik} - A_k) = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, w)$$

Bu eşitliklerin k için toplamı yazılırsa,

$$\sum_k \lambda_k (\sum_i n_i a_{ik} - A_k) = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, w)$$

elde edilir.

- Son toplam değerinin G^* 'ye ilave edilmesiyle F fonksiyonu elde edilir.

$$F = G^* + \sum_k \lambda_k (\sum_i n_i a_{ik} - A_k) = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, w)$$

Toplam teriminin değeri sıfır olduğundan F , G^* ile aynı de-

gere sahiptir. Bununla birlikte F ve G*'nin n₁'ye göre kısmi türevleri birbirinden farklıdır, çünkü F fonksiyonu, kütle dengesi bağ koşullarını içermektedir.

- F ve G*'nin minimum değerleri, F'nin n₁'ye göre kısmi türevlerinin sıfıra eşitlenmesiyle elde edilir.

$$\left[\frac{\partial F}{\partial n_1} \right]_{T,P,n_j} = \left[\frac{\partial G^*}{\partial n_1} \right]_{T,P,n_j} + \sum_k \nu_k a_{1k} = 0$$

Eşitliğin sağ tarafındaki 1. terim, kimyasal potansiyele eşittir.

$$\mu_1 + \sum_k \nu_k a_{1k} = 0 \quad (i=1,2,\dots,N) \quad (46)$$

$$\mu_1 = G_1^0 + R T \ln \hat{a}_1 \quad (47)$$

Gaz fazı reaksiyonları ve standart şartlar için (47) Nolu eşitlik

$$\mu_1 = G_1^0 + R T \ln \hat{f}_1$$

halini alır. Şayet standart şartlarda, tüm elementlerin G₁⁰ değeri keyfice sıfıra eşitlenirse bileşikler için G₁⁰ = ΔG_{r1}⁰'ye yani her bir i bileşeninin oluşum-Gibbs-enerjisi değişimine eşit olur. Buna ilaveten, fugasite de $\hat{f}_1 = y_1 \hat{\phi}_1 P$ şeklinde ifade edilip yerine konulacak olursa

$$\mu_1 = \Delta G_{r1}^0 + R T \ln(y_1 \hat{\phi}_1 P)$$

yazılabilir. Bu denklem (46) nolu denklemle birleştirilirse,

$$\Delta G_{r1}^0 + R T \ln(y_1 \hat{\phi}_1 P) + \sum_k \nu_k a_{1k} = 0 \quad (i=1,2,\dots,N) \quad (48)$$

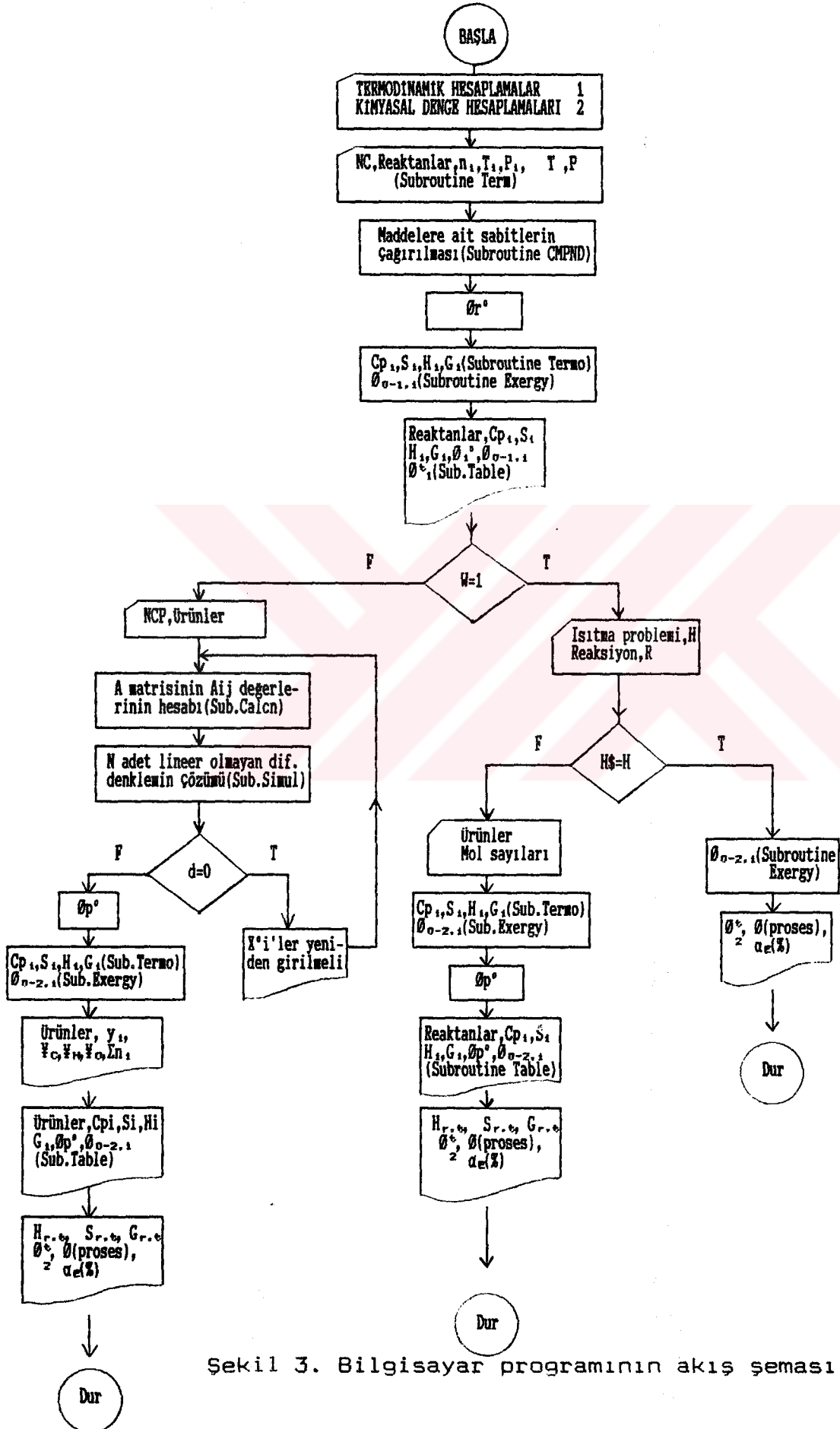
elde edilir.

i bileşeni bir element ise ΔG°_{r1} , sıfırdır. Buradaki P 'nin birimi, standart haldeki basıncın atm veya bar olmasına göre seçilir.

Tür sayısı (N) kadar denge denklemi ve eleman sayısı (w) kadar da kütle denklığı eşitliği ile toplam $N+w$ denklem elde edilir. Bilinmeyen olarak kalan y_i 'nin $y_i = n_i / \sum n_i$ şeklinde ifade edilmesiyle denklem sayısı, tüm bilinmeyenlerin belirlenmesi için yeterli hale gelir.

BÖLÜM 4

BİLGİSAYAR PROGRAMININ AKIŞ ŞEMASI



BÖLÜM 5

UYGULAMALAR

Bu bölümde üç tip uygulamaya yer verilmektedir. Uygulama 1A'da reaktif maddelerin herhangi bir sıcaklıktan başka bir sıcaklığa ısıtılmaları ile hal fonksiyonlarındaki değişimler, Uygulama 1B'de ise bir yakıtın oksijen ile tamamen yanması sonucunda ortaya çıkan standart yanma ısısı hesaplanmıştır. Uygulama 2'de, yakılmak üzere fırına verilen bir yakıtın yakılmadan önceki ve sonraki ekserjileri ile tüm sürecin ekserji kayıp yüzdesi hesaplanmıştır. Son uygulamada ise belli bir oranda reaktöre beslenen reaktiflerin reaktör şartlarındaki denge kompozisyonu hesaplanmıştır.

UYGULAMA 1A.

1 atm basınçta, subuharı, karbonmonoksit ve karbondioksitin sırasıyla 298.16 K, 700 K ve 1400 K sıcaklıkları için hal fonksiyonlarındaki molar değişimleri hesaplayalım.

ÇÖZÜM

$C_p, \Delta S$, $H - H^\circ$, ΔG_f parametrelerini hesaplamak için sırasıyla (11), (19a), (12a) ve (43) No'lu eşitliklerden yararlanılır. Elde edilen sonuçlar aşağıdaki tabloda verilmektedir.

Tablo 1.1. Maddelerin 1 atm ve 298.18 K, 700 K ile 1400 K'deki $C_p, \Delta S$, $H - H^\circ$, ΔG_f değerleri.

Bileşen	C_p (J/mol.K)	ΔS (J/mol.K)	$H - H^\circ$ (kJ/mol)	ΔG_f (kJ/mol)
T = 298.16 K				
H ₂ O	33.58	188.81	0.00	-228.59
CO	29.16	198.00	0.00	-138.97
CO ₂	37.14	213.74	0.00	-394.41
T = 700 K				
H ₂ O	37.49	218.47	14.20	-208.85
CO	31.26	223.77	12.16	-177.34
CO ₂	49.49	254.17	18.12	-395.45
T = 1400 K				
H ₂ O	45.78	247.07	43.33	-170.10
CO	34.54	246.42	35.19	-242.45
CO ₂	57.04	290.13	55.18	-396.66

UYGULAMA 1B [6].

Metanın 1 atm ve 533 K'de oksijenle tam yanmasından açığa çıkan standart yanma ısısını, ürünlerin $\text{CO}_2(\text{g})$ ve $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ olmasına göre hesaplayalım.



Şekil 4. Bir yanma tepkimesi.

ÇÖZÜM

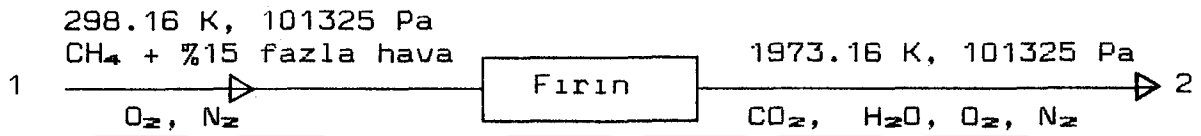
Bu problemin çözümü için (12a) ve (12b) No'lu denklemlerden yararlanılır. Gerekli hesaplamalar yapılırsa

$$\Delta H_{r, 533} = 802.277 \text{ (kJ)}$$

sonucu elde edilir.

UYGULAMA 2 [5].

Metan gazı, %15 hava fazlası ile yakılmaktadır. Metan gazı ve hava karışımı fırına 298.16 K ve 101.325 kPa'de girmekte ve tamamıyla yanarak 1973.16 K'de karbon dioksit, su buharı, oksijen ve azot karışımına dönüşmektedir (Şekil 5). Yanma ürünü olarak çıkan gazlarla fırına giren metan gazı ve hava karışımının kullanılabilirliklerini karşılaştıralım.



Şekil 5. Bir yanma tepkimesi.

CÖZÜM

Metanın yanma tepkimesi:



Hesaplamalar, 1 mol CH_4 gazı temel alınarak ve ideal gaz varsayımından yararlanarak yapılacaktır. Reaktöre giren maddelerin hesaplanmış mol sayıları, mol fraksiyonları ve kısmi basınçları Tablo 2.1'de verilmektedir.

Tablo 2.1. Maddelerin mol, mol kesirleri ve kısmi basınçları.

	Bileşen	n_i	y_i	$P_i = P \cdot y_i, \text{Pa}$
G İ R E N	CH_4	1.00	0.084	8511.3
	O_2	2.30	0.192	19454.4
	N_2	8.65	0.724	74372.55
Ç I K A N	CO_2	1.00	0.084	8511.3
	H_2O	2.00	0.167	16921.3
	O_2	0.30	0.025	2533.1
	N_2	8.65	0.724	73359.3

Reaktöre giren maddelerin ekserji hesabı (22) No'lu denklem-
den faydalanarak yapılabilir:

$$\begin{aligned}\dot{E}_{0-1.1} &= (H_1 - H_0) - T_0(S_1 - S_0) \\ &= C_{p1}(T_1 - T_0) - T_0[(C_{p1} \ln(T_1/T_0) - R \ln(P_{1.1}/P)]\end{aligned}$$

Maddelerin reaktöre giriş sıcaklığı $T_1 = T_0 = 298.16$ K olduğundan

$$\dot{E}_{0-1.1} = T_0 * R \ln(P_{1.1}/P)$$

yazılabilir. Ayrıca bu ifade elde edilen ürünler için aşağı-
daki gibidir ($T_2 = 1973.16$ K, $P = 101325$ Pa):

$$\dot{E}_{0-2.1} = C_{p1}(T_2 - T_0) - T_0[(C_{p1} \ln(T_2/T_0) - R \ln(P_{1.2}/P)]$$

Maddelerin ortalama ısı kapasiteleri (11) No'lu eşitlik kul-
lanılarak aşağıdaki ifadeden bulunabilir.

$$C_{p_m} = R \int (A + B*T + C*T^2 + D*T^{-2}) dT / (T_2 - T_1)$$

Diğer yandan standart ekserji (33) No'lu eşitlik yardımıyla

$$\dot{E}^0 = \Delta G^0(C_m H_b O_c) - [a \Delta G^0(CO_2(g)) + b/2 \Delta G^0(H_2O(l))]$$

ve her maddenin toplam ekserjisi de (32) No'lu eşitlik
yardımıyla hesaplanabilir:

$$\dot{E}_{1.1}^e = \dot{E}^0 + \Delta \dot{E}_{0-1.1}$$

Hesaplamalarda kullanılan ısı kapasitesinin karakteris-
tik sabitleri (6) No'lu kaynaktan, oluşum standart Gibbs ener-
jileri de (9) No'lu kaynaktan alınmıştır.

Yapılan hesaplamalardan elde edilen sonuçlar, Tablo 2.2' .
de verilmiştir.

Tablo 2.2. Reaktan ve ürünlerin ekserjileri.

	Ekserji Bileşen	ni mol	$\emptyset^\circ$ (J/mol)	$\emptyset_{0-1.1}$ (J/mol)	$\emptyset_{1.1}^\circ$ (J)
G İ R E N	CH ₄	1.00	817972.0	-6149.49	811822.51
	O ₂	2.30	0.0	-4084.79	-9395.00
	N ₂	8.65	0.0	-801.11	-6929.60

$$\emptyset^\circ(\text{yakıt}) = 795497.88 \text{ (J)}$$

				$\emptyset_{0-2.1}$	$\emptyset_{2.1}^\circ$
Ç İ K A N	CO ₂	1.00	0.0	53431.09	53431.09
	H ₂ O	2.00	8602.0	43044.68	103293.36
	O ₂	0.30	0.0	26030.31	7809.09
	N ₂	8.65	0.0	35797.40	309647.51

$$\emptyset^\circ(\text{yanma ürünleri}) = 474181.06 \text{ (J)}$$

Sürecin ekserjisi:

$$\begin{aligned} \emptyset^\circ &= \emptyset_{2.1}^\circ - \emptyset_{1.1}^\circ \\ &= 474181.06 - 795497.88 \\ &= -321316.82 \text{ (J)} \end{aligned}$$

Sürecin ekserji kayıp yüzdesi:

$$\begin{aligned} \emptyset \text{ (kayıp \%)} &= (-321316.82 / 795497.88) * 100 \\ &= - 40.4 \end{aligned}$$

UYGULAMA 3 [6].

CH_4 , H_2O , CO , CO_2 ve H_2 içeren bir gaz fazı için 1000 K sıcaklık ve 1 bar basınçtaki denge kompozisyonunu hesaplayalım. Reaksiyon öncesinde 2 mol CH_4 ve 3 mol H_2O bulunmaktadır.

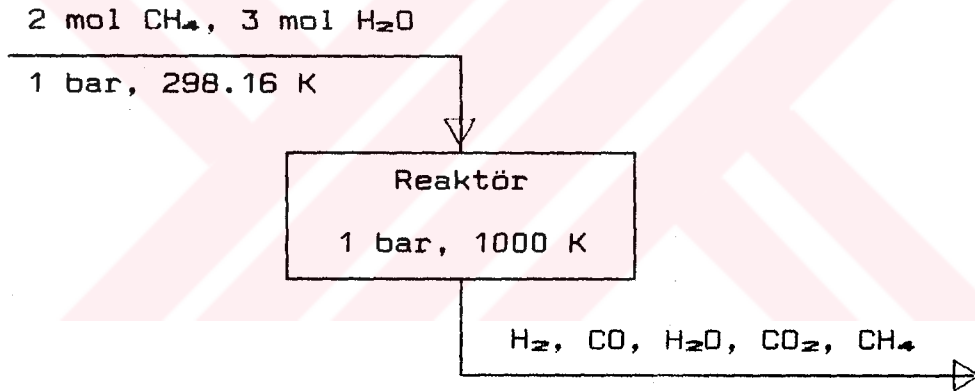
1000 K sıcaklıktaki ΔG_f° değerleri [(43) No'lu denklemden].

$$\Delta G_f^\circ(\text{CH}_4) = 19011 \text{ (J/mol)}$$

$$\Delta G_f^\circ(\text{H}_2\text{O}) = -192635 \text{ (")}$$

$$\Delta G_f^\circ(\text{CO}) = -205547 \text{ (")}$$

$$\Delta G_f^\circ(\text{CO}_2) = -396065 \text{ (")}$$



Şekil 6. Metanın subuharıyla tepkimesi.

ÇÖZÜM

Gerekli olan A_k değerleri, başlangıç mol sayılarından; a_k değerleri de türlerin kimyasal formüllerinden belirlenebilir. Bu değerler Tablo 3.1'de verilmektedir.

Tablo 3.1. Elementlerin toplam atomik kütleleri ve atom sayıları.

	Element, k		
	Karbon	Hidrojen	Oksijen
A_{1k} , sistemdeki k nolu elementin toplam atomik kütlesi.			
	2	14	3
Tür	$a_{1k,i}$ kimyasal türünün her bir molekülünde k'inci elementin atom sayısı.		
CH ₄	1	4	0
H ₂ O	0	2	1
CO	1	0	1
CO ₂	1	0	2
H ₂	0	2	0

1 bar basınç ve 1000 K'deki gazların ideal, dolayısıyla bütün $\hat{\phi}_i$ değerlerinin 1 olduğu kabul edilebilir. Bu durumda $P=1$ bar basınç için (48) No'lu eşitlik aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\Delta G^{\circ}_{T,1} + R T \ln(y_1) + \sum \nu_k \cdot a_{1k} = 0$$

Bu ifade beş ayrı bileşen için,

$$\text{CH}_4 : 19011 + R T \ln(y(\text{CH}_4)) + \nu_C + 4\nu_H + 0 = 0 \quad \{1\}$$

$$\text{H}_2\text{O} : -192635 + R T \ln(y(\text{H}_2\text{O})) + 0 + 2\nu_H + \nu_O = 0 \quad \{2\}$$

$$\text{CO} : -205547 + R T \ln(y(\text{CO})) + \nu_C + 0 + \nu_O = 0 \quad \{3\}$$

$$\text{CO}_2 : -396065 + R T \ln(y(\text{CO}_2)) + \nu_C + 0 + 2\nu_O = 0 \quad \{4\}$$

$$\text{H}_2 : 0 + R T \ln(y(\text{H}_2)) + 0 + 2\nu_H + 0 = 0 \quad \{5\}$$

halini alır. Üç adet madde dengesi için (45) No'lu eşitlikten yararlanılır.

$$C : n(CH_4) + n(CO) + n(CO_2) - 2 = 0 \quad \{ '6 \}$$

$$H : 4 n(CH_4) + 2 n(H_2O) + 2 n(H_2) - 14 = 0 \quad \{ '7 \}$$

$$O : n(H_2O) + n(CO) + 2 n(CO_2) - 3 = 0 \quad \{ '8 \}$$

Toplam mol sayısı ise

$$\Sigma n_i = n(CH_4) + n(H_2O) + n(CO) + n(CO_2) + n(H_2) \quad \{ '9 \}$$

şeklinde ifade edildikten sonra { '6 }, { '7 }, { '8 } ve { '9 } No'lu denklemler Σn_i terimine bölünürse aşağıdaki şekle dönüşürler.

$$C : y(CH_4) + y(CO) + y(CO_2) - 2/\Sigma n_i = 0 \quad \{ 6 \}$$

$$H : 4 y(CH_4) + 2 y(H_2O) + 2 y(H_2) - 14/\Sigma n_i = 0 \quad \{ 7 \}$$

$$O : y(H_2O) + y(CO) + 2 y(CO_2) - 3/\Sigma n_i = 0 \quad \{ 8 \}$$

$$y(CH_4) + y(H_2O) + y(CO) + y(CO_2) + y(H_2) - 1 = 0 \quad \{ 9 \}$$

Burada işlem kolaylığı açısından aşağıdaki semboller kullanılmıştır.

X1 : denge karışımındaki CH_4 'ün mol kesri

X2 : denge karışımındaki H_2O 'nun mol kesri

X3 : denge karışımındaki CO'nun mol kesri

X4 : denge karışımındaki CO_2 'nin mol kesri

X5 : denge karışımındaki H_2 'nin mol kesri

X6 : dengedeki toplam mol sayısı

X7 : karbon için Lagrange Çarpanı

X8 : hidrojen için Lagrange Çarpanı

X9 : oksijen için Lagrange Çarpanı

Bu durumda elde edilen 9 adet denklem, aşağıdaki formda yazılabilir:

$$f_i(X) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, 9$$

Burada $X = [X_1 \ X_2 \ X_3 \ X_4 \ X_5 \ X_6 \ X_7 \ X_8 \ X_9]^T$ ise

$$F_1(X) = -19011 + RT \ln(X_1) + X_7 + 4 X_8 = 0$$

$$F_2(X) = -192635 + RT \ln(X_2) + 2 X_8 + X_9 = 0$$

$$F_3(X) = -205547 + RT \ln(X_3) + X_7 + X_9 = 0$$

$$F_4(X) = -396065 + RT \ln(X_4) + X_7 + 2 X_9 = 0$$

$$F_5(X) = RT \ln(X_5) + 2 X_8 = 0$$

$$F_6(X) = X_1 + X_3 + X_4 - 2/X_6 = 0$$

$$F_7(X) = 4 X_1 + 2 X_2 + 2 X_5 - 14/X_6 = 0$$

$$F_8(X) = X_2 + X_3 + 2 X_4 - 3/X_6 = 0$$

$$F_9(X) = X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 - 1 = 0$$

Lineer olmayan bu 9 adet denklemin çözümü, Newton-Raphson Metodu[8] ile yapılabilir. Bunun için, elde edilen her bir fonksiyonun 9 değişkene göre kısmi türevlerinin alınması gerekir. Örneğin birinci fonksiyon için;

$$\frac{\partial F_1}{\partial X_1} = RT/X_1$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial X_5} = 0$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial X_9} = 0$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial X_2} = 0$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial X_6} = 0$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial X_3} = 0$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial X_7} = 1$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial X_4} = 0$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial X_8} = 4$$

yazılabilir. Hesaplanan bu değerler ve diğer fonksiyonların

dokuz deęiřkene gre kısmi trevleri ařaęıdaki tabloda gs-
terilmiřtir.

Tablo 3.2. Fonksiyonların her bir deęiřkene gre trevleri.

Tr	F _i '	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9
CH ₄	F1'	RT/X1	0	0	0	0	0	1	4	0
H ₂ O	F2'	0	RT/X2	0	0	0	0	0	2	1
CO	F3'	0	0	RT/X3	0	0	0	1	0	1
CO ₂	F4'	0	0	0	RT/X4	0	0	1	0	2
H ₂	F5'	0	0	0	0	RT/X4	0	0	2	0
C	F6'	1	0	1	1	0	2/X6 ²	0	0	0
H	F7'	4	2	0	0	2	14/X6 ²	0	0	0
O	F8'	0	1	1	2	0	3/X6 ²	0	0	0
Σn _i	F9'	1	1	1	1	1	0	0	0	0

Dokuz bilinmeyenli dokuz denklemin zm ile elde edilen de-
ęerler (denge karıřımındaki mol kesirleri, toplam mol sayısı
ile Lagrange arpanları) ařaęıda verilmiřtir.

$$y(\text{H}_2) = 0.6691$$

$$y(\text{CO}) = 0.1924$$

$$y(\text{H}_2\text{O}) = 0.1032$$

$$y(\text{CO}_2) = 0.0230$$

$$y(\text{CH}_4) = 0.0123$$

$$\text{¥C} = 10964.550$$

$$\text{¥H} = 1615.560$$

$$\text{¥O} = 208177.240$$

$$\Sigma n_i = 8.7834$$

BÖLÜM 6

TARTIŞMA VE SONUÇ

Uygulamalarda elde edilen bazı sonuçların, alındıkları kaynaktaki sonuçlarla, bazılarının da ($C_p, \Delta S, H - H^\circ, \Delta G_r$) JANAF Thermochemical Tables [9] ile karşılaştırılması yapılarak sonuçlar aşağıdaki tablolara aktarılmıştır.

A - Uygulama 1A'da elde edilen sonuçlar, JANAF Thermochemical Tables'daki değerlerle ($P = 1$ atm basınçta $T = 298.16$ K, $T = 700$ K ve $T = 1400$ K için), Uygulama 1B'de elde edilen sonuç da [6] No'lu kaynaktaki değerle karşılaştırılması yapılmıştır.

Tablo A.1. C_p 'lerin karşılaştırılması [C_p :J/molK].

Bileşen	Bulunan	[9]	% Sapma
---------	---------	-----	---------

$T = 298.16$ K için

H_2O	33.58	33.589	0.027
CO	29.16	29.142	0.062
CO_2	37.14	37.129	0.030

$T = 700$ K için

H_2O	37.49	37.497	0.019
CO	31.26	31.171	0.286
CO_2	49.49	49.564	0.149

$T = 1400$ K için

H_2O	45.78	46.053	0.593
CO	34.54	34.920	1.661
CO_2	57.04	57.802	1.318

Tablo A.2. Entropilerin karşılaştırılması [ΔS :J/molK].

Bileşen	Bulunan	[9]	% Sapma
---------	---------	-----	---------

T = 298.16 K için

H ₂ O	188.81	188.724	0.046
CO	198.00	197.543	0.231
CO ₂	213.74	213.685	0.026

T = 700 K için

H ₂ O	218.47	218.631	0.074
CO	223.77	222.953	0.366
CO ₂	254.17	250.663	1.399

T = 1400 K için

H ₂ O	247.07	247.300	0.093
CO	246.42	245.889	0.216
CO ₂	290.13	288.106	0.703

Tablo A.3. Entalpilerin karşılaştırılması

[H - H° :kJ/mol].

Bileşen	Bulunan	[9]	% Sapma
---------	---------	-----	---------

T = 700 K için

H ₂ O	14.20	14.192	0.056
CO	12.16	12.021	1.156
CO ₂	18.12	17.761	2.021

T = 1400 K için

H ₂ O	43.33	43.493	0.375
CO	35.19	35.338	0.419
CO ₂	55.58	55.907	0.585

Tablo A.4. Gibbs enerjilerinin karşılaştırılması

[ΔG_f :kJ/mol].

Bileşen	Bulunan	[9]	% Sapma
---------	---------	-----	---------

T = 298.16 K için

H ₂ O	-228.59	-228.589	0.000
CO	-138.97	-137.164	1.317
CO ₂	-394.41	-394.405	0.001

T = 700 K için

H ₂ O	-208.85	-208.840	0.005
CO	-177.34	-173.502	2.212
CO ₂	-395.45	-395.430	0.005

T = 1400 K için

H ₂ O	-170.10	-170.155	0.032
CO	-242.45	-235.095	3.129
CO ₂	-396.66	-396.292	0.093

Uygulama 1B için, $\Delta H_{r,t}$ [6] No'lu referansta 800.650(kJ) olarak verilmiştir. Buna göre;

$$\text{Sapma} = \frac{800.650 - 802.277}{800.650} \cdot 100 = \% 0.203$$

SONUÇ: Karşılaştırmalardan anlaşılabacağı üzere elde edilen değerlerin referanslarda belirtilen değerlerle ~% 99 oranında uyum sağladığı görülmüştür.

B - Uygulama 2'de elde edilen sonuçların [5] No'lu referans-taki sonuçlarla karşılaştırılması aşağıda verilmiştir.

Tablo B.1. Reaktif ve ürünlerin toplam ekserjilerinin karşılaştırılması [$\dot{E}_1$: J].

Bileşen		Bulunan	[5]	% Sapma
G İ R E N	CH ₄	811822.51	811822.5	0.000
	O ₂	-9395.00	-9395.0	0.000
	N ₂	-6929.60	-6929.5	0.001
Ç İ K A N	CO ₂	53431.09	53663.7	0.433
	H ₂ O	103293.36	102903.8	0.379
	O ₂	7809.09	8657.8	9.803
	N ₂	309647.51	309788.5	0.046

Sürecin toplam ekserjisindeki sapma : % 0.260

Ekserji kayıp yüzdesindeki sapma : % 0.248

C - Uygulama 3'de elde edilen sonuçların [6] No'lu referanstaki sonuçlarla karşılaştırılması aşağıda yapılmıştır.

Tablo C.1. Mol kesirlerinin ve toplam mol sayısının ((43) No'lu denklemden elde edilen ΔG_r değerleri baz alınarak) karşılaştırılması.

Bileşen	Bulunan	[6]	% Sapma
H ₂	0.6691	0.6735	0.653
CO	0.1924	0.1740	10.575
H ₂ O	0.1032	0.0983	4.985
CO ₂	0.0230	0.0372	38.172
CH ₄	0.0123	0.0200	38.500
Σn_i	8.7834	8.6505	1.536

Tablo C.2. Mol kesirlerinin ve toplam mol sayısının (Referanstaki ΔG_r değerleri baz alınarak) karşılaştırılması.

Bileşen	Bulunan	[6]	% Sapma
H ₂	0.6711	0.6735	0.356
CO	0.1743	0.1740	0.172
H ₂ O	0.0980	0.0983	0.305
CO ₂	0.0371	0.0372	0.269
CH ₄	0.0196	0.0200	2.000
Σn_i	8.6608	8.6505	0.119

SONUÇ : Tablo C.2'de belirtilen sonuçların küçük bir sapma ile hesaplandığı, Tablo C.1'dekiler için ise durumun farklı olduğu görülmektedir. Bunun nedeni, (43) No'lu denklem kullanılarak elde edilen ΔG_f değerlerindeki hatanın, ortaya çıkan doğrusal olmayan diferansiyel denklemleri çözmek için kullanılan Newton-Raphson Metodundan gelen hata ile birleşmesinden kaynaklanmaktadır.

GENEL SONUÇ

Bu çalışmada, gazlarla ilgili hesapların yapılabilmesine öncelik verilmiştir. Program, gerekli karakteristik parametrelerin girilmesi durumunda, daha fazla sayıdaki gazlara ait benzer hesapların yapılabilmesi için uygundur.

Bundan sonraki çalışmalarda gerek bu yönde ve gerekse hem sıvılar, hem de katılar için daha yönlü hesapların yapılabilmesi üzerinde durulacaktır.

KAYNAKÇA

- 1- Arıko1, M., "Ekserji Analizine Giriş", Ders Notları, İstanbul, 1982.
- 2- Dinçer, S., "Available Energy Analysis", Energy Convers. Mgmt. , Vol.25, No.3, sayfa 309-313, İngiltere, 1984.
- 3- Sussman, M.V., "Availability Analysis", TuftsUniversity, Medford, Mass., 1977.
- 4- Sussman, M.V., "Choosing a Reference Environment-State for Available-Energy Calculations", 72nd Annual Meeting AICh, California, 1979.
- 5- Dinçer, S., "Kimya Mühendisliğinde Denge Süreçlerinin Termodinamigi", B.Ü. Yayınları, İstanbul, 1984.
- 6- Smith, J.M., Van Ness ,H.C., "Introduction To Chemical Engineering Thermodynamics", 4.baskı, McGraw-Hill Book Co., Singapur, 1987.
- 7- Petit,P.J., Gaggioli,R.A.,"Second Law Procedures For Evaluating Processes", Chemtech, 1977.
- 8- Carnahan, B., Luther, H.A., Wilkes, J.O., " Applied Numerical Methods", John Wiley & Sons, USA, 1969.
- 9- Stull, D.R., Prophet, H.," JANAF Thermochemical Tables", 2.baskı, Washington, 1971.
- 10- Daubert, T.E., "Chemical Engineering Thermodynamics" 2. baskı, McGraw-Hill Book Co., Singapur, 1987.

EKLER

EK-1

Bazı maddelerin J ve I sabitleri

Bileşen	J	I
CO	-118013.530	13.4140
CO ₂	-393728.440	0.0755
H ₂ O	-237711.713	5.2355
CH ₄	-59239.490	32.5440
H ₂ , N ₂ , O ₂	0.000	0.0000

EK-2

BİLGİSAYAR PROGRAMI

```
C *****
CHARACTER*1 R$,R1$
CHARACTER*20 REA(25),PRD(25)
CHARACTER*10 FA
IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
REAL*8          MOL,MOLR,MOLP,MOLO,MOLRO,MOLPO,MLT,ML,MLN
INTEGER W

C
DIMENSION TNATOM(103),DGFO(25),DGF(25),BRO(25),BPO(25),ML(25)
DIMENSION CPA(25),CPB(25),CPC(25),CPD(25),MOLR(25),MOLP(25)
DIMENSION DCPA(25),DCPB(25),DCPC(25),DCPD(25),GJ(25),GI(25)
DIMENSION MOLO(25),HR(25),DH(25),HF(25),HS(25),DS(25),GB(25)
DIMENSION TAM(25,25),TC(25),TH(25),TO(25),T(25),MOL(25)
DIMENSION A(25,25),XOLD(25),XINC(25)

C
DATA RC,RM,P1/1.987,8.314,1./

C
WRITE(*,*) 'CON - LPT1'
C
READ (*,89) FA
FA='LPT1'
OPEN(4,FILE=FA)

9 DO 8 I=1,25
DO 8 J=1,25
TAM(I,J)=0.
8 CONTINUE
CM=0
HM=0
OM=0
THR=0
SON=0
RR=0
MOLRO=0
MOLPO=0
CEQC=0

C
WRITE(6,78)
WRITE(6,*) '          TERMODINAMIK HESAPLAMALAR ?          == [1]'
WRITE(6,*) '          KIMYASAL DENGE HESAPLAMALARI ?          == [2]'
WRITE(6,78)
READ(5,*)W
89 FORMAT(A4)
78 FORMAT(//////////)

C
C ***** TERMODINAMIK HESAPLAMALAR *****
IF(W.EQ.1) THEN
CALL TERM(W,NC,REA,PRD,P1,T1,P2,T2,R1$,T,TAM,CM,HM,OM,MOLR,MOLP,
+MOLRO,MOLPO,THR,TIA,THRC,TSRC,THPR,TSPR,FIB0,FIB1,CEQC,BPO,
+CPA,CPB,CPC,CPD,HF,HS,DGF,DCPA,DCPB,DCPC,DCPD,GJ,GI)
```

```
GO TO 99
END IF

C
C ***** KIMYASAL DENGİ HESAPLAMALARI *****
IF(W.EQ.2.AND.THR.EQ.0) THEN
CALL TERM(W,NC,REA,PRD,P1,T1,P2,T2,R1$,T,TAM,CM,HM,OM,MOLR,MOLP,
+MOLRO,MOLPO,THR,TIA,THRC,TSRC,THPR,TSPR,FIBO,FIB1,CEQC,BPO,
+CPA,CPB,CPC,CPD,HF,HS,DGF,DCPA,DCPB,DCPC,DCPD,GJ,GI)
C
NCO=NC
DO 17 J=1,25
17 MOLO(J)=1.
CALL CHEQ(MOLO,PRD,P1,T1,P2,T2,LK,NCP,TAM,TC,TH,TO,CPA,CPB,CPC,
+CPD,HF,HS,DGF0,DGF,DCPA,DCPB,DCPC,DCPD,GJ,GI,TIA)
NC=LK
DO 98 J=1,NC
98 MOL(J)=MOLO(J)
END IF
NC=LK
RT=RM*T2
C
DO 59 J=1,LK
59 BPO(J)=DGF0(J)-(TAM(J,LK+2)*(-394405)+TAM(J,LK+3)*(-237191)/2)
C
43 DO 23 I=1,NC
IF(I.LE.(NC-NC/2)) THEN
XOLD(I) = 1.5/NC
ELSE
XOLD(I) = .5/(NC*2)
END IF
23 CONTINUE
XOLD(NC+1) = MOLRO
DO 26 I=NC+2,NC+4
26 XOLD(I) = 10.
GO TO 11
WRITE(6,*)'X0 Degerlerini yeniden giriniz !'
82 DO 46 J=1,NC
WRITE(6,*)'X0(',J,')'
READ(5,*)XOLD(J)
46 CONTINUE
C
11 ITMAX=500
IND=1
EPS1=1.0E-20
EPS2=1.0E-08
N=NC+4
C
...NEWTON-RAPHSON ITERASYONU....
DO 19 ITER=1,ITMAX
C
...A MATRISININ OLUSTURULMASI ICIN ALTPROGRAM CALCN'YI CAGIR....
CALL CALCN(DGF,P2,RT,CM,HM,OM,TAM,NC,TC,TH,TO,XOLD,A,SON)
C
... JAKOBIYEN'IN HESAPLANMASI VE XINC DEGERLERININ DOGRULANMASI
ICIN ALTPROGRAM SIMUL'U CAGIR ...
CALL SIM(N,A,EPS1,IND,XINC,SIMUL)
DETER=SIMUL
```

```
IF (DETER.NE.O.) GO TO 13
WRITE (6,*)'X0 degerleri uygun degil !'
WRITE (6,*)'Yeniden giriniz. !'
RR=1
GO TO 82
C ...DONUSUMU KONTROL ET .....
13 ITCON=1
RR=1
DO 15 I=1,N
IF (ABS(XINC(I)).GT.EPS2) ITCON = 0
15 XOLD(I)=XOLD(I)+XINC(I)
IF ( ITCON.EQ.0 ) GO TO 19
GO TO 50
19 CONTINUE
GO TO 43
C
50 WRITE(6,*)'Σni=',XOLD(NC+1)
WRITE(6,*)' ¥C=',XOLD(NC+2)
WRITE(6,*)' ¥H=',XOLD(NC+3)
WRITE(6,*)' ¥O=',XOLD(NC+4)
PAUSE
C
MLT=XOLD(NC+1)
DO 36 I=1,NCO
IF(REA(I).EQ.'N2') THEN
MLT=XOLD(NC+1)+MOLR(I)
MLN=MOLR(I)
END IF
36 CONTINUE
C
DO 51 I=1,NCP
IF(PRD(I).EQ.'N2') THEN
ML(I)=MLN
ELSE
ML(I)=XOLD(NC+1)*XOLD(I)
END IF
51 CONTINUE
WRITE(6,78)
DO 24 J=1,NCP
XOLD(J)=ML(J)/MLT
WRITE(6,88)PRD(J),XOLD(J)
88 FORMAT(8H      Y (,A3,3H) =,F5.4)
24 CONTINUE
PAUSE
CEQC=1.
CALL TERM(W,NCP,REA,PRD,P1,T1,P2,T2,R1$,T,TAM,CM,HM,OM,MOLR,ML,
+MOLRO,MLT,THR,TIA,THRC,TSRC,THPR,TSPR,FIB0,FIB1,CEQC,BPO,CPA,
+CPB,CPC,CPD,HF,HS,DGF,DCPA,DCPB,DCPC,DCPD,GJ,GI)
C
99 WRITE(6,*)
WRITE(6,*)' { PROGRAMDAN CIKIS ? }   [E] veya [H] '
READ(5,100) R$
100 FORMAT(A1)
IF(R$.EQ.'H') GO TO 9
```

```
STOP
END

C
C *****
C *****
SUBROUTINE TERM(W,NC,REA,PRD,P1,T1,P2,T2,R1$,T,TAM,CM,HM,OM,MOLR,
+MOLP,MOLRO,MOLPO,THR,TIA,THRC,TSRC,THPR,TSPR,FIB0,FIB1,CEQC,BPO,
+CPA,CPB,CPC,CPD,HF,HS,DGF,DCA,DCB,DCC,DCD,GJ,GI)
CHARACTER*1 TEXT(20)
CHARACTER*1 B
CHARACTER*1 F
CHARACTER*2 D
CHARACTER*1 R$,R1$,H$
CHARACTER*2 ELEMNT(103)
CHARACTER*20 COMP(25),REA(25),PRD(25)
IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
REAL*8 MOL,MOLR,MOLRR,MOLP,MOLPP,MOLRO,MOLPO
INTEGER W,W2
COMMON/LM/ELEMNT

C
LOGICAL Y,Z
LOGICAL LCCF,LBLANK

C
DIMENSION TNATOM(103),DGF(25),TAM(25,25),MOLR(25)
DIMENSION CPA(25),CPB(25),CPC(25),CPD(25)
DIMENSION DCA(25),DCB(25),DCC(25),DCD(25),GJ(25),GI(25)
DIMENSION MOLP(25),HF(25),HS(25),T(25),MOL(25),BR0(25),BPO(25)
DIMENSION DB1(25),DB2(25),CP(25),HR(25),DS(25),GB(25)
DIMENSION CPR(25),HRP(25),DSP(25),GBP(25)

C
IF(CEQC.NE.0) GO TO 75
KH=0
THRC=0
TSRC=0
THPR=0
TSPR=0
TGRC=0
TGPR=0
FIB0=0
FIB1=0
64 DO 40 J=1,103
TNATOM(J)=0
IF(J.LE.25) T(J)=0
40 CONTINUE
DO 58 J=1,25
DO 58 JJ=1,25
58 TAM(J,JJ)=0.

C
224 L=1
IF(KH.NE.0) THEN
WRITE(6,*)'TOPLAM URUN SAYISI ?'
READ(5,*) NC
NPR=NC
LK=NC
```

```
GO TO 1
ELSE
WRITE(6,*)'TOPLAM REAKTIF SAYISI ?'
END IF
READ(5,*) NC
LK=NC
WRITE(6,*)'ILK BASINC [atm] ?'
READ(5,*) P1
WRITE(6,*)'BUTUN REAKTIFLER AYNI SICAKLIKTA MI ?'
WRITE(6,*)'[E] veya [H]'
READ(5,101) R1$
101 FORMAT(A1)
IF(R1$.EQ.'E') THEN
WRITE(6,*)'ILK SICAKLIK [K] ?'
READ(5,*) T1
END IF
C
1 CONTINUE
IF(L.GT.NC) GO TO 3
IF(KH.NE.0) THEN
WRITE(6,*)'URUN ['',L,']'
ELSE
WRITE(6,*)'REAKTIF ['',L,']'
END IF
READ(5,102) TEXT
102 FORMAT(20A1)
C
DO 7 KK=1,20
IF(KH.EQ.0) THEN
REA(L)(KK:KK)=TEXT(KK)
COMP(L)(KK:KK)=TEXT(KK)
ELSE
PRD(L)(KK:KK)=TEXT(KK)
COMP(L)(KK:KK)=TEXT(KK)
END IF
7 CONTINUE
C
IF(R1$.EQ.'H') THEN
WRITE(6,*)['',REA(L),'] ICIN ILK SICAKLIK !'
READ(5,*) T(L)
END IF
IF(KH.EQ.0) THEN
WRITE(6,*)['',REA(L),'] ICIN BASLANGIC MOL SAYISINI GIRINIZ !'
READ(5,*) MOLR(L)
MOLR0=MOLR0+MOLR(L)
ELSE
WRITE(6,*)['',PRD(L),'] ICIN MOL SAYISINI GIRINIZ !'
READ(5,*) MOLP(L)
MOLP0=MOLP0+MOLP(L)
END IF
IF(KH.EQ.0) THEN
MOL(L)=MOLR(L)
ELSE
MOL(L)=MOLP(L)
```

C END IF

```

      I=0
      I=I+1
2  CONTINUE
      B=TEXT(I)
      F=TEXT(I+1)
      Z=LCCF(F)
      IF(Z) THEN
        D=B//F
        IND=1
        I=I+2
      ELSE
        D=B//' '
        IND=1
        I=I+1
      END IF

```

C

```

      B=TEXT(I)
      Z=LBLANK(B)
      IF(Z) THEN
        DO 4 J=1,103
          IF(D.EQ.ELEMNT(J)) THEN
            IF(ELEMNT(J).EQ.'C') THEN
              TAM(L,LK+2) = IND*MOL(L)
            END IF
            IF(ELEMNT(J).EQ.'H') THEN
              TAM(L,LK+3) = IND*MOL(L)
            END IF
            IF(ELEMNT(J).EQ.'O') THEN
              TAM(L,LK+4) = IND*MOL(L)
            END IF
            TNATOM(J)=TNATOM(J)+IND*MOL(L)
          END IF
4  CONTINUE
      CALL CMPND(COMP,L,CPAA,CPBB,CPCC,CPDD,HFF,HSS,DLGF,DCPAA,DCPBB,
+DCPCC,DCPDD,GJJJ,GIII,TIA)
      CPA(L) = CPAA
      CPB(L) = CPBB
      CPC(L) = CPCC
      CPD(L) = CPDD
      HF(L) = HFF
      HS(L) = HSS
      DGF(L) = DLGF
      DCA(L) = DCPAA
      DCB(L) = DCPBB
      DCC(L) = DCPCC
      DCD(L) = DCPDD
      GJ(L) = GJJJ
      GI(L) = GIII
      IF(TIA.EQ.1) GO TO 224
      L=L+1
      GO TO 1
    END IF

```

C

```
B=TEXT(I)
CALL NUMBER(B,J,Z)
IF(.NOT.Z) GO TO 6
F=TEXT(I+1)
CALL NUMBER(F,K,Y)
IF(Y) THEN
I=I+1
IND=J*10+K
ELSE
IND=J
END IF
```

6 CONTINUE

C

```
DO 10 J=1,103
IF(D.EQ.ELEMNT(J)) THEN
IF(ELEMNT(J).EQ.'C') THEN
TAM(L,LK+2) = IND*MOL(L)
END IF
IF(ELEMNT(J).EQ.'H') THEN
TAM(L,LK+3) = IND*MOL(L)
END IF
IF(ELEMNT(J).EQ.'O') THEN
TAM(L,LK+4) = IND*MOL(L)
END IF
TNATOM(J)=TNATOM(J)+IND*MOL(L)
END IF
```

10 CONTINUE

C

```
CALL CMPND(COMP,L,CPAA,CPBB,CPCC,CPDD,HFF,HSS,DLGF,DCPAA,
+DCPBB,DCPCC,DCPDD,GJJJ,GIJJ,TIA)
DGF(L)=DLGF
IF(KH.EQ.0) THEN
BRO(L)=DGF(L)-(TAM(L,LK+2)*(-394405)/MOL(L)+TAM(L,LK+3)*
+(-237191)/(MOL(L)*2))
ELSE
BPO(L)=DGF(L)-(TAM(L,LK+2)*(-394405)/MOL(L)+TAM(L,LK+3)*
+(-237191)/(MOL(L)*2))
END IF
```

C

```
B=TEXT(I)
Z=LBLANK(B)
IF(Z) THEN
L=L+1
GO TO 1
ELSE
GO TO 2
END IF
```

3 CONTINUE

C

```
75 IF(KH.EQ.0.AND.CEQC.EQ.0) THEN
DO 5 J=1,NC
5 BPO(J)=0.
WRITE(6,*)'SON BASINC [atm] ?'
```



```
      READ(5,*) P2
      WRITE(6,*) 'SON SICAKLIK [K] ?'
      READ(5,*) T2
      CALL EXERGY(NC,MOLR,MOLR0,T1,P1,CPA,CPB,CPC,CPD,DB1)
C
      DO 48 J=1,NC
      MOLRR=MOLR(J)
      CPAA=CPA(J)
      CPBB=CPB(J)
      CPCC=CPC(J)
      CPDD=CPD(J)
      HFF=HF(J)
      HSS=HS(J)
      DCPA=DCA(J)
      DCPB=DCB(J)
      DCPC=DCC(J)
      DCPD=DCD(J)
      GJJ=GJ(J)
      GII=GI(J)
      CALL TERMO(NC,MOLRR,CPAA,CPBB,CPCC,CPDD,HFF,HSS,DCPA,DCPB,DCPC,
+DCPD,GJJ,GIJ,T1,T2,P1,P2,CPP,HRR,DSS,GBB)
      CP(J)=CPP
      HR(J)=HRR/1000
      DS(J)=DSS
      GB(J)=GBB/1000
      THRC=THRC+MOLR(J)*HF(J)/1000+HR(J)
      TSRC=TSRC+DS(J)
      TGRC=TGRC+GB(J)
      FIB0=FIB0+MOLR(J)*(BR0(J)+DB1(J))
48 CONTINUE
C
      CALL TABLE(NC,REA,PRD,CP,DS,HR,GB,BR0,BP0,DB1,DB2,KH,CEQC)
C
      WRITE(6,55)FIB0
55 FORMAT(/,21H              Ø = ,F12.3,5H (J),/)
      ELSE
      CALL EXERGY(NC,MOLP,MOLP0,T2,P2,CPA,CPB,CPC,CPD,DB2)
      DO 57 J=1,NC
      CPAA=CPA(J)
      CPBB=CPB(J)
      CPCC=CPC(J)
      CPDD=CPD(J)
      HFF=HF(J)
      HSS=HS(J)
      DCPA=DCA(J)
      DCPB=DCB(J)
      DCPC=DCC(J)
      DCPD=DCD(J)
      GJJ =GJ(J)
      GII =GI(J)
      MOLPP=MOLP(J)
      CALL TERMO(NC,MOLPP,CPAA,CPBB,CPCC,CPDD,HFF,HSS,DCPA,DCPB,DCPC,
+DCPD,GJJ,GIJ,T1,T2,P1,P2,CPP,HRR,DSS,GBB)
      CPR(J)=CPP
```

```

HRP(J)=HRR/1000
DSP(J)=DSS
GBP(J)=GBB/1000
THPR=THPR+MOLP(J)*HF(J)/1000+HRP(J)
TSPR=TSPR+DSP(J)
TGPR=TGPR+GBP(J)
FIB1=FIB1+MOLP(J)*(BPO(J)+DB2(J))
57 CONTINUE

C
CALL TABLE(NC,REA,PRD,CPR,DSP,HRP,GBP,BRO,BPO,DB1,DB2,KH,CEQC)

C
WRITE(6,55)FIB1
PAUSE
DHRC=THPR-THRC
DSRC=(TSPR-TSRC)/1000
DGRC=TGPR-TGRC
WRITE(6,8)DHRC
WRITE(6,67)DSRC
WRITE(6,74)DGRC
FTOT=FIB1-FIB0
ENLS=FTOT/FIB0*100
WRITE(6,68)FTOT
IF(ENLS.LT.0) THEN
WRITE(6,79)ENLS
ELSE
WRITE(6,84)ENLS
END IF
8 FORMAT(/,21H      H(r,toplam) = ,F12.3,6H (kJ))
67 FORMAT(/,21H      S(r,toplam) = ,F12.3,6H (kJ))
68 FORMAT(/,21H      Ø (PROSES) = ,F12.3,5H (J),/)
74 FORMAT(/,21H      G(r,toplam) = ,F12.3,6H (kJ),///)
79 FORMAT(/,23H      Ø (KAYIP) = % ,F10.1,///)
84 FORMAT(/,23H      Ø (ARTIŞ) = % ,F10.1,///)
GO TO 49
END IF

C
DO 20 J=1,103
IF(TNATOM(J).NE.0) THEN
IF (ELEMNT(J).EQ.'C') CM=TNATOM(J)
IF (ELEMNT(J).EQ.'H') HM=TNATOM(J)
IF (ELEMNT(J).EQ.'O') OM=TNATOM(J)
END IF
20 CONTINUE

C
THR=1
IF(W.EQ.2) GO TO 49
IF(KH.EQ.0) THEN
WRITE(6,*)'ILGILI PROBLEM ISITMA PROBLEMI MI yoksa'
WRITE(6,*)'BIR REAKSIYON MU ?'
WRITE(6,*)'ISITMA      == [H]'
WRITE(6,*)'REAKSIYON == [R]'
READ(5,101) H$
IF(H$.EQ.'H') THEN
CALL EXERGY(NC,MOLR,MOLRO,T2,P2,CPA,CPB,CPC,CPD,DB2)

```

```
DO 65 J=1,NC
65 FIB1=FIB1+MOLR(J)*(BR0(J)+DB2(J))
WRITE(6,55)FIB1
FTOT=FIB1-FIB0
ENLS=FTOT/FIB0*100
WRITE(6,68) FTOT
IF(ENLS.LT.0) THEN
WRITE(6,79)
ELSE
WRITE(6,84) ENLS
END IF
ELSE
WRITE(6,*)'URUN MOL SAYILARININ BILINMESI GEREKIR !'
WRITE(6,*)'BILINIYOR — [E] / BILINMIYOR — [H]'
READ(5,101) H$
IF(H$.EQ.'E') THEN
KH=12
GO TO 64
ELSE
WRITE(6,*)'MOL SAYILARINI HESAPLAYABILMEK ICIN, BU PROGRAMIN'
WRITE(6,*)'KIMYASAL DENG E HESAPLAMALARI KISMINI SECMEZ GEREKIR'
GO TO 49
END IF
END IF
END IF
C
49 RETURN
END
C
C *****
SUBROUTINE CHEQ(MOLO,PRD,P1,T1,P2,T2,LK,NCP,TAM,TC,TH,TO,CPA,
+CPB,CPC,CPD,HF,HS,DGFO,DGF,DCPA,DCPB,DCPC,DCPD,GJ,GI,TIA)
CHARACTER*1 TEXT(20)
CHARACTER*1 B
CHARACTER*1 F
CHARACTER*2 D
C
CHARACTER*1 STR(25),STP(25)
CHARACTER*2 ELEMNT(103)
CHARACTER*20 COMP(25),PRD(25)
IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
REAL*8 MOLO,MOLPO
COMMON/LM/ELEMNT
C
LOGICAL Y,Z
LOGICAL LCCF,LBLANK
C
DIMENSION TNATOM(103),MOLO(25),TAM(25,25),TC(25),TH(25),TO(25)
DIMENSION CPA(25),CPB(25),CPC(25),CPD(25),HF(25),HS(25),DGF(25)
DIMENSION DCPA(25),DCPB(25),DCPC(25),DCPD(25),GJ(25),GI(25)
DIMENSION DGFO(25)
C
223 DO 80 J=1,103
DO 80 JJ=1,25
IF(JJ.LE.25) THEN
```

```
TC(JJ)=0
TH(JJ)=0
TO(JJ)=0
END IF
TNATOM(J)=0
80 CONTINUE
C
  L=1
  JK=0
  WRITE(6,*)'TOPLAM URUN SAYISI ?'
  READ(5,*) NC
  LK=NC
C
201 CONTINUE
  I=0
  IF((L+JK).GT.NC) GO TO 203
  WRITE(6,*)'URUN [' ,L+JK,']'
  READ(5,103) TEXT
103 FORMAT(20A1)
C
  DO 72 KK=1,20
    PRD(L)(KK:KK)=TEXT(KK)
    COMP(L)(KK:KK)=TEXT(KK)
  72 CONTINUE
C
  IF(PRD(L).EQ.'N2') THEN
    JK=1
C
    L=L-1
    LK=NC-1
    GO TO 201
  END IF
C
  I=I+1
C
202 CONTINUE
  B=TEXT(I)
  F=TEXT(I+1)
  Z=LCCF(F)
  IF(Z) THEN
    D=B//F
    IND=1
    I=I+2
  ELSE
    D=B//' '
    IND=1
    I=I+1
  END IF
C
  B=TEXT(I)
  Z=LBLANK(B)
  IF(Z) THEN
    DO 204 J=1,103
      IF(D.EQ.ELEMNT(J)) THEN
        IF(D.EQ.'C') THEN
```

```
TAM(L,LK+2) = IND*MOLO(L)
TC(L)=1
END IF
IF(D.EQ.'H') THEN
TAM(L,LK+3) = IND*MOLO(L)
TH(L)=1
END IF
IF(D.EQ.'O') THEN
TAM(L,LK+4) = IND*MOLO(L)
TO(L)=1
END IF
TNATOM(J)=TNATOM(J)+IND*MOLO(L)
END IF
204 CONTINUE
CALL CMPND(COMP,L,CPAA,CPBB,CPCC,CPDD,HFF,HSS,DLGF,DCPAA,DCPBB,
+DCPCC,DCPDD,GJJJ,GIII,TIA)
CPA(L)= CPAA
CPAP=CPAA
CPB(L)= CPBB
CPBP=CPBB
CPC(L)= CPCC
CPCP=CPCC
CPD(L)= CPDD
CPDP=CPDD
HF(L)= HFF
HFP=HFF
HS(L)= HSS
HSP=HSS
DCPA(L)=DCPAA
DCAP=DCPAA
DCPB(L)= DCPBB
DCBP=DCPBB
DCPC(L)= DCPCC
DCCP=DCPCC
DCPD(L)= DCPDD
DCDP=DCPDD
GJ(L)= GJJJ
GJP=GJJJ
GI(L)= GIII
GIP=GIII
MOLPO=MOLO(L)
DGFO(L)=DLGF
CALL TERMO(NC,MOLPO,CPAP,CPBP,CPCP,CPDP,HFP,HSP,DCAP,DCBP,DCCP,
+DCDP,GJP,GIP,T1,T2,P1,P2,CPP,HRR,DSS,GBB)
DGF(L)=GBB
IF(TIA.EQ.1) GO TO 223
L=L+1
GO TO 201
END IF
C
B=TEXT(I)
CALL NUMBER(B,J,Z)
IF(.NOT.Z) GO TO 206
F=TEXT(I+1)
```

```
CALL NUMBER(F,K,Y)
IF(Y) THEN
  I=I+1
  IND=J*10+K
ELSE
  IND=J
END IF
206 CONTINUE
C
DO 210 J=1,103
  IF(D.EQ.ELEMNT(J)) THEN
    IF(ELEMNT(J).EQ.'C') THEN
      TAM(L,LK+2) = IND*MOLO(L)
      TC(L)=1
    END IF
    IF(ELEMNT(J).EQ.'H') THEN
      TAM(L,LK+3) = IND*MOLO(L)
      TH(L)=1
    END IF
    IF(ELEMNT(J).EQ.'O') THEN
      TAM(L,LK+4) = IND*MOLO(L)
      TO(L)=1
    END IF
    TNATOM(J)=TNATOM(J)+IND*MOLO(L)
  END IF
210 CONTINUE
C
B=TEXT(I)
Z=LBLANK(B)
IF(Z) THEN
  L=L+1
  GO TO 201
ELSE
  GO TO 202
END IF
203 CONTINUE
C
DO 230 I=LK+1,LK+3
DO 230 J=1,LK
230 TAM(I,J)=TAM(J,I+1)
C
IF(LK.NE.NC) THEN
  PRD(NC)='N2'
END IF
NCP=NC
RETURN
END
C
C *****
LOGICAL FUNCTION LCCF(AB)
CHARACTER*1 AB
LOGICAL B
B=.FALSE.
IF(AB.EQ.'a') B=.TRUE.
```

```
IF(AB.EQ.'b') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'c') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'d') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'e') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'f') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'g') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'h') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'i') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'j') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'k') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'l') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'m') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'n') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'o') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'p') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'q') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'r') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'s') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'t') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'u') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'v') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'w') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'x') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'y') B=.TRUE.
IF(AB.EQ.'z') B=.TRUE.
LCCF=B
RETURN
END
```

C

```
LOGICAL FUNCTION LBLANK(AB)
CHARACTER*1 AB
LOGICAL B
B=AB.EQ.' '
LBLANK=B
RETURN
END
```

C

```
SUBROUTINE NUMBER(AB,J,B)
CHARACTER*1 AB
LOGICAL B
B=.FALSE.
IF(AB.EQ.'0') THEN
J=0
B=.TRUE.
END IF
IF(AB.EQ.'1') THEN
J=1
B=.TRUE.
END IF
IF(AB.EQ.'2') THEN
J=2
B=.TRUE.
END IF
IF(AB.EQ.'3') THEN
```

```
J=3
B=.TRUE.
END IF
IF(AB.EQ.'4') THEN
J=4
B=.TRUE.
END IF
IF(AB.EQ.'5') THEN
J=5
B=.TRUE.
END IF
IF(AB.EQ.'6') THEN
J=6
B=.TRUE.
END IF
IF(AB.EQ.'7') THEN
J=7
B=.TRUE.
END IF
IF(AB.EQ.'8') THEN
J=8
B=.TRUE.
END IF
IF(AB.EQ.'9') THEN
J=9
B=.TRUE.
END IF
RETURN
END
```

C

```
SUBROUTINE CMPND(CMPN,L,CAPA,CAPB,CAPC,CAPD,HOF,ENT,DELGF,DCAPA,
+DCAPB,DCAPC,DCAPD,GJJ,GII,TIA)
CHARACTER*20 CMPN(25)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
TIA=0
IF(CMPN(L).EQ.'CH4') THEN
CAPA = 1.702
CAPB = 9.081E-3
CAPC = -2.164E-6
CAPD = 0.
HOF = -74873.
ENT = 186.28
DELGF=-50815.
DCAPA=-6.567
DCAPB=7.466E-3
DCAPC=-2.164E-6
DCAPD=0.701E5
GGJ=-59239.49
GII=32.544
GO TO 41
END IF
IF(CMPN(L).EQ.'CO') THEN
CAPA = 3.376
CAPB = .557E-3
```



```
CAPC = 0.
CAPD = -0.031E+5
HOF = -110529.
ENT = 198.
DELGF=-137626.67
DCAPA=-0.2145
DCAPB=-0.467E-3
DCAPC=0.
DCAPD=0.6495E5
GJJ=-108013.53
GII=13.414
GO TO 41
END IF
IF(CMPN(L).EQ.'CO2') THEN
CAPA = 5.457
CAPB = 1.045E-3
CAPC = 0.
CAPD = -1.157E+5
HOF = -393522.
ENT = 213.74
DELGF=-394405.
DCAPA=0.047
DCAPB=-0.232E-3
DCAPC=0.
DCAPD=-0.063E5
GJJ=-393728.44
GII=0.0755
GO TO 41
END IF
IF(CMPN(L).EQ.'H2') THEN
CAPA = 3.249
CAPB = 0.422E-3
CAPC = 0.
CAPD = 0.083E+5
HOF = 0.
ENT = 130.649
DELGF=0.
DCAPA=0.
DCAPB=0.
DCAPC=0.
DCAPD=0.
GJJ=0.
GII=0.
GO TO 41
END IF
IF(CMPN(L).EQ.'O2') THEN
CAPA = 3.269
CAPB = 0.506E-3
CAPC = 0.
CAPD = -0.227E+5
HOF = 0.
ENT = 205.127
DELGF= 0.
DCAPA=0.
```

```
DCAPB=0.
DCAPC=0.
DCAPD=0.
GJJ=0.
GII=0.
GO TO 41
END IF
IF(CMPN(L).EQ.'N2') THEN
CAPA = 3.28
CAPB = 0.593E-3
CAPC = 0.
CAPD = 0.04E+5
HOF = 0.
ENT = 191.581
DELGF = 0.
DCAPA=0.
DCAPB=0.
DCAPC=0.
DCAPD=0.
GJJ=0.
GII=0.
GO TO 41
END IF
IF(CMPN(L).EQ.'H2O') THEN
CAPA = 3.47
CAPB = 1.450E-3
CAPC = 0.
CAPD = 0.121E+5
HOF = -241814.
C HOF(1) = -285830.
ENT = 188.814
C ENT(1) = 76.026
DELGF=-228589.
DCAPA=-1.6
DCAPB=0.775E-3
DCAPC=0.
DCAPD=0.1515E5
GJJ=-237711.713
GII=5.2355
GO TO 41
ELSE
WRITE(6,*)'BU BILESEN DATA BANKTA YOKTUR !'
WRITE(6,*)
WRITE(6,*)'PROBLEMİNİZİ GOZDEN GECİRİNİZ !'
TIA=1
CAPA = 0.
CAPB = 0.
CAPC = 0.
CAPD = 0.
HOF = 0.
ENT = 0.
DELGF= 0.
DCAPA=0.
DCAPB=0.
```

```
DCAPC=0.
DCAPD=0.
GJJ=0.
GII=0.
END IF
41 CONTINUE
RETURN
END

C
C ***** TERMODINAMIK OZELLIKLERIN HESAPLANMASI *****
SUBROUTINE TERMO(NC,MOL,CA,CB,CC,CD,CF,HS,DA,DB,DC,DD,JJ,II,
+T1,T2,P1,P2,CP,HR,DS,GB)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 MOL,JJ,II

C
RM=8.314
CALL HCP(CA,CB,CC,CD,T1,T2,EL,EV,EEV)
CP=EL
HR=MOL*EV*(T2-T1)
DS=MOL*(HS+EV*DLOG(T2/T1)-RM*DLOG(P2/P1))
GB=MOL*(JJ-RM*T2*(DA*DLOG(T2)+DB/2*T2+DC/6*T2**2+DD/(2*T2**2)+
+II))

C
RETURN
END

C
C ***** CP HESAPLAMALARI *****
SUBROUTINE HCP(CA,CB,CC,CD,T1,T2,EL,EV,EEV)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
T2=T2+0.0011
EL=8.314*(CA+CB*T2+CC*T2**2+CD/(T2**2))
TMA=(T1+T2)/2
EV=8.314*(CA+CB*TMA+CC/3*(4*TMA**2-T1*T2)+CD/(T1*T2))
TMS=(T2-T1)/2
TLM=(T2-T1)/DLOG(T2/T1)
EEV=8.314*(CA+CB*TLM+TMS*(CC+CD/(T1*T2)**2))

C
RETURN
END

C
C ***** EKSERJİ HESAPLAMALARI *****
SUBROUTINE EXERGY(NC,MOL,MOLOT,T1,T2,P,CPA,CPB,CPC,CPD,DB)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
REAL*8 MOL,MOLOT
DIMENSION CPA(25),CPB(25),CPC(25),CPD(25),MOL(25),DB(25)
RM=8.314
PO=P*101325
TI=T2
DO 47 IJ=1,NC
CA=CPA(IJ)
CB=CPB(IJ)
CC=CPC(IJ)
CD=CPD(IJ)
CALL HCP(CA,CB,CC,CD,T1,T2,EL,EV,EEV)
```

```

      PI=MOL(IJ)/MOLOT*PO
      DB(IJ)=EV*(TI-298.16)-298.16*(EV*DLOG(TI/298.16)-RM*
+DLOG(PI/PO))
47 CONTINUE
C
      RETURN
      END
C
C ***** TABLOLAR *****
      SUBROUTINE TABLE(N,REA,PRD,CP,DS,HR,GB,BRO,BPO,DB1,DB2,KH,CEQC)
      CHARACTER*20 REA(25),PRD(25)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
C
      DIMENSION CP(25),DS(25),HR(25),GB(25)
      DIMENSION BRO(25),BPO(25),DB1(25),DB2(25)
C
      WRITE(6,39)
39 FORMAT(//////)
      WRITE(6,*)'Bilesen      Cp      Entropi      (H - H°)      Gibbs En.
+      Ø°      Ø(o-i)      '
      WRITE(6,*)'      (J/molK)      (J/K)      (kJ)      (kJ)
+      (J)      (J)      '
      WRITE(6,*)'-----
+      -----'
C
      DO 90 J=1,N
      IF(KH.EQ.0.AND.CEQC.EQ.0) THEN
      WRITE(6,69)REA(J),CP(J),DS(J),HR(J),GB(J),BRO(J),DB1(J)
69 FORMAT(A5,6F12.2)
      ELSE
      WRITE(6,69)PRD(J),CP(J),DS(J),HR(J),GB(J),BPO(J),DB2(J)
      END IF
90 CONTINUE
      WRITE(6,39)
C
      RETURN
      END
C
C *****
      SUBROUTINE CALCN(DGF,P,RT,CM,HM,OM,TAM,NC,TC,TH,TO,DXOLD,A,RES)
      IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
      DIMENSION XOLD(25),DGF(25),DXOLD(25),TAM(25,25),TC(25),TH(25)
      DIMENSION TO(25),A(25,25),CCM(25),HHM(25),OOM(25)
C
      ..... DXOLD DEGERLERININ XOLD'A ATANMASI .....
      DO 31 I=1, NC+4
      XOLD(I)=DXOLD(I)
      DO 31 J=1,NC+5
      IF (I.LE.NC.AND.XOLD(I).LT.0) THEN
      RES = 1.
      RETURN
      END IF
31 A(I,J) = 0.
C
      .....A'NIN SIFIR OLMAYAN ELEMANLARININ HESAPLANMASI

```

```

DO 92 I=1,NC
DO 92 J=1,NC+5
IF (I.EQ.J) A(I,J) = RT/XOLD(I)
IF (J.EQ.NC+5) THEN
A(I,J) = -RT*DLOG(XOLD(I)*P)-TAM(I,NC+2)*XOLD(NC+2)-TAM(I,NC+3)
+*XOLD(NC+3)-TAM(I,NC+4)*XOLD(NC+4)-DGF(I)
GO TO 92
END IF
IF (J.EQ.NC+2) A(I,J) = TAM(I,J)
IF (J.EQ.NC+3) A(I,J) = TAM(I,J)
IF (J.EQ.NC+4) A(I,J) = TAM(I,J)
92 CONTINUE
C
TOPC = 0.
TOPH = 0.
TOPO = 0.
TOPN = 0.
C
DO 83 J=1,NC
CCM(J)=0.
HHM(J)=0.
OOM(J)=0.
83 CONTINUE
C
DO 61 J=1,NC
IF(TC(J).EQ.1) THEN
CCM(J) = TAM(NC+1,J)*XOLD(J)
END IF
61 CONTINUE
C
DO 62 J=1,NC
IF(TH(J).EQ.1) THEN
HHM(J) = TAM(NC+2,J)*XOLD(J)
END IF
62 CONTINUE
C
DO 63 J=1,NC
IF(TQ(J).EQ.1) THEN
OOM(J) = TAM(NC+3,J)*XOLD(J)
END IF
63 CONTINUE
C
DO 56 J=1,NC
TOPC = TOPC+CCM(J)
TOPH = TOPH+HHM(J)
TOPO = TOPO+OOM(J)
56 CONTINUE
C
DO 94 I=NC+1,NC+3
DO 94 J=1,NC+5
IF(J.EQ.(NC+5)) GO TO 76
IF(I.EQ.(NC+1).AND.J.EQ.(NC+1)) THEN
A(I,J) = CM/XOLD(NC+1)**2
GO TO 94
END IF

```

```

      IF(I.EQ.(NC+2).AND.J.EQ.(NC+1)) THEN
      A(I,J) = HM/XOLD(NC+1)**2
      GO TO 94
      END IF
      IF(I.EQ.(NC+3).AND.J.EQ.(NC+1)) THEN
      A(I,J) = OM/XOLD(NC+1)**2
      ELSE
      A(I,J) = TAM(J,I+1)
      END IF
      GO TO 94
76 IF(I.EQ.(NC+1)) THEN
      A(I,J) = -TOPC+CM/XOLD(NC+1)
      ELSE
      IF(I.EQ.(NC+2)) THEN
      A(I,J) = -TOPH+HM/XOLD(NC+1)
      ELSE
      A(I,J) = -TOPO+OM/XOLD(NC+1)
      END IF
      END IF
94 CONTINUE
C
      DO 35 I=1,NC
      35 TOPN=TOPN+XOLD(I)
C
      DO 73 J=1,NC+5
      IF(J.EQ.(NC+5)) THEN
      A(NC+4,NC+5) = 1-TOPN
      ELSE
      IF(J.LE.NC) THEN
      A(NC+4,J) = 1.
      ELSE
      A(NC+4,J) = 0.
      END IF
      END IF
73 CONTINUE
C
      RETURN
      END

C *****
      SUBROUTINE SIM(N,A,EPS,INDIC,X,SIMUL)

      IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
      DIMENSION IROW(50), JCOL(50), JORD(50), Y(50), A(25,25), X(N)
C
      MAX=N
      IF ( INDIC.GE.0 ) MAX = N+1
C
      .....N 50'DEN BUYUK MU ? .....
      IF (N.LE.50) GO TO 44
      WRITE (6,200)
      SIMUL=0.
      RETURN
C
      .....ELIMINASYON ISLEMLERI .....
44 DETER=1.

```

```

DO 18 K=1,N
KM1=K-1
C      ....PIVOT ELEMENTIN ARANMASI ....
PIVOT=0.
DO 91 I=1,N
DO 91 J=1,N

C      ....UYGUN PIVOT ICIN IROW AND JCOL ARRAY'LERININ TARANMASI...
IF (K.EQ.1) GO TO 54
DO 66 ISCAN= 1, KM1
DO 66 JSCAN= 1, KM1
IF ( I.EQ.IROW(ISCAN) ) GO TO 91
IF ( J.EQ.JCOL(JSCAN) ) GO TO 91
66 CONTINUE
54 IF (DABS(A(I,J)).LE.DABS(PIVOT)) GO TO 91
PIVOT=A(I,J)
IROW(K)=I
JCOL(K)=J
91 CONTINUE
C      ....SECILMIS PIVOT'UN EPS'DEN BUYUK OLMASI GEREKIR.....
IF (DABS(PIVOT).GT.EPS) GO TO 14
SIMUL=0.
RETURN
C      ....DETERMINANT DEGERININ BELIRLENMESI.....
14 IROWK=IROW(K)
JCOLK=JCOL(K)
DETER=DETER*PIVOT
C      .... PIVOT SIRA ELEMENTLERININ NORMALIZE EDILMESI.....
DO 25 J=1, MAX
A(IROWK,J)=A(IROWK,J)/PIVOT
25 CONTINUE
C      .... ELIMINASYONA DEVAM EDEREK INVERS MATRISIN OLUSTURULMASI..
A(IROWK,JCOLK)=1./PIVOT
DO 18 I=1,N
AIJCK=A(I,JCOLK)
IF ( I.EQ.IROWK ) GO TO 18
A(I,JCOLK)=-AIJCK/PIVOT
DO 22 J=1,MAX
IF ( J.NE.JCOLK ) A(I,J)=A(I,J)-AIJCK*A(IROWK,J)
22 CONTINUE
18 CONTINUE
C
DO 70 I=1,N
IROWI=IROW(I)
JCOLI=JCOL(I)
JORD(IROWI)=JCOLI
70 IF ( INDIC.GE.0 ) X(JCOLI)=A(IROWI,MAX)
C      .... DETERMINANT ISARETININ BELIRLENMESI ....
INTCH=0
NM1=N-1
DO 33 I=1,NM1
IP1=I+1
DO 33 J=IP1,N
IF ( JORD(J).GE.JORD(I) ) GO TO 33

```

```
JTEMP=JORD(J)
JORD(J)=JORD(I)
JORD(I)=JTEMP
INTCH=INTCH + 1
33 CONTINUE
IF ( INTCH/2*2.NE.INTCH ) DETER=-DETER
C ..... INDIC, POSITIF ISE SONUCLARLA GERI DON .....
IF ( INDIC.LE.0 ) GO TO 86
SIMUL=DETER
RETURN
C ..... INDIC, NEGATIF VEYA SIFIR ISE INVERS MATRISI ONCE
C ..... SIRA ELEMENLARLA CARP .....
86 DO 38 J=1,N
DO 37 I=1,N
IROWI=IROW(I)
JCOLI=JCOL(I)
37 Y(JCOLI)=A(IROWI,J)
DO 38 I=1,N
38 A(I,J)=Y(I)
C .....SONRA KOLON ELEMENLARLA....
DO 29 I=1,N
DO 28 J=1,N
IROWJ=IROW(J)
JCOLJ=JCOL(J)
28 Y(IROWJ)=A(I,JCOLJ)
DO 29 J=1,N
29 A(I,J)=Y(J)
C .....INDIC, NEGATIVE VEYA SIFIR ISE GERI DON .....
SIMUL=DETER
RETURN
END
C

BLOCK DATA
CHARACTER*2 ELMN(103)
COMMON/LM/ELMN
DATA ELMN/'H ','He','Li','Be','B ','C ','N ','O ','F ','Ne','Na',
+'Mg','Al','Si','P ','S ','Cl','Ar','K ','Ca','Sc','Ti','V ','Cr',
+'Mn','Fe','Co','Ni','Cu','Zn','Ga','Ge','As','Se','Br','Kr','Rb',
+'Sr','Y ','Zr','Nb','Mo','Tc','Ru','Rh','Pd','Ag','Cd','In','Sn',
+'Sb','Te','I ','Xe','Cs','Ba','La','Ce','Pr','Nd','Pm','Sm','Eu',
+'Gd','Tb','Dy','Ho','Er','Tm','Yb','Lu','Hf','Ta','W ','Re','Os',
+'Ir','Pt','Au','Hg','Tl','Pb','Bi','Po','At','Rh','Fr','Ra','Ac',
+'Th','Pa','U ','Np','Pu','Am','Cm','Bk','Cf','Es','Fm','Md','No',
+'Lw'/'
END
```

NOT: BU PROGRAM'DA KULLANILAN STANDART ENTROPI DEGERLERI
(10) NO'LU KAYNAKTAN ALINMISTIR.

EK-3

UYGULAMALARIN BILGISAYAR ÇIKTISI

UYGULAMA 1A.

TERMODINAMİK HESAPLAMALAR ? == [1]
KİMYASAL DENGİ HESAPLAMALARI ? == [2]

1
TOPLAM REAKTİF SAYISI ?
3
İLK BASINÇ [atm] ?
1.00
BUTUN REAKTİFLER AYNI SICAKLIKTA MI ?
[E] veya [H]
E
İLK SICAKLIK [K] ?
298.16

REAKTİF [1] = ?
H2O

[H2O] İÇİN BASLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
1.00

REAKTİF [2] = ?
CO

[CO] İÇİN BASLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
1.00

REAKTİF [3] = ?
CO2

[CO2] İÇİN BASLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
1.00
SON BASINÇ [atm] ?
1.00
SON SICAKLIK [K] ?
298.16

Bilesen	Cp (J/molK)	Entropi (J/K)	(H - H°) (kJ)	Gibbs En. (kJ)	Ø° (J)	Ø(o-i) (J)
H2O	33.58	188.81	0.00	-228.59	8602.00	-2723.35
CO	29.16	198.00	0.00	-138.97	256778.33	-2723.35

CO2	37.14	213.74	0.00	-394.41	0.00	-2723.35
-----	-------	--------	------	---------	------	----------

$$\emptyset = 257210.271 \text{ (J)}$$

ILGILI PROBLEM ISITMA PROBLEMI MI yoksa

BIR REAKSIYON MU ?

ISITMA [H]

REAKSIYON [R]

H

$$\emptyset = 257210.271 \text{ (J)}$$

$$\emptyset \text{ (PROSES)} = 0.000 \text{ (J)}$$

$$\emptyset \text{ (KAYIP)} = \% 0.0$$

{ PROGRAMDAN CIKIS ? } [E] veya [H]

H

TERMODINAMIK HESAPLAMALAR ? [1]

KIMYASAL DENGES HESAPLAMALARI ? [2]

1

TOPLAM REAKTIF SAYISI ?

3

ILK BASINC [atm] ?

1.00

BUTUN REAKTIFLER AYNI SICAKLIKTA MI ?

[E] veya [H]

E

ILK SICAKLIK [K] ?

298.16

REAKTIF [1] = ?

H2O

[H2O] ICIN BASLANGIC MOL SAYISINI GIRINIZ !

1.00

REAKTIF [2] = ?

CO

[CO] ICIN BASLANGIC MOL SAYISINI GIRINIZ !

1.00

REAKTIF [3] = ?

CO2

[CO2] ICIN BASLANGIC MOL SAYISINI GIRINIZ !

1.00
SON BASINC [atm] ?
1.00
SON SICAKLIK [K] ?
700.00

Bilesen	Cp (J/molK)	Entropi (J/K)	(H - H°) (kJ)	Gibbs En. (kJ)	Ø° (J)	Ø(o-i) (J)
H2O	37.49	218.47	14.20	-208.85	8602.00	-2723.35
CO	31.26	223.77	12.16	-177.34	256778.33	-2723.35
CO2	49.49	254.17	18.12	-395.45	0.00	-2723.35

$$\emptyset = 257210.271 \text{ (J)}$$

ILGILI PROBLEM ISITMA PROBLEMI MI yoksa
BIR REAKSIYON MU ?
ISITMA == [H]
REAKSIYON == [R]
H

$$\emptyset = 273525.177 \text{ (J)}$$

$$\emptyset \text{ (PROSES)} = 16314.907 \text{ (J)}$$

$$\emptyset \text{ (KAYIP)} = \% \quad 6.3$$

{ PROGRAMDAN CIKIS ? } [E] veya [H]
H

TERMODINAMIK HESAPLAMALAR ? == [1]
KIMYASAL DENGES HESAPLAMALARI ? == [2]

1
TOPLAM REAKTIF SAYISI ?
3
ILK BASINC [atm] ?
1.00
BUTUN REAKTIFLER AYNI SICAKLIKTA MI ?
[E] veya [H]

E
ILK SICAKLIK [K] ?
298.16

REAKTIF [1] = ?
H2O

[H2O] ICIN BASLANGIC MOL SAYISINI GIRINIZ !
1.00

REAKTIF [2] = ?
CO

[CO] ICIN BASLANGIC MOL SAYISINI GIRINIZ !
1.00

REAKTIF [3] = ?
CO2

[CO2] ICIN BASLANGIC MOL SAYISINI GIRINIZ !
1.00

SON BASINC [atm] ?
1.00

SON SICAKLIK [K] ?
1400.00

Bilesen	Cp (J/molK)	Entropi (J/K)	(H - H°) (kJ)	Gibbs En. (kJ)	Ø° (J)	Ø(o-i) (J)
H2O	45.78	247.07	43.33	-170.10	8602.00	-2723.35
CO	34.54	246.42	35.19	-242.45	256778.33	-2723.35
CO2	57.04	290.13	55.58	-396.66	0.00	-2723.35

$$\emptyset = 257210.271 \text{ (J)}$$

ILGILI PROBLEM ISITMA PROBLEMI MI yoksa
BIR REAKSIYON MU ?
ISITMA == [H]
REAKSIYON == [R]
H

$$\emptyset = 335189.195 \text{ (J)}$$

$$\emptyset \text{ (PROSES)} = 77978.925 \text{ (J)}$$

Ø (KAYIP) = % 30.3

{ PROGRAMDAN ÇIKIŞ ? } [E] veya [H]

UYGULAMA 1B.

H

TERMODİNAMİK HESAPLAMALAR ? == [1]
KİMYASAL DENGİ HESAPLAMALARI ? == [2]

1
TOPLAM REAKTİF SAYISI ?

2
İLK BASINÇ [atm] ?
1.00

BÜTÜN REAKTİFLER AYNI SICAKLIKTA MI ?
[E] veya [H]

E
İLK SICAKLIK [K] ?
533.00

REAKTİF [1] = ?
CH₄

[CH₄] İÇİN BAŞLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
1.00

REAKTİF [2] = ?
O₂

[O₂] İÇİN BAŞLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
2.00

SON BASINÇ [atm] ?
1.00

SON SICAKLIK [K] ?
533.00

	(J/molK)	(J/K)	(kJ)	(kJ)	(J)	(J)
CH4	49.28	186.28	0.00	-29.65	817972.00	314.39
O2	28.76	410.25	0.00	0.00	0.00	767.51

$$\emptyset = 819821.409 \text{ (J)}$$

ILGILI PROBLEM ISITMA PROBLEMI MI yoksa
BIR REAKSIYON MU ?

ISITMA == [H]
REAKSIYON == [R]

R

URUN MOL SAYILARININ BILINMESI GEREKIR !
BILINIYOR — [E] / BILINMIYOR — [H]

E

TOPLAM URUN SAYISI ?
2

URUN [1] = ?
CO2

[CO2] ICIN MOL SAYISI GIRINIZ !
1.00

URUN [2] = ?
H2O

[H2O] ICIN MOL SAYISI GIRINIZ !
2.00

Bilesen	Cp (J/molK)	Entropi (J/K)	(H - H°) (kJ)	Gibbs En. (kJ)	Ø° (J)	Ø(o-i) (J)
CO2	46.61	213.74	0.00	-395.05	0.00	150.09
H2O	35.63	377.63	0.00	-434.86	8602.00	1191.20

$$\emptyset = 19736.483 \text{ (J)}$$

$$H(r, \text{toplām}) = -802.277 \text{ (kJ)}$$

$$S(r, \text{toplām}) = 0.005 \text{ (kJ/K)}$$

$G(r, \text{toplam}) = -800.253 \text{ (kJ)}$

$\emptyset \text{ (PROSES)} = -800084.925 \text{ (J)}$

$\emptyset \text{ (KAYIP)} = \% -97.6$

{ PROGRAMDAN CIKIS ? } [E] veya [H]
E



UYGULAMA 2.

TERMODINAMİK HESAPLAMALAR ? [1]
KİMYASAL DENGİ HESAPLAMALARI ? [2]

1
TOPLAM REAKTİF SAYISI ?

3
İLK BASINÇ [atm] ?

1.00
BÜTÜN REAKTİFLER AYNI SICAKLIKTA MI ?
[E] veya [H]

E
İLK SICAKLIK [K] ?
298.16

REAKTİF [1] = ?
CH₄

[CH₄] İÇİN BAŞLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
1.00

REAKTİF [2] = ?
O₂

[O₂] İÇİN BAŞLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
2.30

REAKTİF [3] = ?
N₂

[N₂] İÇİN BAŞLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
8.65

SON BASINÇ [atm] ?
1.00

SON SICAKLIK [K] ?
1973.16

Bileşen	C _p (J/molK)	Entropi (J/K)	(H - H°) (kJ)	Gibbs En. (kJ)	Ø° (J)	Ø(o-i) (J)
CH ₄	93.08	314.24	121.41	126.33	817972.00	-6149.49
O ₂	35.43	604.37	121.88	0.00	0.00	-4084.79
N ₂	37.01	2175.54	477.05	0.00	0.00	-801.11

$$\emptyset = 795497.876 \text{ (J)}$$

ILGILI PROBLEM ISITMA PROBLEMİ MI yoksa
BİR REAKSIYON MU ?

ISITMA $\equiv$ [H]

REAKSIYON $\equiv$ [R]

R

URUN MOL SAYILARININ BILINMESİ GEREKİR !

BILINIYOR --- [E] / BILINMIYOR --- [H]

E

TOPLAM URUN SAYISI ?

4

URUN [1] = ?

CO2

[CO2] ICIN MOL SAYISI GIRINIZ !

1.00

URUN [2] = ?

H2O

[H2O] ICIN MOL SAYISI GIRINIZ !

2.00

URUN [3] = ?

O2

[O2] ICIN MOL SAYISI GIRINIZ !

0.30

URUN [4] = ?

N2

[N2] ICIN MOL SAYISI GIRINIZ !

8.65

Bilesen	Cp (J/molK)	Entropi (J/K)	(H - H°) (kJ)	Gibbs En. (kJ)	$\emptyset^\circ$ (J)	$\emptyset(o-i)$ (J)
CO2	62.27	310.13	89.78	-397.05	0.00	53431.09
H2O	52.66	527.87	143.08	-274.04	8602.00	43044.68
O2	35.43	78.83	15.90	0.00	0.00	26030.31
N2	37.01	2175.54	477.05	0.00	0.00	35797.40

$$\emptyset = 474181.061 \text{ (J)}$$

$$H(r, \text{toplam}) = -796.795 \text{ (kJ)}$$

$$S(r, \text{toplam}) = -0.002 \text{ (kJ)}$$

$$G(r, \text{toplam}) = -797.422 \text{ (kJ)}$$

$$\emptyset \text{ (PROSES)} = -321316.815 \text{ (J)}$$

$$\emptyset \text{ (KAYIP)} = \% -40.4$$

{ PROGRAMDAN CIKIS ? } [E] veya [H]

UYGULAMA 3.

TERMODINAMİK HESAPLAMALAR ? [1]
KİMYASAL DENGİ HESAPLAMALARI ? [2]

2
TOPLAM REAKTİF SAYISI ?

2
İLK BASINÇ [atm] ?
1.00

BÜTÜN REAKTİFLER AYNI SICAKLIKTA MI ?
[E] veya [H]

E
İLK SICAKLIK [K] ?
298.16

REAKTİF [1] = ?
CH₄

[CH₄] İÇİN BAŞLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
2.00

REAKTİF [2] = ?
H₂O

[H₂O] İÇİN BAŞLANGIÇ MOL SAYISINI GİRİNİZ !
3.00

SON BASINÇ [atm] ?
1.00

SON SICAKLIK [K] ?
1000.00

Bileşen	C _p (J/molK)	Entropi (J/K)	(H - H°) (kJ)	Gibbs En. (kJ)	Ø° (J)	Ø(o-i) (J)
CH ₄	71.66	503.92	76.97	38.02	817972.00	-2271.40
H ₂ O	41.01	697.40	77.93	-577.90	8602.00	-1266.29

$$\Delta G = 1653408.349 \text{ (J)}$$

TOPLAM ÜRÜN SAYISI ?

5
ÜRÜN [1]
H₂

URUN [2]
CO
URUN [3]
H2O
URUN [4]
CO2
URUN [5]
CH4

Eni= 8.787855067266680
¥C= 11040.125844948300000
¥H= 1667.921688390670000
¥O= 208203.279823293000000

Y (H2) =.6695
Y (CO) =.1926
Y (H2O) =.1029
Y (CO2) =.0229
Y (CH4) =.0121

Bilesen	Cp (J/molK)	Entropi (J/K)	(H - H°) (kJ)	Gibbs En. (kJ)	Ø° (J)	Ø(o-i) (J)
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
H2	30.59	976.60	121.90	0.00	237191.00	9073.08
CO	32.67	397.93	36.80	-347.84	256778.33	6484.35
H2O	41.01	210.25	23.49	-174.22	8602.00	6985.80
CO2	53.10	54.87	6.76	-79.87	0.00	6938.93
CH4	71.66	26.73	4.08	2.02	817972.00	7752.37

$$\emptyset = 1997475.219 \text{ (J)}$$

$$H(r, \text{toplama}) = 420.285 \text{ (kJ)}$$

$$S(r, \text{toplama}) = 0.465 \text{ (kJ)}$$

$$G(r, \text{toplama}) = -60.035 \text{ (kJ)}$$

$$\emptyset \text{ (PROSES)} = 344066.870 \text{ (J)}$$

$$\emptyset \text{ (KAYIP)} = \% 20.8$$

ÖZGEÇMİŞ

1968'de İskenderun'da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini İskenderun'da tamamladı. 1985 yılında Yıldız Teknik Üniversitesi Kimya Mühendisliği Bölümünde okumaya hak kazandı ve 1989'da bölüm ikincisi olarak lisans öğrenimini bitirdi. Aynı yıl Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsünde 1 yıl İngilizce öğrenimi gördü ve ardından Kimya Mühendisliği Bölümü'nde yüksek lisans öğrenimine başladı. Haziran-1990'dan bugüne, Yıldız Teknik Üniversitesi Kimya-Metalurji Fakültesi Kimya Mühendisliği Bölümünün Temel İşlemler ve Termodinamik Anabilim Dalı'nda Araştırma Görevlisi olarak çalışmaktadır.