

AKDENİZ ONİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

+

SÜREKLİ SİSTEMLERDE

ÇOK BİLEŞENLİ GAZ DİFUZYONU

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Mak.Müh.Havva CEYLAN

T344/1-1

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih: 23 Mayıs 1988

Tezin Savunulduğu Tarih : 10 Haziran 1988

Tez Danışmanı : Prof.Dr.İng.Z.Kâzım TELLİ

Diğer Jüri Üyeleri : Doç.Dr.Hüseyin ŞALVARLI

Yrd.Doç.Dr.Ali Kemal YAKUT

HAZİRAN 1988

ÖNSÖZ

Moleküler difüzyon teknik pratikte heterojen katalitik gaz reaksiyonlarında, gaz absorpsiyonunda, kondenzasyonda yer alan önemli bir olaydır. Belirtilen yüzey proseslerinde difüzyonun, dolayısıyla difüzyon kütle akımlarının belirlenebilmesi için difüzyon katsayılarının hesaplanması gerekmektedir. Şimdiye kadar yapılan çalışmalarda, N bileşen içinde 1 ve 2 bileşenin difüzyona uğradığı durum için difüzyon katsayıları türetilmiştir. Bu çalışmada ise N bileşen içinde 3 bileşenin difüzyona uğradığı durumda hesaplar yapılarak, yukarıda bahsedilen yüzey proseslerinin incelenmesine bir kademe daha ilave edilmiştir.

Bu çalışmam esnasında ilgi ve yardımlarını esirgemeyen değerli hocam Prof.Dr.Ing.Z.Kâzım TELLİ'ye teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
SEMBOLLER.....	IV
ÖZET.....	V
SUMMARY.....	VI
BÖLÜM 1. GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2. POLİNER DİFÜZYON KATSAYILARININ HESABI.....	3
BÖLÜM 3. NÜMERİK SONUÇLARIN DEĞERLENDİRİLMESİ.....	27
KAYNAKLAR.....	29
EKLER.....	30
ÖZGEÇMİŞ.....	32

SEMBOLLER

- y : Kütleyüzdesi
 μ : Mol kütlesi
 M : Kütleyakımı
 \bar{D}_{ij} : Biner difüzyon katsayısı
 D_{ij} : Poliner difüzyon katsayısı
 \dot{m} : Difüzyon kütleyakımı
 ρ : Yoğunluk
 T : Sıcaklık ($^{\circ}K$)
 F : Kontrol büyüklüğü

ÖZET

Sürekli sistemlerde difüzyon konusu TELLİ [1] tarafından genel olarak incelenmiştir. Bu çalışmada ise N bileşenli gaz karışımı içinde 3 bileşenin difüzyon durumunda olduğu hal ele alınarak gaz karışımına ait poliner difüzyon katsayıları hesaplanmıştır.

Poliner difüzyon katsayılarının hesaplanmasında dönüştürülmüş Stefan-Maxwel denklemi temel denklem olarak kullanılmış, eylemsiz bileşenlere ait kütle akımları ve kütle yüzdesi gradyanları ihmal edilmiştir.

Bundan sonra etilenin hidrojenlenmesi reaksiyonu örneğinde difüzyon katsayılarının nümerik sonuçları elde edilmiş ve bu sonuçlar üzerinde fiziksel değerlendirme yapılmıştır.

SUMMARY

Diffusion process in the continuous systems was extensively investigated by TELLÍ[1]. In this study, considering the diffusion of three components in multicomponent gas systems, the polynary diffusion coefficients of the gas mixture have been calculated.

In the calculation of the polynary diffusion coefficients the transformed Stefan-Maxwell's equation is used as a main equation. Mass flow of inert gas components and the gradients of mass percentage are ignored.

Finally as an example of ethylene hydrogenation reaction, the numerical values of the polynary diffusion coefficients are obtained, and discussed physically.

It has been seen from the diagrams that the coefficients of diffusion increase as temperature increases. In addition, if components with great molecular weight get richer, the coefficients of polynary diffusion decrease.

1. GİRİŞ

Difüzyon, fiziksel bir etki altında tek bir bileşenin karışım içindeki moleküler hareketidir. Difüzyonun başlıca sebebi konsantrasyon farklarıdır. Konsantrasyon farkından dolayı bileşen, bu farkı giderecek yöne doğru hareket eder. Sonunda konsantrasyonlar eşit hale gelir.

Bir bölgede konsantrasyon gradyanının sıfırdan farklı olması ilk defa Fick tarafından

$$j_i = -D_i \frac{dc_i}{dr}$$

ifadesiyle belirtilen, moleküler difüzyona neden olur. Burada j_i difüzyon mol akımı, D_i difüzyon katsayısı, dc_i/dr ise konsantrasyon gradyanıdır. Eğer bu bölgede konsantrasyon farklarının yanısıra basınç ve sıcaklık farkları da varsa, bu durumda Fick tarafından belirtilen moleküler difüzyona ilave olarak basınç difüzyonu ve termedifüzyon meydana gelir.

Difüzyon sisteminde gaz karışımında ikiden fazla bileşen varsa, çok bileşenli difüzyondan söz edilir. Çok bileşenli gaz difüzyonu gaz absorpsiyonu, heterojen kimyasal reaksiyonlar ve kondenzasyon gibi yüzeyel proseslerde yer alan bir olaydır.

Değinilen proseslerde turbulans hakim olsa da, yüzeye yakın bölgede moleküler karakterdeki difüzyon önemli rol oynamaktadır. İlgili bileşenler yüzeye, gaz karışımı içinden, difüzyonla iletilmektedir.

Difüzyonun olduğu bölgede gaz karışımı hidrodinamik bakımdan hareket halinde, ise sistem süreklidir. Difüzyon kapalı hareketsiz bir bölgede oluyorsa, sistem süreksizdir.

Süreksiz sistemlerde difüzyonu direkt olarak Stefan-Maxwell denklemi belirlemektedir.

$$c. \frac{dx_i}{dr} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{x_i N_j - x_j N_i}{D_{ij}}$$

Yukarıdaki denklemde miktarlar mol, konsantrasyonlar mol yüzdesi olarak alınır. Miktarlar g ve konsantrasyonlar kütle yüzdesi cinsinden gösterilecek şekilde dönüşümler yapılırsa sürekli sistemlerdeki difuzyonu belirleyen denklem elde edilir. Bu denklem yardımıyla sürekli sistemlerdeki çeşitli difuzyon durumunu, gaz bileşenlerin difuzyon yeteneğine göre incelemek mümkündür.

TELLİ [1] 'de sürekli sistemlerde difuzyon konusu genel olarak incelenmiş, çok bileşenli gaz difuzyonuna esas teşkil eden Stefan-Maxwell denklemi barisantrik sisteme dönüştürülmüştür. Değınilen çalışmada ayrıca sürekli sistemler için geçerli genel difuzyon denklemi yardımıyla iki difuzyon durumu incelenmiştir.

1- Sürekli bir sistemde N bileşenli gaz karışımı içinde sadece 1 no'lu bileşen difuzyon durumundadır. Diğer (N-1) bileşen eylemsiz gazlardır.

2- Yine sürekli bir sistemde 1 ve 2 bileşenleri difuzyon durumunda, (N-2) bileşen eylemsiz gazlardır.

Bu çalışmada N bileşenli gaz karışımında 3 bileşenin difuzyon durumunda olduğu hal incelenerek difuzyon katsayıları hesaplandı. Dönüştürülmüş Stefan-Maxwell denklemi temel denklem olarak kullanıldı.

2. POLİNER DİFUZYON KATSAYILARININ HESABI

N bileşenli gaz karışımının yer aldığı sürekli bir sistemdeki poliner difüzyon TELLİ [1] 'den alınan genel defüzyon denklemleriyle belirlidir.

$$\sum_{j=1}^N \frac{y_j}{\mu_j} \cdot \frac{dy_i}{dr} - y_i \sum_{j=1}^N \frac{1}{\mu_j} \frac{dy_j}{dr} = \frac{1}{\rho} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{y_i \dot{M}_j - y_j \dot{M}_i}{\mu_j D_{ij}}$$

$i = 1, 2, 3, \dots, N.$ (2.1)

Bu ifadede ρ kütle yoğunluğu, y_i i bileşenine ait kütle yüzdesi, dy_i/dr kütle yüzdesi gradyanı, $\overline{D_{ij}}$ i ve j bileşenine ait biner difüzyon katsayısıdır. \dot{M}_i ile belirtilen kütle akımı ise sistemde difüzyon ve konveksiyon yoluyla meydana gelen kütle akımlarının toplamını ifade eden büyüklüktür.

$$\dot{M}_i = \dot{m}_i + y_i \dot{M}_t \quad i = 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.2)$$

Burada \dot{M}_i kütle akımı, \dot{M}_t total kütle akımı, \dot{m}_i ise difüzyon kütle akımıdır.

Şayet bir gaz bileşen sınır yüzeyindeki heterojen proses katılmıyor ise veya mol kütlesi relatif olarak büyük yani difüzyon hızı küçük ise buna eylemsiz gaz denir. Bu tür bileşenlere ait kütle akımları sıfır olarak alınır.

Bu çalışmada 3 bileşen difüzyon durumunda olup, diğer (N-3) bileşen eylemsiz gazlardır. Dolayısıyla eylemsiz bileşenler için

$$\dot{M}_j = 0 \quad j = 4, 5, \dots, N$$

geçerlidir. Difüzyona uğrayan 3 bileşen için ise,

$$\dot{M}_1 = \dot{m}_1 + y_1 \dot{M}_t$$

$$\dot{M}_2 = \dot{m}_2 + y_2 \dot{M}_t$$

$$\dot{M}_3 = \dot{m}_3 + y_3 \ddot{M}_t$$

bağıntıları yazılabilir.

\dot{M}_t total kütle akımı sistemdeki kütle akımlarının toplamına eşittir.

$$\dot{M}_t = \sum_{i=1}^N \dot{M}_i$$

$$\dot{M}_t = \dot{M}_1 + \dot{M}_2 + \dot{M}_3$$

$$\dot{M}_t = \dot{m}_1 + y_1 \dot{M}_t + \dot{m}_2 + y_2 \dot{M}_t + \dot{m}_3 + y_3 \dot{M}_t$$

$$\dot{M}_t = \dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3 + \dot{M}_t (y_1 + y_2 + y_3)$$

$$\dot{M}_t - \dot{M}_t (y_1 + y_2 + y_3) = \dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3$$

$$\dot{M}_t (1 - y_1 - y_2 - y_3) = \dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3$$

Sistemdeki bileşenlere ait kütle yüzdelerinin toplamı 1'e eşit olacağından,

$$\sum_{j=1}^N y_j = 1 \quad 1 - y_1 - y_2 - y_3 = \sum_{j=4}^N y_j$$

ifadesiyle,

$$\dot{M}_t = \frac{\dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3}{\sum_{j=4}^N y_j}$$

bulunur. Difüzyona uğrayan bileşenler için yazılan \dot{M}_1 , \dot{M}_2 , \dot{M}_3 kütle akımlarında \dot{M}_t değerini yerine koyalım.

$$\dot{M}_1 = \dot{m}_1 + \frac{y_1}{\sum_{j=4}^N y_j} (\dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3)$$

$$\dot{M}_2 = \dot{m}_2 + \frac{y_2}{\sum_{j=4}^N y_j} (\dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3)$$

$$\dot{M}_3 = \dot{m}_3 + \frac{y_3}{\sum_{j=4}^N y_j} (\dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3)$$

$$a_1 = \frac{y_1}{\sum_{j=4}^N y_j}, \quad a_2 = \frac{y_2}{\sum_{j=4}^N y_j}, \quad a_3 = \frac{y_3}{\sum_{j=4}^N y_j}$$

ile,

$$\dot{M}_1 = \dot{m}_1 + a_1(\dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3) = (1+a_1)\dot{m}_1 + a_1(\dot{m}_2 + \dot{m}_3)$$

$$\dot{M}_2 = \dot{m}_2 + a_2(\dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3) = (1+a_2)\dot{m}_2 + a_2(\dot{m}_1 + \dot{m}_3)$$

$$\dot{M}_3 = \dot{m}_3 + a_3(\dot{m}_1 + \dot{m}_2 + \dot{m}_3) = (1+a_3)\dot{m}_3 + a_3(\dot{m}_1 + \dot{m}_2)$$

ifadeleri elde edilir.

Sürekli sistemlerde i bileşenine ait difüzyon kütle akımı

$$\dot{m}_i = \rho \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N D_{ij} \frac{dy_j}{dr} \quad i = 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.3)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Burada D_{ij} sürekli bir sistemdeki poliner difüzyon katsayılarıdır. Süreksiz sistemlere Fick sistemi, sürekli sistemlere barisantrik sistem de denilmektedir.

(2.3) denkleminde $i = 1, 2, 3$ bileşenleri için $\dot{m}_1, \dot{m}_2, \dot{m}_3$ difüzyon kütle akımları bulunur. Bu ifadeler $(N-1)$ adet kütle yüzdesi gradyanına bağlıdır.

$$\sum_{i=1}^N y_i = 1$$

eşitliğinden,

$$\frac{dy_2}{dr} = - \frac{dy_1}{dr} - \frac{dy_3}{dr} - \frac{dy_4}{dr} - \dots - \frac{dy_N}{dr}$$

ile,

$$\dot{m}_1 = -\rho D_{12} \frac{dy_1}{dr} + \rho (D_{13} - D_{12}) \frac{dy_3}{dr} + \rho \sum_{j=4}^N (D_{1j} - D_{12}) \frac{dy_j}{dr}$$

$$\dot{m}_2 = -\rho D_{21} \frac{dy_2}{dr} + \rho (D_{23} - D_{21}) \frac{dy_3}{dr} + \rho \sum_{j=4}^N (D_{2j} - D_{21}) \frac{dy_j}{dr}$$

$$\dot{m}_3 = -\rho D_{31} \frac{dy_3}{dr} + \rho (D_{32} - D_{31}) \frac{dy_2}{dr} + \rho \sum_{j=4}^N (D_{3j} - D_{31}) \frac{dy_j}{dr}$$

elde edilir. Burada 4'den N'e kadar bileşenler eylemsiz gaz olduğundan 3.terimler ihmal edilir [2]. Böylece yukarıdaki ifadeler aşağıda verildiği gibi basitleşir:

$$\dot{m}_1 = -\rho D_{12} \frac{dy_1}{dr} + \rho (D_{13} - D_{12}) \frac{dy_3}{dr}$$

$$\dot{m}_2 = -\rho D_{21} \frac{dy_2}{dr} + \rho (D_{23} - D_{21}) \frac{dy_3}{dr} \quad (2.4)$$

$$\dot{m}_3 = -\rho D_{31} \frac{dy_3}{dr} + \rho (D_{32} - D_{31}) \frac{dy_2}{dr}$$

N bileşen içinde 3 bileşenin difüzyona uğradığı durum için elde edilen bu denklemler 3 kütle yüzdesi gradyanı ve 6 difüzyon katsayısına bağımlıdır.

6 difüzyon katsayısının hesaplanabilmesi için difüzyon kütle akımı cinsinden belirlenmiş 3 adet denkleme ihtiyaç vardır. Aranılan bu denklemler genel difüzyon denkleminde $i=1,2,3$ için bulunacaktır.

2.1 denkleminde $i=1$ için:

$$\sum_{j=1}^N \frac{y_j}{\mu_j} \frac{dy_1}{dr} - y_1 \sum_{j=1}^N \frac{1}{\mu_j} \frac{dy_j}{dr} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{y_1 \dot{M}_2 - y_2 \dot{M}_1}{\mu_2 \cdot \bar{D}_{12}} \right. \\ \left. + \frac{y_1 \dot{M}_3 - y_3 \dot{M}_1}{\mu_3 \cdot \bar{D}_{13}} + \frac{y_1 \dot{M}_4 - y_4 \dot{M}_1}{\mu_4 \cdot \bar{D}_{14}} + \dots + \frac{y_1 \dot{M}_N - y_N \dot{M}_1}{\mu_N \cdot \bar{D}_{1N}} \right)$$

elde edilir. Bu ifade,

$$\dot{M}_j = 0, \quad j = 4, 5, 6, \dots, N$$

ve,

$$\dot{M}_i = \dot{m}_i + y_i \dot{M}_t, \quad i = 1, 2, 3$$

ile,

$$\sum_{j=1}^N \frac{y_j}{\mu_j} \cdot \frac{dy_1}{dr} - y_1 \sum_{j=1}^N \frac{1}{\mu_j} \frac{dy_j}{dr} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{y_1 \dot{m}_2 - y_2 \dot{m}_1}{\mu_2 \cdot \bar{D}_{12}} + \right. \\ \left. + \frac{y_1 \dot{m}_3 - y_3 \dot{m}_1}{\mu_3 \cdot \bar{D}_{13}} - \dot{M}_1 \sum_{j=4}^N \frac{y_j}{\mu_j \cdot \bar{D}_{1j}} \right)$$

şeklini alır. Buradaki 2. terimde

$$\sum_{j=1}^N \frac{1}{\mu_j} \frac{dy_j}{dr} = \frac{1}{\mu_1} \frac{dy_1}{dr} + \frac{1}{\mu_2} \frac{dy_2}{dr} + \frac{1}{\mu_3} \frac{dy_3}{dr} \\ + \frac{1}{\mu_4} \frac{dy_4}{dr} + \dots + \frac{1}{\mu_N} \frac{dy_N}{dr}$$

$$\frac{dy_2}{dr} = \frac{-dy_1}{dr} - \frac{dy_3}{dr} - \frac{dy_4}{dr} - \dots - \frac{dy_N}{dr}$$

yerleştirilir.

$$\sum_{j=1}^N \frac{1}{\mu_j} \frac{dy_j}{dr} = \left(\frac{1}{\mu_1} - \frac{1}{\mu_2} \right) \frac{dy_1}{dr} + \left(\frac{1}{\mu_3} - \frac{1}{\mu_2} \right) \frac{dy_3}{dr} + \sum_{j=4}^N \left(\frac{1}{\mu_j} - \frac{1}{\mu_2} \right) \frac{dy_j}{dr}$$

ve eylemsiz gazların kütle yüzdesi gradyanları TELLİ[3] 'e dayanılarak ihmal edilirse,

$$\frac{dy_j}{dr} = 0, \quad j= 4,5,6, \dots$$

$$\sum_{j=1}^N \frac{1}{\mu_j} \frac{dy_j}{dr} = \left(\frac{1}{\mu_1} - \frac{1}{\mu_2} \right) \frac{dy_1}{dr} + \left(\frac{1}{\mu_3} - \frac{1}{\mu_2} \right) \frac{dy_3}{dr}$$

elde edilir. Bu ifadeyi i=1 için elde edilen son denklemde yerine koyup, gerekli düzenlemeleri yaparak,

$$\mu_2 \mu_3 \overline{D_{12} D_{13}} \sum_{j=4}^N \frac{y_j}{\mu_j \overline{D_{1j}}} = a_4$$

eşitliği ile diffüzyona uğrayan birinci bileşen için genel diffüzyon denkleminde $\dot{m}_1, \dot{m}_2, \dot{m}_3$ 'e bağlı olarak aşağıdaki denklem elde edilir.

$$\rho \mu_2 \mu_3 \overline{D_{12} D_{13}} \left[\left(\frac{y_1}{\mu_2} + \sum_{j=2}^N \frac{y_j}{\mu_j} \right) \frac{dy_1}{dr} - y_1 \left(\frac{1}{\mu_3} - \frac{1}{\mu_2} \right) \frac{dy_3}{dr} \right] = \dot{m}_3 (\mu_2 \overline{D_{12}} y_1 - a_1 a_4) + \dot{m}_2 (\mu_3 \overline{D_{13}} y_1 - a_1 a_4) - [\mu_3 \overline{D_{13}} y_2 + \mu_2 \overline{D_{12}} y_3 + a_4 (1+a_1)] \dot{m}_1 \quad (2.5)$$

Genel diffüzyon denkleminde i=2 için,

$$\sum_{j=1}^N \frac{y_j}{\mu_j} \frac{dy_2}{dr} - y_2 \sum_{j=1}^N \frac{1}{\mu_j} \frac{dy_j}{dr} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{y_2 \dot{m}_1 - y_1 \dot{m}_2}{\mu_1 \overline{D_{12}}} + \right.$$

$$+ \frac{y_2 \dot{M}_3 - y_3 \dot{M}_2}{\mu_3 \cdot \overline{D}_{23}} + \frac{y_2 \dot{M}_4 - y_4 \dot{M}_2}{\mu_4 \cdot \overline{D}_{24}} + \dots + \frac{y_2 \dot{M}_N - y_N \dot{M}_2}{\mu_N \cdot \overline{D}_{2N}}$$

denklemini yazılır.

i=1 için yapılan tüm işlemler bu denklem içinde yapılarak,

$$\mu_1 \cdot \mu_3 \overline{D}_{12} \overline{D}_{23} \sum_{j=4}^N \frac{y_j}{\mu_j \cdot \overline{D}_{2j}} = a_5$$

ile, difüzyon durumundaki ikinci bileşene ait, \dot{m}_1 , \dot{m}_2 ve \dot{m}_3 'e bağlı denklem elde edilir:

$$\begin{aligned} \rho \cdot \mu_1 \mu_3 \overline{D}_{12} \overline{D}_{23} \left[\sum_{j=1}^N \frac{y_j}{\mu_j} \cdot \frac{dy_2}{dr} - y_2 \left(\frac{1}{\mu_1} - \frac{1}{\mu_2} \right) \frac{dy_1}{dr} - y_2 \right. \\ \left. \left(\frac{1}{\mu_3} - \frac{1}{\mu_2} \right) \frac{dy_3}{dr} \right] = \dot{m}_3 (\mu_1 \overline{D}_{12} \cdot y_2 - a_2 \cdot a_5) - \dot{m}_2 [\mu_1 \cdot \overline{D}_{12} y_3 + \mu_3 \overline{D}_{23} y_1 \\ + a_5 (1 + a_2)] + \dot{m}_1 (\mu_3 \cdot \overline{D}_{23} \cdot y_2 - a_2 \cdot a_5) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Genel difüzyon denkleminde i=3 için,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \frac{y_j}{\mu_j} \frac{dy_3}{dr} - y_3 \sum_{j=1}^N \frac{1}{\mu_j} \cdot \frac{dy_j}{dr} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{y_3 \dot{M}_1 - y_1 \dot{M}_3}{\mu_1 \cdot \overline{D}_{13}} + \right. \\ \left. + \frac{y_3 \dot{M}_2 - y_2 \dot{M}_3}{\mu_2 \cdot \overline{D}_{23}} + \frac{y_3 \dot{M}_4 - y_4 \dot{M}_3}{\mu_4 \cdot \overline{D}_{34}} + \dots + \frac{y_3 \dot{M}_N - y_N \dot{M}_3}{\mu_N \cdot \overline{D}_{3N}} \right) \end{aligned}$$

yazılan denklemde gerekli düzenlemeler yapılır ve,

$$\mu_1 \mu_2 \overline{D}_{13} \overline{D}_{23} \sum_{j=4}^N \frac{y_j}{\mu_j \cdot \overline{D}_{3j}} = a_6$$

ile,

$$\rho \cdot \mu_1 \mu_2 \overline{D_{13} D_{23}} \left[\left(\frac{y_1}{\mu_1} + \frac{y_2 + y_3}{\mu_2} + \sum_{j=4}^N \frac{y_j}{\mu_j} \right) \frac{dy_3}{dr} - y_3 \left(\frac{1}{\mu_1} - \frac{1}{\mu_2} \right) \frac{dy_1}{dr} \right] = \dot{m}_1 (\mu_2 \cdot \overline{D_{23}} \cdot y_3 - a_3 \cdot a_6) + \dot{m}_2 (\mu_1 \cdot \overline{D_{13}} y_3 - a_3 \cdot a_6) - \dot{m}_3 [\mu_1 \overline{D_{13}} y_2 + \mu_2 \overline{D_{23}} y_1 + a_6 (1 + a_3)] \quad (2.7)$$

üçüncü bileşene ait denklem elde edilir.

(2.5) denklemindeki terimler A_i , (2.6) denklemindeki terimler B_i , (2.7) denklemindeki terimler C_i hantleriyle belirlenerek denklemler daha basit bir şekilde ifade edilmiş olur:

$$A_1 \frac{dy_1}{dr} - A_2 \frac{dy_3}{dr} = A_3 \dot{m}_3 + A_4 \dot{m}_2 - A_5 \dot{m}_1$$

$$B_1 \frac{dy_2}{dr} - B_2 \frac{dy_1}{dr} - B_3 \frac{dy_3}{dr} = B_4 \dot{m}_3 - B_5 \dot{m}_2 + B_6 \dot{m}_1 \quad (2.8)$$

$$C_1 \frac{dy_3}{dr} - C_2 \frac{dy_1}{dr} = C_3 \dot{m}_1 + C_4 \dot{m}_2 - C_5 \dot{m}_3$$

(2.8) denklemleri kullanılarak sırasıyla \dot{m}_1 , \dot{m}_2 , \dot{m}_3 ifadeleri elde edilecektir. 1.denklem, 2.denkleme \dot{m}_3 'ün katsayısı olan B_4 ile, 2.denklem, 1.denkleme \dot{m}_3 'ün katsayısı olan A_4 ile çarpılır ve taraf tarafa toplanırsa,

$$(A_1 B_4 + B_2 A_3) \frac{dy_1}{dr} - B_1 A_3 \frac{dy_2}{dr} + (B_3 A_3 - A_2 \cdot B_4) \frac{dy_3}{dr} =$$

$$(A_4 B_4 + B_5 A_3) \dot{m}_2 - (A_5 B_4 + B_6 A_3) \dot{m}_1$$

(2.8) den, ikinci denklem C_5 ile üçüncü denklem B_4 ile çarpılır ve taraf tarafa toplanırsa,

$$-(B_2C_5 + C_2B_4) \frac{dy_1}{dr} + B_1C_5 \frac{dy_2}{dr} + (C_1B_4 - B_3C_5) \frac{dy_3}{dr} =$$

$$(C_4B_4 - B_5C_5) \dot{m}_2 + (B_6C_5 + C_3B_4) \dot{m}_1$$

elde edilir. Bu iki denklemden, birinci denklem $(C_4B_4 - B_5C_5)$ ile, ikinci denklem $(A_4B_4 + B_5A_3)$ ile çarpılır ve taraf tarafa toplanırsa \dot{m}_1 'e bağlı ifade bulunur. Bulunan \dot{m}_1 ifadesi (2.4) denklemindeki \dot{m}_1 ifadesiyle benzeşim göstermesi gerekmektedir. Bu nedenle,

$$\frac{dy_2}{dr} = \frac{-dy_1}{dr} - \frac{dy_3}{dr}$$

kullanılarak,

$$\begin{aligned} & \left[(A_1B_4 + B_2A_3)(C_4B_4 - B_5C_5) + (B_2C_5 + C_2B_4)(A_4B_4 + B_5A_3) + B_1A_3(C_4B_4 - B_5C_5) \right. \\ & \left. + B_1C_5(A_4B_4 + B_5A_3) \right] \frac{dy_1}{dr} + \left[B_1A_3(C_4B_4 - B_5C_5) + B_1C_5(A_4B_4 + B_5A_3) + \right. \\ & \left. (B_3A_3 - A_2B_4)(C_4B_4 - B_5C_5) - (C_1B_4 - B_3C_5)(A_4B_4 + B_5A_3) \right] \frac{dy_3}{dr} = \\ & - \left[(A_5B_4 + B_6A_3)(C_4B_4 - B_5C_5) + (B_6C_5 + C_3B_4)(A_4B_4 + B_5A_3) \right] \dot{m}_1 \quad (2.9) \end{aligned}$$

elde edilir. (2.9) ifadesinin,

$$\dot{m}_1 = -\rho D_{12} \frac{dy_1}{dr} + \rho (D_{13} - D_{12}) \frac{dy_3}{dr}$$

ile karşılaştırılmasından D_{12} ve D_{13} poliner difuzyon katsayıları bulunur. \dot{m}_1 ifadesinde yer alan ρ (2.9) denkleminde, harflerle belirttiğimiz ifadeler içinde yer almaktadır. Bu ifadelerden ρ 'yu parantez dışına aldığımız takdirde benzeşim tamamlanmaktadır.

$$D_{12} = \frac{(A_1B_4 + B_2A_3)(C_4B_4 - B_5C_5) + (B_2C_5 + C_2B_4)(A_4B_4 + B_5A_3) + B_1A_3(C_4B_4 - B_5C_5) + B_1C_5(A_4B_4 + B_5A_3)}{(A_5B_4 + B_6A_3)(C_4B_4 - B_5C_5) + (B_6C_5 + C_3B_4)(A_4B_4 + B_5A_3)}$$

D_{12} denkleminde gerekli basitleştirmeler yapıldıktan sonra paydadaki terimler için,

$$A_3(B_6C_4+C_3B_5)+A_4(B_6C_5+C_3B_4)+A_5(B_4C_4-B_5C_5)=D$$

eşitliği kullanılarak,

$$D_{12} = \frac{A_1'(B_4C_4-B_5C_5)+(B_1'+B_2')(A_3C_4+A_4C_5)+C_2'(A_3B_5+A_4B_4)}{D} \quad (2.10)$$

elde edilir. Burada D nun parantez dışına alındığı ifadeler üssü (') olarak gösterilmiştir.

(2.9) denklemini \dot{m}_1 ifadesiyle karşılaştırmaya devam edersek ($D_{13}-D_{12}$) den D_{13} elde edilir.

$$\begin{aligned} & -[B_1A_3(C_4B_4-B_5C_5)+B_1C_5(A_4B_4+B_5A_3)+(B_3A_3-A_2B_4)(C_4B_4-B_5C_5) - \\ & (C_1B_4-B_3C_5)(A_4B_4+B_5A_3)] \\ D_{13}-D_{12} &= \frac{}{(A_5B_4+B_6A_3)(C_4B_4-B_5C_5)+(B_6C_5+C_3B_4)(A_4B_4+B_5A_3)} \\ &= \frac{A_2(B_4C_4-B_5C_5)-(B_1+B_3)(A_3C_4+A_4C_5)+C_1(A_3B_5+A_4B_4)}{D} \end{aligned}$$

$$D_{13} = \frac{(A_1'+A_2')(B_4C_4-B_5C_5) + (B_2'-B_3')(A_3C_4+A_4C_5) + (C_1'+C_2')(A_3B_5+A_4B_4)}{D} \quad (2.11)$$

\dot{m}_2 ifadesini elde etmek için ise, (2.8) denklemlerinden \dot{m}_1 ve \dot{m}_2 'ye bağlı olarak elde ettiğimiz, iki denklemden birincisi ($B_6C_5+C_3B_4$) ile ikincisi ($A_5B_4 + B_6A_3$) ile çarpılarak taraf tarafa toplanır. Bulunan denklemden,

$$\frac{dy_1}{dr} = -\frac{dy_2}{dr} - \frac{dy_3}{dr}$$

yerleştirilirse,

$$\begin{aligned} & -\left[(A_1 B_4 + B_2 A_3)(B_6 C_5 + C_3 B_4) - (B_2 C_5 + C_2 B_4)(A_5 B_4 + B_6 A_3) + B_1 A_3(B_6 C_5 + \right. \\ & \left. C_3 B_4) - B_1 C_5(A_5 B_4 + B_6 A_3) \right] \frac{dy_2}{dr} + \left[-(A_1 B_4 + B_2 A_3)(B_6 C_5 + C_3 B_4) + \right. \\ & \left. (B_2 C_5 + C_2 B_4)(A_5 B_4 + B_6 A_3) + (B_3 A_3 - A_2 B_4)(B_6 C_5 + C_3 B_4) + (C_1 B_4 - B_3 C_5) \right. \\ & \left. (A_5 B_4 + B_6 A_3) \right] \frac{dy_3}{dr} = \\ & = \left[(A_4 B_4 + B_5 A_3)(B_6 C_5 + C_3 B_4) + (C_4 B_4 - B_5 C_5)(A_5 B_4 + B_6 A_3) \right] \dot{m}_2 \quad (2.12) \end{aligned}$$

elde edilir. (2.12)'nin,

$$\dot{m}_2 = -\rho D_{21} \frac{dy_2}{dr} + \rho (D_{23} - D_{21}) \frac{dy_3}{dr}$$

ile karşılaştırılmasından D_{21} ve D_{23} difüzyon katsayıları bulunur.

1. terimlerin karşılaştırılmasından,

$$\begin{aligned} & (A_1 B_4 + B_2 A_3)(B_6 C_5 + C_3 B_4) - (B_2 C_5 + C_2 B_4)(A_5 B_4 + B_6 A_3) + \\ & B_1 A_3(B_6 C_5 + C_3 B_4) - B_1 C_5(A_5 B_4 + B_6 A_3) \\ D_{21} = & \frac{(A_4 B_4 + B_5 A_3)(B_6 C_5 + C_3 B_4) + (C_4 B_4 - B_5 C_5)(A_5 B_4 + B_6 A_3)}{(A_1 B_4 + B_2 A_3)(B_6 C_5 + C_3 B_4) - (B_2 C_5 + C_2 B_4)(A_5 B_4 + B_6 A_3) + B_1 A_3(B_6 C_5 + C_3 B_4) - B_1 C_5(A_5 B_4 + B_6 A_3)} \\ D_{21} = & \frac{A_1'(B_6 C_5 + B_4 C_3) + (B_1' + B_2')(A_3 C_3 - A_5 C_5) - C_2'(A_3 B_6 + A_5 B_4)}{D} \quad (2.13) \end{aligned}$$

ikinci terimlerin karşılaştırılmasından,

$$\begin{aligned}
 & -(A_1 B_4 + B_2 A_3)(B_6 C_5 + C_3 B_4) + (B_2 C_5 + C_2 B_4)(A_5 B_4 + B_6 A_3) + (B_3 A_3 - A_2 B_4) \\
 & (B_6 C_5 + C_3 B_4) + (C_1 B_4 - B_3 C_5)(A_5 B_4 + B_6 A_3) \\
 D_{23} - D_{21} = & \frac{\quad}{(A_4 B_4 + B_5 A_3)(B_6 C_5 + C_3 B_4) + (C_4 B_4 - B_5 C_5)(A_5 B_4 + B_6 A_3)} \\
 D_{23} = & \frac{-A_2'(B_6 C_5 + B_4 C_3) + (B_1' + B_3')(A_3 C_3 - A_5 C_5) + C_1'(A_3 B_6 + A_5 B_4)}{D} \quad (2.14)
 \end{aligned}$$

\dot{m}_3 ifadesinin bulunması için (2.8) de \dot{m}_1 ve \dot{m}_2 nin yok edilmesi gerekir. Bunun için birinci denklem B_6 , ikinci denklem A_5 ile çarpılır ve taraf tarafa toplanırsa \dot{m}_2 ve \dot{m}_3 'e bağlı birinci denklem elde edilir.

$$\begin{aligned}
 (A_1 B_6 - B_2 A_5) \frac{dy_1}{dr} + B_1 A_5 \frac{dy_2}{dr} - (A_2 B_6 + B_3 A_5) \frac{dy_3}{dr} = \\
 (A_3 B_6 + B_4 A_5) \dot{m}_3 + (A_4 B_6 - B_5 A_5) \dot{m}_2
 \end{aligned}$$

(2.8) de ikinci denklem C_3 , üçüncü denklem B_6 ile çarpılır ve taraf tarafa toplanırsa \dot{m}_2 ve \dot{m}_3 'e bağlı ikinci denklem bulunur.

$$\begin{aligned}
 (C_2 B_6 - B_2 C_3) \frac{dy_1}{dr} + B_1 C_3 \frac{dy_2}{dr} - (B_3 C_3 + C_1 B_6) \frac{dy_3}{dr} = \\
 (B_4 C_3 + C_5 B_6) \dot{m}_3 - (B_5 C_3 + C_4 B_6) \dot{m}_2
 \end{aligned}$$

Elde edilen bu iki denklemden birincisi $(B_5 C_3 + C_4 B_6)$, ikincisi $(A_4 B_6 - B_5 A_5)$ ile çarpılır ve taraf tarafa toplanır. Ve,

$$\frac{dy_1}{dr} = - \frac{dy_2}{dr} - \frac{dy_3}{dr}$$

dönüşümü yapılarak,

$$\begin{aligned}
 & - \left[(A_1 B_6 - B_2 A_5)(B_5 C_3 + C_4 B_6) + (C_2 B_6 - B_2 C_3)(A_4 B_6 - B_5 A_5) - B_1 A_5 (B_5 C_3 + C_4 B_6) \right. \\
 & \left. - B_1 C_3 (A_4 B_6 - B_5 A_5) \right] \frac{dy_2}{dr} - \left[(A_1 B_6 - B_2 A_5)(B_5 C_3 + C_4 B_6) + \right. \\
 & \left. + (C_2 B_6 - B_2 C_3)(A_4 B_6 - B_5 A_5) + (A_2 B_6 + B_3 A_5)(B_5 C_3 + C_4 B_6) + (B_3 C_3 + C_1 B_6) \right. \\
 & \left. (A_4 B_6 - B_5 A_5) \right] \frac{dy_3}{dr} = \left[(A_3 B_6 + B_4 A_5)(B_5 C_3 + C_4 B_6) + (B_4 C_3 + C_5 B_6) \right. \\
 & \left. (A_4 B_6 - B_5 A_5) \right] \dot{m}_3 \quad (2.15)
 \end{aligned}$$

elde edilir. (2.15)'i

$$\dot{m}_3 = -\rho D_{31} \frac{dy_3}{dr} + \rho (D_{32} - D_{31}) \frac{dy_2}{dr}$$

ile karşılaştıralım. Birinci terimin benzeşiminden,

$$\begin{aligned}
 & (A_1 B_6 - B_2 A_5)(B_5 C_3 + C_4 B_6) + (C_2 B_6 - B_2 C_3)(A_4 B_6 - B_5 A_5) + \\
 & (A_2 B_6 + B_3 A_5)(B_5 C_3 + C_4 B_6) + (B_3 C_3 + C_1 B_6)(A_4 B_6 - B_5 A_5) \\
 D_{31} & = \frac{\hspace{15em}}{(A_3 B_6 + B_4 A_5)(B_5 C_3 + C_4 B_6) + (B_4 C_3 + C_5 B_6)(A_4 B_6 - B_5 A_5)} \\
 & (A_1' + A_2')(B_5 C_3 + B_6 C_4) + (B_3' - B_2')(A_4 C_3 + A_5 C_4) + \\
 & (C_1' + C_2')(A_4 B_6 - A_5 B_5) \\
 D_{31} & = \frac{\hspace{15em}}{D} \quad (2.16)
 \end{aligned}$$

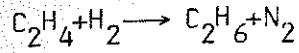
ikinci terimin benzeşiminden,

$$\begin{aligned}
 & - \left[(A_1 B_6 - B_2 A_5)(B_5 C_3 + C_4 B_6) + (C_2 B_6 - B_2 C_3)(A_4 B_6 - B_5 A_5) - \right. \\
 & \left. - B_1 A_5 (B_5 C_3 + C_4 B_6) - B_1 C_3 (A_4 B_6 - B_5 A_5) \right] \\
 D_{32} - D_{31} & = \frac{\hspace{15em}}{(A_3 B_6 + B_4 A_5)(B_5 C_3 + C_4 B_6) + (B_4 C_3 + C_5 B_6)(A_4 B_6 - B_5 A_5)}
 \end{aligned}$$

$$D_{32} = \frac{A_2'(B_5C_3+B_6C_4)+(B_1'+B_3')(A_4C_3+A_5C_4)+C_1'(A_4B_6-A_5B_5)}{D} \quad (2.17)$$

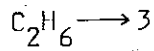
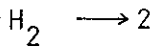
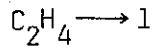
elde edilir.

Poliner difuzyon katsayılarının formül olarak hesaplanmasından sonra, $C_2H_4+H_2+C_2H_6+N_2$ gaz karışımı ele alınarak, bu gaz karışımının,



reaksiyonu yönündeki poliner difuzyon katsayıları nümerik olarak hesaplanacaktır.

Bu reaksiyonda 1 mol etilen ile 1 mol hidrojenden 1 mol etan oluşmaktadır. Azot gazı (N_2) ise eylemsiz gaz olarak ele alınmaktadır.



şeklinde belirlenerek, bileşenlere ait kütle yüzdeleri y_1, y_2, y_3, y_4 olarak ifade edilmiş ve değerleri Tablo 1'de verildiği gibi seçilmiştir.

Tablo 1. Kütle yüzdeleri

y_1	y_2	y_3	y_4
0,400	0,300	0,100	0,200
0,375	0,275	0,150	0,200
0,350	0,250	0,200	0,200
0,325	0,225	0,250	0,200
0,300	0,200	0,300	0,200
0,275	0,175	0,350	0,200
0,250	0,150	0,400	0,200
0,225	0,125	0,450	0,200
0,200	0,100	0,500	0,200
0,175	0,075	0,550	0,200
0,150	0,050	0,600	0,200
0,125	0,025	0,650	0,200

Görülebileceği üzere y_1 ve y_2 değerleri azalmakta, y_3 değerleri artmakta, y_4 ise sabit kalmaktadır.

Biner difüzyon katsayısı MÜLLER [4] tarafından

$$\overline{D}_{12}(T) = \overline{D}_{12}(T_0) \left(\frac{T}{T_0} \right)^n \quad (2.18)$$

şeklinde verilmiştir. Burada $T_0 = 273,15^{\circ}\text{K}$, $\overline{D}_{12}(T_0)$ ise T_0 sıcaklığındaki biner difüzyon katsayısıdır.

Etilenin hidrojenlenmesi reaksiyonu için $\overline{D}_{12}(T_0)$ ve n değerleri [4] den alınarak T sıcaklığındaki $\overline{D}_{12}(T)$ hesaplanır.

$$\overline{D}_{\text{C}_2\text{H}_4-\text{H}_2} = \overline{D}_{12} = 0,521 \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1,68}$$

$$\overline{D}_{\text{C}_2\text{H}_4-\text{C}_2\text{H}_6} = \overline{D}_{13} = 0,0955 \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1,78}$$

$$\overline{D_{C_2H_4-N_2}} = \overline{D_{14}} = 0,138 \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1,71}$$

$$\overline{D_{H_2-C_2H_6}} = \overline{D_{23}} = 0,486 \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1,68}$$

$$\overline{D_{H_2-N_2}} = \overline{D_{24}} = 0,657 \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1,66}$$

$$\overline{D_{C_2H_6-N_2}} = \overline{D_{34}} = 0,128 \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1,72}$$

Bu çalışmada hesaplar $T = 500, 600, 700, 800$ °K için yapılmıştır.

Biner difüzyon katsayılarının hesabından sonra poliner difüzyon katsayıları elde ettiğimiz formüller ile rahatlıkla hesaplanır. Poliner katsayılar hesaplanıp Tablo 2 de verilmiştir. Hesaplar FORTRAN dilinde yazılmış bir programla bilgisayarda yapılmıştır.

Program (FORTRAN IV)

C. POLİNER DİFUZYON KATSAYILARI HESABI

DİMENSİYON Y1(12), Y2(12), Y3(12), Y4(12),
AK1(12), AK2(12), AK3(12), AK4(12), AK5(12), AK6(12),
A1(12), A2(12), A3(12), A4(12), A5(12), B1(12), B2(12),
B3(12), B4(12), B5(12), B6(12), C1(12), C2(12), C3(12),
C4(12), C5(12), D12 P(12), D13P(12), D21P(12), D23P(12),
D31P(12), D32P(12), DP(12), F1(12), F2(12), F3(12).

V1= 28.05

V2= 2.016

V3= 30.066

V4=28.02

T= 500.

51 $D12 = 0,521 \times (T/273.15)^{**} 1.68$

$D13 = 0,0955 \times (T/273.15)^{**} 1.78$

$D14 = 0,138 \times (T/273.15)^{**} 1.71$

$D23 = 0.486 \times (T/273.15)^{**} 1.68$

$D24 = 0,657 \times (T/273.15)^{**} 1.66$

$D34 = 0.128 \times (T/273.15)^{**} 1.72$

DØ3 K= 1,12

3 $Y4(K) = 0.2$

$Y1(1) = 0.4$

DØ4 K=2,12

4 $Y1(K) = Y1(K-1) - 0.025$

$Y2(1) = 0.3$

DØ 5 K=2,12

5 $Y2(K) = Y2(K-1) - 0.025$

DØ 6 K=1,12

6 $Y3(K) = 1. - Y1(K) - Y2(K) - Y4(K)$

DØ 7 K=1,12

$AK1(K) = Y1(K)/Y4(K)$

$AK2(K) = Y2(K)/Y4(K)$

$AK3(K) = Y3(K)/Y4(K)$

$AK4(K) = V2 \times V3 \times D12 \times D13 \times (Y4(K) / (V4 \times D14))$

$AK5(K) = V1 \times V3 \times D12 \times D23 \times (Y4(K) / (V4 \times D24))$

7 $AK6(K) = V1 \times V2 \times D13 \times D23 \times (Y4(K) / (V4 \times D34))$

DØ 8 K= 1,12

$$A1(K) = V2 * V3 * D12 * D13 * (Y1(K)/V2 + Y2(K)/V2 + Y3(K)/V3 + Y4(K)/V4)$$

$$A2(K) = V2 * V3 * D12 * D13 * Y1(K) * (1./V3 - 1./V2)$$

$$A3(K) = V2 * D12 * Y1(K) - AK1(K) * AK4(K)$$

$$A4(K) = V3 * D13 * Y1(K) - AK1(K) * AK4(K)$$

$$A5(K) = V2 * D12 * Y3(K) + V3 * D13 * Y2(K) + AK4(K) * (1. + AK1(K))$$

$$B1(K) = V1 * V3 * D12 * D23 * (Y1(K)/V1 + Y2(K)/V2 + Y3(K)/V3 + Y4(K)/V4)$$

$$B2(K) = V1 * V3 * D12 * D23 * Y2(K) * (1./V1 - 1./V2)$$

$$B3(K) = V1 * V3 * D12 * D23 * Y2(K) * (1./V3 - 1./V2)$$

$$B4(K) = V1 * D12 * Y2(K) - AK2(K) * AK5(K)$$

$$B5(K) = V1 * D12 * Y3(K) + V3 * D23 * Y1(K) + AK5(K) * (1. + AK2(K))$$

$$B6(K) = V3 * D23 * Y2(K) - AK2(K) * AK5(K)$$

$$C1(K) = V1 * V2 * D13 * D23 * (Y1(K)/V1 + (Y2(K) + Y3(K))/V2 + Y4(K)/V4)$$

$$C2(K) = V1 * V2 * D13 * D23 * Y3(K) * (1./V1 - 1./V2)$$

$$C3(K) = V2 * D23 * Y3(K) - AK3(K) * AK6(K)$$

$$C4(K) = V1 * D13 * Y3(K) - AK3(K) * AK6(K)$$

B C5(K) = V1 * D13 * Y2(K) + V2 * D23 * Y1(K) + AK6(K) * (1. + AK3(K))

DØ 9 K= 1,12

$$DP(K) = A3(K) * (B6(K) * C4(K) + C3(K) * B5(K)) + A4(K) * (B6(K) * C5(K) + C3(K) * B4(K)) + A5(K) * (B4(K) * C4(K) - B5(K) * C5(K))$$

$$D12P(K) = (A1(K) * (B4(K) * C4(K) - B5(K) * C5(K)) + (B1(K) + B2(K)) * (A3(K) * C4(K) + A4(K) * C5(K)) + C2(K) * (A3(K) * B5(K) + A4(K) * B4(K))) / DP(K)$$

$$D13P(K) = ((A1(K) + A2(K)) * (B4(K) * C4(K) - B5(K) * C5(K)) + (B2(K) - B3(K)) * (A3(K) * C4(K) + A4(K) * C5(K)) + (C1(K) + C2(K)) * (A3(K) * B5(K) + A4(K) * B4(K))) / DP(K)$$

$$D21P(K) = (A1(K) * (B6(K) * C5(K) + B4(K) * C3(K)) + (B1(K) + B2(K)) * (A3(K) * C3(K) - A5(K) * C5(K)) - C2(K) * (A3(K) * B6(K) + A5(K) * B4(K))) / DP(K)$$

$$D23P(K) = (-A2(K) * (B6(K) * C5(K) + B4(K) * C3(K)) + (B1(K) + B3(K)) * (A3(K) * C3(K) - A5(K) * C5(K))) / DP(K)$$

$$C3(K) - A5(K) * C5(K) + C1(K) * (A3(K) * B6(K) + A5(K) * B4(K)) / DP(K)$$

$$D31P(K) = ((A1(K) + A2(K)) * (B5(K) * C3(K) + B6(K) * C4(K)) + (B3(K) - B2(K)) * (A4(K) * C3(K) + A5(K) * C4(K)) + (C1(K) + C2(K)) * (A4(K) * B6(K) - A5(K) * B5(K))) / DP(K)$$

$$D32P(K) = (A2(K) * (B5(K) * C3(K) + B6(K) * C4(K)) + (B1(K) + B3(K)) * (A4(K) * C3(K) + A5(K) * C4(K)) + C1(K) * (A4(K) * B6(K) - A5(K) * B5(K))) / DP(K)$$

$$F1(K) = D21P(K) - D12P(K) + D31P(K) - D32P(K)$$

$$F2(K) = D21P(K) - D13P(K) + D31P(K) - D23P(K)$$

9 $F3(K) = D12P(K) - D13P(K) + D32P(K) - D23P(K)$

WRITE (5,10) T, D12, D13, D14, D23, D24, D34

10 FORMAT (7 F 15.7)

WRITE (5,11), (Y1(K), Y2(K), Y3(K), Y4(K), F1(K), F2(K), F3(K),
K= 1,12)

11 FORMAT (//, 7F 15.7)

WRITE (5,12), (Y1(K), Y2(K), D12P(K), D13P(K), D21P(K), D23P(K),
D31P(K), D32P(K), K= 1,12)

12 FORMAT (8 E 15.7)

T= T + 100

IF(T.GT.800.) GOTO 50

GOTO 51

50 STOP

END

Tablo 2: Polimer Difüzyon Katsayıları

T	D ₁₂	D ₁₃	D ₂₄	D ₂₃	D ₃₄	D ₃₂
500.	.1209351E+01	.9383389E+00	.1502954E+01	.1473444E+01	.8982059E+00	.9440340E+00
	.1168045E+01	.9047167E+00	.1497191E+01	.1470126E+01	.8673163E+00	.9391674E+00
	.1123677E+01	.8686975E+00	.1491364E+01	.1466745E+01	.8340501E+00	.9342695E+00
	.1075930E+01	.8300325E+00	.1485466E+01	.1463295E+01	.7981629E+00	.9293344E+00
	.1024445E+01	.7884396E+00	.1479490E+01	.1459769E+01	.7593744E+00	.9243540E+00
	.9688075E+00	.7435949E+00	.1473426E+01	.1456159E+01	.7173625E+00	.9193186E+00
	.9085408E+00	.6951233E+00	.1467266E+01	.1452453E+01	.6717572E+00	.9142162E+00
	.8430929E+00	.6425909E+00	.1460995E+01	.1448641E+01	.6221282E+00	.9090322E+00
	.7718200E+00	.5854918E+00	.1454600E+01	.1444707E+01	.5679734E+00	.9037489E+00
	.6939661E+00	.5232314E+00	.1448063E+01	.1440637E+01	.5087061E+00	.8983428E+00
	.6086392E+00	.4551084E+00	.1441366E+01	.1436410E+01	.4436294E+00	.8927848E+00
	.5147787E+00	.3802878E+00	.1434484E+01	.1432002E+01	.3719173E+00	.8870379E+00
600.	.1646071E+01	.1282680E+01	.2039826E+01	.1999740E+01	.1228353E+01	.1289141E+01
	.1590722E+01	.1237375E+01	.2032033E+01	.1995268E+01	.1186759E+01	.1282176E+01
	.1531190E+01	.1188783E+01	.2024158E+01	.1990717E+01	.1141907E+01	.1275153E+01
	.1467036E+01	.1136558E+01	.2016188E+01	.1986073E+01	.1093452E+01	.1268062E+01
	.1397758E+01	.1080303E+01	.2008114E+01	.1981327E+01	.1041004E+01	.1260893E+01
	.1322777E+01	.1019565E+01	.1999923E+01	.1976488E+01	.9841103E+00	.1253629E+01
	.1241426E+01	.9538152E+00	.1991602E+01	.1971482E+01	.9222506E+00	.1246254E+01
	.1152929E+01	.8824434E+00	.1983134E+01	.1966354E+01	.8548169E+00	.1238749E+01
	.1056377E+01	.8047332E+00	.1974498E+01	.1961062E+01	.7810981E+00	.1231087E+01
	.9507006E+00	.7198411E+00	.1965675E+01	.1955587E+01	.7002611E+00	.1223236E+01
	.8346332E+00	.6267680E+00	.1956634E+01	.1949902E+01	.6113132E+00	.1215156E+01
	.7066622E+00	.5243198E+00	.1947343E+01	.1943974E+01	.5130701E+00	.1206794E+01

700.	.213626E+01	.1670624E+01	.2640856E+01	.2588920E+01	.1600445E+01	.1677608E+01
	.2065386E+01	.1612338E+01	.2630801E+01	.2583169E+01	.1546966E+01	.1668207E+01
	.1989065E+01	.1549759E+01	.2620641E+01	.2577315E+01	.1489231E+01	.1658711E+01
	.1906722E+01	.1482428E+01	.2610360E+01	.2571342E+01	.1426787E+01	.1649110E+01
	.1817693E+01	.1409824E+01	.2599946E+01	.2565292E+01	.1359112E+01	.1639385E+01
	.1721211E+01	.1331338E+01	.2589384E+01	.2558996E+01	.1285605E+01	.1629518E+01
	.1616388E+01	.1246271E+01	.2578654E+01	.2552588E+01	.1205571E+01	.1619486E+01
	.1502187E+01	.1153803E+01	.2567737E+01	.2545999E+01	.1118199E+01	.1609260E+01
	.1377398E+01	.1052976E+01	.2556605E+01	.2539280E+01	.1022535E+01	.1598806E+01
	.1240586E+01	.9426559E+00	.2545232E+01	.2532165E+01	.9174588E+00	.1588082E+01
	.1090048E+01	.8214970E+00	.2533581E+01	.2524861E+01	.8016297E+00	.1577034E+01
	.9237444E+00	.6878844E+00	.2521608E+01	.2517244E+01	.6734473E+00	.1565596E+01
800.	.2677426E+01	.2100258E+01	.3302897E+01	.3237900E+01	.2012656E+01	.2107505E+01
	.2589623E+01	.2027763E+01	.3290359E+01	.3230748E+01	.1946178E+01	.2095338E+01
	.2494988E+01	.1949862E+01	.3277688E+01	.3223467E+01	.1874339E+01	.2083034E+01
	.2392781E+01	.1865970E+01	.3264870E+01	.3216041E+01	.1796561E+01	.2070576E+01
	.2282156E+01	.1775419E+01	.3251888E+01	.3208457E+01	.1712176E+01	.2057942E+01
	.2162136E+01	.1677433E+01	.3238720E+01	.3200694E+01	.1620417E+01	.2045106E+01
	.2031583E+01	.1571111E+01	.3225349E+01	.3192730E+01	.1520392E+01	.2032040E+01
	.1889171E+01	.1455404E+01	.3211744E+01	.3184541E+01	.1411056E+01	.2018703E+01
	.1733341E+01	.1332907E+01	.3197875E+01	.3176094E+01	.1291181E+01	.2005053E+01
	.1562248E+01	.1190665E+01	.3183706E+01	.3167354E+01	.1159320E+01	.1991038E+01
	.1373691E+01	.1038427E+01	.3169191E+01	.3158280E+01	.1013737E+01	.1976587E+01
	.1165026E+01	.8702664E+00	.3154278E+01	.3148816E+01	.8523536E+00	.1961616E+01

Difuzyon kütle akımları için N bileşenli bir sistemde,

$$\sum_{i=1}^N \dot{m}_i = 0$$

geçerlidir. Bu ifadeden poliner difuzyon katsayıları arasında (N-1) tane bağıntı elde edilir.

3 bileşenli bir sistemi ele aldığımızda, poliner difuzyon katsayıları arasında, kontrol bağıntıları adını verdiğimiz bağıntılar TELLİ [5] de aşağıdaki şekilde verilmektedir.

$$F_1 = D_{21} - D_{12} + D_{31} - D_{32} = 0$$

$$F_2 = D_{21} - D_{13} + D_{31} - D_{23} = 0$$

$$F_3 = D_{12} - D_{13} + D_{32} + D_{23} = 0$$

Buradaki çalışma N= 4 olduğundan F_1 , F_2 , F_3 sıfır'a eşit olmamakta belirli bir değer almaktadır. Hesaplarımız sonucu çıkan değerler arka sahifede verilmiştir.

Tablo 3: Kontrol Büyüklükleri

F1	F2	F3	T
.2477754	-.0106231	-.2583985	500.
.2572950	-.0103348	-.2676300	
.2674673	-.0100293	-.2774966	
.2783639	-.0096990	-.2880628	
.2900658	-.0093443	-.2994102	
.3026627	-.0089648	-.3116275	
.3162661	-.0085534	-.3248194	
.3309984	-.0081083	-.3391066	
.3470042	-.0076259	-.3546301	
.3644608	-.0070984	-.3715591	
.3835718	-.0065224	-.3900942	
.4045845	-.0058891	-.4104735	
.3329664	-.0142417	-.3472081	600.
.3458943	-.0138513	-.3597456	
.3597224	-.0134354	-.3731577	
.3745418	-.0129902	-.3875320	
.3904673	-.0125118	-.4029791	
.4076269	-.0119994	-.4196264	
.4261718	-.0114449	-.4376167	
.4462726	-.0108459	-.4571185	
.4681320	-.0101990	-.4783310	
.4919990	-.0094929	-.5014919	
.5181584	-.0087228	-.5268812	
.5469573	-.0078800	-.5548372	
.4274299	-.0182433	-.4456730	700.
.4441744	-.0177398	-.4619143	
.4620959	-.0172021	-.4792981	
.4813147	-.0166240	-.4979386	
.5019796	-.0160074	-.5179870	
.5242597	-.0153458	-.5396054	
.5483505	-.0146346	-.5629851	
.5744886	-.0138655	-.5883540	
.6029358	-.0130358	-.6159717	
.6340221	-.0121303	-.6461525	
.6681290	-.011470	-.6792760	
.7057152	-.0100725	-.7157875	

F1	F2	F3	T
.5306222	-.0226042	-.5532265	800.
.5515766	-.0219736	-.5735502	
.5740056	-.0213022	-.5953078	
.5980749	-.0205793	-.6186543	
.6239662	-.0198126	-.6437788	
.6518950	-.0189891	-.6708844	
.6821189	-.0181003	-.7002192	
.7149255	-.0171456	-.7320712	
.7506621	-.0161147	-.7667766	
.7897397	-.0149934	-.8047330	
.8326514	-.0137784	-.8464298	
.8799889	-.0124512	-.8924401	

3. NÜMERİK SONUÇLARIN DEĞERLENDİRİLMESİ

Bu çalışmada amaçlanan, N bileşenli bir gaz karışımında 3 bileşenin difüzyona uğradığı durum için poliner difüzyon katsayılarının bulunması idi. Difüzyon katsayılarının bulunması ise, bize difüzyon kütle akımlarının belirlenmesini sağlamaktadır. Burada istenilen sonuca ulaşılmış ve 6 poliner difüzyon katsayısı hesaplanmıştır.

Sayısal değerlendirmede ($C_2H_4+H_2+C_2H_6+N_2$) gaz karışımı örnek olarak alınmış ve konsantrasyon değerleri değiştirilmiştir. Elde edilen poliner difüzyon katsayılarının değerleri ise Şekil 1'de diyagramlar halinde gösterilmiştir. Bu diyagramlar incelendiğinde aşağıdaki sonuçların var olduğunu görürüz.

Şekil 1'de 6 adet poliner difüzyon katsayısı sıcaklık parametre olmak üzere eğriler halinde görülmektedir. Tablo 1'de verilen konsantrasyon değerlerinden anlaşılacağı üzere, eylemsiz gaz N_2 konsantrasyonu sabit kalmakta, bunun yanısıra C_2H_4 ve H_2 konsantrasyonları azalmakta, C_2H_6 konsantrasyonu artmaktadır. Poliner difüzyon katsayıları konsantrasyona, mol kütlelerine ve biner difüzyon katsayıları \overline{D}_{ij} üzerinde ayrıca mol kütlelerine ve sıcaklığa bağlıdır.

Basıncı $P = 1$ atm. alınmıştır. Literatürde [6]

$$\overline{D}_{ij} = 1,858 \cdot 10^{-3} \frac{\left(\frac{1}{\mu_i} + \frac{1}{\mu_j} \right)^{1/2} \cdot T^{3/2}}{P \cdot \sigma_{ij}^2 \Omega \overline{D}_{ij}}$$

şeklinde biner difüzyon katsayıları ifade edilmektedir. Görüleceği üzere,

$$\overline{D}_{ij} \sim T^{3/2}$$

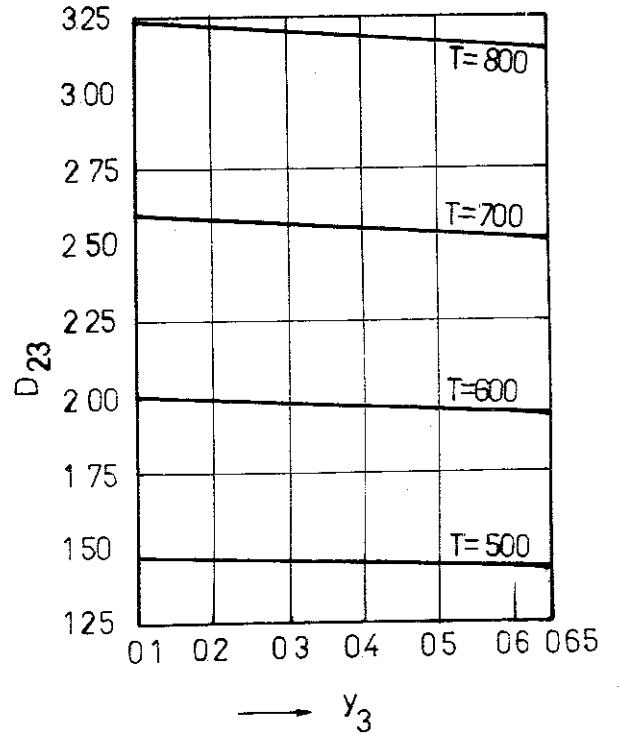
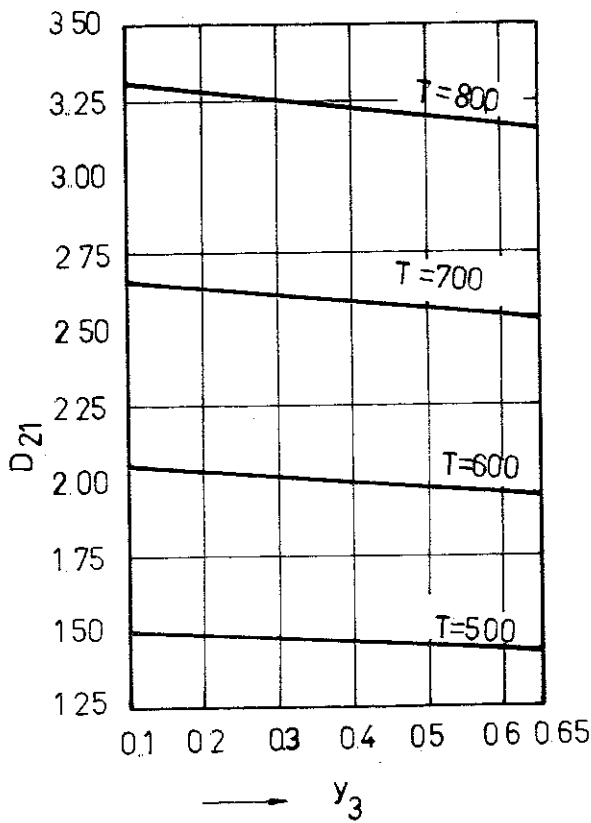
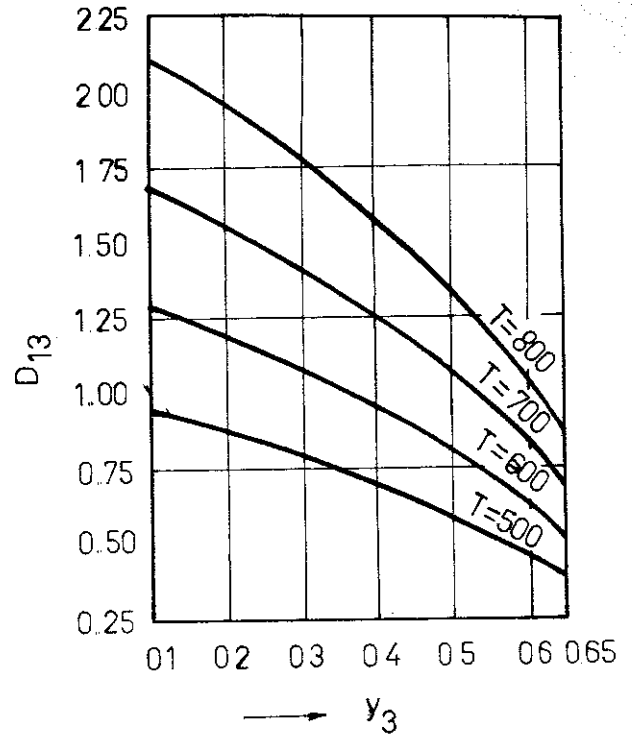
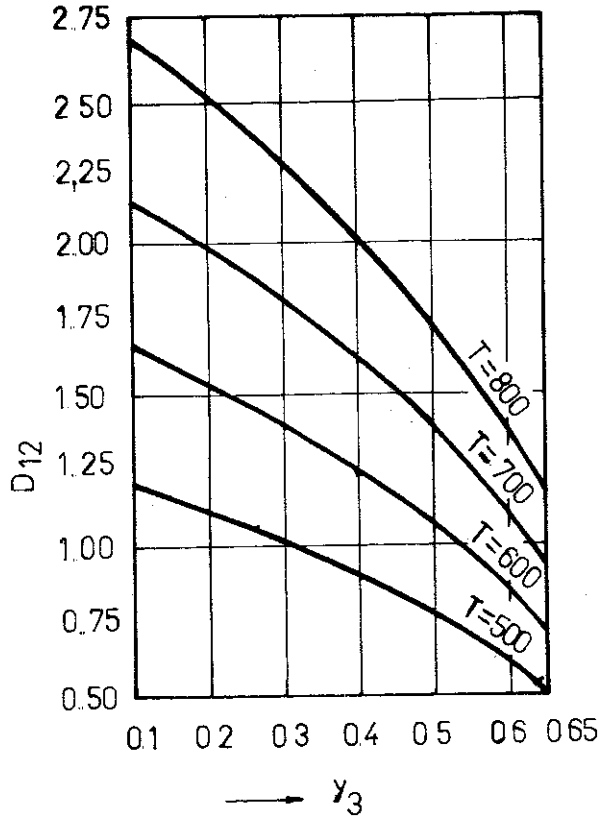
olmakta ve sıcaklıkla artış göstermektedir. Bu nedenle Şekil 1'deki poliner difüzyon katsayısı eğrileri artan sıcaklıkla büyümekte ve yukarıya doğru kaymaktadır. T=sabit için $y_{C_2H_6}$ büyüdükçe \overline{D}_{ij} eğrileri düşüş göstermektedir. Difüzyon durumundaki bileşenlerin mol kütleleri ne kadar küçük olursa, difüzyon o derecede iyileşir. Ancak Şekil 1'de-

ki örnekte mol kütleleri nisbeten küçük olan etilen ve hidrojen azalmakta, mol kütlesi büyük olan etan artmakta dolayısıyla difuzyonda kötüleşme olmaktadır.

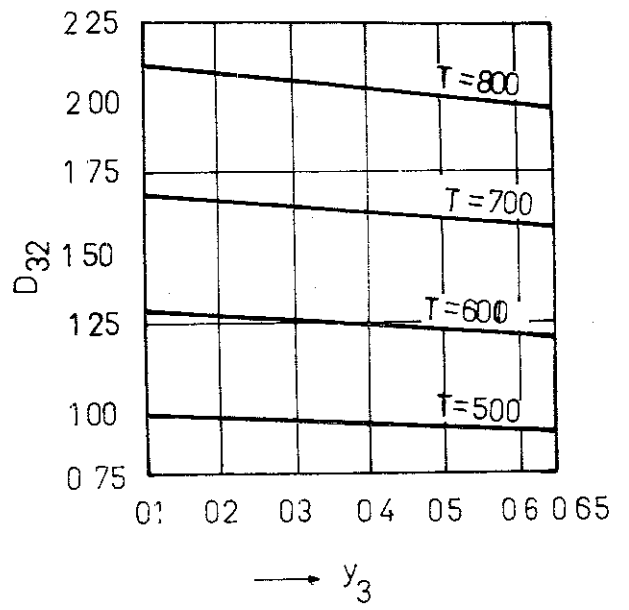
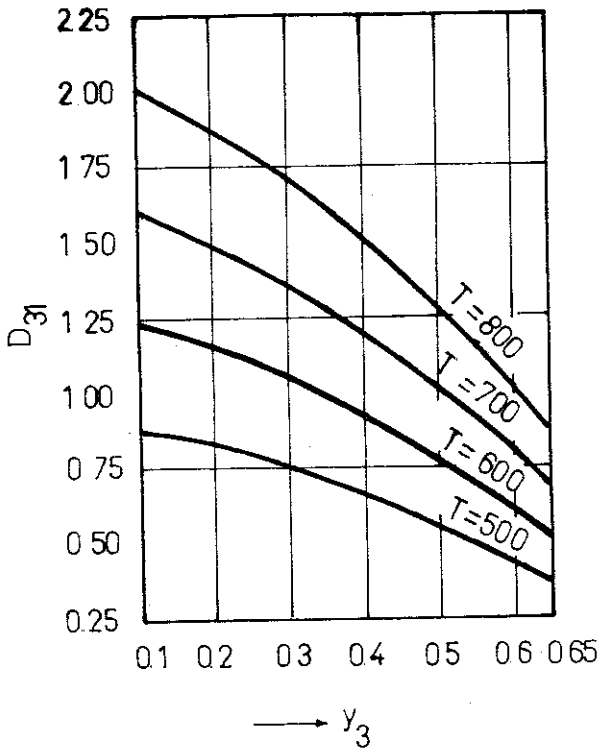
Bu nedenle $T = \text{sabit}$ eğrileri düşüş göstermektedir.

KAYNAKLAR

- [1] TELLİ, Z.K.: "Allgemeine Theorie der Mehrkomponentengasdiffusion in kontinuierlichen Systemen", Chem. Technik 31, 202-203 (1979).
- [2] TELLİ, Z.K.: "Transformation der Stefan-Maxwell" schen Gleichung ins Schwerpunktsystem am Beispiel der ternären Gasdiffusion İTÜ Bülteni, 35 (1982)
- [3] TELLİ, Z.K.: "Anwendung der allgemeinen Diffusionstheorie für kontinuierliche Systeme" İTÜ Bülteni 36(1983).
- [4] MÜLLER, R.: "Chemie-Ing-Technik". 40,7(1968).
- [5] TELLİ, Z.K.: "Dissertation, TU Wien" (1972)
- [6] Bird, Stewart, Lightfoot: "Transport Phenomena".



Şekil 1 : Polimer difuzyon katsayılarının y_3 ve T 'ye bağımlı diyagramları



ÖZGEÇMİŞ

- 15.5.1965 Isparta-Eğirdir-Sarıidris'de doğum
- 1979-1982 Isparta Şehit Ali İhsan Kalmaz Lisesi'nde öğrenim.
- 1982-1986 Akdeniz Üniversitesi Isparta Mühendislik Fakültesi, Makina Bölümünde öğrenim.
- 1986-1988 Akdeniz Üniversitesi Isparta Mühendislik Fakültesi Makina Bölümü Isı ve Proses Tekniği Anabilim Dalında Lisans üstü öğrenim.