

34752

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**BİR MADDE DENKLİĞİ PROGRAMININ
GELİŞTİRİLMESİ VE BİR PROSESE UYGULANMASI**

Kim.Müh. Ümran EMÜR

**F.B.E. Kimya Mühendisliği Anabilim Dalında
hazırlanan**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı : Doç.Dr. Esen BOLAT

İSTANBUL, 1994

BİR MADDE DENKLİĞİ PROGRAMININ GELİŞTİRİLMESİ
VE BİR PROSESE UYGULANMASI

Tez Savunma Tarihi :

Tez Yöneticisi :

Jüri Üyeleri :

İSTANBUL, 1994

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

	ŞEKİL LİSTESİ	v1
	TABLO LİSTESİ	v111
	SEMBOL LİSTESİ	ix
	TEŞEKKÜR	x
	ÖZET	xi
	ABSTRACT	xii
1.0.	GİRİŞ	1
2.0.	KAYNAK TARAMASI	4
2.1.	Bilgisayar Destekli Proses Tasarımı	4
2.1.1.	Bilgisayar Destekli Proses Mühendisliği.	4
2.1.2.	Bilgisayar Destekli Proses Tasarımında Denge Yaklaşımı	11
2.1.3	Proses Benzetimi	15
2.1.3.1.	Proses Benzeteçlerinin Değerlendirilmesi	19
2.1.3.2.	Proses Benzeteçlerinin Sınıflandırılması	22
2.1.4.	Proses Tasarımında Veri Bankaları	23
2.2.	Bilgisayar Destekli Proses Tasarımı Programları	28

2.2.1.	Madde Denkliği Programları	29
2.2.1.1.	Madde Denkliği Programlarının Genel Yapıları	30
2.2.1.2.	Madde Denkliği Programlarında Çözüm Yaklaşımları	33
2.2.1.3.	Madde Denkliği Programlarına Örnekler ..	35
2.2.1.3.1.	SYMBOL	36
2.2.1.3.2.	RUMBA	37
2.2.2.	Tam Benzetim veya Tasarım Program Sistemleri	39
2.2.2.1.	Tam Benzetim veya Tasarım Program Sistemlerinin Genel Yapıları	39
2.2.2.2.	Tam Benzetim veya Tasarım Program Sistemlerine Örnekler	49
2.2.2.2.1.	GEMCS	51
2.2.2.2.2.	FLOWTRAN	52
2.2.2.2.3.	ChemShare Programları	55
2.2.2.2.4.	PROCESS	57
2.2.2.2.5.	CONCEPT	59
2.2.2.2.6.	CHEMOS	61
2.2.2.2.7.	MINI-SIM	64
2.2.2.2.8.	SPEEDUP	65
2.2.2.2.9.	FLOWPACK II	69

2.2.2.2.10.	MASSBAL	72
3.0.	BİR MADDE DENKLIĞİ PROGRAMININ GELİŞTİRİLMESİ VE UYGULANMASI	77
3.1.	Madde Denkliği Programının Genel Yapısı.	77
3.1.1.	Bölünme Kesri Kavramı	77
3.1.2.	Bölünme Kesri Katsayılarını Kestirme Yöntemleri	83
3.1.3.	Madde Denkliği Programının Geliştirilmesi	86
3.2.	Madde Denkliği Programının Uygulanması .	88
3.2.1.	Prosesin Tanıtımı	88
3.2.2.	Madde Denkliği Programının Prosese Uygulanması	94
3.2.3.	Uygulama Sonuçları	106
4.0.	SONUÇ VE ÖNERİLER	108
	KAYNAKLAR	109
	EK	114
	ÖZGEÇMİŞ	

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa No

Şekil 2.1.	Bilgisayar Destekli Proses Mühendisliği.	7
Şekil 2.2.	Yeni Proses Mühendisliği Sistemlerinden Birinin Uygulama Alanı	12
Şekil 2.3.	Proses Benzetiminin Kullanım Alanları ..	17
Şekil 2.4.	Benzetimi Vurgulayan Basitleştirilmiş Proje Yapısı	18
Şekil 2.5.	RUMBA Modülleri Kullanılarak Madde Denkliği Benzetimi	37
Şekil 2.6.	Tam Benzetim veya Tasarım Program Sisteminin Tipik Yapısı	40
Şekil 2.7.	Bir Madde-Enerji Denkliği Programının Genel Yapısı	42
Şekil 2.8.	Geri Döngülü Bir Prosesin Blok Akış Diyagramı	47
Şekil 2.9.	Akış Diyagramı Üzerinde Geri Döngü Akımlarını Koparma Seçenekleri	48
Şekil 3.1.	Blok Diyagramı	78
Şekil 3.2.	Geri Döngülü Bir Prosesin Bilgi Akış Diyagramı	79
Şekil 3.3.	Bir Reaktörün İki Birimli Olarak Gösterilmesi	82
Şekil 3.4.	Bütadien Geri Kazanma ve Saflaştırma Prosesinin Akış Diyagramı	89

Sayfa No

Şekil 3.5. Basitleştirilmiş Akış Diyagramı	95
Şekil 3.6. Bilgi Akışı Blok Diyagramı	104



TABLO LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Tablo 2.1. Benzetim Paketlerine Örnekler	50
Tablo 3.1. Besleme Akımının Bileşimi	88
Tablo 3.2. Akımların Bileşimleri ve Debileri	96
Tablo 3.3. Bileşenlerin Bölünme Kesri Katsayıları ve Taze Besleme Değerleri	105
Tablo 3.4. Bilgisayar Programı Sonuçları	107

SEMBOL LİSTESİ

- i : Birim numarası,
- λ_{ik} : k bileşeninin i birimine giren toplam akışı,
- α_{dik} : Bölünme kesri katsayısı,
- g_{iok} : k bileşeninin sistem dışından i birimine giren taze beslemesi,
- K_k : Denge sabiti,
- x_{ak} : k bileşeninin akım ayırıcısından a akımıyla çıkan kesri,
- x_{bk} : k bileşeninin akım ayırıcısından b akımıyla çıkan kesri,
- x_{rk} : k bileşeninin besleme akımıyla giren kesri,
- r_s : Toplam beslemenin s akımına giden kesri,
- G_m : Gaz debisi,
- L_m : Sıvı debisi,
- m : Denge eğrisinin eğimi,
- s : Raf sayısı.

TEŞEKKÜR

Bu konu üzerinde çalışmama olanak sağlayan Kimya Mühendisliği Bölüm Başkanı Sayın Prof.Dr.Salih DİNÇER'e ve tezin her aşamasında desteğini esirgemeyen hocam Sayın Doç.Dr.Esen BOLAT'a en içten duygularla teşekkür ederim.

Proses verilerini sağlayan PETKİM PETROKİMYA HOLDİNG A.Ş. elemanlarından Kimya Mühendisi Yaşar ŞAHİN'e; bilgisayar programının oluşturulmasında yardımını esirgemeyen Matematik Mühendisliği Bölümü Öğretim Görevlileri Sayın Coşkun GÜLER ve Sayın Zerrin ÖZTÜRK'e; ayrıca Ahmet Şimşek Koleji Öğretmenlerinden Sayın Kenan AKGÜN 'e ve çalışmalarım sırasında devamlı ilgi ve desteğini gördüğüm Araştırma Görevlileri İbrahim ÜNAL, Fatma KARACA, Semra ÖZKAN ve Nalan ADAŞOĞLU'ya teşekkürü bir borç bilirim.

Tüm yaşantım boyunca maddi ve manevi desteğini esirgemeyen aileme, özellikle ablam Sevinç EMÜR'e ve arkadaşım Hale SÜTCÜ'ye sonsuz teşekkür ederim.

ÖZET

Bir kimya tesisinin tasarımı, projenin ön incelemelerinde ve prosesin ekonomik olarak değerlendirilmesinde hesaplamaların elle yapılması, özellikle karmaşık ve geniş proseslerde uzun zaman alır ve maliyeti arttırır. Bu nedenle, bu alanda kullanılmak üzere birçok bilgisayar programı geliştirilmiştir. Bunların arasından amaca en uygun programın seçilmesi, uygulama ve maliyet bakımından çok önemlidir. Seçimin doğru yapılabilmesi için de tasarımda kullanılabilecek bilgisayar programlarının iyi bilinip, özelliklerinin doğru değerlendirilmesi gerekir.

Bu çalışmada, kararlı hal madde ve enerji denklikleri hazırlayan, maliyet hesaplamaları, ekonomik analiz ve optimum tasarım yapan bazı proses tasarımı paket programları hakkında genel bilgiler verilmiştir. Ayrıca, bir kimya tesisinin ön tasarımına yönelik bir madde denkliği programı hazırlanmış ve Bütadien Saflaştırma ve Geri Kazanma prosesi-ne uygulanmıştır.

ABSTRACT

In the preevaluation of a project and the economical analysis of the process as a chemical process design work, manual calculations are time-consuming and increase the total cost especially for complex and large processes. For this reason, a lot of computer programs are developed to be used in this area. Choosing the best program to serve a special purpose is very important from the application and cost minimization point of view. In order to reach to a right decision, the user should well know the programs developed on the related area and evaluate their specifications correctly.

In this study, a literature survey was done on process design package programs preparing steady-state material and energy balances and doing cost calculations, economic analyses and optimum design. Also, a simple steady-state material balance program was prepared and applied to the Butadiene Purification and Recovery process.

1.0. GİRİŞ

Tesis, kimyasal maddeler üretmek için kullanılan boru ve kapların toplamı; tesis tasarımı ise, bir tesisin dökümantasyon, çizim ve mühendislik çalışması olarak tanımlanabilir (Leesley et al., 1984). Tesis tasarımı çalışması, istenen ürünü verecek bir tesisin kurulması amacıyla sürdürülür ve üretim prosesinin, kullanılacak cihazların ve üretimin sürdürüleceği binaların tasarımını içerir. Tesis tasarımı genelde, amacın ortaya konulduğu ve ön çalışmaların yapıldığı projenin geliştirilmesi, prosesin tasarımı, proses birimlerinin ve malzemelerinin seçimi, işletme, bina ve arazi maliyetinin kestiriminde kullanılmak üzere yapılan tesisin donanım ve yerleştirme incelemeleri, ve üretimin ekonomik analizi gibi çalışmalardan oluşur (Bolat, 1991).

Bilgisayarların hesaplama, etkileşimli grafik çizimi ve veri düzenleme amacıyla tasarım çalışmalarında kullanılması ile, bilgisayar destekli tasarım gelişmeye başlamıştır. Ancak pratik bakımından, bir işlem bilgisayarda yapılmadan önce, uygulanabilirliği yanısıra gerekliliği de sorgulanmalıdır. Bir karara varabilmek için iki kriter uygulanmalıdır: bilgisayar kullanılmadan işlem yapılabilir mi veya problem çözülebilir mi; bir problemin çözümünde hesap makinası yerine bilgisayar kullanmak daha uygun, daha ucuz olur mu. Buna karar verebilmek için diğer faktörler arasında, gerekli güç,

zaman ve para düşünölmelidir; ayrıca, problem bir kere mi yoksa birkaç kere mi çözülecek, çözümlün doğruluđu bilgisayar kullanılarak artırılabilir mi, problemi çözmek için uygun bir programın kullanılabileceđi bir bilgisayar var mı, yoksa herhangi bir algoritmanın kodlanarak onun çözümlü mü gerekli; gibi sorulara verilen cevaplar da kararda yardımcı olacaktır (M.Himmelblau,1989).

Bilgisayar destekli tasarımda, tasarımcı düşündüğünü hızla uygulayabilir, kısa sürede hassas sonuçlar alabilir ve gerekli değışiklikleri kolayca yapabilir; böylece, uzun hesaplamalar ve tekrarlarla yorulmaz, verimi artar. Amaca doğru ve hızlı ulaşmak için en uygun programın seçilmesi önemli olduğundan, tasarımda kullanılabilecek programların içeriklerinin ve işleyişlerinin iyi bilinmesi gerekir (Leesley et al.,1984).

Bilgisayarların kimya mühendisliği tasarımında uygulanması pek çok bilgisayar destekli tasarım paket programının geliştirilmesine yol açmıştır. Bu programların bazıları, ısı değıştirici tasarımı (HEATEX), akış şeması hazırlama ve çizimleri (PRODESİGN II) veya veri bankaları (PPDS) gibi tasarımın özel yönleri ile ilgidir. Başka pekçok program, proseslerin tümünün benzetimi ve tasarımı için (madde ve enerji denkliği hesaplamaları dahil) kullanılır. Bunlar arasında, kişisel bilgisayarda kullanılabilen

PROCESS, SPEEDUP, ASPEN PLUS ve HYSIM örnek olarak verilebilir. Ayrıca, UNICORN eğitim amacıyla geliştirilmiş, CHEMCO ise veri bankası ile kullanılabilen paket programlardır (Ray et al.,1989).



2.0. KAYNAK TARAMASI

2.1. Bilgisayar Destekli Proses Tasarımı

Bilgisayar destekli tasarımın, akış şemalarının hazırlanması ve optimizasyonu, tüm prosesin ve tek tek birimlerin madde ve enerji denkliliklerinin hazırlanması, ısı deęiřtirci ve destilasyon kolonu gibi proses birimlerinin ayrıntılı tasarımı, tesisin maliyet hesaplamaları ve ekonomik analizi gibi, birkaç genel uygulaması vardır (Ray et al.,1989).

2.1.1. Bilgisayar Destekli Proses Mühendislięi

Proses mühendislięi, temel işlemlerin her birinin ayrı ayrı ve prosesin bir bütün olarak matematik modellenmesi ile ilgilidir. Bu alanda yapılan bilgisayar destekli çalışmalar, yüksek mühendislik verimlilięi ve hassasiyet gibi büyük avantajlar getirebilir. Bilgisayar uygulamalarının çok önemli bir sonucu olarak, daha iyi özelliklere sahip proses tasarımları geliştirilebilir. Elle yapılan yöntemlere göre bu uygulamaların avantajları şaşırtıcıdır ve teknolojinin gelişmesine ve sürekli ilerlemesine neden olur. Bilgisayar destekli proses mühendislięinin gelişmesinin bir başka sonucu olarak, daha yüksek güvenilirlik ve daha düşük maliyetler sağlanabilir (Winter,1992).

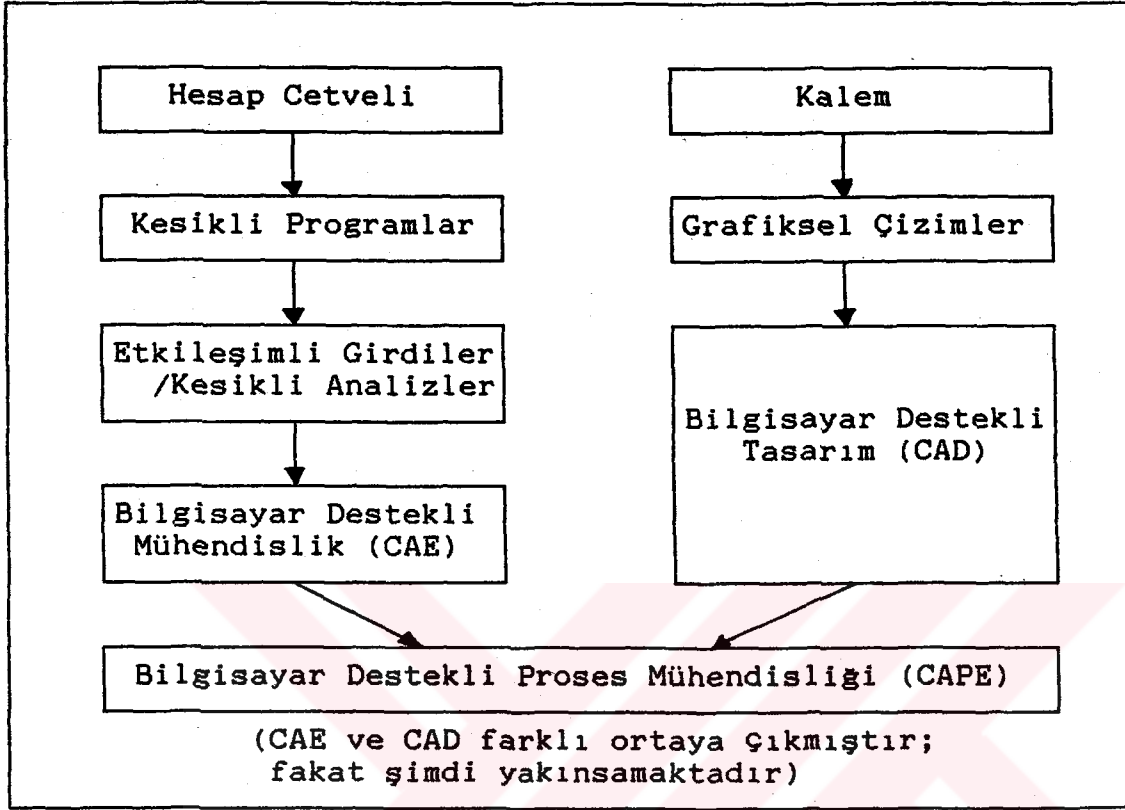
Proses mhendislięi tasarımının esas ıktıları, enerji ve madde denklikleri ile tanımlanan proses akış diyagramları ve belli başlı cihazların tanımlamalarıdır. Bunlar, ilgili başka ayrıntılarla birlikte, bazen proses paketi olarak bilinir. Tesis tasarımı­nın toplam maliyetinin genelde %10'undan daha az bir pay ayrılarak ulaşılan proses paketindeki kararlar, toplam sermayenin % 80'inden fazlasını saptayabilir.

Bilgisayarların proses mhendisliğindeki önemini önce kimyasal proses endüstrisindeki büyük şirketler anlamıştır ve bu alandaki gelişmeler 1950'li yılların ortalarında başlamıştır. Başlangıçta, bilgisayar hesaplamalarındaki hemen hemen tüm çalışmalar, büyük mhendislik toplulukları ve önemli işletme kurumlarında yapı­lırdı. Daha sonra, bu alanda uzmanlaşmış firmaların ortaya çıkmasıyla, endüstri sektörleri, ilgili ortak bilgisayar program sistemlerini kullanmaya başladılar. Bununla beraber, pek çok şirket özel tipteki cihazların modelleri ve fiziksel özellik verileri gibi önemli konularda yapılan çalışmalar ve gelişmeler için iş yatırımlarını sürdürmekteydi. Bugün, proses mhendisliğinde, proses benzetimi, dar boğaz teknolojisi, cihaz tasarımı ve fiziksel özellik verileri ile ilgili alanlarda çoęu sadece bilgisayar programı şeklinde olan teknolojilerden faydalanılır (Winter,1992).

Bilgisayar destekli proses mhendislięi teknolojisinin uygulanabilme derecesi, prosesteki maddelerin fiziksel zelliklerinin uygun bir Őekilde tanımlanabilmesine baęlıdır. Dolayısıyla, petrol ve gaz teknolojisi gibi pek ok arařtırma yapılmıř alanlarda bilgisayar programların kullanımı bir mhendisin ęalıřmasında nemli bir yer tutarken, fiziksel zellik verilerinin daha az olduęu inorganik kimyasalların iřlenmesinde (mineral ekstraksiyonu) ve gıda teknolojisinde, bu programların uygulamalarına ancak son zamanlarda ve geliřtirme amacıyla bařlanmıřtır (Winter, 1992).

Bilgisayar destekli proses mhendislięinin pek ok yn, bilgisayar destekli tasarımı ve bilgisayar destekli mhendislięe uymaktadır. Yıllar boyunca, kimyasal proses endstrisindeki teknik hesaplamalardaki geliřmeler, bilgisayar destekli tasarımdaki geliřmelere paralel olarak (bazen ęakıřarak) devam etmiřtir (Őekil 2.1).

Proses tesislerinin tasarımında, madde denkliklerini ęzme amacıyla mikro bilgisayarlar iin uygun denklem-zen programlar geliřtirilmiřtir (Himmelblau, 1989). BASIC veya Fortran programlarından daha hızlı programlanan bu tip programlar, BASIC ve Fortran programları kadar hızlı deęil, fakat akıř Őeması programlarından daha hızlı ęalıřır.



Şekil 2.1. Bilgisayar Destekli Proses Mühendisliği

Denklem-Çözen paketlerin tipik bir örneği olan TK Solver PLUS aşağıdaki kısımları içerir:

- Denklem ve modellerde kullanılacak olan değişkenlerin isimleri ve tanımların verildiği Değişken Dosyası,
- Değişkenler arasındaki ilişkilerin tanımlandığı Kural Dosyası,
- Kullanıcı tarafından tanımlanan ve bir modelin bir kısmı olan tüm fonksiyonları içeren Fonksiyon Dosyası,

- Hesaplama ve gösterme birimlerinin değiştirilmesi için, gerekli ise, kuralların girildiği Birim Dosyası,
- Modelde oluşturulan tüm listeleri özetleyen Liste Dosyası,
- Model değişkenleri ve bağıntılarının çizim tipi ve yapılarının tanımlandığı Çizim Dosyası,
- Modelde oluşturulan tüm tabloları özetleyen Tablo Dosyası,
- Ondalık hane sayısı ve para türü gibi uygun sayısal düzeni kararlaştıran Sayısal Düzen Dosyası,
- Modeldeki hataları ve ayarları kontrol eden Global Dosya.

TK Solver Plus ayrıca, olduğu gibi kullanılabilen veya farklı şekillerde kullanılmak üzere değiştirilebilen programlardan oluşan geniş bir model kütüphanesi de sunmaktadır. Bu kütüphane, Denklem Kökleri, Türev ve Integral Alma, Diferansiyel Denklemler, Özel Fonksiyonlar, Kompleks Değişkenler, Optimizasyon, Matris Hesaplamaları, Tablolar, Grafikler, İstatistik ve Eğri Uydurma, Mühendislik ve Bilim (özellikle kimya), ve Muhasebe programları içermektedir.

Sözel bir problem, doğrusal veya doğrusal olmayan denklemler grubuna dönüştürüldükten sonra, denklemleri çözmek için jenerik bilgisayar programları kullanılarak, doğrudan veya etkileşimli gibi başlıca iki çözüm tekniği

uygulanabilir. Doğrusal denklemler için uygulanan doğrudan yöntemler daha çok Gauss eliminasyon algoritmasından türemiştir. Gauss yöntemleri tekrarlı yöntemlerden çok daha hızlıdır, ancak hesaplama süresi gözönünde tutulması gereken tek etken değildir. Doğrudan yöntemler çok geniş bir hafıza kapasitesi gerektirir. Ayrıca, tam (teorik) sonuç alındığı hesaplamaların sonuna kadar hiçbir yaklaşık çözüm elde edilemez. Diğer yandan tekrarlı yöntemlerde durum farklıdır. Denklem sistemi $AX=B$ olarak matris şeklinde yazılır ve ilk deneme değeri (X_0) ile başlanarak istenen çözüme oldukça hızlı bir şekilde yakınsama gösteren bir seri vektör (X_k) üretilir.

Son yıllarda mikro bilgisayarlar için uygun elektronik tablolama programları çok kullanılmaya başlandı (Himmelblau, 1989). Başlangıçta, ticari kullanımda elektronik hesap tutma amacıyla geliştirilmiştir; ancak daha sonra madde dengeli problemlerinde de kullanılmaları doğal oldu. İki boyutlu büyük bir matrisin (sütun) bazı kısımlarını saklamak ve ekranda göstermekten oluşan bu tip bir program, programlama dili bilmeyenler tarafından da kullanılabilir. Numaralı sıra ve ardışık harflerle tanımlanan sütunlardan oluşur (veya tersi). Her hücre veya elemanlar "cursor" ile işlenebilir. Cursor klavyeden veya fare ile hareket ettirilebilir. Bu tip programların mühendislikte kullanılmalarının avantajları ucuz, kolay ve hızlı çalıştırma, ve hesaplamalarda

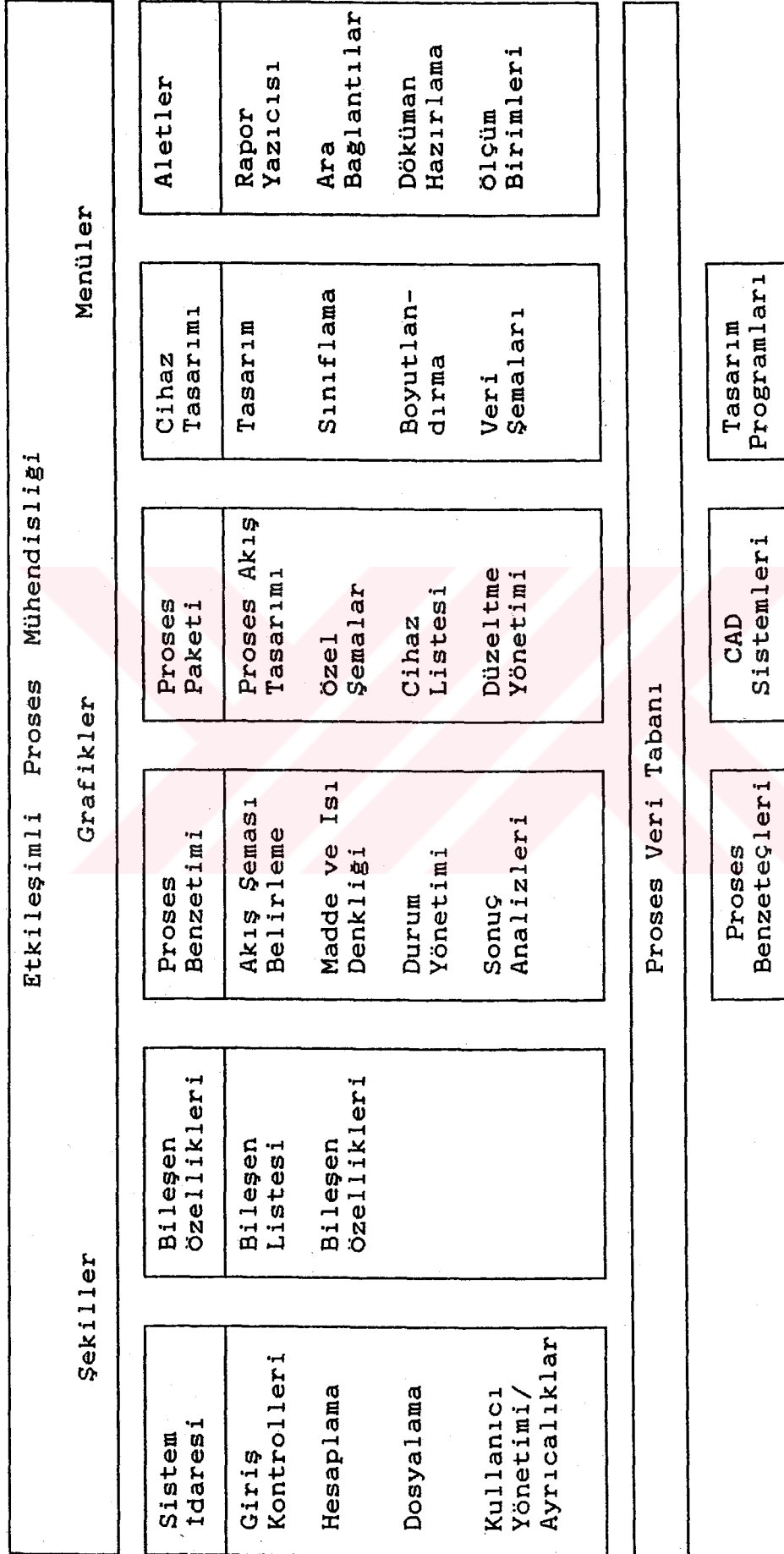
kullanılan denklemlerin özellikle bilinmesidir. Ancak, çok karmaşık madde (ve enerji) denkliği problemlerinin çözümünde kullanılamazlar ve büyük bilgisayarlarda geliştirilen Fortran programlarından çok daha yavaştırlar. Ayrıca, çok sayıda geri döngü akımlı problemlerin veya doğrusal olmayan eşanlı denklem gruplarının tekrarlı çözümünde etkin değildirler. Bu programlarda, doğrusal denklemler setinin çözümünde genelde Gauss-Seidel yöntemi kullanılır. Bu yöntemde, denklem sistemindeki tüm bilgi döngülerini koparmak için bir veya birkaç bilinmeyen ilk değeri olarak rastgele bir değer seçilir (genelde sıfır). Diğer bilinmeyenler basit yerine koyma ile hesaplanır. Bilinmeyenlerin sadece yaklaşık olan bu değerleri, sabit kalana kadar tekrar tekrar hesaplanır.

1960'ların sonlarında temel işlem programlarının birleştirilmesinin önemli avantajlar getireceği fark edilmesi, bugün kullanılan bir çok akış şeması programının ortaya çıkmasına neden olmuştur. 1990'larda ise, çeşitli uygulamalı programların aynı çerçevede toplanması, yüksek mühendislik verimliliği, daha iyi tesis işletimleri ve geliştirilmiş proses tasarım kalitesi bakımından uygun olacağı düşünülmüştür. Bu düşünceyle, birleşik proses mühendisliği sistemleri kurulmuştur. Birleşmeye olan eğilim, akış şeması teknolojisinin geliştirilmesi, proses mühendisliği veri bankası yönetim sistemlerinin geliştirilmesi ve benzetim ile kontrol

arasındaki bağların güçlendirilmesi ile kendini gösterir. Bu sistemlerde, tasarımda katkıda bulunan tüm verilerin saklanması ve kullanılmasında ve uygulamalar arasındaki bilgi aktarımının sağlanmasında mühendislik veri tabanı yönetim sistemleri kullanılabilir. Birleşik veri tabanı sistemleri, tanımlama şeması hazırlama sürelerini fazlasıyla kısaltarak, hızlı ve hatasız proje dökümantasyon kolaylığı sağlar (Winter, 1992). Ayrıca, PRODABAS/3 gibi yeni sistemlerde, çeşitli kaynaklardan gelen bilgilerin çok kullanıcıli ortak bir çerçeve içinde tutulması amaçlanır (Şekil 2.2). Öyle ki, bilgiler daha sonraki analizlerde tekrar kullanılabilir, tüm bilgiler proses tanımının gelişiminde düzenlenebilir, ve proses mühendisliği dökümantasyonunun üretimi ve yönetiminde kalite güvencesi uygulanabilir.

2.1.2. Bilgisayar Destekli Proses Tasarımında Denge Yaklaşımı

Ekonomik bir tesis tasarımı elde etmek için sırasıyla, ürün miktarı ve saflığı ve proses kademeleri verilir, bir akış diyagramı hazırlanır ve basınç, sıcaklık gibi sınırlamalar tanımlanır, her bir akımın akış debisi ve fiziksel şartları saptanır, proses birimleri tasarlanır, tesisin toplam maliyeti ve başlıca birimlerin maliyetleri tahmin edilir, işletme maliyetleri belirlenir, tesisin bugünkü net değeri hesaplanır. Bu yöntem, optimum tasarıma ulaşıncaya kadar tekrarlanır (Wells, 1973).



Şekil 2.2. Yeni Proses Mühendisliği Sistemlerinden Birinin Uygulama Alanı

Ayrıntılı tasarımlara başlanmadan önce, prosesin akış şemasında gösterilen ve cihaz listesinde bulunan her bir birimin ayrı ayrı madde ve enerji denklikleri tamamlanmalıdır. Her bir birimin madde ve enerji denkliği,

- uygun bir zaman birimi seçilerek (dakika, saat, gün, v.s.) cihaz içine ve dışına akan tüm akışların kütleli debileri (ele alınan sayılar kolayca değerlendirilmelidir; örneğin 0-100 arasında olmalıdır ve mümkün olduğu kadar 10^3 veya 10^{-3} kullanılmamalıdır; tüm denklikler aynı zaman temelinde kurulmalıdır),
- tüm akımların bileşimi (% ağırlık),
- bazen gaz akımların molar debileri (ve mol %'leri),
- her bir akımın sıcaklığı ($^{\circ}\text{C}$ yada K kullanılır; 0°C altındaki sıcaklıklarda K tercih edilir),
- her bir akımın basıncı (önemli bir basınç düşüşü yer almıyorsa basınç bir kez belirtilir),
- her bir akımın entalpisi (J, MJ, GJ, v.s.)

gibi ayrıntıları içermelidir (Ray, 1989).

Bir enerji denkliği, enerjinin çeşitli proses akışkanları arasında aktarıldığı besleme ısıtıcıları veya bir tepkime tankı ve onu takip eden soğutucu veya ısıtıcı gibi gruplar veya tesisin bir kısmı etrafında kurulabilir. Enerji denkliği tamamlandıktan sonra, enerjinin verimli kullanımı ele alınabilir ve dolayısıyla enerji korunumu

şeması hazırlanabilir (Ray, 1989).

Tasarımın bu kademesinde bile, madde ve enerji denkliklerinin tüm ayrıntıları sonuçlandırılmayabilir. Her bir birimin çalışma özellikleri bilinmelidir, ancak bazı debilerin ve sıcaklıkların sadece tahmini değerleri bulunabilir. Bu durumda her bir cihazın ayrıntılı tasarımından sonra enerji ve madde denklikleri değişiklik ve kontrol gerektirir (Ray, 1989).

Bir madde denklığının basit ve hızlı olarak elde edilmesini gerektiren bir proses tasarımı önerisi ile madde ve enerji denklikleri tanımlanarak hazırlanan ayrıntılı bir proses akış şemasının hazırlanması arasındaki fark ayırt edilmelidir. Çoğu durumda, ikinci tip çalışma, önerilen proseste en önemli temel işlemlerin ayrıntılı benzetimini gerektirir. Her iki tip çalışmayı yapabileceği ileri sürülen programlar vardır. Ancak, her iki amaca uygun olarak geliştirilmesi ile, bu tip programlar bazı kullanışlı yönlerini kaybetmiştir. Dolayısıyla, farklı tipte çalışma için farklı programların kullanılması daha uygundur. Bunun için de, bir mühendisin belli bir programı ne zaman kullanacağını bilmesi çok önemlidir (Hutchison et al., 1982).

2.1.3. Proses Benzetimi

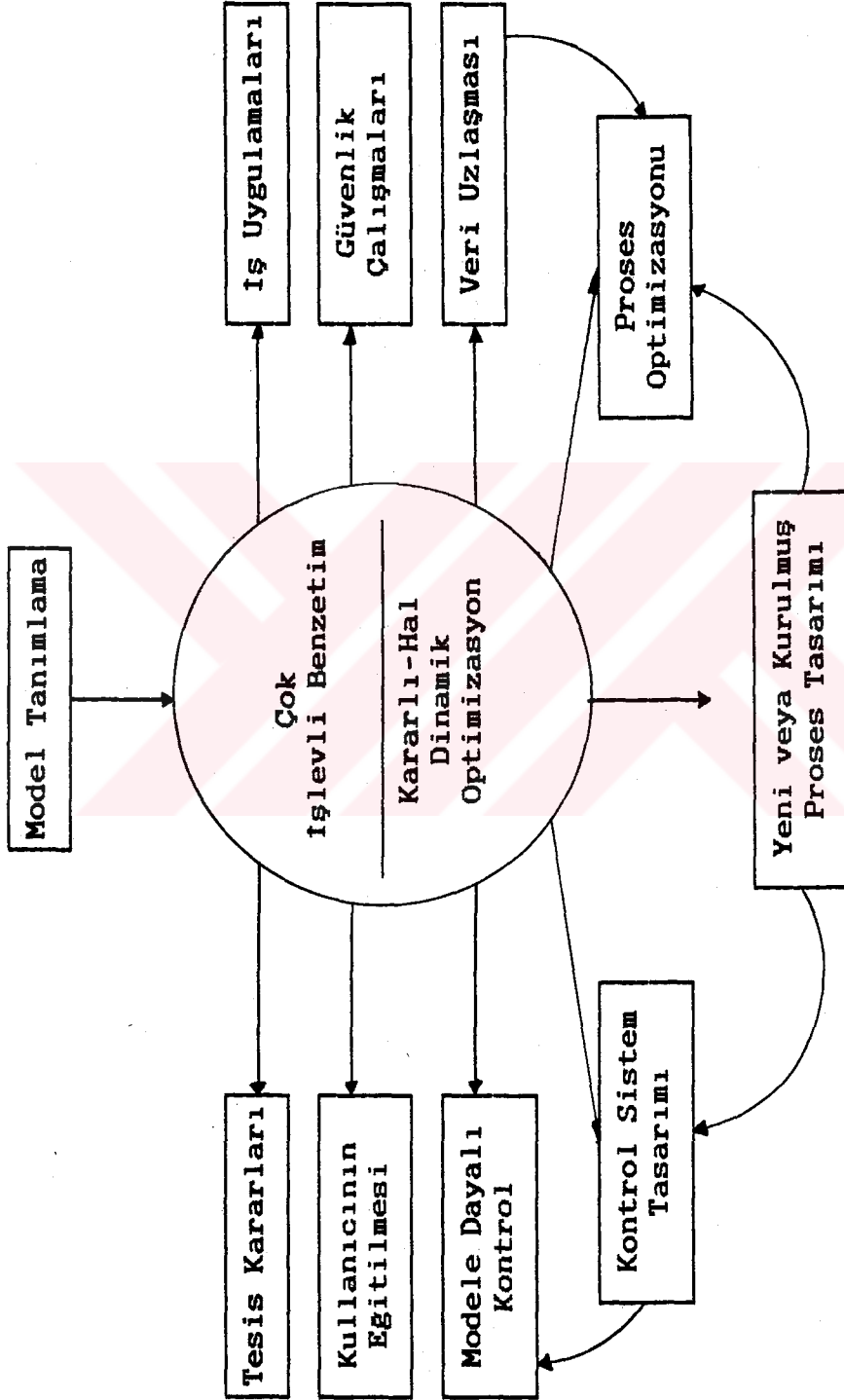
Benzetim programlarının geliřimi, analog bilgisayarların ortaya ıkması ile 2.Dünya Savaşından hemen sonra başlamıştır. Ancak, oldukça karmařık programlama gerektirmesi, verilerin ve programların uygun bir řekilde saklanamaması, mantık kontrolünün yokluğu ve bilgisayarı kontrol etmek için kullanıcının bir uzmana ihtiyaç duyması, geleneksel analog bilgisayar benzetiminin başta gelen dezavantajlarıdır. Aynı zamanlarda, sayısal bilgisayarlarla da denemeler yapılıyordu. Fakat programlamanın makina dilinde yapılması sayısal programlamayı ok zorlařtırdı. Ayrıca, ilk sayısal benzetim alıřmaları hem yavaş hem de pahalıydı. 1950'lerin ortalarında uygun üst düzey dillerin geliřmesiyle, sayısal bilgisayarlar analog bilgisayarlarla yarışır hale geldi. Farklı benzetimler arasında birçok ortak nokta bulunduğundan, her benzetim için ayrı bir programın hazırlanması verimsiz oldu. Bu durum, sayısal bilgisayarlarda kullanılmak üzere, genelleřtirilmiş benzetim dillerinin geliřtirilmesine yol açtı. R.G.Selfridge, 1955 yılında sayısal bilgisayarlar için ilk benzetim dilini geliřtiren olarak bilinir; ve pek ok sayıda başka diller bunu takip etti (Greenburg et al., 1982).

Proses benzetimi, proses benzeteleri veya genelleřtirilmiş akıř řeması programları ile yeni bir prosesin

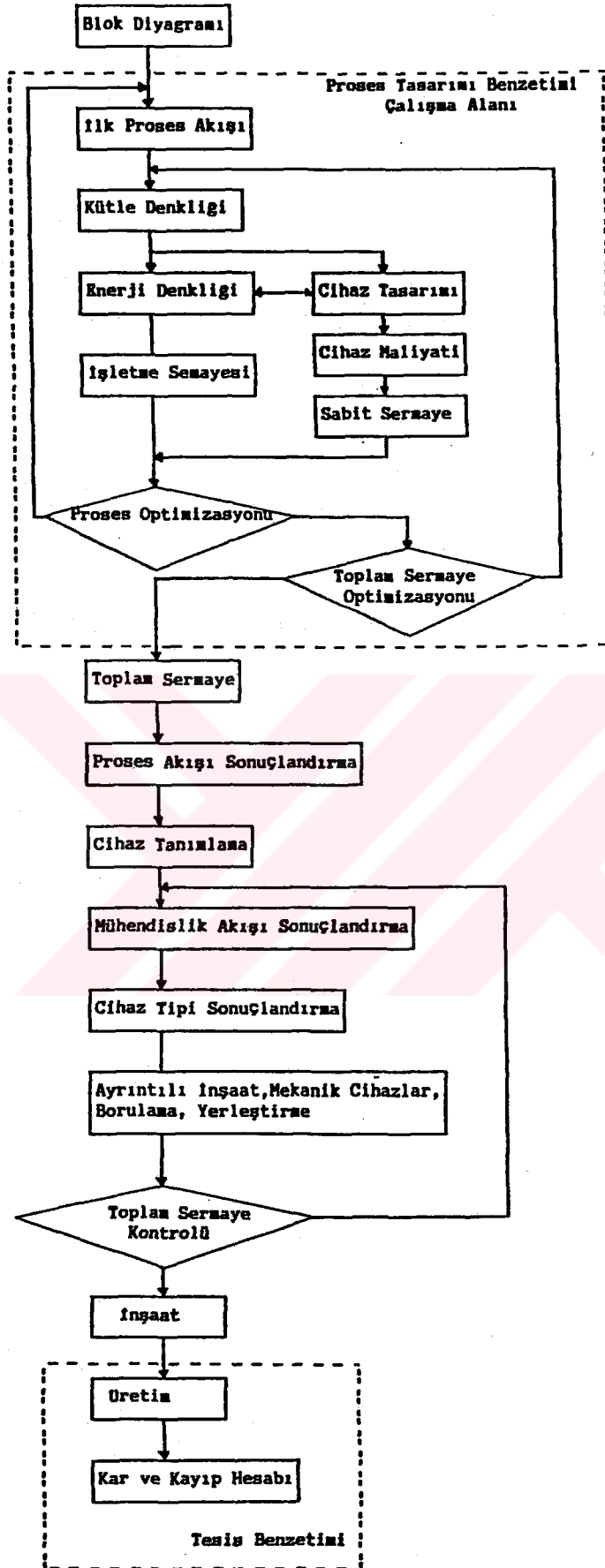
tasarımında veya varolan bir tesisin geliştirilmesinde uygulanabilir. Tam bir benzetim uygulamasında sırasıyla,

- benzetim derecesine karar verilir,
- uygun zorlukta altprogramların kullanabilirliği sağlanır,
- gerekli olan ve sistemler tarafından sağlanmayan fiziksel özellik verileri ve termodinamik yöntemler toplanır,
- başka benzetim sonuçlarından faydalanılarak uygun işletme şartları saptanır,
- daha basit benzetimlerden faydalanılarak geri döngü gerektiren akımlar için ilk başlatma tahmin değerlerine karar verilir, ve
- benzetim çalıştırılır (Hutchison et al., 1982).

Tesis tasarımı ve işletilmesi ile ilgili çalışmalarda proses benzetiminin uygulandığı alanlar Şekil 2.3. de verilmektedir. Bir prosesin doğru bir modeli sadece kararlı hal tasarımı için değil, aynı zamanda dinamik benzetim ve optimizasyon için de geliştirilebilir (Winter, 1992). Benzeteçlerin kolayca değerlendirilebildiği işlemler Şekil 2.4.'deki basitleştirilmiş proje ağı üzerinde gösterilmektedir.



Şekil 2.3. Proses Benzetiminin Kullanım Alanları



Şekil 2.4. Benzetimi Vurgulayan Basitleştirilmiş Proje Yapısı

2.1.3.1. Proses Benzeteçlerinin Değerlendirilmesi

Proses benzetim sistemleri, kimya mühendislerinin kullanma yetkisindeki analiz gereçlerinden en önemlileri olarak, geniş kabul görmüştür. Bunlar, analiz ve yaratıcı çalışma gibi gerçek amaçları gölgeleyebilen ve çok zaman harcatan sıradan günlük işleri yapar. Benzetim sistemlerinin sunduğu avantajlara rağmen, uygulamalarında bazı belirsizlikler vardır. Bir benzeteç geliştiricinin cevaplaması gereken soruların bazıları şunlardır: sistem, proses geliştirme ve tasarımı mı, mevcut proseslerin analizleri için mi, yoksa bir eğitim aracı olarak mı kullanılmak üzere tasarlanmıştır? Basit kütle dengesi mi, yoksa kar analizleri ve maliyet tahminlerini de içeren tam tesis tasarımı mı? Ne derecede karmaşıklık yeterli olacaktır? Sistem, proses tipleri ve maddeleri cinsinden ne kadar genel olmalıdır? Sistemin bilgisayar aksamına bağlı yönleri hakkında ne yapılmalıdır? Etkileşimli mi yoksa kesikli tipte mi bir benzeteç daha uygun olabilir? Pek çok şeyi düşünmesi gereken potansiyel kullanıcının aklına ise, sistemi kullanmak kolay mıdır, personeli yetiştirmek için gereken süre ne kadardır, saptanan mali sınırlamalar içinde istenen çalışma verilebilir mi, sisteme veri yada bilgisayar programları şeklinde özel bilgiler eklemek mümkün müdür şeklinde sorular gelebilir (Leesley,1982).

1950'lerde, ilk ortaya çıktıklarından beri, proses benzeteçleri üç ayrı gelişme süreci geçirmiştir. Birinci kuşak benzeteçleri, sınırlı fiziksel özellik yetenekleri ve temel işlem alt program kütüphaneleri, ilkel yakınsama teknikleri ve dar sınırlar içinde uygulanabilirlik ile tanımlanabilir. Daha güçlü olan ikinci kuşak benzeteçleri, yüksek dereceli bir esneklik sağlamak için çok genelleştirilmiş olan çıktı düzenlemeleri, verimli hesaplama yöntemleri ve geniş fiziksel özellik verileri ve proses birimi alt program kütüphaneleri ile tanımlanmıştır. Şimdi, bir üçüncü kuşak kararlı-hal proses benzeteçleri tasarlanarak, geliştirilmektedir.

Bu hızlı ilerlemelerin bir sonucu olarak, pek çok sayıda kararlı-hal benzeteçleri geliştirilmiştir. En azından 80 sistem bilinmektedir. Böylece, benzeteç tasarım ve kullanım standartların tam olarak anlaşılmadığı bir durum ortaya çıkmaktadır. Teknoloji olmasına karşın, onun ortak bir temelde değerlendirilmesi için kriterler bulunmamaktadır. Dolayısıyla, standart bir akış şeması yada test problemi kurmak ve benzetim sistemlerinin özelliğini değerlendirmek amacıyla bir ölçüte sahip olmak yararlı olacaktır. Böyle bir referansın, benzeteçlerin uygulanabilirliğinin ölçülebildiği bir temel, yeni sistemlerin tasarımında çalışan araştırmacılara iyi bir standart, kullanıcılara da ihtiyaçlar çerçevesinde iki ticari sistemin özelliklerinin analizi ve birbirleriyle

karşılaştırılmasında bir yöntem oluşturabileceği düşünülmüştür (Leesley, 1982). 14 uzmanın bir araya gelerek geliştirmeye çalıştığı standart test akış şeması tasarımında amaçlar şunlardır: standart akış şemasının uygulamaları belli kimya mühendisliği konularıyla ilgili olmalıdır; standart akış şemasının kullanımı verimli ve etkin olmalı, fakat uzun sürmemeli, yani sonuçlara belirli araştırma ve analiz süreleri içinde ulaşılmalıdır; standart akış şeması, proses mühendisinin özel ihtiyaçlarına duyarlı ve esnek olmalı ve proses mühendisi için anlamlı olan kriterleri sağlayacak şekilde ortaya konmalıdır; belli fiziksel özellikleri seçme olanakları, karmaşık raf-rafi destilasyon hesaplamaları yada ısı değiştiricilerin mekanik tasarımı gibi kriterler, proses mühendislerinin ihtiyaçlarına ve ilgilerine kolayca cevap verecek şekilde sunulmalıdır. Tasarlanan temel test, madde ve enerji denklilikleri içindir. Kullanıcı, ayrıntılı proses cihaz tasarımı, karlılık analizleri veya özel ilgi alanına giren ek testleri dahil edebilir. Bu ön deneme, bir başlangıç noktası olarak önerilmektedir. Test her benzetiş için şöyle sürdürülür:

- Test akış şeması %3,25 yaklaşık hatayla çözülür.
- Bir çözüme ulaşırsa reaksiyon bölgesi etrafında madde ve enerji denkliliklerinin elle kontrolü yapılır.
- Akış debisi değiştirilir ve bu tek değişiklikle benzetim yeniden yapılır. Madde ve enerji denkliği tekrar

kontrol edilir (Leesley,1982).

2.1.3.2. Proses Benzeteçlerinin Sınıflandırılması

Genel amaçlı ticari proses benzeteçleri (FLOWTRAN dahil) tasarım özellikleri ve akış şemasındaki yakınsama için genelde bir ardışık-modüler yöntem kullanır. Bu yöntemde, giren akımlar ve işletme şartları verilerek, çıkan akımlar ve proses birimleri ard arda hesaplanır. Döngü akımları döngü etrafındaki tekrarlı hesaplamalar sonucunda yakınsar. Tasarım şartları, besleme akımı verileri yada birim parametleri tekrar tekrar düzeltilerek sağlanır. Etkilenen birimler yakınsamaya ulaşıncaya kadar tekrar hesaplanır. Bu yaklaşım, proses tasarımı ve tekrarlı geri döngü yakınsamalarının hesaplama verimliliğinin düşmesine karşılık, akış şeması benzetimi için basitlik ve büyük esneklik sunar (Larsen,1982).

Denklem-çözen ve eşanlı-modüler yöntemler gibi yeni hesaplama yolları, proses benzetimi araştırmalarının konusu olmaktadır. Bu yöntemler, hesaplama veriminin artırılması yönünden ümit vericidir, fakat geniş benzetimler için henüz kanıtlanmamıştır. Denklem-çözen yöntemde benzetimdeki tüm doğrusal olmayan denklemler eşanlı olarak çözülür. Özel amaçlı benzeteçlerin pek çoğu, bu tiptendir. Tasarım şartları kolayca girilir, fakat genelde iyi başlangıç değerleri

istenir. Eşanlı - modüler benzeteçler, ardışık-modüler ve denklem - çözen yöntemlerin bir kombinasyonudur. Proses birimlerinin basit doğrusal modelleri, akım değişkenlerinin tümü için eşanlı olarak çözülür. Daha sonra, proses birimleri hesaplanır, doğrusal modeller düzeltilir ve yakınsamaya ulaşıncaya kadar yöntem tekrarlanır.

Ardışık-modüler benzeteçler, sabit yada değişken iç yapıya sahip olabilir. Sabit bir yapı ile, ana program her zaman aynıdır. Program boyunca hesaplama yolları ve akımların birim modüllerine uygunluğu, kullanıcı tarafından sağlanan verilerle saptanır. Değişken yapıli programlarda, her farklı akış şeması için farklı bir ana program yazılır veya üretilir. Ana program kullanıcı tarafından yazılabilir, veriler doğrudan çözümleme kodunda yorumlanır veya veriler, hesaplanan, bağlanan ve daha sonra geliştirilen bir ana program üretebilir (Larsen,1982).

2.1.4. Proses Tasarımında Veri Bankaları

Veriler, geniş anlamda, ilginç gelen şeylerle ilgili olarak kaydedilmiş olaylar veya belli özellikler, daha dar anlamda ise, bir proses tesisinin tasarımında veya yapımında ve işletilmesinde gerekli olan ilgili durum ve ayrıntıların tümüdür. Veriler, aynı zamanda, mühendislik tasarımının çeşitli kademelerindeki ürünleridir (Buchmann,1982).

Bilgisayar destekli tasarım daha çok, ayrı ayrı bilgisayar paketlerinin gelişmesi ile ilgilidir ve veriler, bu proseslerin girdi ve çıktıları olarak ele alınır. Verilerin elde edilmesi, hazırlanması, doğrulanması ve aktarılması, proses tesis tasarımında bir darboğaz yaratır ve tasarım maliyetinin üçte birine mal edilir. Dolayısıyla, bu alanda yapılan çalışmalarda veri kullanımının geliştirilmesi, ayrıca verilerin elde edilmesi, hazırlanması, doğrulanması ve aktarılmasının toplam maliyetinin düşürülmesi amaçlanmalıdır.

Bir kaynağın daha iyi kullanılmasının anahtarı, onun kolay ulaşılır olmasıdır. Veriler, bir mühendislik şirketinin en değerli kaynaklarından ve kolayca kullanılır olmaları ile daha faydalı olurlar. Kolay ulaşılabilirliğin iki şekli vardır: belli verilerin rastgele bir temelde tasarımcı tarafından sık sık kullanılabilir olması veya verilerin bir program tarafından işlenmek üzere önceden saptanmış bir düzende hazır olması. Geleneksel mühendislik yönteminde bilgiler, mühendislik çizimleri ve tanımlama şemaları gibi tasarım dökümanları şeklinde saklanır ve bu bilgilere dökümanların araştırılması ile ulaşılır. Bu tip verilerin programlarda kullanılma olasılığı düşüktür. Bir programda bu veriler istendiğinde, zaman kaybı ve hata olasılığını beraberinde getiren insan müdahalesi gerekir. Önceleri bu sorun, verilerin seçilerek, programlara uygun düzende

hazırlanmış dosyalara yüklenmesi ile kısmen çözülmüştür. Bu yaklaşımın, programlara verimli veri girişleri gibi bazı avantajları vardır. Ancak, verilerin çıkarılması veya yeni verilerin girilmesi durumunda, dosyalara ve programlara müdahale edilmesi gerekir ve bu durum, kararsız programlara neden olur. Bu yaklaşımın diğer önemli bir dezavantajı verilerin fazlalığıdır (Buchmann,1982). Her programın kendisine ait veri dosyası vardır; dolayısıyla, aynı bilgiler birkaç farklı dosyada saklanır. Bir dosyada yapılan herhangi bir değişiklik, diğer bütün dosyalarda da eşanlı olarak yapılması gerekir. Bu yöntemde daha çok kullanılan ardışık dosyalarda, bir verinin değerinin anlamı dosyadaki fiziksel durumu ile ilgilidir. Böyle bir dosyayı anlamamanın tek yolu, dosyanın fiziksel yapısını bilmektir. Bir başka dezavantaj, program/veri bağımsızlığının eksikliğidir. Esneklik ve veri bağımsızlığı, en iyi şekilde, bir veri bankasının kullanılması ile elde edilebilir.

Bir veri bankası, gerçeğin bir kısmını temsil eden ve birbirleriyle ilişkili olan verilerin meydana getirdiği ve sürekli gelişen bir toplamı olarak anlaşılır. Bu veriler, bazı uygulamalara açıktır ve kontrollü sayıdadır. Kullanıcı, veri tabanı yönetim sistemi (DBMS) yardımıyla verileri sınırlı bir şekilde ekleyebilir, silebilir, güncelleştirebilir ve tekrar kullanabilir (Buchmann,1982).

Veriler, deęerler, yapısal özellikler, sınırlamalar veya kontrol kurallarından oluşur. Mühendislikte, deęerler ve yapısal özellik verileri zihinde, veya tablolar halinde kağıt üzerinde toplanır. Sınırlamalar ve kontrol kuralları deneyimlere veya sezgilere dayanılarak uygulanır. Bir veri tabanında veri tabanı yönetim sistemi uygulatabilsin diye bu sınırlamalar oluşturulmalı ve açıkça belirtilmelidir.

Veri tabanı tasarımı, iki kısma ayrılır: mantıksal ve fiziksel tasarım. Veri tabanının mantıksal tasarımı, bir girişimi modellemeyi ve bu modeli veri tabanı yönetim sistemi tarafından işletilebilecek şekilde uygun bir dilde ifade etmeyi amaçlar. Fiziksel tasarımı ise, bilgisayar donanımında fiziksel bir depolama şeklinin seçilmesi ve geliştirilmesinden oluşur (Buchmann,1982).

Bugünkü proses mühendisliği veri tabanı sistemleri ile elde edilen üretim deneyimleri, programların katılması, özel hal uygulamaları ve tutarlı verilerin kullanımı gibi önceden tahmin edilen avantajların yanısıra, pratikte aşağıdaki avantajların da sağlandığını göstermiştir (Winter,1992):

- Daha iyi tanımlanan yöntemler,
- Kabul edilmiş yöntemlerin daha kolay standartlaştırılması,
- Daha iyi kalite güvencesi,
- Eleman değişikliğine gösterilen esneklik,

- Kontrol imkanı.

Bu başarılar, son proses tasarımınnın veri içeriğinin çoğunun, benzetim ve tasarım programlarından değil, küçük hesaplamalardan ve daha çok daha önceki tasarımlardan geldiği kabulüne dayanır. Bu faktörlerin önemine dikkat edilerek, proses mühendisliği veri tabanı sistemleri, detaylı mühendislik ile benzetim arasında bilgisayara dayalı etkin bir köprü sağlar.

Kimya mühendisliği tasarım problemlerinde en kullanışlı veri tabanları, uygun kestirim yöntemleri kullanarak bilinmeyen verileri sağlayanlardır. Kimyasal proseslerde karmaşık ve ideal olmayan karışımlar ele alınır ve geniş sıcaklık ve basınç aralığında çalışılır. Bu durum, gerekli verilerin ilgili tablolardan doğrudan bulunamayacağı anlamındadır. Dolayısıyla, bilinmeyen bir veri yerine benzer bir bileşeninki kullanılabilir. Gerekli verinin hesaplama üzerinde önemli bir etkisi yoksa, kaba bir tahmini değer kullanılabilir. Kullanıcı, programda hangi kestirim yönteminin uygulandığını, hassasiyetini ve hesaplama sonuçları üzerindeki etkisini bilmek zorundadır (Ray,1989).

Değişik tipte karışımların özelliklerinin saptanmasında uygulanacak yöntemlerin geliştirilmesinde yoğun çalışmalar yapılmıştır ve bu yöntemler, ilgili kimyasal maddelerin temel parametrelerin veri bankaları ile birlikte, fiziksel

özellik veri sistemlerine yüklenmiştir. En çok kullanılan fiziksel özellik veri bankaları ASPEN-PLUS (Aspen Tech, ABD), CHEMCO (Eurecho, İsviçre), DATABANK (Imperial Chemical Industries, İngiltere), FLOWTRAN (Monsanto, ABD) ve PFDS (Ichem E, İngiltere)'dir (Ray, 1989). Ayrıca, SYSTEM 2000, IMS, ADABAS, DMS VE IDMS gibi ticari sistemler de çok kullanılır. Bunların çoğu, kararlı - hal akış şeması benzetim programlarında doğrudan kullanılmak üzere oluşturulmuştur. Bu programlarda, buhar/sıvı dengesi ve entalpiler gibi termodinamik veriler ve yoğunluk, viskozite ve iletkenlik gibi aktarım özellikleri şeklinde pek çok veri gereksinimi bulunur. Proses benzetimleri tipik olarak, merkez proses biriminin çalışma zamanının %80'den fazlasını fiziksel özellik hesaplamalarına harcar. Sonuç olarak, çoğu bilgisayar destekli proses mühendisliği bilgisayar programlarının geçerliliği, sonuçların niteliği ve hesaplama performansı bakımından, ilgili fiziksel özellikler sistemine bağlıdır (Winter, 1992).

2.2. Bilgisayar Destekli Proses Tasarımı Programları

Ön tasarım hesaplamalarının sonucunda, en ümit verici üç veya dört akış şeması seçilir, bu alternatif proseslerin herbirinin optimum tasarım şartları (akım bileşimleri, sıcaklıkları ve basınçları, cihaz boyutları) saptanır ve ayrıca, ayrıntılı tasarım çalışmalarının gerekli olup

olmadığına karar verilir. Ancak, ön hesaplamalar yaklaşık sonuçlara dayanır. Dolayısıyla, daha ayrıntılı bir çalışma yapılarak hassas çözümler elde etmek amacıyla madde ve enerji denklikleri kurulur, tepken ve ürün madde kayıpları hesaplanır ve daha hassas cihaz tasarımları yapılır. Bunun için de bilgisayar destekli tasarım programları kullanılır (Douglas, 1988). Proses tasarımı bilgisayar programları genelde, iki sınıfa ayrılabilir: madde denkliği programları ve tam benzetim veya tasarım program sistemleri (Hutchison et al., 1982).

2.2.1. Madde Denkliği Programları

Akış şemasının yapısı belirlendikten sonra, bir tasarımın gelişiminde genelde, ayrıntılı madde-enerji denklikleri kurulur, cihaz boyutları hesaplanır ve sabit ve işletme maliyetleri hesaplanarak prosesin karlılığı değerlendirilir. Bu problemlerin tümü aynı zamanda çözülebilir, ancak problemin tümü daha küçük problemler serisine bölünerek yapılacak bir çözüm yöntemi önerilir. Verilerin girilmesinde kolaylıkla hata yapılabilmesi ve programı geliştirme sürelerinin uzun olması, bu kademeli yaklaşımın nedenleri arasındadır. Enerji denkliği hesaplamaları, cihaz boyutlandırma ve fiyat hesaplamalarının tümü madde denkliklerine dayandığından, önce madde denkliği hesaplamaları yapılır ve kontrol edilir (Douglas, 1988).

2.2.1.1. Madde Denkliği Programlarının Genel Yapıları

Modern tesisler her zaman pek çok geri döngü akış içerir. Bunlar, madde denkliklerinin değerlendirilmesinin uzun ve tekrarlı olmasına neden olur. Dolayısıyla, bu işi yapan bilgisayar programları, mühendisler için çok yararlı olabilir. Madde denkliği programları, ön denklik programları ve kestirim programları olarak iki sınıfta toplanabilir (Hutchison et al.,1982).

Ön denklik programları, birimin sadece madde denkliğini kurar, bir tasarım seçeneği vermez. Bunlar, genelde, akış şemalarının dört temel işlem biriminin (ayırıcı,karıştırıcı, kolon ve reaktör) kombinasyonları şeklinde oluşturulması ile ilgilidir. Besleme bileşimleri açıkça belirtilmelidir ve doğrusal problem kısıtlayıcıları (belli bir akım saflığı gibi) verilir. Sıcaklık, basınç ve diğer termodinamik özellikler bu tip hesaplamalar için uygun değildir.

Kestirim yöntemleri madde denkliği hesaplamalarında olduğu gibi, cihaz boyutlandırmada da kullanılır. Bu tip programlar çoğunlukla, prosesin olabilirliğini bütçede izin verilen hassasiyet aralığında (%15) incelemek veya belli bir ürünün optimum üretim prosesini saptamak amacıyla kullanılır. Bu programlar kısa işlem sürelidir ve özel tesis işletme verilerine doğrusal programlama yöntemlerini uygular.

Bir prosesin kararlı-hal madde denklğini elde etmek için, belirlenen proses çıkışları dışında herhangi bir noktada madde birikimi ve belirlenen proses girişleri dışında da madde azalması olmaksızın yer alan işlem sırasında maddelerin toplam ve her birinin ayrı ayrı, prosesin çeşitli birimleri arasındaki akışlarını belirlemek gerekir. Proses kesikli elemanlar içeriyorsa, madde denklğinin zaman temelli, prosesin tahmini ömründen kısa, proses süresinden uzundur. Bir birimin (bir destilasyon kolonu veya reaktör gibi) çalışması birime beslenen akımların debilerine ve bileşimlerine bağlı olduğundan, böyle bir hesaplama genelde zordur (Hutchison et al.,1982).

Madde denklği için hazırlanan bir bilgisayar programı birkaç kısımdan oluşur. Önce, her bir cihaz, giren ve çıkan akımların debileri ve akış şartları cinsinden tanımlanır. Karmaşık birimlerin giriş ve çıkış şartları arasındaki ilişkiyi kurmak için oldukça karmaşık matematiksel modeller gerekebilir. Cihaz modellerini ele alma sırası belirtilir; genelde, basit olanlarla başlanır. Daha sonra, denklemlerin çözümü yapılır. Düzenleme sonucu birer bilinmeyenli denklemler elde edilebilir ve hesaplama tekrar gerekmeyebilir. Doğrusal denklemlerden oluşan denklem gruplarının çözümü veya denklemler doğrusal değil ise uygun bir algoritma gerekebilir (Ray et al.,1989). Burada düşünülen madde denklği programları, bir prosesteki birimlerin çalışması sabit

faktörlerle tanımlanabildiği durumlarla ilgilidir. Bazı sabit faktörler bir prosesin tanımlanmasında doğal olarak ortaya çıkar. Bunlar arasında, stokiyometrik katsayılar, besleme akımlarındaki safsızlıklar, güvenlik nedeniyle zorunlu konan bileşim sınırlamaları, ürün akımlarında istenen özellik benzerlikleri örnek verilebilir. Uygulamada, kütle denklemlerinin elde edilmesi amacıyla sabit alınabilecek pek çok faktöre erişilebilir. Bu tip faktörlerin değerleri, özel amaçlı hesaplamalardan, benzer amaçlı birimlerin tesis kayıtlarından veya ön çalışma için yeterli olan bir hassasiyetle genel deneyimlerden elde edilebilir. Proses tasarımı- nın hassasiyeti arttıkça, kabul edilen faktörlerin değerleri düzeltilir. Düzeltilmiş değerlerin kolayca yerleştirilerek yeni bir madde denkliği elde etmek için programın yeniden geliştirilmesi madde denkliği programlarının bir özelliği kabul edilir. Bu tip madde denkliği programları, prosesteki temel birimleri birleştiren madde akımlarındaki tüm bileşen- lerin akışlarını veren doğrusal denklemlerin setini kurar ve çözer. Kurulan doğrusal denklem seti çok dağınıktır ve katsayı matrisi birçok sıfır içerir. Dolayısıyla, denklemlerin depolanması ve çözümünde özel yöntemler uygulanmalıdır. Bu tip programların sınırlamaları bellidir: prosesin enerji denklğini doğrudan gözönüne almaz, prosesteki temel işlemlerin herhangi birini doğrudan modelleyemez. Bir madde denkliği programının ilgili bir veya daha fazla temel

işlemin çeşitli tipte hesaplamaları ile beraber kullanıldığı bir hesaplama dizisinin yakınsayacağı garanti edilemez. Ancak, sınırlamalar açıkça belirtilirse bu tip madde denkliği hesaplamaların proses tasarımı için ilk kademelerinde önemli bir rol oynayacağı açıktır (Hutchison et al.,1982).

2.2.1.2. Madde Denkliği Programlarında Çözüm Yaklaşımları

Kavramsal olarak, madde denkliği programlarında ve madde-enerji denkliği programlarında çözüme birkaç farklı yaklaşımla ulaşılabılır (Massey,1982):

Cebirsel Yaklaşım. Akış şemasının tümü, cebirsel işlemlerle sayıları an aza indirgenen denklemler ile gösterilir. Son çözüm, elde kalan eşitlikler ile yapılan tekrarlı hesaplamalarla elde edilir.

Modüler (blok tipi) Sıralama. Bu yaklaşımda, akış diyagramı, birbirine bağlı ve her biri kendi kendine yeterli bir hesaplama temel işlemi olan karakutulardan oluşan bir seri olarak kabul edilir. Her bir birim, bileşenin kütleli akışlarını gösteren bir akım kaydı yada bir numara serisi ile bağlıdır. Her temel işlem programda işletici çağırma programının belirlediği sıra ile çağrılan bir alt programdır. Bu program, her bir birimi sıra ile çağırır ve tüm akımların hesaplanan değerlerindeki değişimler önemsiz

oluncaya kadar proses döngüleri etrafında tekrarlı hesaplamalarla çözer. Hesaplamalar uzun sürdüğü için, verimli bir yakınsama hızlandırıcısı kullanılmadıkça, böyle bir yaklaşım madde denkliği programlarında sık sık uygulanmaz.

Eşanlı Çözüm. Bu yaklaşımda, akış şemasındaki her bir birim bir doğrusal denklemler grubu şeklinde gösterilir. Daha sonra tesisi gösteren bu denklemler grubunun tamamı matris şeklinde saklanır. Matris kurulunca problem çözümü kolaydır. Sonuç olarak, eşanlı çözüm yaklaşımının son derece hızlı bir çözüm verdiği kabul edilir.

Karma Sistemler Yaklaşımı. Doğrusal ve doğrusal olmayan denklemlerden oluşan karma sistemler için, doğrusal olmayan fonksiyonların doğrusallaştırıldığı tekrarlı yöntemler geliştirilmiştir. Temel işlemlerin her birinin tanımlama denklemi $f(x)=c$ şeklinde yazılır. Birimler arasındaki bağlantılar açıkça belirtilir ve sistemi tamamıyla tanımlayan sınırlamalar belirlenir. Bu bilgiler üzerinde mantık çalışmaları yapılır ve prosesin kararlı-hal durumunu tanımlamak için gerekli minimum sayıda cebirsel denklemi eşanlı çözmek için bir program hazırlanır.

2.2.1.3. Madde Denkliği Programlarına Örnekler

Proses tasarımı ve ekonomik gelişme ile bağlantılı olarak, bilgisayar destekli madde denkliği hesaplamaları 20 yıldan fazla bir süreden beri kullanılmaktadır. Bazı bilgisayar programları bir cebirsel denklemler sistemi temelinde iken, programların çoğunda ardışık modüler teknikler kullanılır. İkinci türdeki pek çok benzetim programı bilgisayar mantığı (örneğin:hızlandırılmış yakınsama) bakımından çok karmaşık, uygulama (örneğin:proses optimizasyonu) bakımından da çok güçlüdür. Bazıları, pek çok sayıda cihaz boyutlandırma ve maliyet tahmini alt programlarını içeren birleşik sistemlerin bir bölümünü oluşturur. Bazıları ise, geniş olmalarına rağmen, madde denkliği benzetim kısmını temel işlem ve ekonomi kısımlarından ayrı tuttuğu için, daha az karmaşıktır.

Ancak, yeterli veri veya ayrıntılı proses tasarımı için yeterli zaman olmadığında, projenin ilk kademelerinde ön madde denkliğine sınırlı, kullanıma hazır, basit, genel bir programa ihtiyaç vardır. Projenin daha sonraki aşamalarında, bu tip sınırlı amaçlı bir program, sistemin ısı ve kinetik davranışından çok, madde denkliği ile ilgili şartlar tarafından kontrol edilen prosesler için daha kullanışlıdır (Klumpar, 1982).

2.2.1.3.1. SYMBOL

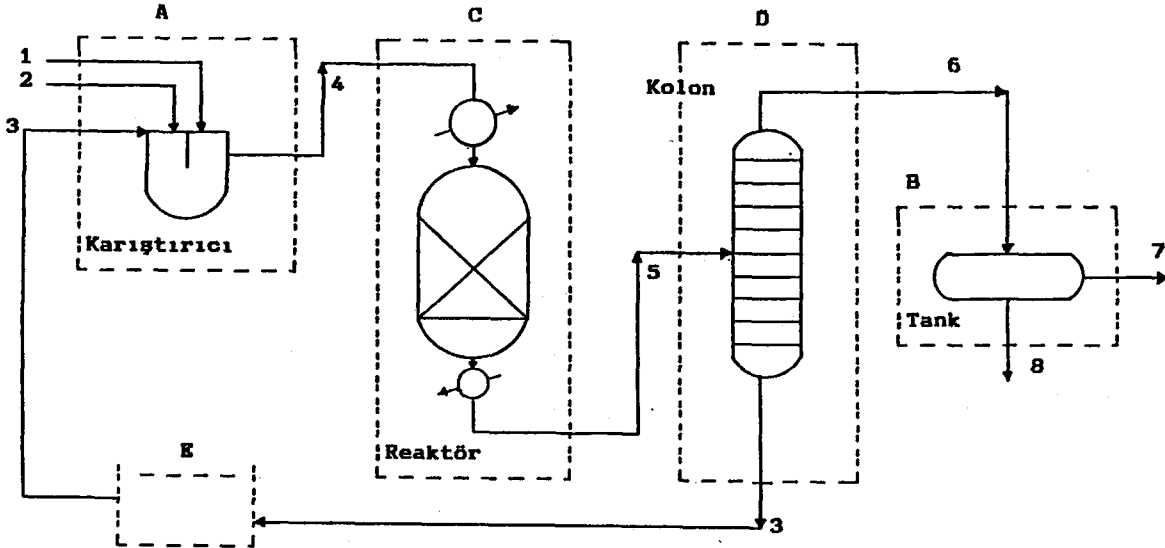
SYMBOL. H.P.Hutchison tarafından geliştirilen bir doğrusal madde denkliği program sistemidir (Hutchison et al., 1982). SYMBOL'de, tesisteki akımların tüm bileşenlerinin debileri arasında kurulması gereken doğrusal denklemler, tesis 5 temel birim tipine (kaynaklar, karıştırıcılar, ayırıcılar, kademeler ve reaktörler) indirgenerek elde edilir. Şöyleki,

1. Bir kaynak, yada prosese giren bir akım, bilinen bileşimde bir maddenin beslemesi olarak ele alınır. Ayrıca, toplam debi yada bir bileşenin debisi belirtilebilir.
2. Bir çıkış akımı sağlamak için en fazla yedi akım karıştırılır.
3. Bir akım, iki çıkış akımına ayrılır. Daha karmaşık ayırmalar bir seri ayırıcılar ile gösterilmelidir. Ayırmayı anlatmak için birkaç yöntem kullanılabilir.
4. Geçişen farklı fazda iki akım, bileşenlerini değiştirebilir.
5. Bir giren akım, bir çıkan akım vermek için tepkimeye girer. Stokiyometri (teorik yada ampirik) gereklidir, fakat reaksiyon derecesini tanımlamak için de bir kaç yöntem vardır. Eşanlı iki yada daha çok reaksiyon, iki yada daha çok reaktörden oluşan bir seride ele alınmalıdır.

Gerçek bir tesis birimi, program tarafından tanınan iki yada daha çok birim ile gösterilmesi gerekir. Gerçek bir durumda, madde denkliği için gerekli doğrusal denklemlerin toplanması zordur. SYMBOL sistemi, problem hakkında gerekli bazı bilgiler verildiğinde, ana madde denkliği programının çalıştırılması için yada veri hazırlamanın bir sonraki kademesi için gerekli kullanıcıya dönük verileri sağlayan iki veri hazırlama programı içerir (Hutchison et al.,1982).

2.2.1.3.2. RUMBA

RUMBA programı, sınırlı model madde denkliği özelliklerini taşır (Klumpar,1982). Bu program, herhangi bir kimyasal prosesin dört tip modülün [toplama(A), bölme(B), dönüştürme(C), ayırma(D)] kombinasyonu kullanılarak benzetilebileceği kavramına dayanır. Bu, çok basit bir akış diyagramı üzerinde Şekil 2.5.'de gösterilmektedir.



Şekil 2.5. RUMBA Modülleri Kullanılarak Madde Denkliği Benzetimi

Hammadde akımları (1 ve 2) verilirse ve tüm temel işlemler uygun olarak tanımlanırsa diğer tüm akımlar hesaplanabilir. Geri döngü akımı (3) deneme-yanılma ile hesaplanabilir.

Cihazlar dört modülde birleştirilebilir. Bölme modülü (B) sıfır, dönüştürme modülü (C) ise üç temel işlem içerir. Girdide, her modül, bir tip nosu, giriş ve çıkış akım noları ile belirlenen akış şemasındaki yeri ile tanınır. Tip noları toplama, bölme, dönüştürme ve ayırma modülleri için sırasıyla, 1,2,3 ve 4'tür.

- Toplama modülü (A), daha başka girdiye gereksinim duymaz. Akımların çıkarılması, negatif akımların eklenmesi olarak gösterilir.
- Bölme modülü (B), giren akımın benzer bileşime sahip iki çıkan akıma kesirsel bölünmesini gösterir.
- Dönüştürme modülü (C), anahtar bileşenin kesirsel dönüşümünü ve ilgili tüm diğer bileşenlerin anahtar bileşene göre stokiometrik katsayılarını verir.
- Ayırma modülü (D), bütün bileşenlerin dağılma katsayılarını veya onların her çıkan akımdaki bileşimlerini tanımlar.

Buna ek olarak, bütün bileşenlerin molekül ağırlıkları verilir ve bütün akışlar bileşen akış debileri cinsinden belirtilir. Hesaplama sırası, modüler verilerin giriş sırasına göre saptanır.

2.2.2. Tam Benzetim veya Tasarım Program Sistemleri

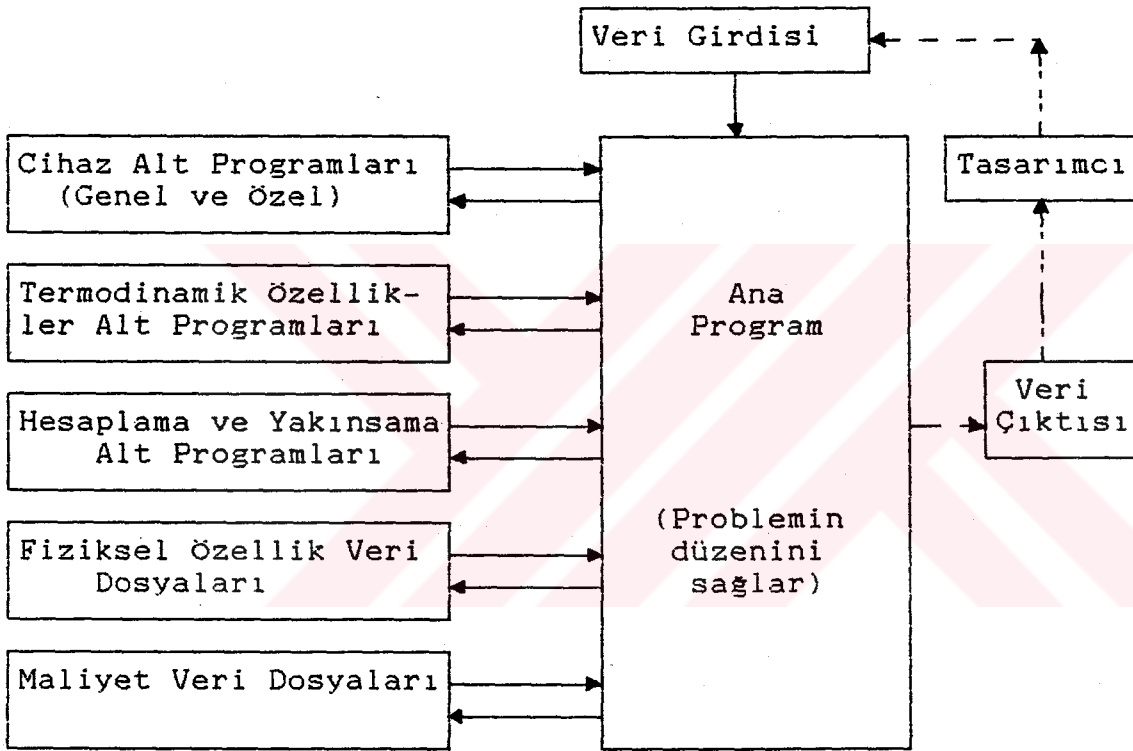
Tam benzetim veya tasarım programları madde denkliği programlarından daha karmaşık yapıdadır. İlk olarak, bir akımın debisi ve bileşimi kadar ısı şartlarını da değerlendirmek için, madde denkliği gibi enerji denkliği de kurulur. İkinci olarak, prosesteki önemli temel işlemlerin çalışması ile ilgili ayrıntılı modeller kullanılır. Bu modeller, sistemler tarafından genel bir kütüphane şeklinde sağlanabilir yada özel bir temel işlemi modellemek için kullanıcı tarafından yazılabilir. Her iki durumda model, çok basit bir bağıntı veya gelişmiş sayısal yada analitik bir benzetim olabilir (Hutchison et al., 1982).

2.2.2.1. Tam Benzetim veya Tasarım Program Sistemlerinin Genel Yapıları

Tasarımı yapılan prosesin kararlı-hal davranışını benzeten karmaşık madde ve enerji denkliği programları, büyük üretim kuruluşlarının pek çoğunun merkezi tasarım bölümlerinde ve üniversitelerin ilgili bölümlerinde geliştirilmiştir. Özel hesaplama bürolarında da böyle programlar ve hesaplama yöntemleri bulunur (Sinnot, 1983). Bu tip programlar, kimyasal proses hakkında akış şeması düzeyinde ayrıntılı bilgiler gerektirir ve sadece madde ve enerji akışları ile değil, maliyetler, borulama düzeni, zaman

etkileri ve tasarım ve işletme hesaplamaları ile ilgili veriler sağlayacak hesaplamalar yapar (M.Himmelblau,1989).

Bilgisayar destekli tasarım programları genelde aynı kısımlardan oluşur (Şekil 2.6) (Sinnot, 1983):



Şekil 2.6. Tam Benzetim veya Tasarım Program Sisteminin Tipik Yapısı

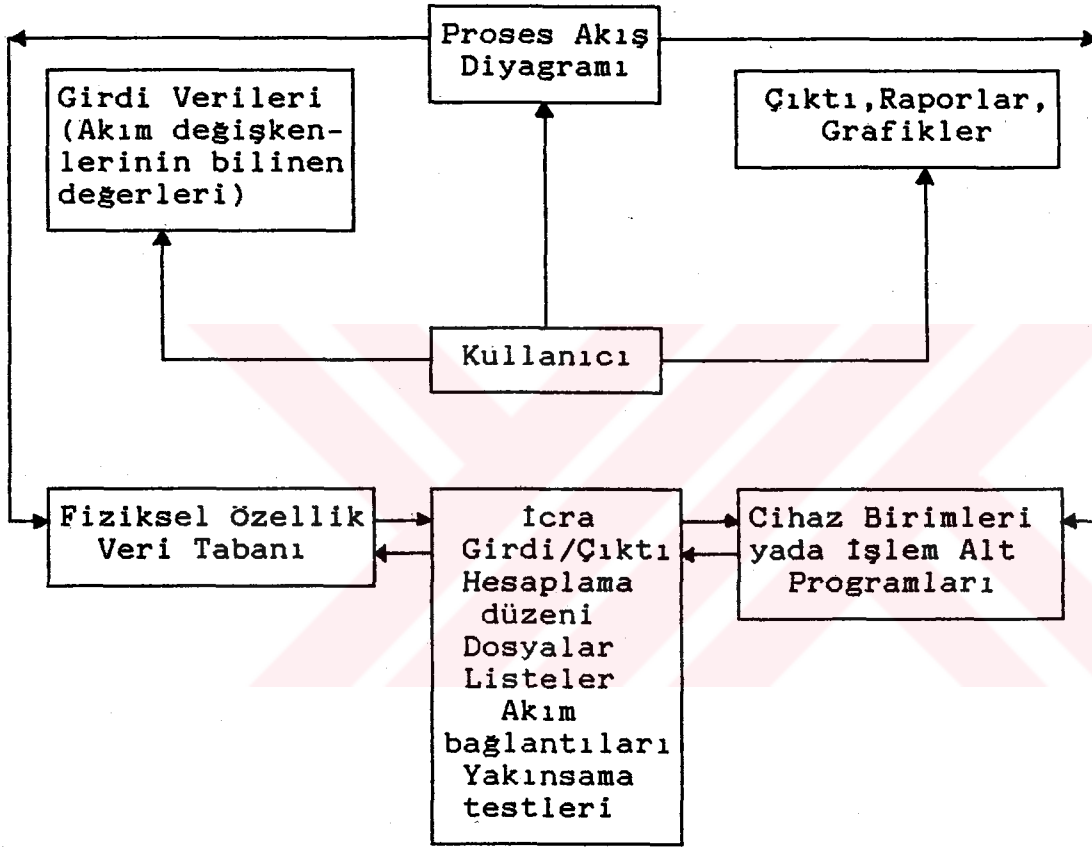
1. Ana Program - Madde ve enerji denkliği hesaplamalarını ve alt programlara gidip gelen bilgi akışlarını izler ve kontrol eder.

2. Fiziksel Özellikler Veri Bankası - Belli bir prosesin tasarımı gerektiren fiziksel özellik verilerinin toplandığı ve saklandığı yerdir. CAD programlarının gelişmişlik ve kullanılabilirlik derecesi fiziksel özellikler veri bankasının boyutuna bağlıdır. Belirli bir prosesin tasarımı için gerekli fiziksel özellik verilerinin toplanması ve bunların programa uygun hale getirilmesi uzun zaman ve çok emek isteyen bir iştir. Bu nedenle, kendi veri bankası bulunmayan, gerektiğinde sadece veri bankası olarak kullanılmak üzere yapılmış programlardan faydalanan programlar da vardır.
3. Termodinamik Özellikler Alt Programları - Buhar-sıvı denge değerlerinin ve entalpi gibi termodinamik özelliklerin hesaplandığı alt programlardır.
4. Cihaz Alt Programları - Cihaz benzetimi yapar ve giren akımların özelliklerinden faydalanan çıkan akımlarınkini hesaplar.
5. Maliyet Veri Bankaları ve Alt Programları - Cihazların sabit ve işletme maliyetlerinin tahmin edildiği alt programlardır. Tam benzetim programları tasarımcıya, farklı proses şemalarını kolayca inceleme, maliyet alt programları ise hızlı ekonomik karşılaştırma olanağı sağlar.

Bazı programlar, optimizasyon hesaplamaları da içerir. Maliyet alt programlarından yararlanabilmek için, program en

azından yaklaşık bir cihaz tasarımı yapabilmelidir.

Şekil 2.7'de bir madde-enerji denkliği programının yapısı gösterilmektedir (Himmelblau,1989).



Şekil 2.7. Bir Madde-Enerji Denkliği Programının Genel Yapısı

Bu tip programlarla, geri döngü akımları içeren ve bağlantılı proses birimlerinden oluşan birleşik kimyasal tesislerin kararlı-hal (ve bazı durumlarda kararsız-hal) davranışı benzetilebilir.

Madde ve enerji denkliği programlarında iki farklı uç bulunmaktadır. Bir uçta, prosesi gösteren eşitlikler (veya eşitsizlikler) setinin tümü kullanılır. Bu tip bir gösterim şekli "Denkleme yönelik yöntem" olarak bilinir. Denklemler, modüler gösterime benzer olarak ardışık düzende veya Newton yöntemini, Broyden yöntemini yada matris hesaplamalarını azaltmak için dağınık matris tekniklerini kullanarak eşanlı düzende çözülebilir (Himmelblau,1989).

Diğer uçta, proses, her bir alt sistemi veya cihazı gösteren denklemlerin toplandığı ve kodlandığı modüller grubu ile gösterilebilir. Bu tip bir gösterim şekli "Modüler yöntem" olarak bilinir. Bir modül, akış şemasının geri kalanından ayrı olarak kullanılabilir ve böylece bir akış şemasından diğerine taşınabilir. Ticari önemi olan programların çoğu modüler karakterdedir. Her bir modül, cihaz boyutları, madde ve enerji denkliği ilişkileri, hız denklemleri, bileşen akış debilerini saptama değişkenleri, ve modülle gösterilen fiziksel cihaza giren veya ondan çıkan her bir akımın sıcaklıkları, basınçları ve faz şartlarını içerir. Diğer bir deyişle, modüller herhangi bir prosesi göstermek için genel şekillerde düzenlenebilen yapı blokları setini kapsamaktadır. Bir ana program, modülleri uygun sıra ile çağırır, hesaplama alt programlarından bilgiler aktarır ve ilgili veri bankasından fiziksel özelliklerle ilgili

bilgileri seçer (Himmelblau,1989).

Hem ardışık hem de eşanlı hesaplama düzeni, modüler yaklaşım için olduğu kadar, denkleme yönelik yaklaşım (ve ikisinin ara karışımları) için de önerilmiştir. Program ve/veya kullanıcının, geri döngü karar değişkenlerini seçmesi; ayrıca, özellikle pek çok geri döngü akımı olan bir proste hesaplamaların yakınsamasını kesinleştirmek için belli akım değerlerinin tahmini değerlerini sağlaması gerek.

Taşınabilir olmalarına karşın, modüler kodların denkleme yönelik kodlara göre bazı zorlukları vardır:

1. Bir modülün çıktısı diğerinin girdisidir. Bir bilgisayar modülündeki girdi ve çıktı değişkenleri belirlenmiştir; öyle ki, keyfi olarak bir çıktı verilemez ve bir girdi üretilemez.
2. Modüller, belli bir öncelikli çözüm düzeni gerektirebilir (bir modülün çıktısı bir başkasının girdisi olabilir); böylece yakınsama, denkleme yönelik kodda olduğundan daha yavaş, hesaplama maliyetleri ise yüksek olabilir.
3. Bir modülde bir parametreyi bir tasarım değişkeni olarak tanımlamak için, modül etrafında bir kontrol blokunun yerleştirilmesi ve tasarım özelliklerinin sağlanması amacıyla parametrelerin düzeltilmesi gerekir. Bu düzenleme bir döngü yaratır. Bir çok tasarım

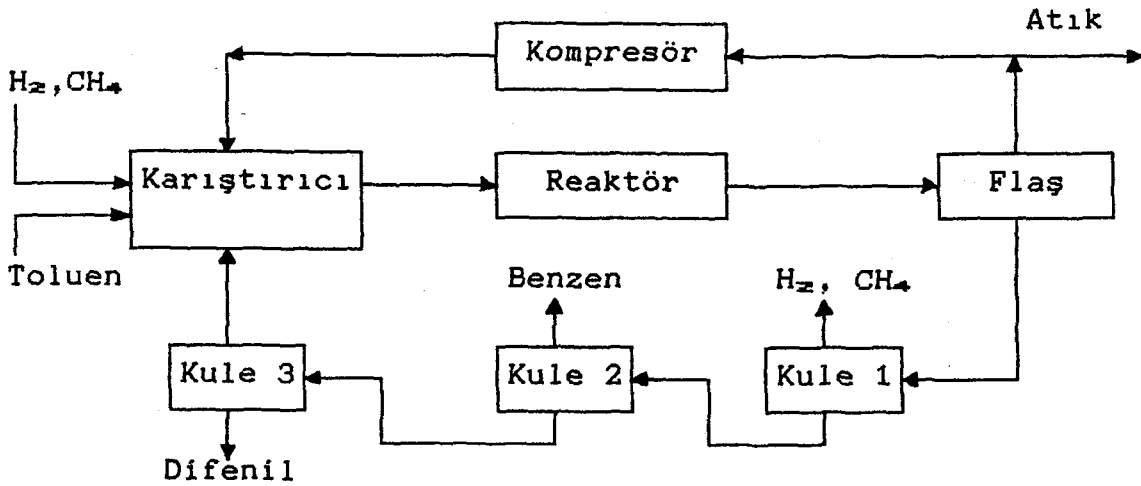
değişkeninin değeri saptanması gerekirse, sonuçta birkaç iç içe hesaplama döngüsü oluşur.

Kimyasal proses tesislerinde hemen hemen her zaman maddelerin bir tür geri akışı bulunur: dönüştürülmemiş tepkenler beslemeye geri verilir; sürükleyiciler azeotropik kolonlara geri gönderilir; geri ısıtma beslemenin sıcaklığını yükseltir. İki akım bir geri döngüde karıştırıldığında, bir madde geri döngüsü oluşur ve hesaplamalar sıcaklık ve bileşim temelinde tekrarlanır. Bir karışma olmadan akımlar çapraz olarak birbirini geçerse, sadece ısı döngüsü bulunur. Bir ısı döngüsünde, hem bileşimleri hem de sıcaklıkları aktarılan ısıya bağlı olan akımlar bulunabilir. Ancak, bileşimi aktarılan ısıya bağlı olmayan bir akım her zaman bulunur. Bu durum, sadece sıcaklık tekrarını gerektirir ve dolayısıyla, tahminleri daha kolay yapılır, yakınsamaları da daha hızlı ulaşılır hale getirir. Bir benzetimde proses kısıtlamaları uygulandığında kontrol döngüleri katılır (Massey,1982). Geri döngüler basit, iç içe veya kenetlenmiş olabilir. Basit döngüler açıklama gerektirmez; geri döndürülen sadece bir akım ve dolayısıyla sadece bir döngü vardır. İç içe bir döngüde tekrarlanan tek bir akım vardır, ancak döngüler bağımsız olarak yakınsar; uzun sürer fakat dengelidir. Ortak bir akımı paylaşan iç içe olmayan kenetlenmiş döngülerde tekrarlı bir akım vardır, fakat döngüler eşanlı olarak yakınsar; hızlıdır fakat daha az dengelidir. Bu

durumlar, hesaplamalara başlanmadan önce geri döngü akımlarının şartları ve bileşimlerinin tahminini gerektirdiğinden, tasarımı zorlaştırır. Tahminler kontrol edilir; hatalı ise, yeni tahminler yapılarak hesaplamalar tekrarlanır. Bu işlem, tahmin doğru oluncaya kadar devam ettirilir (Massey, 1982).

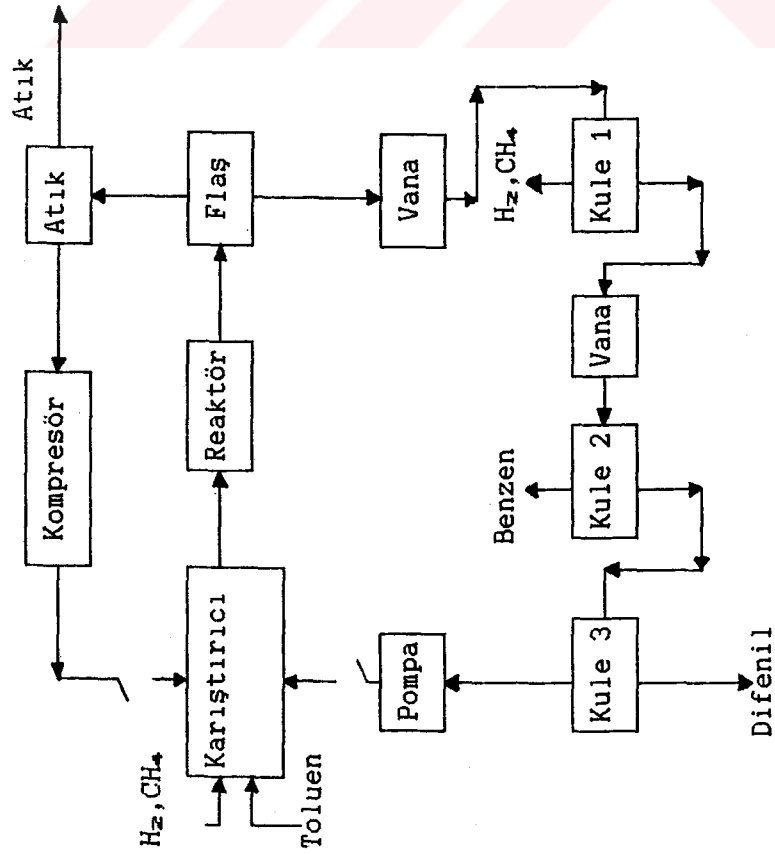
Geri döngülü problemlerde pek çok tekrarlı tahmin ve hesaplamalar yapıldığından, çözümleri bilgisayarla bile, özellikle yakınsama olmaz ise, çok pahalı ve uzun olur. Böylece, madde (ve enerji) denkliklerini çözmek için modüler yöntemle ilgili olarak, "Koparma" (tearing) kavramı ortaya çıkmıştır. Bu kavram ardışık bilgi akışı sağlamak amacıyla modüller arasındaki bağların koparılması ile ilgilidir. "Koparma", geri döngü akımlar nedeniyle oluşmuş bilgi döngüsünden dolayı gereklidir. Koparmada bilinmeyen değerlerin bazıları (koparma değişkenleri) ve genellikle geri döngü akımları için, tahmini değerler sağlanır. Daha sonra, modüller alt programlardan koparma değişkenlerinin değerleri hesaplanır. Bu hesaplama, değerler arasındaki fark yeterince küçük oluncaya kadar böyle devam eder (Himmelblau, 1989). Yakınsamaya hızla ulaşabilmede hangi akımların koparılacağına doğru karar vermek önemlidir. Örneğin, Şekil 2.8.'de verilen geri döngülü bir prosesin (toluenin hidrodealkilasyonu (HDA)) akış şemasında, gaz ve sıvı akımların ikisini de kesmek verimli değildir (Şekil 2.9a); bunun

yerine reaktöre giren veya çıkan akım kesilirse her iki geri döngü parçalanır (Şekil 2.9b). Burada, flaş tankına giren akım, hesaplamalarda başlangıç noktası olarak kabul edilebilir. Fiziksel özellik verilerinin prosese gerçek tahminler sağlayacağından emin olunmalı ve CAD çalışmasına flaş hesaplamaları ile başlanmalıdır. Flaş tankına giren akımın belirtilmesi, her zaman bir veya birkaç geri döngüyü parçalar ayrıca, sıvı ayırma sistemi ile ilgili olarak verilen bazı kararların değerlendirilmesini de sağlar. CAD paketlerin çoğu, akış şemasına dahil edilmesi gereken yakınsama bloklarının sayısını en aza indirmek için hangi akımların koparılması gerektiğini gösteren bir algoritma içerir (Douglas, 1988). Geri dönüş akımlarının değerlerinin hesaplanmasında yakınsama hızlandırıcısı olarak kullanılabilecek pek çok yöntemden özellikle ikisi pratikte gerçekten gereklidir: Ard arda yerine koyma yöntemi ve Wegstein yöntemi (Massey, 1982).

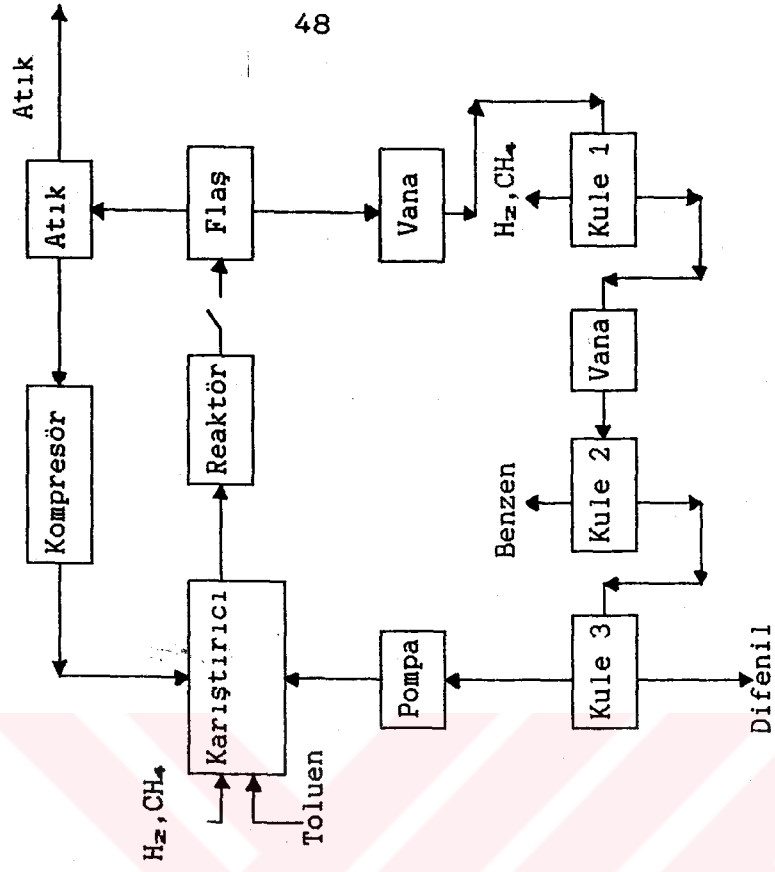


Şekil 2.8. Geri Döngülü Bir Prosesin Blok Akış Diyagramı

a)



b)



Şekil 2.9. Akış Diyagramı Üzerinde Geri Döngü Akımlarını Koparma Seçenekleri

2.2.2.2. Tam Benzetim veya Tasarım Program Sistemlerine Örnekler

Tam benzetim ve tasarım program sistemleri temelde aynı kısımlardan oluşuyorsa da aralarında farklar da vardır. Bu sistemler, hesaplama düzenini kullanıcıdan sağlamasını bekleme derecesi, veya kullanıcı için akış şemasını analiz etme derecesi veya kullanıcı ile birlikte akış şemasını analiz etme derecesi; termodinamik paket yada paketler seçeneğini sunma derecesi; kullanılabilir standart alt programların sayısı; standart olmayan alt programları ekleme kolaylığı; yakınsamayı hızlandırıcı yöntemlerin kullanılabilirliği; sisteme girdi ve çıktıların kullanıcıya dönük olma derecesi ve temel işlemlerin işletme parametrelerinin değerlerini veya akış şemasının şeklini benzetim veya tasarım prosesi olarak kabul veya değiştirme durumları bakımından farklılık gösterebilir. Böylece, tam benzetim ve tasarım programları, basit GEMCS'den esnek FLOWPACK ve tam etkileşimli bir bilgisayar işletme sisteminden faydalanmak için geliştirilen CONCEPT sistemine kadar çeşitlilik gösterir (Tablo 2.1.) (Sinnot,1985).

Tablo 2.1. Benzetim Paketlerine Örnekler

Adı	Yazarı	Kaynak	Elde Edilebilirliği
GEMCS	McMasters Üniversitesi	Kullanım kitabı, Johnson(1972)	Açık
FLOWTRAN	Monsanto Company ve CACHE	Seader et al. (1977), Clark(1977)	ABD Üniversiteleri
ASPEN PLUS	Aspen Teknolojisi	Evans et al. (1979)	Aspen Teknolojisi, Cambridge
DESIGN/2000	ChemShare	Kullanım kitabı,	Ticari
PROCESS	Simulation Science Inc., ABD	Kullanım ve Uygulama Kitapları	Ticari İngiltere Üniversiteleri
CONCEPT	CAD Cent Cambridge, İngiltere	Kullanım kitabı, Hutchinson ve Leesley(1982)	Ticari
SPEEDUP	R.Sargent	Sargent et al. (1982)	British Technology Group, Londra, İngiltere
FLOWPACK	Imperial Chemical Industries Ltd., İngiltere	Kullanım kitabı, Davies(1971)	İngiltere Üniversiteleri

2.2.2.2.1. GEMCS

GEMCS, geri döngü akımları olan veya olmayan kararlı-hal prosesler için uygun bir ardışık modüler benzetim yürütücü programdır. Fiziksel akımları hesaplamak veya birimler ile hesaplama blokları arasında mali veya fiziksel olmayan verileri aktarmak için bir modelleme yaklaşımı kullanır (Peters, 1982).

Bir prosesteki birimlerin matematiksel modelleri ve prosese verilen beslemeleri tanımlayan uygun parametreler verildiğinde, GEMCS, ara ve çıkan akımların şartlarını hesaplar. Sadece yürütücü bir programdır; az sayıda temel işlem modeli verir ve fiziksel özellik paketine sahip olmadığı için uygulanabilecek proses tipleri sınırlıdır. Ancak özel veya genel amaçlı fiziksel özellik paketlerini GEMCS'a bağlamak kolaydır. Yürütücü yapısı GEMCS'a pek çok pratik avantaj sağlar:

- Uygulama alanını, belli bir kimya, proses veya sistem mühendisliğine sınırlamaz,
- Sadece 5000 kelimelik bir bilgisayar hafıza kapasitesi gerektirir,
- Öğrenilmesi, kullanılması ve çeşitli uygulamalara göre değiştirilmesi kolaydır,
- Çok iyi bir benzetim eğitim aracıdır,
- Birim modelleri ve fiziksel özellikler kullanıcı

tarafından sağlandığından sonuçların hassasiyeti ve güvenilirliği anlaşılabilir,

- Kısa bir programdır; elde edilmesi ve çalıştırılması ucuzdur,
- FORTRAN'da yazılmıştır; kimya, petrokimya, metalurji, maden işleme, nükleer malzemeler hazırlama ve kağıt sanayilerinde kullanılır,
- Daha gelişmiş akış şeması programlarının temelini oluşturur.

2.2.2.2.2. FLOWTRAN

FLOWTRAN, genel amaçlı ticari proses benzetecilerinin çoğu gibi, ardışık-modüler yöntem uygular ve kararlı-hal buhar-sıvı ve sıvı-sıvı proseslerin hemen hemen tümünü modellemek için kullanılabilir. Ayrıntılı madde ve enerji denklikleri, ön cihaz boyutlandırma ve maliyet hesaplamaları yapabilir (Larsen, 1982).

1961'e kadar, Monsanto'da proses birimlerinin bilgisayar modellerini akış şeması benzetimleri olarak bir araya getirilmesi çabaları devam etmiştir. 1964'de, fiziksel özellikler, sistem tasarımı ve dili, benzetim alt programları ve kullanıcı kütüphaneleri içeren FLOWTRAN başlatıldı. 1966'da FLOWTRAN, Monsanto'da genel kullanıma açıldı. Monsanto, 1969'da FLOWTRAN'ı servis bürosu temelinde A.B.D.'ye sundu; 1972'de ise lisans için başvurdu. Ayrıca,

1973'de FLOWTRAN, ulusal bilgisayar ağında sadece akademik çalışmalarda kullanılmak üzere üniversitelere sunuldu. 1977'de M.I.T tarafından ASPEN (kömür proseslerinin benzetiminde kullanılmak üzere geliştirilen ileri proses benzeteci) 'in geliştirilmesinde temel olarak seçildi.

FLOWTRAN proses benzetimi sistemi, başlıca dört programdan oluşur:

1. INF bigi programı - PUBLIC VE PRIVATE veri dosyalarında saklanan 180 saf bileşenin veri sabitleri elde edilir.
2. PROPTY bileşen fiziksel özellik programı - deneysel verilerden ve kestirim yöntemleri ile saf bileşenlerin veri sabitleri elde edilir ve sonradan kullanılmak üzere saklanır.
3. VLE faz dengesi programı - benzeteçlerde kullanılmak üzere buhar-sıvı ve sıvı-sıvı denge verilerinden karışım katsayıları elde edilir.
4. FLOWTRAN proses benzetim programı - FLOWTRAN girdi verileri yürütülebilir bir FORTRAN programına çevrilir, gerekli veriler ve alt programlar birbirine bağlanır ve hesaplamalar yapılır

Bir FLOWTRAN benzetimi sürdürmek için, birimler arasındaki madde akışı FLOWTRAN akımlarıyla, temel işlemler ise bloklar ile gösterilerek, proses akış şeması FLOWTRAN akış şemasına dönüştürülür. Kullanıcı, prosesteki kimyasal

bileşenleri, prosese giren her bir akımın basıncını, sıcaklığını ve bileşen debilerini, hesaplama sırasını ve her blok için parametreler şeklinde işlem ve tasarım değişkenlerini belirtir. FLOWTRAN, her proses akımı ve her bir aletin çalışma şartları hakkında tam bilgi sağlayarak, tüm tesisin kararlı-hal davranışını hesaplar. Ayrıca, her bir aletin ön boyutlanması yapılarak, sabit ve işletme maliyeti hesaplanabilir ve tüm tesisin kar analizi yapılabilir. FLOWTRAN kullanılarak tek bir temel işlem incelenebilir veya karmaşık bir kimyasal proses analiz edilebilir. Örneğin, FLOWTRAN kullanılarak, bir monomer üretim prosesini darbogazdan kurtarma amacıyla optimizasyon çalışmasında, 750000\$/yıl kar artışı sağladı; ayrıca, yeni bir ayırma prosesinin ekonomik değerlendirilmesinde verilen sürede el hesabında 1 deneme yapılabilir iken, 20 ayrı şart grubunun incelenmesi sağlanabildi ve istenmeyen yan ürünleri yok etmek için tesise eklenecek yeni bir kolonun tasarımında pilot-tesis incelemesi gerekliliği giderildi; Monsanto asetik asit tesisi ise, pilot tesis yapılmadan tasarlandı ve kuruldu (Larsen, 1982).

FLOWTRAN kapasite bakımından ChemShare'in DESIGN/2000 (Bakınız 2.2.2.3.), Simulation Sciences'ın PROCESS (Bakınız 2.2.2.2.4.) ve AAA Technology'nin CONCEPT (Bakınız 2.2.2.2.5.) programları ile karşılaştırılabilir. Bu genel amaçlı proses benzetecileri arasında, faz dengesi ve özel fiziksel özellik modellerinin ve alt programların kullanım

kolaylığı, boyutlandırma ve maliyet analizi, sonuç bildirme açıklığı ve kullanım yaygınlığı bakımından FLOWTRAN, fiziksel özellik modellerinin çeşitliliği, veri bankasındaki bileşen sayısı, petrol sanayinin özel uygulamalarına cevap verebilme bakımından ise diğerleri daha üstündür (Larsen, 1982).

2.2.2.2.3. ChemShare Programları

ChemShare programları, gaz işleme ve aktarımı, ham petrol rafinasyonu, kimyasal ve petrokimyasal maddeler üretimi ve saflaştırma, kömür dönüştürme prosesleri alanlarında madde ve enerji denkliği hesaplamaları yapmak için kullanılır (Matusky, 1982).

ChemShare programlarının başlıca pazarı, mühendislik, tasarım ve danışmanlık firmaları ve işletmelerden oluşur. Her iki grup aynı programları uyguluyorsa da amaçları farklıdır. Mühendislik, tasarım ve danışmanlık firmaları ChemShare programlarını proses ile ilgili ön incelemeleri yapmak, işletmeler ise genellikle, karı artıracak bir üretime ulaşmak için tesislerde yapılabilecek enerji tasarrufu, darbogazdan kurtulma, daha yüksek saflıkta ürün üretimi, yeni cihaz satın alma gereksinimlerinin azaltılması ve daha ucuz veya farklı hammaddelerin kullanılması gibi değişiklikleri saptamak amacıyla kullanır.

ChemShare kullanıcıları, genel modelleme teknikleri içeren genel amaçlı bir programı kullanmak zorunda değildirler: hesaplamalarını çok özel endüstriyel gereksinimler için ard arda eklenmiş bir veya daha fazla program ile çözebilirler. Programlar ve bunların fonksiyonları aşağıdaki gibidir:

DESIGN/2000: Çok çeşitli kimyasal ve hidrokarbon prosesin tasarımı ve benzetiminde uygulanan son derece güçlü ve kapsamlı bir programdır. Bu program, sadece madde ve enerji denklikleri hesaplamaları yapmaz, bazı tipte cihazları boyutlandırabilir ve akımların bileşimini ve özelliklerini tanımlayabilir. Programa önceden, tüm standart temel işlemler modelleri yüklenmiştir. Temel işlemler, tüm prosesi tanımlamak için, basit bir numaralama sistemi ile birbirine bağlanmıştır. Her birimi tanımlamak için ise, sadece çok kolay bulunabilen tipik bilgiler gerekir. Birimler eklenecek veya çıkarılarak veya işletme şartları ayarlanarak proses değiştirilebilir. Program, akım hesaplamaları için termodinamik verileri otomatik olarak sağlar ve karmaşık geri döngüleri bir yakınsama hızlandırıcısı kullanarak otomatik olarak hesaplar. Ayrıca, boru boyutlandırma, özel reaktörler veya ekonomi analiz hesaplamaları için, programa özel alt programlar da katılabilir.

REFINE: Ham petrol destilasyonları için özel bir modeldir. Yakınsaması zor olan ham petrol kolonu hesaplamalarının daha hızlı ve emin çözümü, ChemShare tarafından geliştirilen yeni matematiksel teknik ile yapılır. Yakınsama yöntemi, standart tekrarlı tekniklerden çok daha etkilidir; ana kolonu ve yan sıyırıcıları tek bir birim olarak ele alır ve eşanlı çözüm yapar.

CHEMTRAN: DESIGN/2000 VE REFINE'a fiziksel özellik verileri sağlayan çok amaçlı bir programdır. CHEMTRAN, saf bileşen özelliklerinin en geniş ticari veri bankasını içerir ve 900'e yakın bileşenin özelliklerini (molekül ağırlığı, kaynama noktası, kritik özellikler, ideal gaz ısı kapasitesi, kapasitesi, asentrik faktör, çözünürlük özellikleri, sıvı yoğunluğu, buhar basıncı, buharlaşma ısısı) otomatik olarak iki benzetece aktarır (Matulsky,1982).

2.2.2.2.4. PROCESS

PROCESS benzetim programı petrol, sentetik yakıt ve kimyasal proses tesislerindeki kararlı-hal madde ve enerji denkliklerini hesaplamak için veri ve programlanmış yöntemler paketidir (Brannock et al.,1982). 250 alt program içeren ve FORTRAN IV dilinde yazılmış bu program, modüler ve dosyaya dönük olarak tasarlanmıştır. Termodinamik özellik tahmini, temel işlemler hesaplamaları ve özel çıkışlı raporlar için kullanıcıya ait alt programları girmek mümkündür.

PROCESS, 650'den fazla organik ve inorganik bileşenden oluşan geniş bir saf bileşen veri bankası içerir. Her bir bileşen için, sıcaklığa bağlı özellikler ve sabit özellikler ve parametreler saklanmıştır. Kullanıcı, özellik verilerinden herhangi birini çıkarabilir, ekleyebilir veya değiştirebilir. Ayrıca, özel bir veri bankası oluşturulup, geliştirilebilir.

PROCESS, K denge değerleri, entalpi, entropi ve yoğunluk kestirimleri için pek çok yönteme sahiptir. Bu programda, yüksek basınç ve düşük sıcaklıklarda hafif hidrokarbon sistemleri için, Soave-Redlich-Kwong veya Peng-Robinson hal denklemleri sıkça kullanılır. Kimyasal sistemler için bileşen buhar basıncı verileri ve entalpi verileri kullanılır. Sistem ideal değilse, sıvı aktivite katsayılarını ve buhar faz fûgasite düzeltmelerini hesaplamak için veriler girilebilir.

Bütün çalışma tanımlamaları madde, enerji ve denge denkliği bağıntıları ile eşanlı olarak çözülür. Kullanılan algoritma bir Newton-Raphson yakınsama tekniğidir. Tepsi sıcaklığı, akış debileri ve ısıtıcı-soğutucu yükleri, yan ürün debileri ve besleme debileri gibi kullanıcı tarafından tanımlanan özellik değişkenleri programda kullanılan bağımsız değişkenlerdir. PROCESS, Fenske tüm geri akış hesaplamaları için iki model, Underwood minimum geri akış hesaplamaları için ise bir model içerir.

Akış şeması hesaplamaları, normal olarak sadece madde ve enerji denklıkları içerir. Fakat PROCESS sadece ön tasarım ve analiz için madde denkliği hesaplamaları yapar. PROCESS'de ele alınabilen akış şeması 75 temel işlem 150 akım ve 50 bileşenlidir ve rahatça genişletilebilir. Hesaplama düzeni, kullanıcı tarafından verilebilir yada PROCESS tarafından belirtilebilir. PROCESS, koparılacak geri döngü akımlarını ve döngü hesaplama sırasını belirleyen bir geri döngü analizörü içerir; kullanıcının, geri döngü akımlarını tanımlaması gerekmez. Proses benzetim akış şemasında yakınsama bloku gerektirmez. Yakınsama sınırlamaları program tarafından otomatik olarak düzenlenir; fakat kullanıcı tarafından da ele alınabilir. Wegstein hızlandırıcı tekniği kullanılabilir (Brannock et al., 1982).

2.2.2.2.5. CONCEPT

CONCEPT, büyük ve küçük problemlerde etkin, pek çok prosese uygulanabilen, hem güçlü hem de esnek, etkileşimli bir proses akış şeması programıdır (Winter, 1982). Pek çok akış şeması programı gibi, CONCEPT, madde ve enerji denkliği, fiziksel özellik ve ayrıntılı tasarım hesaplamalarını modüler yaklaşımla yapar. Ancak, diğer programlarda pek rastlanmayan tam etkileşimli işlem, temel işlemler arasındaki bilgi aktarımı için tam esneklik, aşırı hesaplama yapılmadan ileri ve geri kontrol olanğı, güçlü yakınsama

hızlandırıcıları (Ardarda Yerine Koyma, Wegstein, Broyden yöntemleri) ve otomatik akış şeması analizi gibi pek çok teknolojik yenilikler içerir. CONCEPT, uygulama ve kullanıcı gereksinimlerine cevap verecek şekilde değiştirilebilen, fakat çözümleri çok az bir ön hazırlıkla hızlı bir şekilde elde edilebilmesi için kütüphanesi aşırı miktarda teknoloji ile yüklenen, "açık" bir sistem olarak yaratıldı.

CONCEPT modüllerden oluşan bir programdır. Bu modüllerin her biri, kendi görevine uygun özellikler taşımaktadır, ancak tüm sistemin işleyişi ilgili tesise özgü bir proje veri dosyası ile düzenlenir. Bu dosya herhangi bir kademede saklanabilir veya çağrılabilir, öyle ki kullanıcı her defasında sadece istediği kadar bir çalışma yapabilir. Etkileşimli, basit bir İngilizce dili kullanarak tanımlamaları belirtmek, sonuçların analizini hızlandırmak ve düzeltilen şartların tekrar uygulanmasını başlatmak için, terminal çalışmasına olanak sağlar.

CONCEPT'in çeşitli kısımlarının başlıca fonksiyonları:

FLOWSHEET - birimin proses akımlarının analizi ile ilgilidir
 DIALOGUE - problem tanımlamalarını CONCEPT hesaplayıcısına girme mekanizmasını sağlar. Girilecek bilgiler, kimyasal bileşenlerin özellikleri, termodinamik seçeneklerin seçimi, geri döngü akımların ve besleme akımların verileri, temel işlem

modüllerin özellikleri ve parametreleri ve hesaplama ve yakınsama ayarlamaları ile ilgilidir.

CONCEPT hesaplayıcısı - tasarım veya benzetimi FLOWSHEET ve DIALOGUE'de verilen tanımlamalar uygulayan modüler-ardışık hesaplayıcıdır.

KUTUPHANE - temel işlem kütüphanesinde, destilasyon kolonları, pompalar, ısı değiştiriciler ve flaş tankları gibi proses tesisini meydana getiren cihazların tasarım yöntemleri verilmektedir. Ayrıca, termodinamik ve aktarım verileri sağlamak amacıyla KEYDATA sistemi CONCEPT içinde verilmektedir.

CONCEPT'i daha ayrıntılı mühendislik tasarım çalışmaları, proje mühendisliği sistemleri ve kararsız-hal durumları inceleyebilecek hale getirmek için çalışılmaktadır.

2.2.2.2.6. CHEMOS

CHEMOS, farklı zorluk seviyelerinde kullanılabilen etkileşimli bir proses tasarım programıdır (Thompson, 1982). Program modüler yapıdadır. Kullanıcıların pek çoğu üniversite son sınıf öğrencileri veya yüksek lisans yapan proses tasarımı öğrencileridir. Programın temeli proses akış şemalarının oluşturulduğu basit proses birimlerinin bir kataloğundan oluşur. Birimler eklenebilir, birbirine bağlanabilir,

Çalıştırılabilir ve silinebilir. Kullanıcı, sistem ile oynayabilir ve birçok değişik proses şeması oluşturabilir. Bu şekilde geliştirilen modeller, dosyalarda saklanabilir, yeniden incelenebilir, çalışma parametrelerine daha uygun değerler verilerek geliştirilebilir ve ekonomik kıyaslama amacı ile maliyet verileri eklenerek genişletilebilir. Daha ileri bir seviyede, program, yüksek lisans tezi çalışmalarıyla kullanılabilen özellikler de sunabilir. İç içe bir blok yapısı ve kullanıcı tarafından yazılan kısım ile standart blok kısmı arasındaki etkileşimi sağlayan yüksek seviyeli bir dil bu özellikler arasındadır. Bir CHEMOS programı en basit haliyle tesisi oluşturan proses birimlerinin listesi (hesaplama düzeni içinde) ve gerekli olabilecek herhangi bir geri besleme kontrolü veya geri döngü kapama bloklarından oluşur. Herbir proses birimiyle birlikte parametreler ve onların ilgili değerlerin listesi verilebilir. Akım özellikleri de modeli tamamlar.

CHEMOS programı, PL/I(F)' de yazılmış birbirine bağlı yöntemler ve makina dili formunda 300 bileşimin özelliklerini içeren bir veri bankasından oluşur. Bu program, maliyet verilerinin yüklenmesinde çeşitli yolların kullanılabilmesini sağlar. Böylece, çeşitli tasarımlar maliyet veya karlılık bakımından kıyaslanabilir.

Her proses birimi bloku veya CHEMOS komutu, beraberinde işlem ve uygulanabilir parametreler hakkında bilgi taşıdığından, bu program kendi kendini bilgilendiren tiptedir. Bir model test edilip, tesis verileri veya başka hesaplamalarla kontrol edildikten sonra, performansı yükseltmek için çeşitli şekilde değiştirilebilir. En basit şekilde, bir seri deneyde, her denemeden sonra bazı parametrelerin değerleri değiştirilerek yapılabilir.

Grafik paketleriyle bağlantılar sayesinde, her tek boyutlu araştırmanın sonuçları veya ölçümleri grafiksel olarak monitör üzerinde gösterilir ve daha sonra çıktı olarak alınabilir. Daha karmaşık proseslerin geliştirilmesinde (özellikle bir üniversite tasarım dersinde) problemi az yada çok kendi kendine yeterli olan ayrı ayrı modellenen ve kontrol edilebilen birimlere parçalamak sık sık gerekir. Bazı girdi akımları diğer birimlere veya toplam madde denkliliğine bağlı olduğundan, birimler tam olarak kendi kendine yetmez. Ancak, model hesaplamalarının doğruluğunu kontrol etmek için, bütün girdiler için uygun değerler kabul edilebilir. Bir proses birimi modülünde kaç seçenek olduğuna bağlı olmaksızın, bunların sayısı yetersiz kalacaktır. Doğrudan hesaplama kısımlarını katma yöntemi gereklidir. CHEMOS, bir tercüman program içerir. Bu program, kaynak dilinin bir satırını, hemen uygulanacak veya uygulamak üzere hesaplama birimi blokuna saklanacak bir komutlar serisine çevirir.

2.2.2.2.7. MINI-SIM

MINI-SIM, kullanıcıya proses şartlarını değiştirme, akımları ele alma ve bazı basit temel işlem hesaplamaları yapma imkanı veren düzenleyici bir programla birleştirilmiş çok amaçlı bir denge programıdır (Erbar et al., 1982). Düzenleyici program, etkileşimli bir bilgisayar gerektirir. Bu hesaplama yöntemlerinin hiç birisi yeni değildir, ancak, MINI-SIM, bütün bu özellikleri tek programda sunan tek benzetim sistemi gibi görünmektedir. MINI-SIM hızla gelişen, oldukça geniş hafızaya sahip, girdi çıktı kabiliyeti düşük ev tipi bilgisayarlar için uygundur.

MINI-SIM'in kalbi, çok amaçlı güçlü bir denge hesabıdır. Denge tahminleri için kullanılan termodinamik özellikler, Soave-Redlich-Kwong (SRK) hal eşitliğine dayanır. Denge programı, kabarcık noktası, çığ noktası ve flaş gibi ve standart denge hesaplamaları ve sabit entalpi veya entropi tipi hesaplamaları yapabilir. Programa girdiler iki şekilde verilebilir:

- Problemlerle ilgili özel bilgilerin sorulduğu programla doğrudan dialog şeklinde; bunun için de istenen temel problem verileri, hesaplama tipi, problem tanımlama, birimler, seçilmiş kontrol sabitleri, sistemin sıcaklığı ve basıncı, beslenenlerin bileşen tanımlama numaraları ve akış debileridir.

- Önceden MINI-SIM tarafından hazırlanmış disk dosyası şeklinde. Bu tip bir girdiyle, kullanıcı, temel problem verilerini bir defa girer; problem dosyasını yazdıktan sonra çalışmayı durdurur ve daha sonra önceki hesaplamadan hiç bir sonucu kaybetmeden hesaplamaları yeniden başlatır. MINI-SIM de çalışılabilecek maksimum bileşen sayısı 25'dir. Hesaplamalardaki bileşen sayısına bağlı olarak, 10-52 akımla ilgili olan bilgiler saklanabilir. Bu programda 60 bileşenin verileri saklanır. Ayrıca, programda standart olmayan en fazla 20 bileşenin özellikleri saklanabilir.

MINI-SIM'den "tam" ve "özet" olarak iki farklı çıktı şekli elde edilebilir. "Tam" çıktıda, besleme, sıvı ve buhar debileri, mol kesirleri, her bileşenin K değerleri verilir. Ayrıca, beslenen sıvı ve buharın molekül ağırlığı, toplam ve molar entalpileri ve entropileri ve sıvı-buhar faz yoğunlukları da yazılır.

2.2.2.2.8. SPEEDUP

Kararlı-hal proses benzetim programlarının çoğu yönteme dönüktür. Her biri, kimyasal proseslerde kullanılan çeşitli birimlerin benzetimi yada tasarımı için özel amaçlı programlar ve bu programları hesaplanabilir bir sırada birleştirmek için prosesin akış diyagramının şeklini kullanan bir

yürütücü program içerir. Proses akış diyagramı geri döngü akımlar içeriyorsa, prosesi hesaplamak amacıyla bazı akımların değerlerinin tahmini ve tekrarını içeren akım parçalama tekniklerin kullanılması gerekir (Sargent et al.,1982).

Standart birimler için özel amaçlı programlar yazmakta pek çok avantaj vardır. Tanımlayıcı denklemlerin cebirsel yapıları incelenebilir, ayrıca, birimlerin bilinen fiziksel davranışlarından türemiş sayısal şartlar da gözönüne alınabilir. Ancak, özellikle tasarım problemleri için, birim programlarının katı (sert) yapıları tüm prosesin bileşik çözümünü zorlaştırır. Bu problemlerde, besleme akımı parametrelerin veya birimlerin davranışını tanımlayan parametrelerin bazıları bilinmez ve değerlerinin istenen çıkan akım şartlarına ulaşması araştırılır. Böylece, yönteme dönük bir yaklaşımla, tasarım problemlerinde akış diyagramına fazladan bilgi geri döngüleri katılır. Bu geri döngüler, hesaplama düzenini saptama problemini ve akım parçalama ile ilgili sayısal problemleri zorlaştırır.

Denkleme dönük bir benzetim sistemi de standart birimler için hazırlanmış modeller gerektirir. Ancak, bunlar, gene proses akış diyagramı kullanılarak yürütücü program tarafından bir araya getirilen tanımlayıcı denklemler grubudur. Böylece, modeller kolay yazılabilir, değiştirilebilir ve ana yürütücü programda oluşturuldukları için özel sayısal

yöntemlerin bilinmesi gerekmez. Bu tip tasarım tanımlamalarının belli problemleri yoktur sadece yürütücü programa fazladan denklem sağlar. Ancak, her ne kadar otomatik cebirsel işlemler son yıllarda çok gelişmişse de cebirsel yapının tüm denklem sisteminin otomatik hassasiyet analizi bakımından incelenmesi çok pahalı olabilir. Dolayısıyla, pratik bir benzetim paketi yöntem ve denklemlerden oluşan karma sistemleri ele alabilmelidir; öyle ki, kötü şartlanmış denklem alt grupları için özel amaçlı yöntem programları kullanılabilsin (Sargent et al., 1982).

Kararlı-hal proses benzetiminde olduğu gibi, dinamik benzetimde de yönteme dönük (veya modüler) ve denkleme dönük olarak iki paralel gelişme akımı oluşmuştur. Modüler düzenlemede, modüllerle benzetimi yapılan proses birimleri ile ilgili hal değişkenlerinin türevlerini hesaplamak için yöntemler (modüller) kullanılır. Bu türevler, birimin zaman boyunca davranışını hesaplamak için kullanılır. Her birimin durumu her zaman süresinde bağımsız olarak saptanır. Böylece modüller arasındaki birleşme, denkleme dönük düzenlerde olduğu gibi entegrasyon prosesinin her kademesinde değil, sadece zaman süreleri sonunda yer alır. Dolayısıyla, modüler yöntemler denkleme-dönük yöntemlerden daha az hassas sonuçlar verir. Daha sonra gelişen yöntemlerde prosesi tanımlayan tüm denklemler eşanlı olarak çözülür; böylece, tüm birimler arasında tam bir birleşme söz konusudur. Dinamik

benzetimde daha az hesaplama ile daha hassas sonuçlar için, bilgisayar hafızası sınırlı olduğu durumlar dışında denkleme dönük yaklaşım tercih edilmiştir.

SPEEDUP, kimyasal proseslerin hem kararlı-hal hem de dinamik benzetimi için kullanılabilen eşanlı denklem-çözen bir proses benzetim sistemidir (Sargent et al.,1982). Proses şartlarının optimizasyonu için de imkan sağlar. Fazla geri döngü akımı olduğunda daha etkin olan bu program, kararlı- hal proses tasarımı, proses kontrol tasarımı, güvenlik analizleri ve işletme incelemeleri için kullanılabilir.

SPEEDUP sisteminin özü, tasarımın durumunu gösteren veri bankasıdır. Tasarımın çeşitli kademelerini sürdürmek için girdi bilgileri ve komutları mühendisliğe dönük dilde verilir. Sistem, tesis birimi modelleri, fiziksel özellikler, standartlar, maliyetler gibi tasarım verileri içeren bir veri bankası ve yürütücü tarafından kullanılan 40 FORTRAN alt programlarından (sayısal yöntemler, fiziksel özellik bağıntıları) oluşan bir kütüphane içerir. Kullanıcı veri bankasını değiştirebilir veya ona ekleme yapabilir.

Benzetim problemini tanımlayan belli başlı kısımlar şöyle özetlenebilir:

FLWSHEET- Çeşitli birimler arasındaki bağlantıları gösteren prosesin akış diyagramı.

- MODEL - Prosesteki birim tiplerinin her biri için belirlenmiş tanımlama denklemleri.
- UNIT - Her bir proses akımı veya birimin tasarım tanımlamaları
- OPERATION - Benzetim sırasında izlenmesi gereken işlem düzeni

Üretim, bakım ve taşıma kolaylığı amacıyla SPEEDUP sistemi PASCAL'da programlanmıştır, ve komutları derlendikten sonra fiziksel özellik kütüphaneleri ve benzetimi yapacak sayısal yöntemler ile bağlanan bir FORTRAN programı üretir. Belli bir süreden sonra veya bir kesinti noktasında işlem durdurulabilir ve kontrol kullanıcıya döner. Kullanıcı, grafik yada çizelge şeklinde üretilmiş sonuçları inceleyebilir yada bazı değişkenlerin değerlerini değiştirebilir ve seçilen herhangi bir zamandan sonra benzetimi tekrar başlatır.

2.2.2.2.9. FLOWPACK II

ICI laboratuvarlarında 25 yıl önce, kullanılacak akış şeması programına karar verilmeden önce çeşitli tekniklerin değerlendirilmesi üzerinde durulmuştur; böylece Network 67 ve 68 akış şemasına dayalı FLOWPACK I, PACER'in geliştirilmiş hali olan PSYCHO ve özel amaçlı akış şeması programların hazırlanması için bir çerçeve oluşturan GENIE gibi en az üç

sistem geliştirilmiş ve kullanılmıştır. Ancak, hesaplama maliyetlerinin yüksek olması "üçüncü-kuşak" akış şeması sistemlerinin geliştirilmesine neden olmuştur. FLOWPACK II bu tip sistemlere bir örnektir (Perris,1982).

Eşanlı modüler yapıda olan FLOWPACK II, karmaşık ama hesaplama bakımından verimli olan proses modelleri üretmek, rastgele bilgi akımları kullanmak, katılarla ilgili proseslerin benzetimini yapmak, tasarım özelliklerine ulaşmak amacıyla kontrollü benzetim yapmak için yeni kolaylıklar ve problemini tanımlamak, yapılan yanlışları düzeltmek ve sonuçların anlamını ve sınırlamalarını kavramak için tasarımcıya yardım etmek amacıyla geniş kolaylıklar sağlanmıştır. Özellikle, şunlara dikkat edilmiştir:

- Basit, kullanımı kolay bir girdi dili,
- Anlamlı kararlarla geniş denetleme,
- Temel işlem modelleri ve fiziksel özellik bağıntıları kütüphanesi,
- Esnek ve güçlü bir fiziksel özellik veri bankası sistemi,
- Anlamlı işlem süresi kararları ve yüksek sistem güvenilirliği ve sağlamlığı,
- Yeni temel işlemler modelleri ve fiziksel özellik bağıntılarını kolayca eklemek için basit bir yapı.

Büyük çaplı endüstriyel problemlerin çözümünde kullanılan akış şeması programlarının en önemli problemi, bilgisayarın işlem süresidir. FLOWPACK II'de hesaplama verimini artırmak için şu kolaylıklar sağlanmıştır:

- Birim ayırması ve sınıflaması. Bu, yer ve zaman tasarrufu sağlar; bu şekilde minimum bağımsız denklem grubu çözülür.
- Hem birinci, hem de ikinci derecede güçlü denklem çözme teknikleri,
- Daha çok verilerin değiştirilmesi ile, çözümün iç içe yapısı üzerinde seçimli kontrol,
- Termo-fiziksel özelliklerin ve temel işlemlerin hesaplanmasında yeni teknikler,
- Birimlerin, akımların, bileşenlerin sayıları üzerindeki sınırlamaları kaldıran esnek, yekpare bir depolama yapısı.

Ardışık modüler bir sistem oldukça verimsiz olduğundan dezavantajları yok etmek için FLOWPACK'ta temel işlem modellerin hesaplanabilir yapısının yürütücü tarafından ele alınabildiği bir "alt ağ" kolaylığı tasarlanmıştır. Ayrıca, eşanlı yakınsama sağlandığından, tasarım hesaplamalarına yeni bir yaklaşım getirir. Eşitlik sınırlamaları, istenirse, proses geri döngüleri ile eşanlı olarak sağlanabilir veya daha çok eşitsizlik sınırlamaları durumunda olduğu gibi bir dış döngü olarak çözülebilir (Perris, 1982).

Temel işlem modellerin hesaplanmasında verimin artırılması problemi iki farklı fakat birbirini tamamlayan yolla ele alınır: alışılacelmış modüler yaklaşımdan ayrılmak olan temel işlem modellerinde ağ tanımlama dilinin kullanılması ile, temel işlem hesaplamalarının mantıksal yapısına yürütücü girişine ve hesaplamaların en verimli düzende yerleştirilmesini kolaylaştıran ağ analizi yapılabilir. Ayrıca, ekstrapolasyon amacıyla onları sürekli tekrar hesaplamak yerine, fiziksel özelliklere kısmen hassas yaklaşık değerler vererek hesaplama verimi yükseltilebilir (Perris,1982).

2.2.2.2.10. MASSBAL

MASSBAL, kağıt endüstrisindeki proseslerin kararlı-hal madde-enerji denkliği hesaplamalarında kullanılan bir akış şeması programıdır. Uygun olmayan veri girdisi, problem tanımlama sınırlamaları ve diğer programlarla gözlenen zayıf yakınsama problemlerini gidermek için geliştirilmiştir (Shewchuk, 1982).

MASSBAL programı, modüler eşanlı bir sistem olarak tasarlanmıştır. İncelenen prosesin matematiksel tanımlaması program tarafından her bir temel işlemi ve işletme sınırlamalarını modelleyen uygun denklemler toplanarak yapılır. MASSBAL, bunu yapmak için program modülleri içerir. Bu doğrusal olmayan denklemler grubu daha sonra Newton-Raphson

yöntemiyle eşanlı olarak çözülür.

Diger sistemlerde kullanılan modüler ardışık yöntemlere göre bu yöntemin bazı avantajları vardır. Bütün denklemler aynı anda çözüldüğü için, problem çözümünü başlatmak için hangi akımların koparılacağına karar vermek için bir döngü analizinin yapılması gerekli değildir; ayrıca, hesaplama sırasının saptanması da anlamsızdır. Bütün denklemler birlikte çözüldüğünden, program, prosesin işletme sınırlamalarını belirlemede büyük esneklik sağlar. Tutarsızlıklar ön- lendiği sürece, akış şemasındaki herhangi bir proses birimi- nin işleyişi sistemdeki herhangi bir yerdeki bir şart belir- tilerek kontrol edilebilir. Ayrıca, bu işletme sınırlamala- rı ilişkili olabilir yani proses değişkenleri arasında bir cebirsel denklem kurulabilir. Eşanlı yöntem hızla yakınsar. Genelde, bir problemin çözümünde 10'dan az tekrar gerekir.

MASSBAL programı proses cihazlarının çoğunun oluşturu- labildiği bir grup oldukça basit temel işlem içermektedir. Bu modeller, çeşitli işlemlerin temel enerji ve madde denk- ligi ilişkilerini ele alır; ayrıca, karmaşık işlemlerin modellenmesi için sınırlandırılabilcek kadar esneklik de sağlar. Modeller bileşen veya toplam debi (ton/gün veya bir başka birim), bileşim (ağırlık veya mol), sıcaklık, entalpi gibi tipik proses akış değişkenleri içerir.

MASSBAL, proses akış değişkenleri olmayan değişkenlerin de katılmasına izin verir. Cihaz tasarım parametreleri (Çıkış hızı, yaklaşma sıcaklığı), cihaz işletme parametreleri (BG gün/ton, güç, verim), ekonomik değerler (enerji maliyeti) ele alınacak değişkenlere katılabilir. Bu değişkenler, MASSBAL programına verilen problem tanımlamasına bağlı olarak belirtilir.

MASSBAL birim modellerinin toplamı ve sınırlamalar, programa, daha sonraki akış şemalarında işlendiği gibi yerleştirilebilecek bir proses grubu olarak tanımlanabilir. Bu şekilde kullanıcı, proses tanımlamasındaki modelleri kurabilir ve kontrol edebilir. Bu kolaylık nedeni ile, veri girişi daha kısadır ve çok daha kolay yapılabilir. Bu özellikler, MASSBAL'a esneklik sağlar.

Genelde, proses birimlerinin modelleme denklemleri prosesin kararlı-hal işlemini tek olarak tanımlamaz. Kalan herhangi bir serbestlik derecesini sağlayacak fazladan sınırlamaları denklem setine katmak gerekir. Program, çok çeşitli sınırlamanın konmasına kolaylık sağlar. Bunların bazıları, iki değişkeni eşitleyerek, bir değişkene belli bir değer vererek, iki değişkenin oranı veya çarpımı, bir değişkenin logaritması veya eksponansiyeli belirtilerek uygulanabilir. Daha genel doğrusal bağıntılar da olabilir. Bu sınırlamalar prosesi modelleyen denklem setine eklenir, böylece pek çok çeşitli prosesin modellenmesinde esneklik

saglanır (Shewchuk, 1982).

MASSBAL programında fiziksel özellikler kütüphanesi yoktur. MASSBAL enerji denkliği hesaplamaları, kullanıcı tarafından her bir bileşen için sağlanan ısı kapasitesi verilerine dayandırılır. Bu veriler iki kısımda sağlanır: Isı kapasitesi ve sıcaklık arasındaki ilişkiyi veren bir polinom ve bir temel şart. Bu veriler birlikte entalpi hesaplamalarını sağlar. Bu ısı kapasitesi denklemleri her bir birimin enerji denkliği denklemlerinin saptanmasında problem süresince kullanılır.

MASSBAL, bölünme-kesri kavramına dayalı bir madde denkliği programıdır. Bu program, en fazla 20 bileşen ve 50 birimli proseslerin madde denkliklerini hesaplamak için kullanılabilir (Sinnott, 1983). Özellikle bir kaç geri döngü akımı içeren prosesler için yararlıdır. Proses akış diyagramı, her bir birim için tahmin edilen taze beslemelerin ve bileşenlerin bölünme kesirlerinin değerlerini ve birimler arasındaki tüm bağıntıları gösteren bir bilgi akış diyagramına indirgenir. Bu değerler bir terminalde yazılır ve program her bir birimdeki bileşenlerin akışlarını hesaplar ve yazar. Program, bölünme-kesri katsayılarının ilk tahminlerinin kolaylıkla değiştirilmesine imkan sağlar; ayrıca, tasarım sınırlamalarını (proses özellikleri ve cihaz parametreleri) sağlayan değerleri bulmak için etkileşimli bir biçimde çalıştırılabilir.

MASSBAL üç ayrı BASiC programından oluşur:

- MM1: katsayılar matrisi ve taze besleme vektörünü düzenleyen ve verileri dosyalayan program.
- MM2: gerektiğinde dosyalanmış değerlerin değiştirilmesinde kullanılan program.
- MM3: her bir bileşenin denklem grubunu çözen, değerleri toplayan ve bileşim yüzdelerini ve debileri yazan program.



3.0. BİR MADDE DENKLİĞİ PROGRAMININ GELİŞTİRİLMESİ VE UYGULANMASI

3.1. Madde Denkliği Programının Genel Yapısı

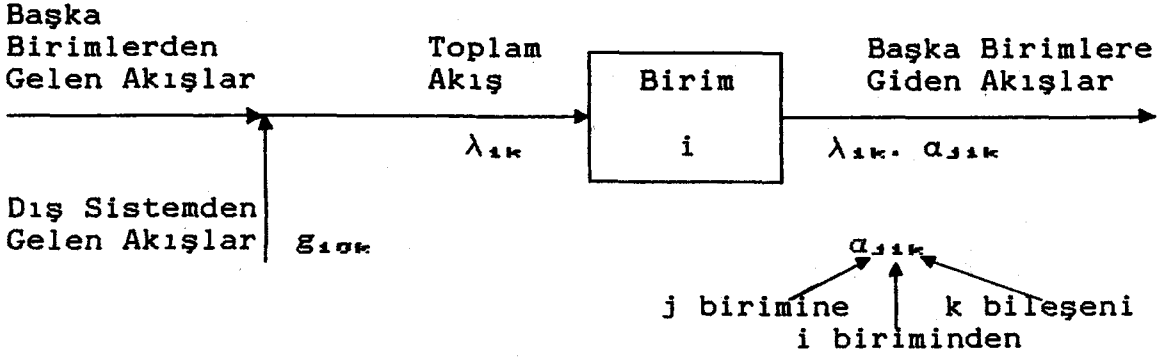
Temelde MASSBAL'den kaynaklanan ve burada geliştirilerek çalışır hale getirilen ve uygulanan bu program, prosesin madde denkliğini tanımlayan eşanlı denklemler grubunu oluşturmak için bölünme-kesri kavramını (Sinnott,1985) kullanan bir yönteme dayanmaktadır.

3.1.1. Bölünme Kesri Kavramı

Bir bilgi akış diyagramında her blok bir hesaplama modülünü (grubunu), yani çıkan bileşen akımları ile giren akımlar arasındaki ilişkiyi gösteren denklemler grubunu simgeler. Kimyasal proses birimlerinin çoğunun temel işlevi, bir bileşenin giren akımını iki veya daha çok çıkış akımına ayırmaktadır; örneğin, bir destilasyon kolonu besleme-deki bileşenleri baş ve taban ürün akımlarına ve yan akımlara ayırılır. Dolayısıyla, bir temel işlemi tanımlayan denklemleri kurarken, çıkan bir akımdaki bir bileşenin akışını bu bileşenin giren akımdaki akışının bir kesri olarak ifade etmek uygundur (Sinnott, 1985).

Şekil 3.1.'de gösterilen blok, bir bilgi akış diyagramındaki herhangi bir birimi simgeler ve madde denkliği

denklemlerinin kurulmasında kullanılan simgeleri verir.



Şekil 3.1. Blok Diyagramı

i = Birim numarası,

λ_{ik} = k bileşeninin i birimine giren toplam akışı,

α_{jik} = Bölünme kesri katsayısı; k bileşeninin i birimine giren toplam akışın j birimine giren kesri

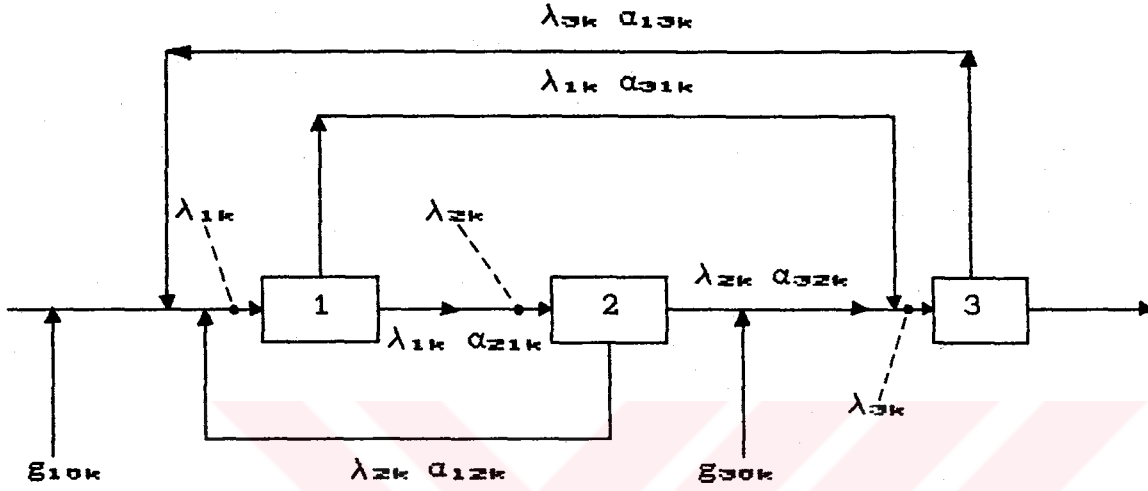
g_{i0k} = k bileşeninin sistem dışından (0 biriminden) i birimine giren taze beslemesi.

Herhangi bir k bileşeninin i biriminden j birimine akışı, i birimine giren akışın bölünme kesri katsayısı ile çarpımına eşittir:

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

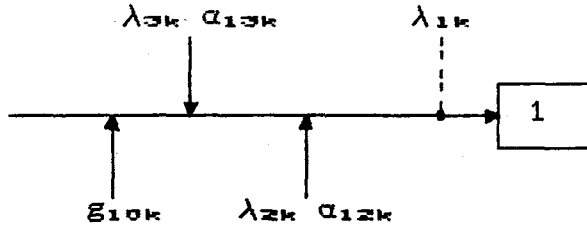
Bölünme kesri katsayısının değeri birimin tipine ve giren akımların bileşimine bağlıdır. Bir birimden çıkan akımlar başka birimlere girer veya geri döndürülürler.

Üç birimden oluşan iki geri döngülü bir prosesin bilgi akış diyagramı Şekil 3.2.'de gösterilmektedir:



Şekil 3.2. Geri Döngülü Bir Prosesin Bilgi Akış Diyagramı

Birim 1'e giren akışlar incelenirse:



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

Her birime giren akışlar için benzer madde denklilikleri yazılabilir:

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

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

Her denklem tekrar düzenlenirse, bilinmeyen λ_{1k} , λ_{2k} , λ_{3k} akışları cinsinden üç eş zamanlı denklemden oluşan bir grup oluşturulur:

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

Bu denklemler matris şeklinde yazılırsa :

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

Her bileşen için böyle bir denklem grubu olacaktır.

Kendi kendine geri döngüler yani tek bir birim etrafında geri döngü akımları olmadığı kabul edilir. Bunların pratikte olması muhtemel değildir. Bir kendi kendine geri döngüsü katmak gerekli ise, iki birim olarak gösterilebilir; yada bir başka şekilde, kendi kendine geri döngü yok kabul edilerek program tarafından otomatik olarak diagonalde yerleştirilen 1 değeri, $(1 - a_{11k})$ olarak değiştirilebilir ($a_{11k} = 1$, tüm geri döngü anlamındadır ve denklem grubunun tek çözümü olmaz).

Madde denkliği bağıntılarının türetilmesinde uygulanan bu yöntem oldukça geneldir. n birimli bir proses için her bileşen için n denklemlilik bir set kurulur. Aşağıda n denklemin matris hali gösterilmektedir:

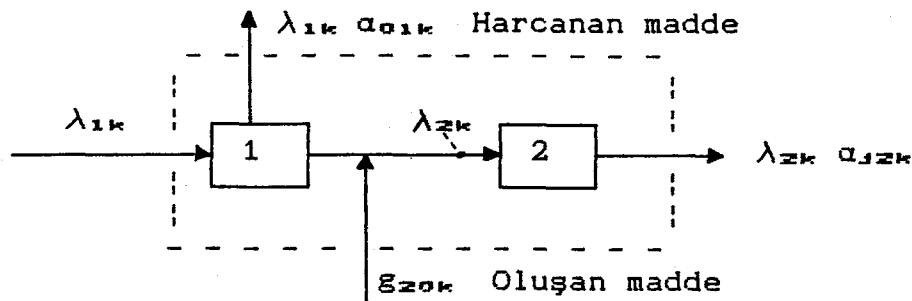
$$\begin{bmatrix}
 (1 - \alpha_{11k}) & -\alpha_{12k} & -\alpha_{13k} & \dots & -\alpha_{1nk} \\
 -\alpha_{21k} & (1 - \alpha_{22k}) & -\alpha_{23k} & \dots & -\alpha_{2nk} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 -\alpha_{n1k} & \dots & \dots & \dots & (1 - \alpha_{nnk})
 \end{bmatrix}
 \times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

Birimler arasındaki bağıntıların sayısı, toplam kurulabileceklerin ancak bir kısmı olduğundan, tüm pratik madde denkliği problemleri için, bölünme-kesri katsayılarının çoğu sıfırdır ve matris çok dağınık olur. n birimli bir proses için bağıntıların toplam sayısı matris boyutuna eşit, $n \times n$, fakat gerçek sayı $2n$ ile $3n$ arasında olacak olacaktır.

Bölünme kesri katsayıları (α) giren akımların ve aynı zamanda da birimin fonksiyonu olduğundan, denklemler genelde doğrusal olmazlar. Ancak, katsayıların pek çoğu proses sınırlamaları ile belirlenir; diğerleri ise, ilk yaklaşım olarak giren akışlardan (λ) bağımsız olarak alınabilir. Taze beslemeler, proses özelliklerinden bilinir; böylece, bölünme kesri katsayıları için tahmini değerler kabul edilirse, her birime giden her bir bileşenin akışını belirlemek için

denklemler çözülebilir. Bölünme kesirleri, giren akışlara bağımlı olduğunda, değerler düzeltililebilir ve kabul edilen tahmini değerler ile hesaplananlar arasında tatmin edici bir yakınsama oluncaya kadar hesaplamalar tekrarlanır.

Kimyasal reaktörde, giren akımlardaki bileşenler tüketilir ve yeni bileşenler (giren akışlarda olmaları gerekmez) oluşturulur. Oluşan bileşenler, giren akımların bölünme kesirleri gibi gösterilemez; dolayısıyla, yalancı-taze beslemeler olarak gösterilmelidir. Bir reaktör iki birim olarak gösterilir (Şekil 3.3.). Birinci birimin bölünme kesirleri tepkimeyle kaybedilen maddeyi açıklamak için kullanılır; ikincisi ise, diğer reaktör çıktısını diğer birimlere bağlı akışlara dağıtır. Reaktörden çıkan sadece bir akım varsa (bir başka birime tek bir bağlantı) ikinci birim dahil edilmeyebilir.



Şekil 3.3. Bir Reaktörün İki Birimli Olarak Gösterilmesi

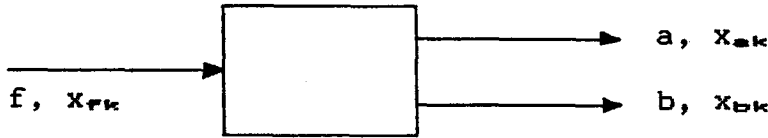
Sadece birimlere giren akışların debisi ve bileşimleri hesaplanır. Ancak, birimdeki bölünme kesri katsayısı 1 alınarak istenen hat üzerinde yapay bir birim dahil edilebilir ve akış, yapay birime giren bir akış olarak yazılır. Bu şekilde, giren akış olmadığı halde, herhangi bir akış için bir sonuç elde edilebilir. Yapay birimler ayrıca, atık veya ürün akışları gibi, sistemi terkeden herhangi bir akışın debisini ve bileşimini doğrudan elde etmek için de kullanılabilir.

3.1.2. Bölünme Kesri Katsayılarını Kestirme Yöntemleri

Bölünme kesri katsayıları, proses biriminin işlevi gözönüne alınarak ve ürün kalitesi, güvenlik, faz dengeleri ve diğer termodinamik bağıntılar ve genel proses ve mekanik tasarım şartları dolayısıyla akışlar ve bileşimlerinde meydana gelen sınırlamalar kullanılarak tahmin edilebilir (Sinnot, 1985). Örneğin, giren akımları tek bir akıma birleştiren bir birim için her bileşenin bölünme kesri katsayıları 1'e eşittir ($\alpha_{j,k} = 1$). Buna karşın, bir birime giren akım her birinin bileşimi girenle aynı olan iki veya daha çok akıma ayrılırsa, her bileşenin bölünme-kesri katsayısı, toplam akımın bölünme kesri ile aynı olan bir değer alır. Atık akım buna bir örnektir: % 10'luk bir atık oranı için atık akımın bölünme kesri katsayısı 0,1 olur.

Şekilde gösterilen akım ayırıcısından çıkan ve dengede sayılan a ve b akımları için yazılacak denge bağıntısı, denge sabiti (K_k) yardımı ile şöyle ifade edilebilir:

$$x_{ak} = K_k x_{bk}$$



Bölünme kesri katsayıları ise madde denklighinden hesaplanabilir. Böylece, a akımının bölünme kesri,

$$\frac{K_k}{K_k - 1} * \frac{x_{fk} - x_{bk}}{x_{fk}}$$

olarak bulunabilir.

Bir destilasyon kolonunda, besleme akımındaki bileşenler tepe, dip ve yan ürünlere ayırır. Ürün bileşimleri genelde bilinir; belirtilebilirler yada akış sınırlamaları, azeotrop bileşimleri veya ürün özellikleri gibi proses şartlarınca belirlenebilirler. Belli bir a akımı için, r_a , toplam beslemenin a akımına giden kesri ise, bölünme kesri katsayısı

$$\frac{x_{ak} * r_a}{x_{fk}}$$

şeklinde verilebilir. Beslemenin bileşimi belli ise yada

tahmin edilebiliyorsa, r_m 'nin değeri bir kütle denklighinden hesaplanabilir.

Geri döngünün debisi, besleme debisine oranı sabit olacak şekilde ayarlandığında bölünme kesri katsayıları beslemenin bileşimine çok bağlı değildir. Ön madde denkliği hesaplamalarında geri akışı belirtmek gerekli değildir; böylece, sistem sınırı, geri akış yoğunlaştırucusunu dahil edecek şekilde çizilebilir. Yan akımları olmayan bir kolon için, toplam beslemenin tepe ürün olarak ayrılan kesri, şöyle verilebilir:

$$r = \frac{X_{Fk} - X_{Wk}}{X_{Dk} - X_{Wk}}$$

Bir kolonda absorplanan veya sıyırılan bir bileşenin miktarı, kolon tasarımına (raf sayısı), bileşenin çözünürlüğüne ve gaz ve sıvı debilerine bağlıdır. Absorplanan kesir, absorpsiyon faktör yöntemi kullanılarak tahmin edilebilir. Kolona beslenen çözücüde çözünenin derişimi sıfır ise, yada ihmal edilebilirse, çözünen bileşenin absorpsiyon kolonunda absorplanan kesri

$$\frac{(L_m/m \cdot G_m)^{N+1} - L_m/m \cdot G_m}{(L_m/m \cdot G_m)^{N+1} - 1}$$

şeklinde, sıyırma kolonunda sıyırılan kesri ise,

$$\frac{(m \cdot G_m/L_m)^{N+1} - (m \cdot G_m/L_m)}{(m \cdot G_m/L_m)^{N+1} - 1}$$

şeklinde hesaplanabilir.

Burada, G_m = Gaz debisi, $\text{kmol/m}^2\text{saat}$

L_m = Sıvı debisi, $\text{kmol/m}^2\text{saat}$

m = Denge eğrisinin eğimi

s = Raf sayısı

Çözücü ekstraksiyonu proseslerinde de aynı yaklaşım kullanılabilir. Tepkenlerin bölünme kesirleri doğrudan dönüşüm %'lerinden hesaplanabilir. Dönüşüm, tepkenlerin (besleme bileşimi) göreceli debilerine bağlı olabilir ve öyleyse, besleme şartlarını sağlayan değerleri belirlemek için tekrarlamalar gerekebilir. Dönüşüm genelde inert bileşenlerin derişimine bağlı değildir. Reaktörde oluşan ürünlerin yalancı taze beslemeleri prosesin belirtilen veya tahmin edilen veriminden hesaplanabilir.

3.1.3. Madde Denkliği Programının Geliştirilmesi

Prosesin kararlı hal madde denkliğini gözlemek için geliştirilen program iki ayrı kısımdan oluşmaktadır. Birinci kısımda, bölünme kesri katsayılarının ve taze beslemelerin ilk tahmin değerlerini içeren veri dosyasını düzenlemek için bir yöntem ve kurallarını içerir. İkinci kısımda ise oluşturulan denklem grubunun çözümü yapılır. Programı kullanma yöntemi kısaca şöyle açıklanabilir;

1. Her proses birimi için bir blok kullanılarak prosesin blok diyagramı çizilir,

2. Bloklar arasındaki bağlantılar kurulur,
3. Her bileşen için birimin bir tablosu oluşturulur.
Bu tablo her bileşenin hangi birime girdiğini (sıra nosu), hangi birimden geldiğini (kolon nosu) gösterir ve bölünme kesri katsayılarını verir,
4. Her bileşen için, her birime giren taze beslemelerin bir tablosu hazırlanır (Proseste reaktör kullanılıyorsa, oluşan ürünleri tanımlamak için yalancı taze beslemeler kullanılır),
5. Program çağrılır,
6. Bölünme kesri katsayıları ve taze beslemeler yazılır,
7. Program sonuçlarının tümünün veya seçilen bazı birimlerin sonuçlarının yazımı arasında bir seçme olanağı verir.
8. Hesaplanan akışların ve bileşimlerin proses parametrelerine (tasarım sınırlamaları) uyumu kontrol edilir
9. Çıktılar sınırlamalara karşılık kontrol edilir,
11. Gerektikçe 8-10 kademeleri tekrarlanır.

Program, veri dosyasındaki verileri okur, düzenler ve her birimin beslemelerini belirlemek için eşanlı denklem gruplarını çözer. Her defasında, bir bileşenle ilgili sonuçlar matriste saklanır ve bütün bileşenlerin akışları hesaplanır.

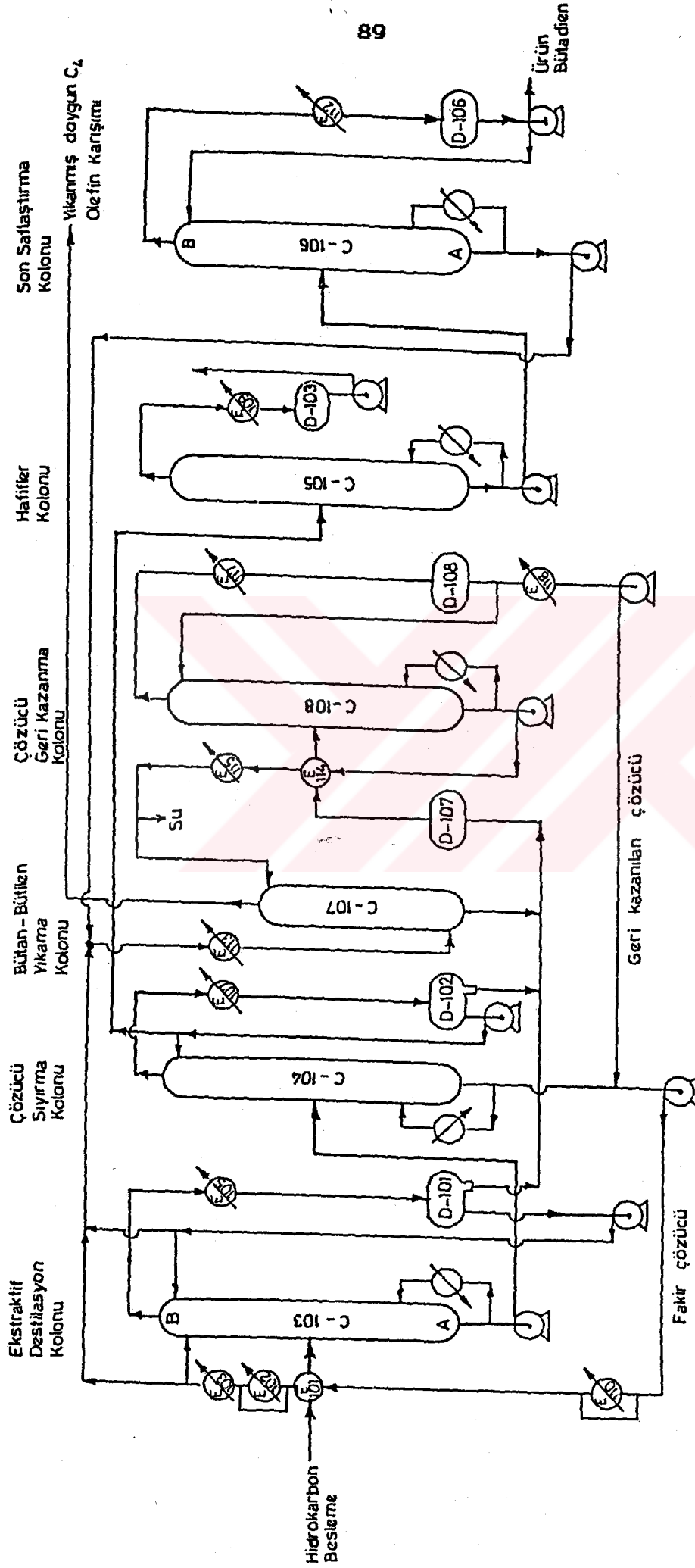
3.2. Madde Denkliği Programının Uygulanması

3.2.1. Prosesin Tanıtımı

Prosesin amacı, hidrokarbon karışımından bütadien (BD) üretimidir. PETKİM PETROKİMYA HOLDİNG A.Ş. Yarımca Kompleksi bünyesinde olan tesis, bütadien ekstraksiyonu yöntemini uygulayarak ve yılda 8000 saat çalışarak, saatte 10880 kg olarak verilen besleme içindeki bütadien'in % 96' sından yararlanarak yılda % 99 saflıkta 33000 metrik ton bütadien üretecek şekilde tasarlanmıştır (Şahin, Y.,1993). Besleme akımının bileşimi Tablo 3.1 'de, prosesin akış diyagramı ise Şekil 3.4 'de verilmektedir.

Tablo 3.1. Besleme Akımının Bileşimi

Bileşen	% Ağırlık
Propan	0,06
Metil asetilen	0,2
i-Bütan	1,4
n-Bütan	2,3
i-Bütilen	26,6
Büten-1	17,1
tr-Büten-2	7,8
cis-Büten-2	4,8
1,3 Bütadien	39,1
1,2 Bütadien	0,1
C ₂ 'ler	0,3
Vinil asetilen	0,2
Etil asetilen	0,03



Şekil 3.4. Bütadien Geri Kazanma ve Sıfırlama Prosesinin Akış Diyagramı

Hidrokarbon (HC) beslemesi, E-101 ısı deęiřtiricisinde sıcak çözücü kullanılarak 38°C'den 56°C'ye ısıtılır. Sıcak çözücü, önce düşük basınçlı buhar üreticisi E-110'dan geçirilirse E-101'de 117°C'dan 101°C'a, E-110 devre dışı ise, E-101'de 145°C'dan 129°C'a soğur. Normal olarak % 93-98'i buhar halinde olan HC beslemesi C-103 ekstraktif destilasyon kolonuna verilir.

E-110 devrede ise E-101'den 101°C'da çıkan çözücü, ana çözücü soğutucusu E-103'de soğutma suyu ile 62°C'a kadar soğutulur. E-110 devrede değilse 129°C'daki çözücü önce yedek soğutucu E-102'de soğutma suyu ile 101°C ye soğutulur, oradan E-103'e verilir. Bir miktar çözücü ayrılarak,ekst-aktör tepe ve son saflaştırma dip akımları ile birleřtikten sonra C-107'ye girer. Çözücünün geri kalan büyük kısmı ekstraktöre (C-103) gönderilir.

C-103 ekstraktif destilasyon kolonunda hafifler (bütadien'den hafifler) tepeden, HC karışımındaki bütadien ve ağırlar ise çözücüyle beraber dipten alınır. HC beslemesi 10880 kg/h olarak girer. Çözücü 77100 kg/h olarak birbirine simetrik iki ayrı noktadan girer. C-103 A dip akımı C-104 kolonuna basılır, tepe akımı ise C-103 B dibine basınçlandırılır. C-103 B dip akımı C-103 A'ya basılır. C-103 B tepesinden alınan akım E-105'de yoğunlaştırularak, 46°C'da D-101 drumında toplanır. D-101'in altından alınan asetonitrilli su D-107'ye basınçla sevk edilir. D-101'den alınan HC-çözücü

karışımının 6474 kg'ı C-107'ye, az bir kısmı ise geri akış olarak C-103 B'nin tepesine verilir. C-103 A kolonunun 81207 kg/saat'lik dip ürünü C-104 kolonuna basılır.

C-104 çözücü ayırma kolonunda, çözücünden ayrılan HC tepeden alınır. 123°C'deki besleme kolona birbirine simetrik iki ayrı noktadan girer. 52°C'daki tepe akımı E-107 yoğunlaştırıcısında soğutma suyu ile yoğunlaştırularak D-102 drumında toplanır. Drumın altında toplanan su fazı D-101'den gelen su fazı akımıyla birleşir ve D-107'ye basınçlandırılır. 4567 kg/h tepe ürün C-105'e, 76159 kg/h'lik dip akımı ise 1979 kg/h'lik çözücü ilavesi ve 535 kg/h lik kondensat ilavesi ile birleşerek C-103'e basılır.

C-105 hafifler kolonunda, C-104'ün tepe akımı olarak gelen ham bütadien besleme akımı içindeki metil asetlen ayrılır. Besleme akımı 4567 kg/saat olarak girer. Tepe akımı E-109 yoğunlaştırıcısında yoğunlandıktan sonra D-103 drumında toplanır. D-103'den alınan kolon tepe ürününün 35 kg/h'i dışarı, geri kalanı kolona geri verilir. Kolon dip ürünü, C-106 son saflaştırma kolonuna 4532 kg/h olarak basılır.

C-105'den gelen ham bütadien'nin son saflaştırması C-106 kolonunda gerçekleştirilerek % 99 saflıkta bütadien tepe ürünü olarak elde edilir. C-106 A'dan alınan kolon dip akımı, C-107'ye giden akımlarla birleşerek E-113'e gelir. Burada 49°C'dan 38°C'a soğutulur ve C-107'ye verilir.

C-106 B tepe akımı E-112 yoğunlaştırucusunda yoğunlaştırularak D-106 drumunda toplanır. Tepe ürünün (% 99 saflıkta BD) bir kısmı C-106 B tepesine geri verilir, geri kalan 4131 kg/h'lik kısmı ise saf bütadien kürelerine gönderilir.

C-107 bütan-bütilen yıkama kolonunda, birleşerek gelen C-103 kolonu HC tepe akımı, C-103'e verilmeden ayrılan çözücü akımı ve C-106 dip akımı, suyla yıkanarak asetonitrilden arınır. E-113' den soğuyarak gelen 8448 kg/h besleme ve 14105 kg/h yıkama suyu kolona verilir. Kolon dibinden alınan son yıkama suyu D-107'ye basınçlandırılır. 6714 kg/h tepe ürünü 90 D 106 küresine basınçlandırılır.

C-108 çözücü geri kazanma kolonunda, birleşerek gelen C-107 bütan-bütilen yıkama kolonu dip ürünündeki ve D-101 ile D-102 drumlarının diplerinden alınan su fazlarındaki asetonitril ayrılır ve tepe ürünü olarak alınır. Besleme, kolona girmeden önce, E-114 ısı değiştiricisinde 115°C'dan 74°C'a soğuyan C-108 dip akımı yardımıyla 38°C'dan 74°C'a ısıtılır ve D-107'ye gönderilir. D-107'nin dibinden alınan akım C-108 kolonuna basılır. Tepe akımı E-117' de yoğunlaştıktan sonra D-108'de toplanır. Drumdan, tepe akımının bir kısmı kolona geri verilir, geri kalanı ise tepe ürünü olarak, E-118' de 79°C'dan 38°C'a soğutulur ve T-101 geri kazanılmış çözücü tankına gönderilir. C-108 dip akımı, E-114'de C-108 besleme akımını ısıtıttıktan sonra, E-115'de soğutma suyu ile 74°C'dan 38°C'a soğutulur ve C-107 kolonuna 14105

kg/h debi ile yıkama suyu olarak verilir. Arta kalan kanala atılır.

Genel olarak, operasyon sırasında ayrılan bir akımla sürekli alınan bir miktar çözücü, çözücü geri kazanma kısmında (C-108) işlenerek, kullanılan çözücü içindeki ağır HC ve safsızlıkların fazla miktarda birikmesi önlenir. Toplam çözücünün % 2'sinin ayrılarak C-107'ye gönderileceği düşünülmüştür. Ancak her ihtimale karşı tasarım % 2,5 olarak yapılmıştır. Yapılan analizler çözücü içindeki HC ve diğer safsızlıkların oranının çok yükseldiğini gösterirse, ayrılan akımın kesri arttırılabilir. Bu arttırma işi yavaş yavaş yapılır ve buna paralel olarak gerekli değişiklikler de operasyona uygulanır.

Ekstraktif destilasyon çözücüsünde su ağırlıkça % 9 olmalıdır. Böylece, hidrokarbonların uçuculukları, mol yüzde-leri ve çözünürlükleri operasyona uygun durumda tutulur.

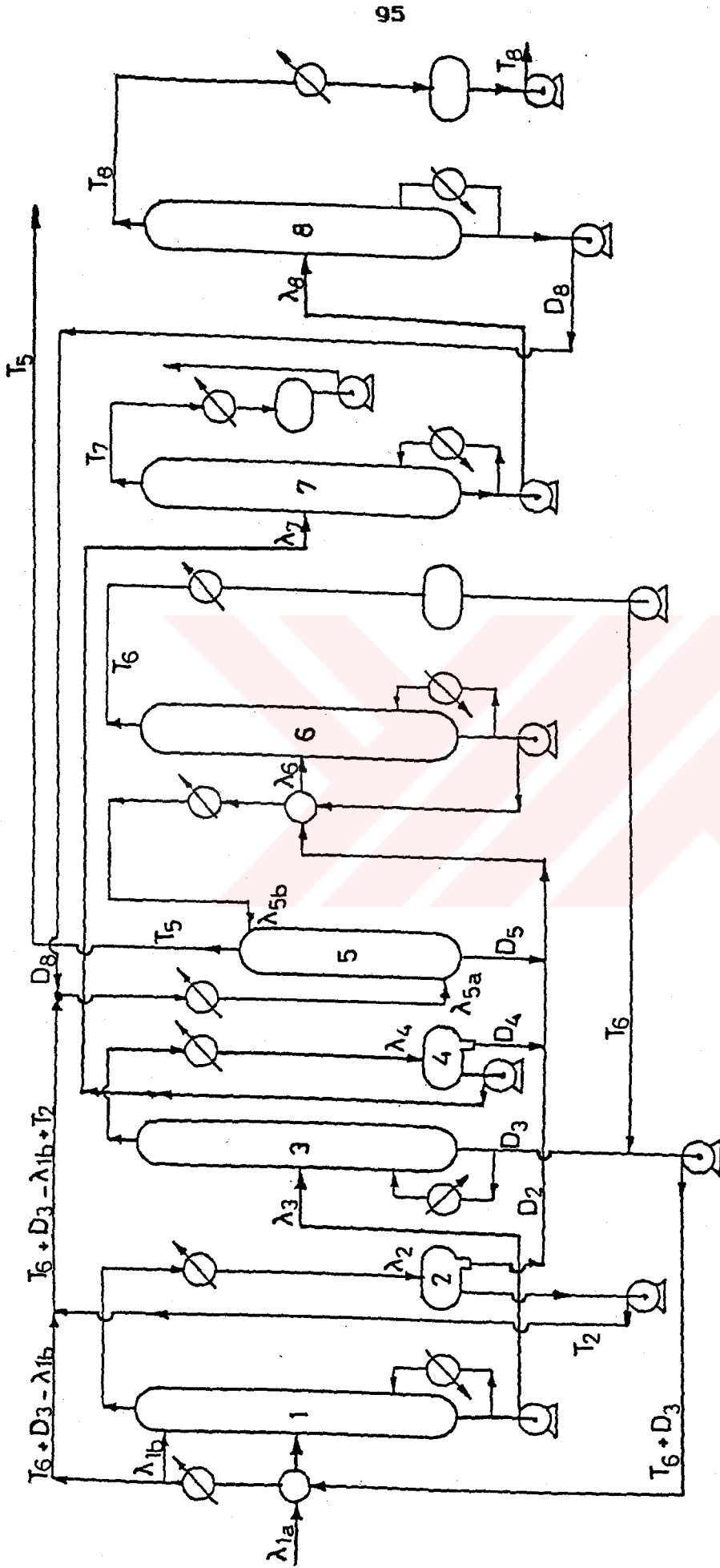
Geri kazanılan çözücü akımı (C-108'in tepe ürünü) içinde su ağırlıkça % 19 olduğu ve % 9 su içeren çözücü akımına katıldığı halde, ekstraktif destilasyon (C-103) ve çözücü sıyırma (C-104) kolonlarında tepeden asetonitrilden çok su alınır. Operasyon şartlarında çözücüdeki su derişiminin normal seviyede tutabilmesi için, çözücü periyodik olarak analiz edilir ve devamlı olarak su ilavesi yapılır.

3.2.2. Madde Denkliği Programının Prosesse Uygulanması

Basitleştirilmiş bir akış diyagramı (Şekil 3.5.) ve proses birimlerinden çıkan toplam tepe ve dip akımlarının debi ve bileşim değerleri (Şahin, Y.,1993) kullanılarak, bileşenlerin her birim için ayrı ayrı giren ve çıkan debileri tek tek hesaplanmıştır (Tablo 3.2.). Daha sonra, bölünme kesri kavramı da uygulanarak bilgi akışı blok diyagramı hazırlanmış (Şekil 3.6.) ve Tablo 3.2.'deki değerler kullanılarak bölünme kesri katsayıları hesaplanmıştır. Hesaplanan katsayı değerleri Tablo 3.3.'de özetlenmiştir. Tabloda verilmeyen α değerlerinin tümü 0'dır.

Hesaplanan α değerleri kullanılarak, bölünme kesri kavramı temelinde her bileşen için ayrı ayrı matrisler oluşturulmuştur. Örnek olarak, aşağıda, asetonitril ($k=14$) için elde edilen matris düzeni verilmektedir.

$$\begin{bmatrix}
 1 & 0 & -0,9783 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 -0,002 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 -0,998 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -0,0004 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -0,909 & -0,0213 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\
 0 & -0,091 & 0 & -0,963 & -1 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -0,037 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \lambda_{114} \\
 \lambda_{214} \\
 \lambda_{314} \\
 \lambda_{414} \\
 \lambda_{514} \\
 \lambda_{614} \\
 \lambda_{714} \\
 \lambda_{814}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 1725 \\
 0 \\
 34,9 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0
 \end{bmatrix}$$



Şekil 3.5. Basitleştirilmiş Akış Diyagramı

Tablo 3.2. Akımların Bileşimleri ve Debileri

Birim 1

k	Toplam (kg/h)		Giren		Çıkan	
			λ_{1a}	λ_{1b}	λ_2	λ_3
	Bileşen		10880	77100	6773	81207
1	Propan	% (ag.)	0,06	-	0,1	-
		ag. (kg)	6,5	-	6,5	-
2	Metil asetilen	% (ag.)	0,2	-	0,1	0,02
		ag. (kg)	21,8	-	6,8	15
3	i-Bütan	% (ag.)	1,4	-	2,2	-
		ag. (kg)	152,3	-	152,3	-
4	n-Bütan	% (ag.)	2,3	-	3,7	-
		ag. (kg)	250,2	-	250,2	-
5	i-Bütülen	% (ag.)	26,6	-	42,4	0,02
		ag. (kg)	2895,2	-	2875	20,2
6	Büten-1	% (ag.)	17,1	-	27,2	0,02
		ag. (kg)	1860,5	-	1845,4	15,1
7	tr-Büten 2	% (ag.)	7,8	-	11,3	0,1
		ag. (kg)	848,6	-	765,9	82,7
8	cis-Büten 2	% (ag.)	4,8	-	5,4	0,2
		ag. (kg)	522,2	-	367,2	155
9	1,3 Bütadien	% (ag.)	39,1	-	0,5	5,2
		ag. (kg)	4254,1	-	31,1	4223
10	1,2 Bütadien	% (ag.)	0,1	-	-	0,01
		ag. (kg)	10,9	-	-	10,9
11	C ₆ H ₆	% (ag.)	0,3	-	0,1	0,03
		ag. (kg)	32,6	-	6,8	25,8
12	Vinil asetilen	% (ag.)	0,2	-	0,1	0,02
		ag. (kg)	21,8	-	6,8	15
13	Etil asetilen	% (ag.)	0,03	-	-	0,004
		ag. (kg)	3,3	-	-	3,3
14	Asetonitril	% (ag.)	-	93	2,6	88
		ag. (kg)	-	71703	176	71527
15	Su	% (ag.)	-	7	4,2	6,3
		ag. (kg)	-	5397	283	5114

Birim 2

	Toplam (kg/h)		Giren	Çıkan	
			λ_z	T_z	D_z
	Bileşen		6773	6474	299
1	Propan	$\Sigma(\text{ag.})$	0,1	0,1	-
		ag. (kg)	6,5	6,5	-
2	Metilasetilen	$\Sigma(\text{ag.})$	0,1	0,1	-
		ag. (kg)	6,8	6,8	-
3	i-Bütan	$\Sigma(\text{ag.})$	2,2	2,4	-
		ag. (kg)	152,3	152,3	-
4	n-Bütan	$\Sigma(\text{ag.})$	3,7	3,9	-
		ag. (kg)	250,2	250,2	-
5	i-Bütilen	$\Sigma(\text{ag.})$	42,4	44,4	-
		ag. (kg)	2875	2875	-
6	Büten-1	$\Sigma(\text{ag.})$	27,2	28,5	-
		ag. (kg)	1845,4	1845,4	-
7	tr-Büten 2	$\Sigma(\text{ag.})$	11,3	11,8	-
		ag. (kg)	765,9	765,9	-
8	cis-Büten 2	$\Sigma(\text{ag.})$	5,4	5,7	-
		ag. (kg)	367,2	367,2	-
9	1,3 Bütadien	$\Sigma(\text{ag.})$	0,5	0,5	-
		ag. (kg)	31,1	31,1	-
10	1,2 Bütadien	$\Sigma(\text{ag.})$	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
11	C ₆ H ₆	$\Sigma(\text{ag.})$	0,1	0,1	--
		ag. (kg)	6,8	6,8	-
12	Vinilasetilen	$\Sigma(\text{ag.})$	0,1	0,1	-
		ag. (kg)	6,8	6,8	-
13	Etilasetilen	$\Sigma(\text{ag.})$	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
14	Asetonitril	$\Sigma(\text{ag.})$	2,6	2,5	5,4
		ag. (kg)	176	160	16
15	Su	$\Sigma(\text{ag.})$	4,2	-	94,6
		ag. (kg)	283	-	283

Birim 3

k	Bileşen		Toplam (kg/h)	Giren	Çıkan	
				λ_0	λ_+	D_0
				81207	5048	76159
1	Propan	% (ag.)	-	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-	-
2	Metilasetilen	% (ag.)	0,02	0,3	-	-
		ag. (kg)	15	15	-	-
3	i-Bütan	% (ag.)	-	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-	-
4	n-Bütan	% (ag.)	-	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-	-
5	i-Bütilen	% (ag.)	0,02	0,4	-	-
		ag. (kg)	20,2	20,2	-	-
6	Büten-1	% (ag.)	0,02	0,3	-	-
		ag. (kg)	15,1	15,1	-	-
7	tr-Büten 2	% (ag.)	0,1	1,6	-	-
		ag. (kg)	82,7	82,7	-	-
8	cis-Büten 2	% (ag.)	0,2	3,1	-	-
		ag. (kg)	155	155	-	-
9	1,3 Bütadien	% (ag.)	5,2	83,6	-	-
		ag. (kg)	4223	4223	-	-
10	1,2 Bütadien	% (ag.)	0,01	0,2	-	-
		ag. (kg)	10,9	10,9	-	-
11	C ₆ H ₆	% (ag.)	0,03	0,5	-	-
		ag. (kg)	25,8	25,8	-	-
12	Vinilasetilen	% (ag.)	0,02	0,3	-	-
		ag. (kg)	15	15	-	-
13	Etilasetilen	% (ag.)	0,004	0,07	-	-
		ag. (kg)	3,3	3,3	-	-
14	Asetonitril	% (ag.)	88	0,5	93,9	-
		ag. (kg)	71527	27	71500	-
15	Su	% (ag.)	6,3	9,1	6,1	-
		ag. (kg)	5114	455	4659	-

Birim 4

k	Toplam (kg/h)		Giren	Çıkan	
			λ_4	λ_7	D_4
	Bileşen		5048	4567	481
1	Propan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
2	Metilasetilen	% (ag.)	0,3	0,3	-
		ag. (kg)	15	15	-
3	i-Bütan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
4	n-Bütan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
5	i-Bütilen	% (ag.)	0,4	0,4	-
		ag. (kg)	20,2	20,2	-
6	Büten-1	% (ag.)	0,3	0,3	-
		ag. (kg)	15,1	15,1	-
7	tr-Büten 2	% (ag.)	1,6	1,8	-
		ag. (kg)	82,7	82,7	-
8	cis-Büten 2	% (ag.)	3,1	3,4	-
		ag. (kg)	155	155	-
9	1,3 Bütadien	% (ag.)	83,6	92,5	-
		ag. (kg)	4223	4223	-
10	1,2 Bütadien	% (ag.)	0,2	0,2	-
		ag. (kg)	10,9	10,9	-
11	C ₆ ⁺	% (ag.)	0,5	0,5	-
		ag. (kg)	25,8	25,8	-
12	Vinilasetilen	% (ag.)	0,3	0,3	-
		ag. (kg)	15	15	-
13	Etilasetilen	% (ag.)	0,07	0,07	-
		ag. (kg)	3,3	3,3	-
14	Asetonitril	% (ag.)	0,5	0,02	5,4
		ag. (kg)	27	1	26
15	Su	% (ag.)	9,1	-	94,6
		ag. (kg)	455	-	455

Birim 5

k	Toplam (kg/h)		Giren		Çıkan	
			λ_{sa}	λ_{sb}	T_s	D_s
	Bileşen		8448	14105	6714	15839
1	Propan	% (ag.)	0,07	-	0,1	-
		ag. (kg)	6,5	-	6,5	-
2	Metilasetilen	% (ag.)	0,08	-	0,1	-
		ag. (kg)	6,8	-	6,8	-
3	i-Bütan	% (ag.)	1,8	-	2,3	-
		ag. (kg)	152,3	-	152,3	-
4	n-Bütan	% (ag.)	2,9	-	3,7	-
		ag. (kg)	250,2	-	250,2	-
5	i-Bütilen	% (ag.)	34	-	42,8	-
		ag. (kg)	2875	-	2875	-
6	Bütene-1	% (ag.)	21,8	-	27,5	-
		ag. (kg)	1845,4	-	1845,4	-
7	tr-Büten 2	% (ag.)	10	-	12,6	-
		ag. (kg)	848,6	-	848,6	-
8	cis-Büten 2	% (ag.)	6,2	-	7,8	-
		ag. (kg)	522,2	-	522,2	-
9	1,3 Bütadien	% (ag.)	1,6	-	2,1	-
		ag. (kg)	138,4	-	138,4	-
10	1,2 Bütadien	% (ag.)	0,1	-	0,2	-
		ag. (kg)	10,9	-	10,9	-
11	C ₆ ⁺	% (ag.)	0,4	-	0,5	-
		ag. (kg)	32,6	-	32,6	-
12	Vinilasetilen	% (ag.)	0,2	-	0,3	-
		ag. (kg)	21,8	-	21,8	-
13	Etilasetilen	% (ag.)	0,04	-	0,05	-
		ag. (kg)	3,3	-	3,3	-
14	Asetonitril	% (ag.)	20,3	-	-	10,8
		ag. (kg)	1717,9	-	-	1717,9
15	Su	% (ag.)	0,2	100	-	89,2
		ag. (kg)	16,1	14105	-	14121,1

Birim 6

k	Toplam (kg/h)		Giren	Çıkan	
			λ_a	T_a	λ_{ab}
	Bileşen		16619	2514	14105
1	Propan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
2	Metilasetilen	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
3	i-Bütan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
4	n-Bütan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
5	i-Bütillen	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
6	Büten-1	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
7	tr-Büten 2	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
8	cis-Büten 2	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
9	1,3 Bütadien	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
10	1,2 Bütadien	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
11	C ₆ ⁺	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
12	Vinilasetilen	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
13	Etilasetilen	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
14	Asetonitril	% (ag.)	10,6	70	-
		ag. (kg)	1759,9	1759,9	-
15	Su	% (ag.)	89,4	30	100
		ag. (kg)	14859,1	754,1	14105

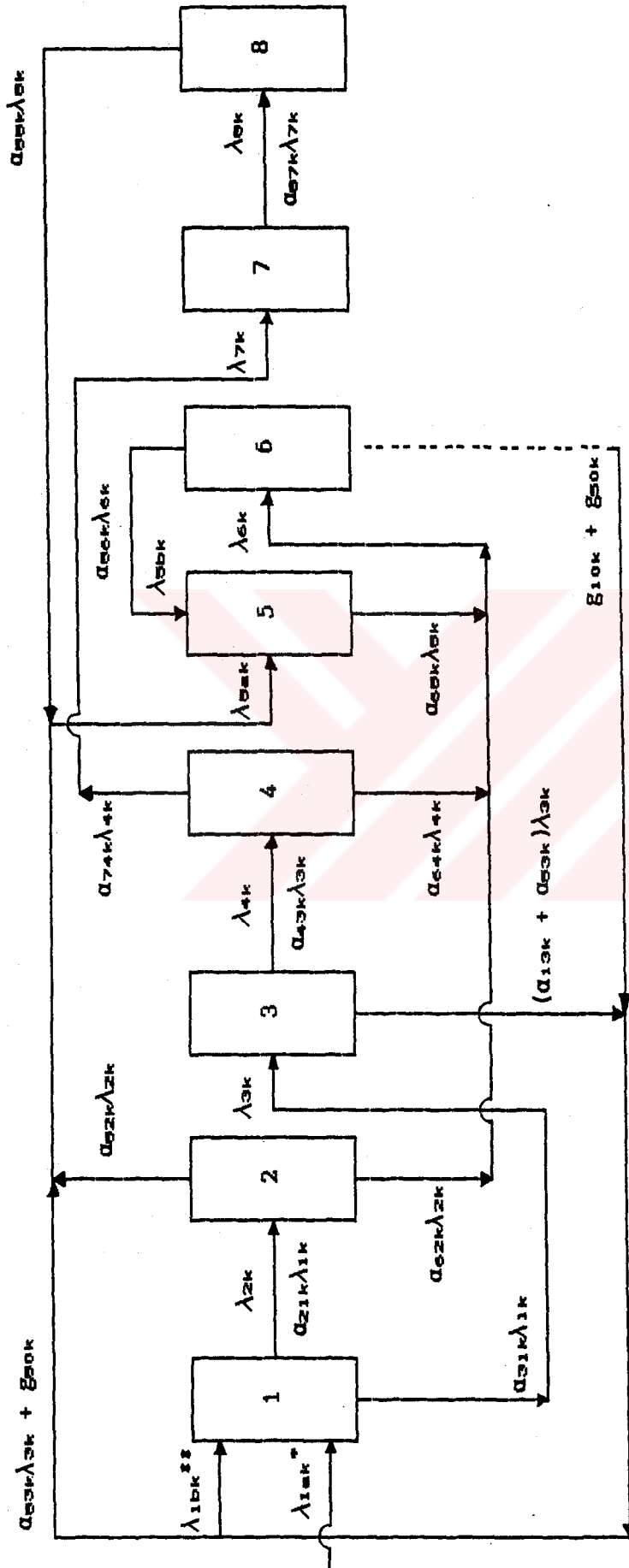
Birim 7

k	Bileşen	Toplam (kg/h)	Giren	Çıkan	
			λ_7	T_7	λ_8
			4567	35	4532
1	Propan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
2	Metilasetilen	% (ag.)	0,3	43	-
		ag. (kg)	15	15	-
3	i-Bütan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
4	n-Bütan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
5	i-Bütillen	% (ag.)	0,4	-	0,4
		ag. (kg)	20,2	-	20,2
6	Büten-1	% (ag.)	0,3	-	0,3
		ag. (kg)	15,1	-	15,1
7	tr-Büten 2	% (ag.)	1,8	-	1,8
		ag. (kg)	82,7	-	82,7
8	cis-Büten 2	% (ag.)	3,4	-	3,4
		ag. (kg)	155	-	155
9	1,3 Bütadien	% (ag.)	91,5	57	92,7
		ag. (kg)	4223	20	4203
10	1,2 Bütadien	% (ag.)	0,2	-	0,2
		ag. (kg)	10,9	-	10,9
11	C ₆ H ₆	% (ag.)	0,5	-	0,5
		ag. (kg)	25,8	-	25,8
12	Vinilasetilen	% (ag.)	0,3	-	0,3
		ag. (kg)	15	-	15
13	Etilasetilen	% (ag.)	0,07	-	0,07
		ag. (kg)	3,3	-	3,3
14	Asetonitril	% (ag.)	0,02	-	0,02
		ag. (kg)	1	-	1
15	Su	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-

Tablo 3.2. (devam)

Birim 8

k	Toplam (kg/h)		Giren	Çıkan	
			λ_0	T_0	D_0
	Bileşen		4532	4131	401
1	Propan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
2	Metil asetilen	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
3	i-Bütan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
4	n-Bütan	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-
5	i-Bütilen	% (ag.)	0,4	0,5	-
		ag. (kg)	20,2	20,2	-
6	Büten-1	% (ag.)	0,3	0,4	-
		ag. (kg)	15,1	15,1	-
7	tr-Büten 2	% (ag.)	1,8	-	20,6
		ag. (kg)	82,7	-	82,7
8	cis-Büten 2	% (ag.)	3,4	-	38,7
		ag. (kg)	155	-	155
9	1,3 Bütadien	% (ag.)	92,7	99,1	26,7
		ag. (kg)	4203	4095,7	107,3
10	1,2 Bütadien	% (ag.)	0,2	-	2,7
		ag. (kg)	10,9	-	10,9
11	C ₆ H ₆	% (ag.)	0,5	-	6,4
		ag. (kg)	25,8	-	25,8
12	Vinil asetilen	% (ag.)	0,3	-	3,7
		ag. (kg)	15	-	15
13	Etil asetilen	% (ag.)	0,07	-	0,8
		ag. (kg)	3,3	-	3,3
14	Asetonitril	% (ag.)	0,02	-	0,2
		ag. (kg)	1	-	1
15	Su	% (ag.)	-	-	-
		ag. (kg)	-	-	-



* = Hidrokarbon beslemesi

** = $\alpha_{10k}\lambda_{2k} + g_{10k}$

Sıkıl 3.6. Bilgi Akışı Blok Diyagramı

Tablo 3.3. Bileşenlerin Bölünme Kesri Katsayıları ve Taze Besleme Değerleri

k	Bileşen	α 13k	α 21k	α 31k	α 43k	α 52k	α 53k	α 56k	α 58k	α 62k	α 64k	α 65k	α 74k	α 87k	g 10k	g 50k
1	Propan	0	-1	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	6,5	0
2	Metil asetilen	0	-0,312	-0,688	-1	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0	21,8	0
3	1-Bütan	0	-1	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	152,3	0
4	n-Bütan	0	-1	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	250,2	0
5	i-Bütilen	0	-0,993	-0,007	-1	-1	0	0	0	0	0	0	-1	-1	2895,2	0
6	Büten-1	0	-0,992	-0,008	-1	-1	0	0	0	0	0	0	-1	-1	1860,5	0
7	tr-Büten-2	0	-0,903	-0,097	-1	-1	0	0	-1	0	0	0	-1	-1	848,6	0
8	cis-Büten-2	0	-0,703	-0,297	-1	-1	0	0	-1	0	0	0	-1	-1	522,2	0
9	1,3 Bütadien	0	-0,007	-0,993	-1	-1	0	0	-0,026	0	0	0	-1	-0,995	4254,1	0
10	1,2 Bütadien	0	0	-1	-1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	-1	10,9	0
11	C ₆ *	0	-0,209	-0,791	-1	-1	0	0	-1	0	0	0	-1	-1	32,6	0
12	Vinil asetilen	0	-0,312	-0,688	-1	-1	0	0	-1	0	0	0	-1	-1	21,8	0
13	Etil asetilen	0	0	-1	-1	0	0	0	-1	0	0	0	-1	-1	3,3	0
14	Asetonitril	-0,9783	-0,002	-0,998	-0,0004	-0,909	-0,0213	0	-1	-0,091	-0,963	-1	-0,037	-1	1725	34,9
15	Su	-0,908	-0,052	-0,948	-0,089	0	-0,003	-0,949	0	-1	-1	-1	0	0	753	1,1

Bu örnekte de görüldüğü gibi, α değerlerinin bazıları-
nın sıfıra yakın olması, bazılarının da bunlara oranla çok
büyük olması nedeniyle, burada, matris çözümünde Maksimum
Pivot yöntemi uygulanmıştır. Bu yöntemde en büyük katsayı-
nın bulunduğu denklem pivot denklem olarak seçilir ve çözüme
bu denklemle başlanır.

Bu çalışmada, α değerleri verildiğinde her birime giren
bileşenlerin debilerini ayrı ayrı hesaplayan bir bilgisayar
programı hazırlanmıştır (EK).

3.2.3. Uygulama Sonuçları

Elle yapılan hesaplamaların sonuçları daha önce Tablo
3.2.'de verilmiştir. Bilgisayar programı kullanılarak elde
edilen sonuçlar ise Tablo 3.4.'de verilmektedir.

Tablo 3.4. Bilgisayar Programı Sonuçları

Birim Bileşen	1	2	3	4	5	6	7	8
1	6.5	6.5	0.0	0.0	6.5	0.0	0.0	0.0
2	21.8	6.8	15.0	15.0	6.8	0.0	15.0	0.0
3	152.3	152.3	0.0	0.0	152.3	0.0	0.0	0.0
4	250.2	250.2	0.0	0.0	250.2	0.0	0.0	0.0
5	2895.2	2874.9	20.3	20.3	2874.9	0.0	20.3	20.3
6	1860.5	1845.6	14.9	14.9	1845.6	0.0	14.9	14.9
7	848.6	766.3	82.3	82.3	848.6	0.0	82.3	82.3
8	522.2	367.1	155.1	155.1	522.2	0.0	155.1	155.1
9	4254.1	29.8	4224.3	4224.3	139.1	0.0	4224.3	4203.2
10	10.9	0.0	10.9	10.9	10.9	0.0	10.9	10.9
11	32.6	6.8	25.8	25.8	32.6	0.0	25.8	25.8
12	21.8	6.8	15.0	15.0	21.8	0.0	15.0	15.0
13	3.3	0.0	3.3	3.3	3.3	0.0	3.3	3.3
14	72918.3	145.8	72772.5	29.1	1718.6	1759.9	1.1	1.1
15	5408.9	281.3	5127.6	456.4	14048.7	14786.3	0.0	0.0

4.0. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada hazırlanan program, BASIC dilinde yazılmış bir kararlı hal madde denkliği programıdır. Bu programda maksimum 50 birim ve 50 bileşenle çalışılabilmektedir.

Bilgisayar programıyla ve elle yapılan hesaplamalarda elde edilen sonuçlar arasında büyük benzerlik görülmektedir. Sonuçlar arasında % 0 - 4 arasında değişen farklılıklar bulunmaktadır. Sadece asetonitril bileşeni ile ilgili sonuçlarda, Birim 7 ve 8'e giren akımların değerlerinde % 10, Birim 2'ye giren akım değerlerinde ise % 17'lik bir fark gözlenmektedir.

Programın geliştirilmesi amacıyla, verilerin dosyalara rastgele girişini sağlamak için bir alt program oluşturulabilir. Bu alt program yardımıyla, herhangi bir bileşenin alt programı seçilerek yazılabilir. Bu şekilde, tasarım sınırlamalarını sağlayan akım bileşimleri ve debiler elde edilinceye kadar işlem tekrarlanır. Denklem grubunu çözmek için değişik çözüm yöntemleri kullanılabilir. Programa, kararlı hal enerji denkliği ve maliyet hesaplamaları yapabilecek alt programlar da eklenebilir. Ayrıca, termofiziksel özellikler içeren bir veri dosyası da oluşturulabilir.

KAYNAKLAR

1. Benedek, P., 1982. SIMUL: Flowsheet Simulation and Computer-Aided Process Design, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 517 - 535.
2. Bolat, E., 1991. Kimya Tesislerinin Tasarımı ve Ekonomisi Ders Notları. İstanbul: 5-6.
3. Brannock, N.F., Verneuit, V.S. and Wang, Y.L., 1979. PROCESS Simulation Program.-A Comprehensive Flowsheeting Tool for Chemical Engineers. Comp. Chem. Eng., 3: 329.
4. Brannock, N.F., Verneuil, V.S., Wang, Y.L., 1982. PROCESS Simulation Program, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 536 - 545.
5. Chem. Share Corp., 1979. Guide to Solving Process Engineering Problems by Simulation (Users Manual), Chem. Share Corp., Houston.
6. Clark, A.P., 1977. Exercises in Process Simulation Using FLOWTRAN (CACHE Corporation).
7. Conte, S., de Boor, C., 1981. Elementary Numerical Analysis (An Algorithmic Approach). McGraw-Hill International Editions, Singapore: 157 - 159.
8. Davies, C., 1971. Chem. Engr. London, No.248 (April), Applications of Systems Engineering Techniques to Projects in the Chemical Process Industry: 149.

9. Douglas, J.M., 1988. Conceptual Design of Chemical Processes. McGraw-Hill Book Company, New York: 369 - 404.
10. Erbar, J.H., Sutton, C.B., 1982. Computer-Aided Process Design Using Home-Style Computers, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 552 - 565.
11. Evans, L.B., 1979. ASPEN: An Advanced System for Process Engineering. Comput. Chem. Eng., 3:319.
12. Himmelblau, M.D., 1989. Basic Principles and Calculation in Chemical Engineering (5.Ed.). Prentice Hall International Editions: 191 - 205.
13. Hutchison, H.P., Leesley, M.E., 1982. A Balanced Approach to Process Design by Computer, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 117 - 130.
14. Johnson, A.I., 1972. Computer-Aided Process Analysis and Design - a Modular Approach. Brit. Chem. Eng. & Proc. Tech., 17 : 28.
15. Kincoide, D., Cheney, W., 1991. Numerical Analysis. Thomson Information/ Publishing Group, California.
16. Klumpar, I.V., 1982. The RUMBA Program, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 461 - 466.

17. Larsen, A.H., 1982. FLOWTRAN for Process Simulation.
In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 475-488.
18. Leesley, M.E., 1982. Evaluating Process Simulation Software, Inc: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 131-141.
19. Leesley, M.E., Hall, M., McDonell, R.G., 1984. CAD for Process Plants; An Update, Computer-Aided Design. 16(3) : 155 - 159.
20. Massey, N.A., 1982. The Process Design Office, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 190 - 230.
21. Matulsky, M., 1982. ChemShare Process Simulation Programs, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 489 - 511.
22. Perris, F.A., 1982. FLOWPACK II: A Third-Generation Flowsheeting System, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 609 - 628.
23. Peters, N., 1982. GEMCS: A Flowsheeting Executive Program, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 466 - 474.

24. Ray, M.S., Johnston, D.W., 1989. Chemical Engineering Design Project; A case study approach. Gordon and Breach Science Publishers, London: 106 - 115.
25. Rosen, E.M., Pauls, A.C., 1977. Computer Aided Chemical Process Design The FLOWTRAN System. COMPUT.& Chem. Eng.,1: 11.
26. Sargent, R.W.H., Perkins, J.D., Thomas, S., 1982. SPEEDUP: Simulation Program for the Economic Evaluation and Design of Unified Processes, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 566 - 574.
27. Seader, J.D., Seider, W.D., Pauls, A.C., 1977. FLOWTRAN Simulation - an Introduction, 2.Ed., CACHE Corporation.
28. Shewchuk, C.F., 1982. MASSBAL: A Flowsheeting Program for the Pulp and Paper Industry, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 442 - 460.
29. Sinnott, R.K., 1985. Chemical Engineering; An Introduction to Chemical Engineering Design, Pergamon Press Ltd., Oxford: 131 - 147.
30. Şahin, Y., 1993. Şahsi görüşme.
31. Thambynayagam, R.K.M., Banch, S.J., Winter, P., CONCEPT MK IV; A New Approach to Process Flowsheeting 277th Event Eur. Fed. Chem. Eng. (CHEMPLANT'80), Sept.3-5, 1980. Heviz, Hungary.

32. Thompson, D.W., 1982. CHEMOS: Chemical Engineering Modeling and Optimization System, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 575 - 585.
33. Weels, G.L., 1973. Computation for Process Engineering. John Wiley and Sons Inc., New York: 105 - 120.
34. Winter, P., 1982. CONCEPT: Interactive Process Flowsheeting, In: M.E. Leesley (Editor), Computer-Aided Process Plant Design. Gulf Publishing Company, Houston: 512 - 517.
35. Winter, P., 1992. Computer-Aided Process Engineering; The Evolution Continues. Chemical Engineering Progress: 88(2):75 - 85.



```

10 CLS
20 'UMRAN2 DOSYASI
30 CLS:KEY OFF:COLOR 10,5
40 LOCATE 25,1:PRINT STRING$(35,177);:COLOR 3045
45 PRINT "UMRAN2";:COLOR 10,5:PRINT STRING$(35,177)
50 FOR K=15 TO 60
60 FOR L=6 TO 20
70 LOCATE L,K:PRINT "■" ;:NEXT L,K
80 FOR K=20 TO 65
90 FOR L=8 TO 22
100 LOCATE L,K :PRINT "|||" ;:NEXT L,K
110 COLOR 15,1:LOCATE 10,26:PRINT " MADDE DENKLIĞİ HESAPLAMASI "
120 LOCATE 14,26 :PRINT "<A>.....YENİ BİR DOSYA AÇILIR "
130 LOCATE 15,26 :PRINT "<B>.....VERİLER GİRİLİR "
140 LOCATE 16,26 :PRINT "<C>.....HESAPLAMA YAPILIR "
150 LOCATE 17,26 :PRINT "<D>.....ÇIKIŞ "
160 LOCATE 20,40 :PRINT "SEÇİMİNİZ :";:INPUT "",SEC$
231 IF SEC$="D" THEN 270
270 END

```

[illegible]

```

10 'UMRAN1 FILE
20 CLS
21 PRINT :PRINT :PRINT
22 LOCATE 10,26 :PRINT "      İŞLEMİNİZİ YAPIYORUM      "
23 LOCATE 16,26 :PRINT "      LÜTFEN BEKLEYİNİZ .....      "
24 PRINT :PRINT :PRINT
60 FOR W=1 TO C2
70 FOR I=1 TO N:FOR J=1 TO N
90 FOR I=1 TO N:INPUT #1,B(I):NEXT I
120 FOR I=1 TO N
181 ENB=ABS(A(INDIS,K)/SS(INDIS))
190 FOR I=K TO N
200 INDIS=P(I):SAKLA=ABS(A(INDIS,K)/SS(INDIS))
220 NEXT I
290 INDIS=P(I)
310 NEXT J:NEXT I:NEXT K
320 FOR K=1 TO N-1
330 FOR I=K+1 TO N
340 INDIS=P(I)
360 NEXT I:NEXT K
370 FOR I=N TO 1 STEP -1
380 SAKLA=0
390 FOR J=I+1 TO N
410 NEXT J
420 X(I)=(B(P(I))-SAKLA)/A(P(I),I):SON(W,I)=X(I)
430 NEXT I
440 NEXT W
450 CLS
460 LOCATE 8,20:PRINT "1. EKRAN "
470 LOCATE 10,20:PRINT "2. YAZICI "

```

```

480 LOCATE 12,20:INPUT "SEÇİMINİZ <1-2> ",SEC
490 IF SEC=1 THEN 540
500 IF SEC=2 THEN 640
510 LOCATE 15,20:PRINT "HATALI SEÇİM YAPTINIZ....."
520 LOCATE 16,20:INPUT "DİKKATLİ SEÇİM YAPINIZ ...<ENTER> TUSUNA BASINIZ...",FF$
530 GOTO 450
540 CLS
580 PRINT STRING$(80,196):IF SATIR>40 THEN INPUT"",TT:CLS:SATIR=0
590 NEXT J
600 CLOSE
610 LOCATE 22,20:PRINT " ENTER "
620 IF INKEY$=""THEN 620
630 CHAIN "UMRAN2
640 CLS
650 SS=0
660 LOCATE 12,20:INPUT "PRINTERİ ACINIZ.....",FF$
670 LPRINT " BİLEŞEN BİRİM ";
680 FOR I=1 TO N
690 SS=SS+1
710 LPRINT "
720 LPRINT "
730 SS=1
740 LPRINT I;
750 LPRINT " ";:NEXT I
760 LPRINT STRING$(80,196)
770 LPRINT " 1 ";
780 SS=0
790 FOR J=1 TO C2:SS=0:FOR I=1 TO N
800 SS=SS+1

```



```
810 IF SS<=5 THEN 850
820 LPRINT
890 IF J=C2 THEN 910
900 LPRINT " ";J+1;" "
910 NEXT J
920 CLOSE
930 LOCATE 22,20:PRINT " ENTER "
940 IF INKEY$=""THEN 940
950 CHAIN "UMRAN2"
```

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi : 04-02-1970

Doğum yeri : İstanbul

Öğrenim Durumu:

1975 - 1980 Gümüşsuyu ilkokulu, İstanbul,
1980 - 1983 Beykoz Ziya Ünsel Ortaokulu, İstanbul,
1983 - 1986 Paşabahçe Ferit İnal Lisesi, İstanbul,
1986 - 1990 Yıldız Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi,
Kimya Mühendisliği Bölümü, İstanbul,
1990 - Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri
Enstitüsü, Kimya Mühendisliği Bölümünde
Yüksek Lisans Öğrencisi.

Medeni Hali : Bekar