

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

57504

**ÇOK YATAKLI AMONYAK
REAKTÖRÜNÜN MODELLENMESİ**

Kimya Müh. İbrahim GHANİPOUR

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

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Selahattin GÜLTEKİN

İSTANBUL, 1996

İÇİNDEKİLER**Sayfa No**

Sembol Listesi	IV
Şekil Listesi	V
Tablo Listesi	VII
Teşekkür	VIII
Özet	IX
Summary	X
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK TARAMASI	2
2.1 Amonyak Hakkında Genel Bilgiler	2
2.1.1 Amonyanın Fiziksel ve Kimyasal Özellikleri	2
2.1.2 Amonyanın Kullanıldığı Alanlar ve Ekonomisi	2
2.2 Amonyak Üretimi	3
2.2.1 Reaksiyon Hızı ve Katalizörü	4
2.2.2 Amonyak Üretim Proseslerinin Tanımı	6
2.2.3 Amonyak Üretim Proses Aşamaları	7
3. PROBLEMİN ÇÖZÜMÜ	11
3.1 Genel Yöntem	11
3.2 Tasarım Denklemleri	11
3.2.1 Hız İfadesi	11
3.2.2 Enerji Denkliği	12
3.2.3 Basınç Düşüşü	13
3.2.4 Çözüm Yöntemi ve Elde Edilen Grafikler	13
4. SONUÇLAR ve DEĞERLENDİRME	15
5. EKLER	49
6. KAYNAKLAR	74

SEMBOL LİSTESİ

A_c	Reaktör yatağının kesit alanı, m^2
c_p	Gazın özgül ısı kapasitesi, $kJ/(kg K)$
d_p	Katalizör partikül çapı, m
F_{AO}	Besleme debisi, $kmol/s$
f	Katalizör aktivite katsayısı ,(birimsiz)
G	Kütleli debi , $kg/(m^2)(s)$
k_1	Sağa doğru reaksiyon hız sabiti, $kmol/(kg kat.saat.atm^{1/2})$
k_2	Sola doğru reaksiyon hız sabiti, $kmol/(kg kat.saat.atm^{1/2})$
L	Reaktör uzunluğu, m
P_O	Giriş basıncı, atm
P_A	A bileşeninin kısmi basıncı, atm
P	Toplam basınç, atm
r_A	Reaksiyon hızı, $kmol/(kg kat)(s)$
R	Gaz sabiti, $kJ/kmol K$
T	Reaksiyon sıcaklığı, K
T_O	Giriş sıcaklığı, K
X	Dönüşüm ,(birimsiz)
W	Katalizör ağırlığı, kg
ρ_B	Katalizörün yoğunluğu, kg/m^3
ρ_O	Gazın yoğunluğu, kg/m^3
θ_i	i bileşen konsantrasyonunun referans konsantrasyonuna oranı ,(birimsiz)
μ	Gazın viskozitesi, $Pa.s$
ϕ	Katalizör boşluk oranı ,(birimsiz)
ϵ	Hacimsel genişleme oranı,(birimsiz)
ν_i	Stokiyometrik katsayı ,(birimsiz)
ΔH	Reaksiyon ısısı, $kJ/kmol$

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa No

Şekil 1.1 Birinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=1,0$)	19
Şekil 1.2 İkinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=1,0$)	20
Şekil 1.3 Üçüncü yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=1,0$)	21
Şekil 1.4 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği ($X_{in}=0,00$, $f=1,0$)	22
Şekil 1.5 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-L, X-r grafiği ($X_{in}=0,00$, $f=1,0$)	22
Şekil 2.1 Birinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,9$)	23
Şekil 2.2 İkinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,9$)	24
Şekil 2.3 Üçüncü yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,9$)	25
Şekil 2.4 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği ($X_{in}=0,00$, $f=0,9$)	26
Şekil 2.5 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-L, X-r grafiği ($X_{in}=0,00$, $f=0,9$)	26
Şekil 3.1 Birinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,85$)	27
Şekil 3.2 İkinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,85$)	28
Şekil 3.3 Üçüncü yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,85$)	29
Şekil 3.4 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği ($X_{in}=0,00$, $f=0,85$)	30
Şekil 3.5 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-L, X-r grafiği ($X_{in}=0,00$, $f=0,85$)	30
Şekil 4.1 Birinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,80$)	31
Şekil 4.2 İkinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,80$)	32
Şekil 4.3 Üçüncü yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,80$)	33
Şekil 4.4 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği ($X_{in}=0,00$, $f=0,80$)	34
Şekil 4.5 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-L, X-r grafiği ($X_{in}=0,00$, $f=0,80$)	34
Şekil 5.1 Birinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,02689$, $f=1,0$)	35
Şekil 5.2 İkinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,02689$, $f=1,0$)	36
Şekil 5.3 Üçüncü yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,02689$, $f=1,0$)	37
Şekil 5.4 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği ($X_{in}=0,02689$, $f=1,0$)	38
Şekil 5.5 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-L, X-r grafiği ($X_{in}=0,02689$, $f=1,0$)	38

Şekil 6.1 Birinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,9$)	39
Şekil 6.2 İkinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,9$)	40
Şekil 6.3 Üçüncü yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,9$)	41
Şekil 6.4 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği ($X_{in}=0,02689$, $f=0,9$)	42
Şekil 6.5 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-L, X-r grafiği ($X_{in}=0,02689$, $f=0,9$)	42
Şekil 7.1 Birinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,85$)	43
Şekil 7.2 İkinci yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,85$)	44
Şekil 7.3 Üçüncü yatakta sıcaklık-dönüşüm ve basınç profilleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,85$)	45
Şekil 7.4 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği ($X_{in}=0,02689$, $f=0,85$)	46
Şekil 7.5 Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-L, X-r grafiği ($X_{in}=0,02689$, $f=0,85$)	46
Şekil 8.1 Birinci yatakta her bir giriş sıcaklığına karşılık gelen çıkış dönüşüm profili ($X_{in}=0,02689$, $f=0,90$)	47
Şekil 8.2 Birinci yatakta her bir giriş basınca karşılık gelen çıkış dönüşüm profili ($X_{in}=0,02689$, $f=0,90$)	47
Şekil 9.1 Birinci yatakta değişik katalizör aktivite katsayısı için çıkış dönüşüm profili ($X_{in}=0,00$)	48

Tablo Listesi

Sayfa No

Tablo E.1.1 :	Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=1,0$)	49
Tablo E.1.2 :	İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=1,0$)	50
Tablo E.1.3 :	Üçüncü yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=1,0$)	51
Tablo E.2.1 :	Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,9$)	52
Tablo E.2.2 :	İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,9$)	53
Tablo E.2.3 :	Üçüncü yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,9$)	54
Tablo E.3.1 :	Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,85$)	55
Tablo E.3.2 :	İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,85$)	56
Tablo E.3.3 :	Üçüncü yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,85$)	57
Tablo E.4.1 :	Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,80$)	58
Tablo E.4.2 :	İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,80$)	59
Tablo E.4.3 :	Üçüncü yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,00$, $f=0,80$)	60
Tablo E.5.1 :	Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,02689$, $f=1,0$)	61
Tablo E.5.2 :	İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,02689$, $f=1,0$)	62
Tablo E.5.3 :	Üçüncü yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,02689$, $f=1,0$)	63
Tablo E.6.1 :	Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,9$)	64
Tablo E.6.2 :	İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,9$)	65
Tablo E.6.3 :	Üçüncü yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,9$)	66
Tablo E.7.1 :	Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,85$)	67
Tablo E.7.2 :	İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,85$)	68
Tablo E.7.3 :	Üçüncü yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri ($X_{in}=0,02689$, $f=0,85$)	69

TEŐEKKÜR

Bana deęerli yardımlarda bulunan, bilimsel ve çok yönlü yorumlarıyla bana ışık tutan Sayın Prof. Dr. Selahattin Gültekin'e ve Arařtırma Gör. Kimya Yüksek Mühendisi İbrahim Ünal'a teőekkür ederim



ÖZET

Bu çalışmada , çok yataklı amonyak sentez reaktöründeki çeşitli reaksiyon parametrelerin değişimi (dönüşüm, sıcaklık ve basınç) etkileri incelenmiştir. Model denklemleri Runge-Kutta-Gill yöntemi ile sayısal olarak çözümünden elde edilen sonuçlar, İGSAŞ (İstanbul Gübre Sanayi A.Ş.)'daki verilerle karşılaştırıldı. Sonuç olarak simulasyondan elde edilen değerlerin İGSAŞ'dan alınan değerlerle uyum içerisinde olduğu gözlenmiştir. Bütün bu işlemler, farklı f (katalizör aktivite katsayısı) değerleri için yapıldı ve sonuçta, beklenildiği üzere , aktivite katsayısının azalması ile verimliliğin azaldığı görülmüştür.



SUMMARY

In this study mathematical modelling, simulation and process parameters (conversion, temperature and pressure) for a multi-bed reactor for Ammonia synthesis were investigated. The design model equations were solved numerically by Runge-Kutta-Gill method and the results were compared with the actual data received from İGSAŞ (İstanbul Gübre Sanayi A.Ş.).



1. GİRİŞ

Çok yönlü kullanım sahası olan amonyak, dünya çapında özellikle tarım alanında en önemli kimyasal maddelerden birisidir. Dolayısıyla, amonyak üretim proseslerinde sentez reaktörünün verimliliğinin artırılması, hem bağlı bulunduğu diğer proseslerin dengesi, hem de ekonomi bakımından son derece önemlidir. Çalışmalarımız, çeşitli reaksiyon parametre değişikliklerinin sentez reaktörünün verimliliği üzerinde olmuştur.

Amonyak sentez reaksiyonu, tersinir ve ekzotermik bir reaksiyon olup, 400-550 °C sıcaklıkta gerçekleştirilir. Tercih edilen basınç ve sıcaklık değeri sentez gazının niteliğine bağlı olarak değişir.

Sentez basıncının seçiminde göz önüne alınan faktörlerle ilgili çalışmalar, literatürde mevcuttur [1] . Reaksiyon hızının artırımı, reaksiyonun istenilen denge durumu ve amonyağın kondenzasyonu, yüksek basınçla sağlanır. Endüstride, 200-300 atm'lik işletme basıncı optimum olarak kabul edilir. Proses işletiminde dikkate alınması gereken önemli faktörlerden bazıları şunlardır : katalizör hacmi, yataklar arasındaki soğutma, reaksiyona girmeyen reaktiflerin tekrar reaktöre gönderilmesi, üretilen gazın sıkıştırılması için gereken enerji, ekipman maliyeti ve güvenilirliğidir.

Amonyak sentezinde kullanılan reaktörlerin (çok yataklı veya çok borulu) çalışmasının ana prensibi, katalizör yatağını terk eden yüksek sıcaklıktaki reaksiyon gazının daha sonraki katalizör yatağına girmeden önce doğrudan veya dolaylı olarak soğutulmasıdır. Bu da Le Chatelier prensibinin bir sonucudur. Bu yolla reaksiyon ısı geri kazanılır ve her yatakta elde edilen amonyak derişimi korunur. Dolayısıyla, reaktiflerin bir sonraki yatağına düşük sıcaklıkta girmesiyle, reaksiyon dönüşüm oranı daha da arttırılabilir.

Sentez reaktörleri aksenal, radyal ve aksenal-radyal olabilir. Bu çalışmada amaç, sentez reaktörünün reaksiyon parametrelerini değiştirerek çeşitli şartlarda modelleme ve simülasyon yapmaktır. Çalışmalarda elde edilen değerler, İGSAŞ (İstanbul Gübre Sanayi A.Ş.)'a ait katalitik reaktörden elde edilen verilerle karşılaştırılmış, uyum içinde oldukları gözlenmiştir.

2. KAYNAK TARAMASI

2.1 Amonyak Hakkında Genel Bilgiler

2.1.1 Amonyakın Fiziksel ve Kimyasal Özellikleri

Amonyak (NH_3), azot ve hidrojenden oluşan, renksiz, keskin kokulu, gözleri yaşartan, yakıcı bir gazdır. Havadan daha hafiftir (yoğunluğu 0,60). Atmosfer basıncı altında $-33\text{ }^\circ\text{C}$ 'da kolayca sıvılaşır ve bu halde soğutucu ve çözücü olarak kullanılır. Suda çok kolay çözünür. 1 hacim su da, $0\text{ }^\circ\text{C}$ 'da 1000 hacim amonyak çözüldürülür. Yoğunluğu 0,92 olan ticari çözeltide, %20 amonyak bulunur.

Amonyak gazı ısıtılınca, azot ve hidrojen vererek bozunur. Saf oksijende fazla ısı vermeyen bir alevle yanarak, su buharıyla azot çıkarır. Hafifçe ısıtılmış, Pt süngerinden geçirilen bir amonyak gazı-hava karışımı, nitrik asit üretiminde kullanılan azot dioksit meydana getirir. Toprakta amonyaklı bileşikler buna benzer bir oksitlenmeye uğrayarak nitrat haline geçer. Bu olaya "nitratlaşma" denir [2].

2.1.2 Amonyakın Kullanıldığı Alanlar ve Ekonomisi

Amonyak, modern uygarlığın yararlandığı gerçek ana hammaddelerden birisidir. Susuz amonyağın en büyük tüketicisi suni gübre endüstrisidir; kalsiyum ve sodyum nitrat, amonyum sülfat, nitrat ve fosfat, amonyaklandırılmış süper fosfatlar, üre ve sulu amonyak çözeltisinin üretiminde susuz amonyak kullanılır. Anhidramonyak, özel makinalar kullanılarak doğrudan toprağa verilebilen, çok önemli bir gübredir. Amonyum nitratla birlikte, her yıl giderek artan bir miktarda kullanılmaktadır. Amonyak, hemen tüm askeri amaçlı patlayıcıların başlangıç maddesidir. Susuz soda, nitrik asit, naylon, plastikler, vernikler, organik boyar maddeler, lastik ve diğer ürünlerin üretimi için amonyak

gerektiğinden, endüstride hemen her yerde kendisine rastlanır. Amonyak iki şekilde bulunur, sulu amonyak çözeltisi ve anhidramonyak. Sulu amonyağın ticarete satılan türü, çoğunlukla % 28 amonyak bulundurur.

2.2 Amonyak Üretimi

Bilindiği gibi amonyak azot ve hidrojenden elde edilir.



Ekzotermik olan bu denge reaksiyonu sıcaklık ve basınca bağlıdır.

Bu reaksiyon için kimyasal denge sabiti aşağıdaki gibi yazılır:

$$K_p = \frac{P_{\text{NH}_3}}{P_{\text{N}_2}^{1/2} \times P_{\text{H}_2}^{3/2}}$$

Amonyacağın hacmi, azot ve hidrojenin toplu hacminden daha az olduğu için, Le Chatelier prensibine göre basıncın yükseltilmesi, denge halinde daha fazla amonyak verir. Basıncın 100 atm'den 1000 atm'e yükseltilmesi halinde, dönüşüm yüzdesi birkaç kat artar, sıcaklığın 1100 °C'e kadar yükseltilmesi halinde ise, reaksiyona giren gazlarla dengede bulunan amonyağın yüzdesi, giderek azalır ve bu sıcaklıkta minimuma erişir. 1100 °C'in altında çalışıldığı zaman, amonyak dönüştürücüsünün çalıştırılabileceği belirli bir basınçta sıcaklığın düşürülmesi, azot-hidrojen karışımındaki amonyağın mümkün olan yüzdesini arttırır; fakat dengeye erişmek için daha uzun zamana gerek duyulur. Bunun bir sonucu olarak dönüştürücüdeki sıcaklık, gerekli yatırım ve kullanılan katalizör için ekonomik, yeterli bir reaksiyon hızı sağlamaya uygun olacak kadar düşük tutulur.

Örneğin 300 atm basınç ve 450 °C te amonyağın denge konsantrasyonu % 35,8, 500 °C'da ise % 26,4'tür [3].

Şüphesiz amonyak reaksiyonunun hızının artması kullanılan katalizöre de bağlıdır. Özellikle düşük sıcaklıklarda denge değerine yakın olması istenir. Ulaşılabilen yüksek basınç oranında reaksiyon verimliliği artar. Burada ekonomik olması açısından üretimin yüksek kapasitede olması zorunlu olduğundan üretim basıncının yüksek olması gerekmektedir.

2.2.1 Reaksiyon Hızı ve Katalizörü

Hidrojen ve azotun, tek başlarına çok yavaş reaksiyon vermeleri sebebiyle, reaksiyonun ekonomik olması için reaksiyonun debisi arttırılmalıdır. Ticari amaçlı amonyak sentezlerinin temeli, ekonomik değeri olan bir derecede reaksiyon hızının artırılması için, etkin bir katalizör kullanılması esası üzerine kurulmuştur. Bulunmuş olan böyle bir katalizör demirdir ve reaksiyon debisi, alüminyum (% 3) ve potasyum (% 1) oksitlerinin katılmasıyla yükseltilir. Bu promotörler geliştiriciler sinterleşmeyi önlediği gibi aktiviteyi de artırırlar.

Katalizör önce, reaksiyona giren maddelerden biriyle reaksiyon vererek bir ara madde oluşturur ve bu ara madde, reaksiyona girecek ikinci madde ile reaksiyon vererek, katalitik reaksiyon ürünü verir ve katalizörü serbest halde bırakır. Amonyak katalizörünün yüzeyindeki aktif demir atomlarıyla, bir nitrit katılmasının mümkün olduğu kabul edilmektedir. Demir, 520 °C'ın üzerine ısıtıldığı zaman hızlı bir şekilde aktivitesini kaybetse de, çok iyi sonuç veren bir katalizör malzemesidir. Katalizör metalik oksitlerin katılmasıyla daha gelişmiş bir şekle sokulur. Bu, aktivite artımı şeklinde kendini gösterir, alüminyum, zirkonyum veya silisyum gibi metallerin amfoterik oksitleri ve potasyum oksit gibi bir alkali oksit tarafından sağlanır. Emmett bu konuda şöyle yazmaktadır; "3:1 oranına sahip saf hidrojen-azot gazı karışımı, 100 atm basınç , 5000 boşluk hızı, 450 °C sıcaklıkta çift geliştirilmiş böyle bir katalizör üzerinden geçirildiği zaman, amonyak yüzdesinin 13-15 olmasına karşılık, tek geliştirilmiş (promote edilmemiş) katalizörde % 3-5 kadardır". Modern katalizörler , K_2O , CaO , MgO , Al_2O_3 , SiO_2 ve çok az miktarlarda TiO_2 , ZnO_2 , V_2O_5 bulunduran, magnetitten yapılırlar. Geliştiriciler, indirgenmiş katalizörü daha gözenekli yaparlar. Düşük sıcaklıkta daha aktif olan katalizörler daha geçerlidir. Bu katalizörler bakır, fosfor, arsenik ve kükürt gibi pek çok maddelerin temasından etkilenerek zehirlenirler. Bunlar, demirin elektronik yapısını etkilerler. Karbon monoksit de katalizörün aktivitesini önemli derecede azaltır. Bu sebeble, amonyak sentezinde, azot ve hidrojenin saflaştırılmasının maliyeti oldukça yüksektir.

Boşluk hızı, 1 m³ katalizör boşluğundan 1 saatte geçen gazların, standart şartlarındaki (0 °C ve 760 mm Hg) hacmidir (m³ olarak). Ticari amaçlı kuruluşlarda kullanılan boşluk hızı, aynı prosesi kullanan değişik fabrikalarda ve değişik proseslerde, oldukça farklıdır. Dönüştürücüden çıkan gaz akımındaki amonyak yüzdesi, boşluk hızı arttıkça düşme gösterirse de oluşan amonyak miktarı artar. Fakat, çok yüksek boşluk hızı dönüştürücünün ısıl dengesini bozar; çıkan gazlardaki düşük amonyak yüzdesi sebebiyle, amonyağın ayrılmasının gideri artar ve büyük hacimde gazın geri döndürülmesi gerekir. Ticari ünitelerin pek çoğu 10000-70000 (m³/s) boşluk hızı kullanılır .

Amonyak tesisi; su buharı reformingi, Benfield CO₂ giderilmesi ve Kellogg amonyak sentezi proseslerine göre hem doğal gaz hem de nafta bazında çalışacak şekilde kurulmaktadır. Tesiste doğal gaz bazında günde 1000 ton, yılda 330000 ton; nafta bazında ise günde 950 ton yılda 313500 ton amonyak üretilebilir.

İyi bir katalizörde olması gereken özellikler şunlardır :

Katalizör kalitesi,

Gaz sirkülasyonu için daha az enerjinin kullanılması,

Amonyağın sıvılaştırılmasında maliyetin düşük olması,

Sirkülasyon gazının kompozisyonundan dolayı sentez reaktör verimliliğinin daha az etkilenmesi,

Ömrünün uzun olması.

Amonyak sentezinde kullanılan başlıca katalizör Fe₃O₄'dir. Bu katalizördeki demir sadece metalik olduğu zaman etkindir. Burada demir, hidrojen veya hidrojen-nitrojen karışımlarında indirgenebilir. Sentez reaktörünün ilk çalışma safhasında katalizör sıcaklığı artışı saatte 20 °C'yi geçmemelidir. Saatte 20 °C' lik artış 400 °C 'den sonraki sıcaklıklar için geçerlidir. Çünkü bu katalizör 400 °C'den sonra kayda değer bir şekilde indirgenmeye başlar [3] .

2.2.2 Amonyak Üretim Proseslerinin Tanımı

Doğal gazın içinde bulunma olasılığı olan kükürt bileşikleri, “ Reformlama ve CO dönüşümü” katalizörlerini zehirleyici özelliğe sahip olduklarından, hammadde olarak kullanılacak doğal gaz bir gaz kompresöründe sıkıştırılır, ısıtılır ve kükürt gidericiye yollanır. Burada içindeki kükürt bileşikleri ZnO üzerinde adsorplanır. Kükürdü giderilen doğal gaz, aşırı ısınmış buharla karıştırılır, ısıtılır ve “Birincil Reformer” a yollanır. Burada, muhtelif katalizörler üzerinde N₂, CO, CO₂ ve H₂'ye dönüşür. Buradan “İkincil Reformer” bölümüne gelen karışıma gerekli azot oranını sağlamak üzere sıcak hava karıştırılır. Gazın yanması ile oluşan ısı, katalizör yatağından geçen gazdaki metanın da reformlanması dolayısıyla azalmasına neden olur. Gazın içindeki CO, farklı sıcaklıklarda çalışan katalizör dolu ikinci reaktörden geçirilir. Bu reaktörlerde H₂O ile reaksiyona giren CO, CO₂ ve H₂'ye dönüşür. Proses gazının içindeki CO₂, Benfield CO₂ giderilmesi prosesi kullanılarak. Benfield çözeltisi (MEA) ile alınır. Benfield çözeltisi K₂CO₃ ve organik bir katkı maddesinden hazırlanmaktadır.

Proses gazında çok küçük miktarlarda kalan CO (ve CO₂'in) amonyak sentezi katalizörleri üzerinde zehirleyici etki yapmasını engellemek için metanlaştırma reaksiyonu uygulanır. Nikel katalizör üzerinde, proses gazındaki H₂'in küçük bir bölümü ile reaksiyona giren CO ve CO₂'den CH₄ oluşur. Metanatorü terkeden 3/1 oranında H₂, N₂ temizlenmiş sentez gazı kademeli kompresörlerle sıkıştırılarak, sentez reaktöründe katalizörlerin etkisi ile amonyağı oluşturur. Reaktörü terk eden gazlar soğutucularda soğutulup sıvı amonyak içindeki gazların tümü karışımdan ayrılır. Elde edilen sıvı amonyak ise, amonyak deposuna gönderilir.

Amonyak sentez bölümündeki yüksek basınçlı atık gazdan hidrojenin geri kazanılması, yakıt ve hammadde gereksinimini azaltan bir yöntem olup, atık gazın su ile yıkanması ve bir gaz ayırıcısında içindeki H₂'den ayrılan metanca zengin gaz, yakıt olarak reformerde kullanılır. Suda çözünen amonyak ise bir amonyak ayırıcısında suda ayrılarak amonyak deposuna gönderilir.

2.2.3 Amonyak Üretim Proses Aşamaları

Amonyak Üniteleri :

Amonyak üretimi için “Su Buharı Reformlama” prosesi uygulanmaktadır. Bu prosesten önce hidrokarbonların kükürdü giderilir. Hidrokarbonlardan Buhar Reformlama prosesi ile sentez gazı hazırlanır, sentez gazı artırılır ve amonyak sentezi reaktörüne gönderilir [4] .

Amonyak tesisi sırasıyla 6 proses ünitesinden meydana gelmiştir.

- a) Kükürt giderme ünitesi
- b) Reformer ünitesi
- c) Karbon monoksit dönüştürme ünitesi
- d) Karbon dioksit giderme ve geri kazanma ünitesi
- e) Metanasyon ünitesi
- f) Amonyak sentezi ünitesi

a) Kükürt Giderme Ünitesi :

Proses şarjı, doğal gaz, H_2 gazı ile karıştırılıp fırında ısıtıldıktan sonra kobalt-molibden tipi katalizörle yüklü reaktöre sokulur. Hidrojenasyon reaksiyonları sonucunda organik kükürt H_2S haline geçer, reaktörden çıkan akım, soğutucularda yoğunlaştırıldıktan sonra, sıyırma kolonunda H_2S 'den ayrılır.

Reformer katalizörü kükürde karşı çok hassas olduğundan doğal gaz reformere verilmeden önce son bir kükürt giderme işlemine daha tabi tutulur. Bunun için karışım ısıtıldıktan sonra tekrar bir kobalt-molibden katalizörü üzerinden geçirilerek bütün kükürdün H_2S haline dönüşmesi sağlanır. Proses şarjı ZnO dolu bir adsorberden geçirilerek bütün H_2S tutulur.

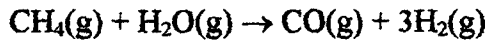
b) Reformler Ünitesi :

Amonyak ünitesi için gerekli hidrojen reformer ünitesinden elde edilir. Reformlama iki kademede olmaktadır.

Birincil Reformer :

Prosesin temel prensibi, ön ısıtmaya tabi tutulan doğal gaz ve su buharını özel katalizörler üzerinden geçirilerek hidrokarbonları H₂ ve CO'e dönüştürmektedir. Bu sırada bazı yan reaksiyonlar sonucunda, CO₂ ve CH₄ de oluşmaktadır.

Su Buharı Reformlama fırını ısıtma ve taşınım olmak üzere iki ana kısımdan meydana gelmiştir. Radyasyon bölümünde, dikey olarak monte edilmiş ve katalizörlerle dolu krom-nikel alaşım çeliğinden borular vardır. Proses gazı ve buhar karışımı bu boruların tepesinden giderek aşağı doğru hareket eder ve böylece reaksiyona girerek H₂, CO, CH₄ gibi bileşenler meydana getirir. Borular, brülör vasıtasıyla ısıtılır. Reformerin basıncı 34-35 atm'dir. Dönüştürme bölümünde proses şarjı, kazan besleme suyu, kızgın buhar ve ikinci reformer için gerekli proses havası ısıtılır. Fırında yakıt olarak CH₄ ve H₂ gazları kullanılır. Birinci reformeri terkeden proses gazında %8 kadar CH₄ bulunur.

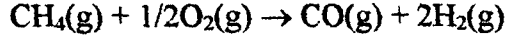


İkincil Reformer :

Birinci reformerden çıkan proses gazı ve ön ısıtmaya tabi tutulmuş basınçlı hava ikinci reformere beslenir. Burada havanın oksijeni ile H₂'nin bir kısmı yanar. Sıcaklığın yükselmesi ile gazda bulunan CH₄, katalizör üzerinden yeniden H₂O ile reaksiyona girerek H₂ miktarını artırır. İkincil reformere verilen havanın miktarı sentez için gerekli azot miktarına göre ayarlanır.

İkincil reformerden 960-980 °C sıcaklıkta çıkan proses gazı bir atık ısı kazanından geçirilerek 340-360 °C'ye kadar soğutulur ve CO dönüştürme ünitesine verilir. Atık ısı

kazanında elde edilen yüksek basınçlı buhar amonyak ünitesinin enerji proses buharı ihtiyacının büyük bir kısmını karşılar.



c) Karbon monoksit dönüştürme ünitesi :

Reformer ünitesinden çıkan gaz karışımının içinde yaklaşık olarak % 12 CO bulunmaktadır. CO dönüştürmesi iki kademe yapılır.

Birinci kademe yüksek sıcaklıkta (350-400 °C) çalışan demir-krom oksitli katalizör yüklü bir reaktörde su buharı ile reaksiyona giren CO, CO₂ ve H₂'ye dönüştürülür. Birinci kademe sonunda gazda %2-3 kadar CO kalır.

İkinci kademe düşük sıcaklıkta (220-240 °C) özel çinko/bakır katalizörü yüklü bir reaktörde CO %0,3 miktarına kadar düşürülür. Proses gazı ikinci kademeye girmeden önce, diğer ünitelerde ve kazan besleme suyunu ısıtmada kullanılarak 220 °C'ye kadar soğutulur. Bu katalizör kükürde karşı çok hassas olduğundan, proses girdileri içindeki kükürt derişimi kükürt giderme ünitesinde 1 ppm'i geçmeyecek seviyeye düşürülmelidir.



d) Karbon dioksit giderme ve geri kazanma ünitesi :

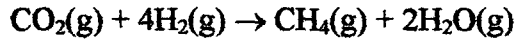
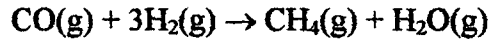
CO konversiyonundan sonra proses gazında bulunan CO₂'nin verilmesi gerekmektedir. Sistem bir absorpsiyon ile bir rejenerasyon kolonundan meydana gelmektedir. Absorpsiyon kolonunda potasyum karbonat çözeltisi tarafından absorplanan CO₂ doymuş çözeltinin rejenerasyonu sırasında geri kazanılır ve üre tesisine hammadde olarak gönderilir. Rejenere edilen çözelti tekrar absorpsiyon kolonuna sirküle edilir.

CO₂ giderme ünitesinden çıkan proses gazında %0,1 kadar CO₂ vardır.

e) Metanasyon ünitesi :

CO₂ giderme ünitesinden gelen proses gazında % 0,1 CO₂ ve %0,3 CO bulunur. Bu miktar CO amonyak sentez katalizörünün zehirlenmesine sebep olur. Bunu önlemek için, metanasyon ünitesinde CO ve CO₂, H₂ ile reaksiyona girip metan ve su haline dönüştürülür. Metanasyon reaksiyonunda nikel esaslı katalizörler kullanılır.

Sentez devresine verilen proses gazındaki CO ve CO₂ miktarı 10 ppm'den aşağı indirilmiş olur.



f) Amonyak sentez ünitesi :

Metanasyon ünitesini terk eden proses gazı (sentez gazı) bir santrifüj kompresör ile sentez basıncına kadar sıkıştırılır. Amonyakın sentezi 300 atm basınç altında yapılır.

Sentez devresi, bir reaktör ile bir seri ısı deęiřtiricilerinden meydana gelen kapalı bir devredir.

Sentez reaktöründen çıkan gaz hacim olarak % 17 amonyak içerir. Gazın sıcaklığı 390 °C'dir. Gazın ısisından buhar üretiminde ve reaktöre giren sentez gaz akımının ısıtılmasında faydalanılır. Meydana gelen amonyağın yoęuşarak devreden ayrılmasını sağlamak amacıyla gazın soęutulması gerekir. Soęutma işlemi, sırasıyla su soęutucuları ve refrijerasyon sistemi ile saęlanır. Yoęuşan amonyak çeřitli soęutma kademeleri arasında bulunan ayırıcılar vasıtasıyla sentez devresinden ayrılır ve bir basınç giderme kabında toplanır.

Metan, argon gibi inert gazların sistemde birikmesini önlemek amacıyla bir miktar gaz sistemden uzaklaştırılır ve sisteme taze sentez gazı katılır. Sentez gazı ilavesi son yoęuşan kademesinden önce yapılır. Böylece, sentez gazı ile sisteme giren bir miktar su buharı yoęunlaşan amonyak tarafından absorbe edilerek devreden uzaklaştırılmış olur. Son kademe yoęunlaştırma işleminden sonra gaz sirkülasyon kompresörü vasıtası ile reaktöre sirküle edilir. Refrijerasyon sisteminde soęutucu olarak kapalı bir devrede

sirküle ettirilen sıvı amonyak kullanılır. Refrijerasyon derecesi sentez basıncına bağlı olarak değişir.

3. PROBLEMİN ÇÖZÜMÜ

3.1 Genel Yöntem

Çok yataklı amonyak reaktörünün modellenmesinde aşağıdaki noktalar göz önüne alınmıştır:

- a) Dönüşümün fonksiyonu olarak hız kanununu açıklamak için stokiyometrik ilişkiler ve besleme özellikleri kullanılır,
- b) Katalizör ağırlığı ve sıcaklığı ile ilgili enerji denkliği uygulanır [5,6],
- c) Basınç düşüşü için Ergun denklemi kullanarak katalizör ağırlığının fonksiyonu olarak basınç belirlenir,
- d) Hesaplamalar için k , K_p , $\Delta H_f (T_r)$, C_p 'nin değerleri ve sıcaklıkla ilişkileri saptanır,
- e) Çıkış dönüşümünü, sıcaklık ve konsantrasyon profillerini belirlemek için tasarım denklemi, enerji denkliği ve Ergun denklemleri aynı anda sayısal olarak integre edilir.

3.2 Tasarım Denklemleri

Temeli katalizör ağırlığına dayandırılan genel mol-tasarım denklemi aşağıdaki şekilde ifade edilebilir :

$$F_{A_0} \cdot \frac{dX}{dW} = -r'_A \quad (3.1)$$

3.2.1 Hız ifadesi

Hız ifadesi için Temkin-Pyzhev denklemi kullanılmıştır [7] .

$$-r_A \rho_B = f \left[k_1 \frac{P_{N_2} P_{H_2}^{1.5}}{P_{NH_3}} - k_2 \frac{P_{NH_3}}{P_{H_2}^{1.5}} \right] \quad (3.2)$$

Burada :

ρ_B = katalizörün kütle yoğunluğu, kg/cm³

f = katalizör aktivitesi

r_A = N₂ reaksiyon hızı, kmol/kg.kat.s

k_1 = ileri hız sabiti

k_2 = geri hız sabiti

Aynı zamanda kısmi basınç, toplam basınç, sıcaklık ve dönüşümün bir fonksiyonu olarak ifade edilebilir.

$$P_i = C_i RT = C_{A_0} \frac{(\theta_i + v_i x) RTP}{(1 + \epsilon x)(T/T_0)P_0} = P_{A_0} \frac{(\theta_i + v_i x)P}{(1 + \epsilon x)P_0} \quad (3.3)$$

Hız ifadesi kısmi basınçlar cinsinden yerine konur ve birleştirilirse,

$$\frac{dx}{dw} = \frac{f}{\rho_B F_{A_0}} \left[\frac{K_1 \left(\frac{1-x}{\theta_D + v_D x} \right) \left(\frac{\theta_B + v_B x}{1 + \epsilon x} \right)^{3/2} \left(\frac{P P_{A_0} T_0}{P_0 T} \right)^{3/2}}{-K_2 \left(\frac{1}{\theta_D + v_D x} \right) \left(\frac{\theta_B + v_B x}{1 + \epsilon x} \right)^3 \left(\frac{P P_{A_0} T_0}{P_0 T} \right)^{-1/2}} \right] \quad (3.4)$$

ifadesi elde edilir.

3.2.2 Enerji denkliği

Aşağıdaki enerji denklemi [8] kararlı durum için verilmiştir :

$$\frac{dT}{dW} = \frac{Q + r_A (-\Delta H_R(T))}{\rho_B F_{A_0} (\sum \theta_i C_{P_i} + x \Delta C_p)} \quad (3.5)$$

Burada $Q = \begin{cases} U(T - T_o) & \text{(adyabatik olmayan durum)} \\ 0 & \text{(adyabatik durum)} \end{cases}$

$$W = \rho_B \frac{\pi D^2 L}{4} \quad (3.6)$$

3.2.3 Basınç düşüşü

Basınç düşüşü, Ergun denklemi ile bulunabilir[9] :

$$\frac{dP}{dL} = - \frac{(1 - \phi)G(1 + \epsilon X)}{\rho_o (P / P_o)(T / T_o)g_c D_P \phi^3} \left[\frac{150\mu(1 - \phi)}{D_P} + 1.75G \right] \quad (3.7)$$

$$G = \frac{(\sum F_{i0} M_i)}{A_c} \quad (M_i = i\text{'nin moleküler ağırlığı})$$

$$A_c = \frac{\pi D^2}{4} \quad \text{olup}$$

$W = \rho_c A_c L$ kullanılırsa aşağıdaki denklem elde edilir :

$$\frac{dP}{dW} = - \frac{G \cdot T \cdot P_o (1 - \phi)(1 + \epsilon X)}{\rho_B \cdot A_c \cdot \rho_o \cdot T_o \phi^3 \cdot D_P \cdot g_c P} \left[\frac{150(1 - \phi)\mu}{D_P} + 1.75G \right] \quad (3.8)$$

3.2.4 Çözüm yöntemi ve elde edilen grafikler

Burada aynı anda çözümlenmesi gereken üç diferansiyel denklem vardır :

$$\text{Mol denkliđi} : \frac{dX}{dW} = f_1(X, T, P)$$

$$\text{Enerji denkliđi} : \frac{dT}{dW} = f_2(X, T, P)$$

$$\text{Basınç denkliđi} : \frac{dP}{dW} = f_3(X, T, P)$$

Görüldüđü gibi bu denklemler analitik olarak çözülemez. Ancak sayısal olarak çözülebilen bu denklemlerin çözümünde Runge-Kutta-Gill yöntemi [10] kullanılmıřtır. Bir Pascal programı yazılmıř ve elde edilen sonuçların grafikleri Mathcad paket programı yardımı ile çizilmiřtir.



4. SONUÇLAR ve DEĞERLENDİRME

Öncelikle, yüksek sıcaklık ve yüksek basınç altında gerçekleşen tersinir amonyak sentez reaksiyonuna ait kütle ve enerji model denklemleri elde edildi. Ayrıca basınç düşüşünü ifade eden Ergun denklemi kullanıldı. Aynı zamanda, model olarak seçilen reaktöre ait değişkenler için reaksiyon denge denklemi çözülerek termodinamiksel denge eğrisi elde edildi. Denge eğrisinin çizilmesi, model denklemlerinden elde edilen değişken değerlerinin (dönüşüm, sıcaklık ve basınç) termodinamiksel değerlere yaklaşımını inceleme bakımından büyük önem taşımaktadır.

Eşanlı olarak çözülmesi gereken denklemlerin çözümünde Runga-Kutta-Gill yöntemi, sıcaklık, basınç ve dönüşüm profillerinin çiziminde MATHCAD paket programı kullanılmıştır. Model denklemleri, tek boyutlu (sıcaklık, basınç ve dönüşümün sadece aksenal yönde değiştiği kabul edilerek) reaktör boyunca ısı ve kütle difüzyonu ihmal edilerek ve reaktördeki gaz sıcaklığının katalizör sıcaklığına eşit olduğunu kabul edilerek çözülmüştür.

Yukarıda belirtilen denklemlerdeki parametreler genel durum göz önüne alınarak ele alınmıştır. Dolayısıyla, tasarım değerleri (ör.: reaktörün yarıçapı veya uzunluğu) veya sentez gazının sıcaklığı, basıncı ve bileşimi değişken olarak ele alınabilir. Bu durumda, herhangi bir radyal veya aksenal reaktör verisi kullanılarak hesaplamalar yapılabilir. Örneğin, İGSAŞ sentez gazının içinde asal ve CH_4 gazları bulunduğu halde bile, hesaplamalar genel denklemler kullanarak yapılmıştır.

Birinci ve ikinci yataklarda, sırasıyla alınan Şekil 1.1a-7.1a ve 1.2a-7.2a da görüldüğü gibi reaktör boyunca dönüşüm oranı beklendiği gibi artış göstermektedir. Reaktör boyunca katalizör miktarının ve sıcaklığın (Şekil 1.1b-7.1b ve 1.2b-7.2b) artmasıyla, reaksiyon hızı ve dönüşüm oranı (denge değerleri içinde) artmaktadır. Burada gerçekleşen reaksiyon ekzotermik olduğundan, sıcaklığın artması normaldir.

Gerçekleşen reaksiyon gereği negatif bir hacim genişmesi sözkonusu olduğundan dolayı ($1 \text{ mol gaz} + 2 \text{ mol gaz} \leftrightarrow 2 \text{ mol gaz}$) reaktör boyunca basınç bir

miktar azalacaktır (Şekil 1.1c-7.1c ve 1.2c-7.2c). Reaktör boyunca sıcaklık çok arttığından reaksiyon tersinir olduğundan reaksiyon sola kayacaktır . Reaktördeki dönüşüm miktarı sıcaklıkla doğru, basınçla ters orantılı olarak değişmektedir (Şekil 1.1d-7.1d ve 1.2d-7.2d).

Üçüncü yatakta ise örnek alınan Şekil 1.3.'de beklendiği gibi reaktör yarıçapınca dönüşüm aksel yataklardan daha fazla artış göstermektedir . Aksel yataklarda akış yönündeki alanın (A_c) reaktör boyunca sabit kaldığı fakat radyal yatakta A_c yarıçap boyunca devamlı artmaktadır (Şekil 1.3a-7.3a). Bu da kullanılan katalizör miktarının daha fazla olması demek olup reaktör yarıçapınca dönüşümün daha fazla olması normaldir .

Radyal reaktörlerde gaz moleküllerinin reaktörde kalma zamanı aksel reaktörlere nazaran daha azdır. Aynı zamanda, kullanılan reaktörün son yatağının radyal olması nedeniyle, reaksiyonu yeterince tamamlamış olan gaz karışımı buraya gelmektedir. Dönüşüm değişkeni açısından düşük olduğundan yarıçap boyunca sıcaklık (Şekil 1.3b-7.3b), dönüşüm ve basınç değişimi aksel yataklara nazaran daha az olmaktadır. Sonucun bu şekilde çıkması da gayet doğaldır.

Reaktör boyunca basınç düşüşü de Ergun denkleminde hesaplanmıştır. Çünkü kullanılan bu denklem viskos kuvvetler, katalizörün geometrik yapısı, hız ve gazın özelliklerine bağlıdır [11].

Elde edilen değerler (X,T,P) model olarak alınan İGSAŞ 'a ait gerçek endüstriyel sentez reaktörünün verileri ile karşılaştırılmıştır. Örneğin İGSAŞ sistem gaz analiz değerlerinin bir kısmı aşağıda verilmiştir.

Sistem Gaz Analizi (İGSAŞ)

Ar (%,mol)	CH ₄ (%,mol)	N ₂ (%,mol)	H ₂ (%,mol)	NH ₃ (%,mol)
6,035	6,77	15,87	53,69	17,63
6,11	6,75	16,05	54,037	16,92

% 4' lük bir atık göz önüne alınrsa ve bu değer model denklemlerinden hesaplanan (Tablo-E. 6.3 'ten , $X=22,36$) değerle karşılaştırılırsa , % 3'luk bir sapma görülmektedir. Sonuç olarak simulyondan elde edilen değerlerin İGSAŞ'dan alınan değerlerle uyum içerisinde olduğu gözlenmiştir.

Bütün bu işlemler, farklı f (katalizör aktivite katsayısı) değerleri için yapıldı ve sonuçta, beklenildiği üzere , aktivite katsayısının azalması ile verimliliğin azaldığı görülmüştür (Şekil 1.1-4.1). Bunu en iyi şekilde incelemek için her bir " f "e karşı gelen üçüncü yataktaki çıkış dönüşüm grafiği 9.1.a.'dan anlaşılabilir.Özet olarak , aktivitenin azalması ile basınç düşüşü arasındaki ilişki aşağıdaki tabloda görülebilir.

Tablo A- Çeşitli katalizör katsayılarına karşı gelen dönüşüm değerleri

f (aktivite)	$X^1_{in}(\%)$	$X^1_{out} (\%)$	$X^{II}_{out} (\%)$	$X^{III}_{out} (\%)$
1,0	0,00	15,94	20,67	24,49
0,9	0,00	14,21	19,03	22,84
0,85	0,00	13,30	18,16	21,97
0,8	0,00	12,40	17,29	21,08

Burada , $X^1_{in}(\%)$ birinci yataktaki amonyak giriş yuzdesini $X^1_{out} (\%)$, $X^{II}_{out} (\%)$ ve $X^{III}_{out} (\%)$ ise sırasıyla birinci,ikinci ve üçüncü yataktaki amonyak giriş yuzdesini göstermektedir.

Aynı işlem İGSAŞ'taki reaktör için yapılırsa , yani birinci yataktaki amonyak giriş yüzdesi ($X^1_{in} = 2.689$) göz önüne alınrsa , aşağıdaki elde edilir.

Tablo B- Çeşitli katalizör katsayılarına karşı gelen dönüşüm değerleri

f (aktivite)	$X_{in} (\%)$	$X^1_{out} (\%)$	$X^{II}_{out} (\%)$	$X^{III}_{out} (\%)$
1,0	2,69	14,46	19,89	23,89
0,9	2,69	13,01	18,34	22,36
0,85	2,69	12,30	17,60	21,58

Kullanılan model denklemleri ile çeşitli giriş sıcaklıklarına karşılık gelen çıkış dönüşüm değerleri hesaplanmıştır. Aynı zamanda , giriş sıcaklıklarına karşılık çıkış dönüşüm değerleri çizilmiştir (Şekil 8.1 - 8.2). Bu hesaplamalar , İGSAŞ reaktörün çalışma şartlarına , göre yapılmıştır . Bu şartlar aşağıda kısaca verilmiştir. Burada, X_{in} , P_{in} ve T_{in} sırasıyla dönüşümü , giriş basıncını ve sıcaklığını simgelemektedir.

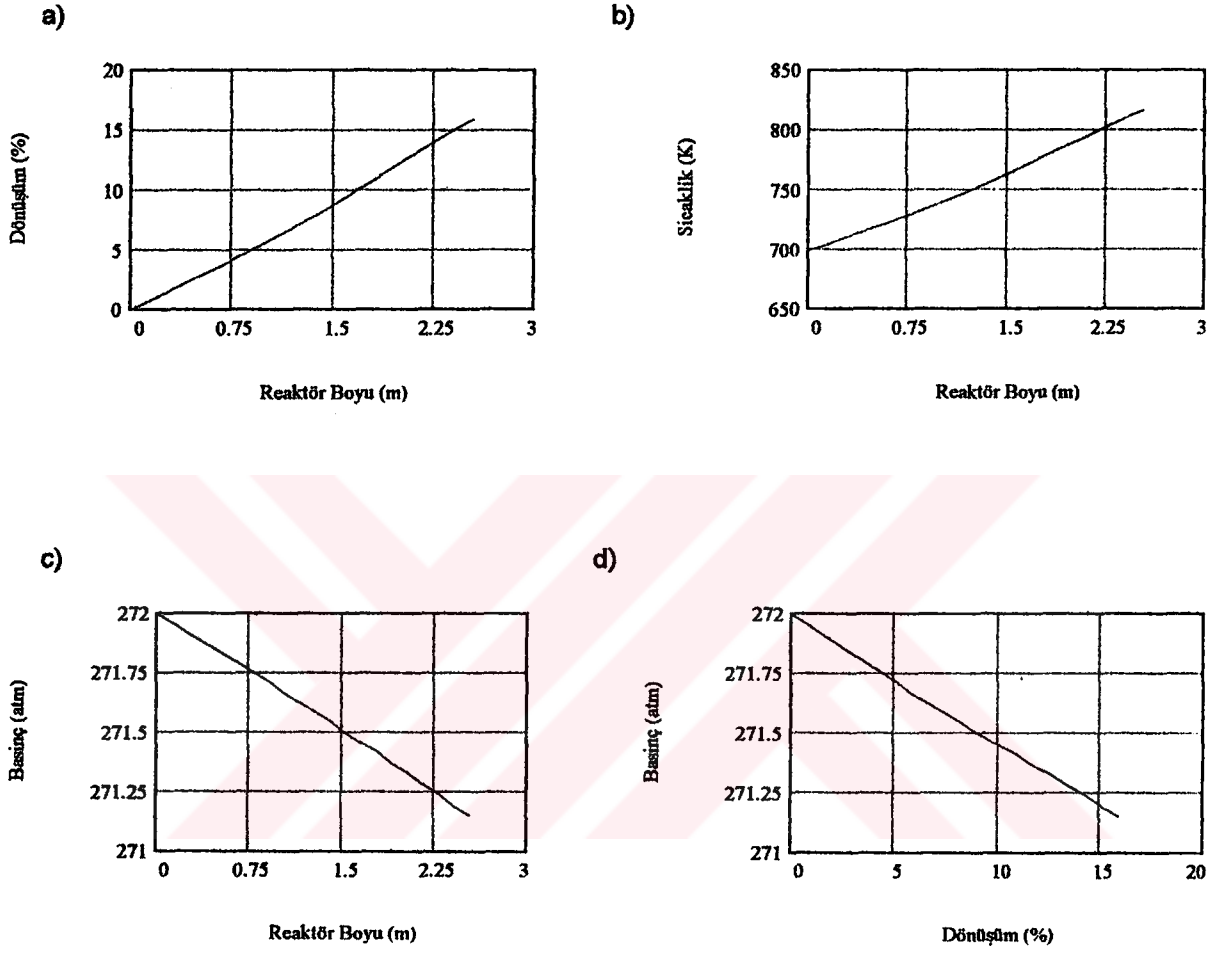
$$X_{in} = 2,689$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$f = 0,9$$

Hesaplamalarda ; optimum giriş sıcaklığı 725 °K bulunmuştur (Şekil 8.1 - 8.2). Pratik olarak , bu giriş şartlarının olması sisteme dışarıdan müdahale gerektirmektedir. Bu durumda , sistemin adyabatik olmaması gerekmektedir. İşletme şartlarındaki proses parametre değerlerinin değiştirilmesi pratik olarak mümkün olmadığından , sistemin proses ekipmanları açısından ayarlanması çok zordur.



Sekil 1.1. Birinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.00$$

$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

$$f = 1.0$$

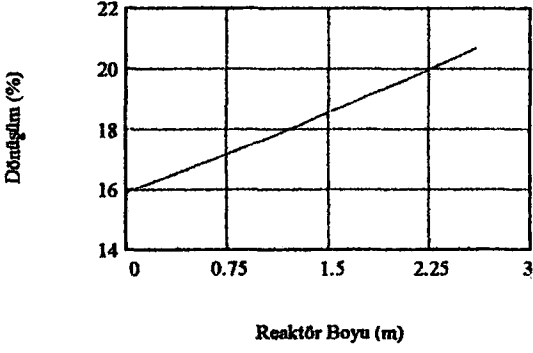
a) Reaktör boyunca dönüşüm profili

b) Reaktör boyunca sıcaklık profili

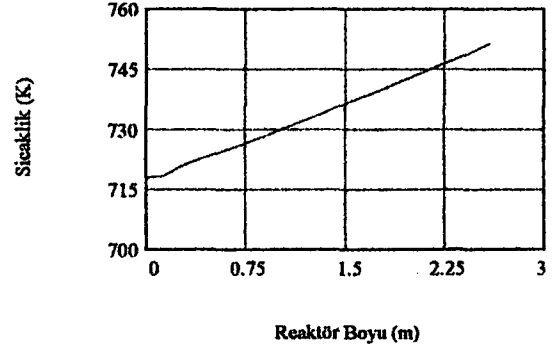
c) Reaktör boyunca basınç profili

d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç

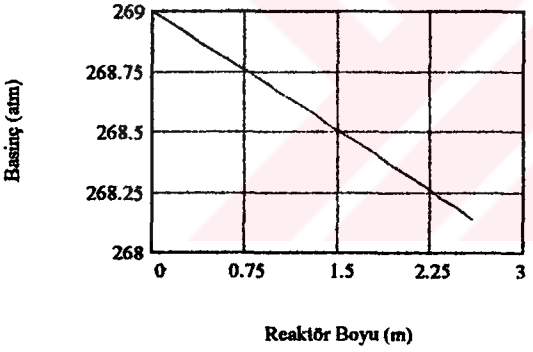
a)



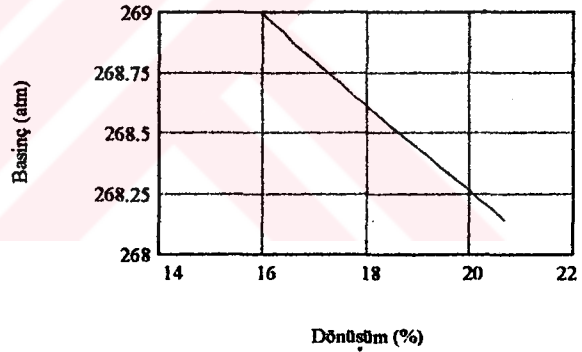
b)



c)



d)



Sekil 1.2. İkinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1594$$

$$T_{in} = 718 \text{ K}$$

$$P_{in} = 269 \text{ atm}$$

$$L = 2.59 \text{ m}$$

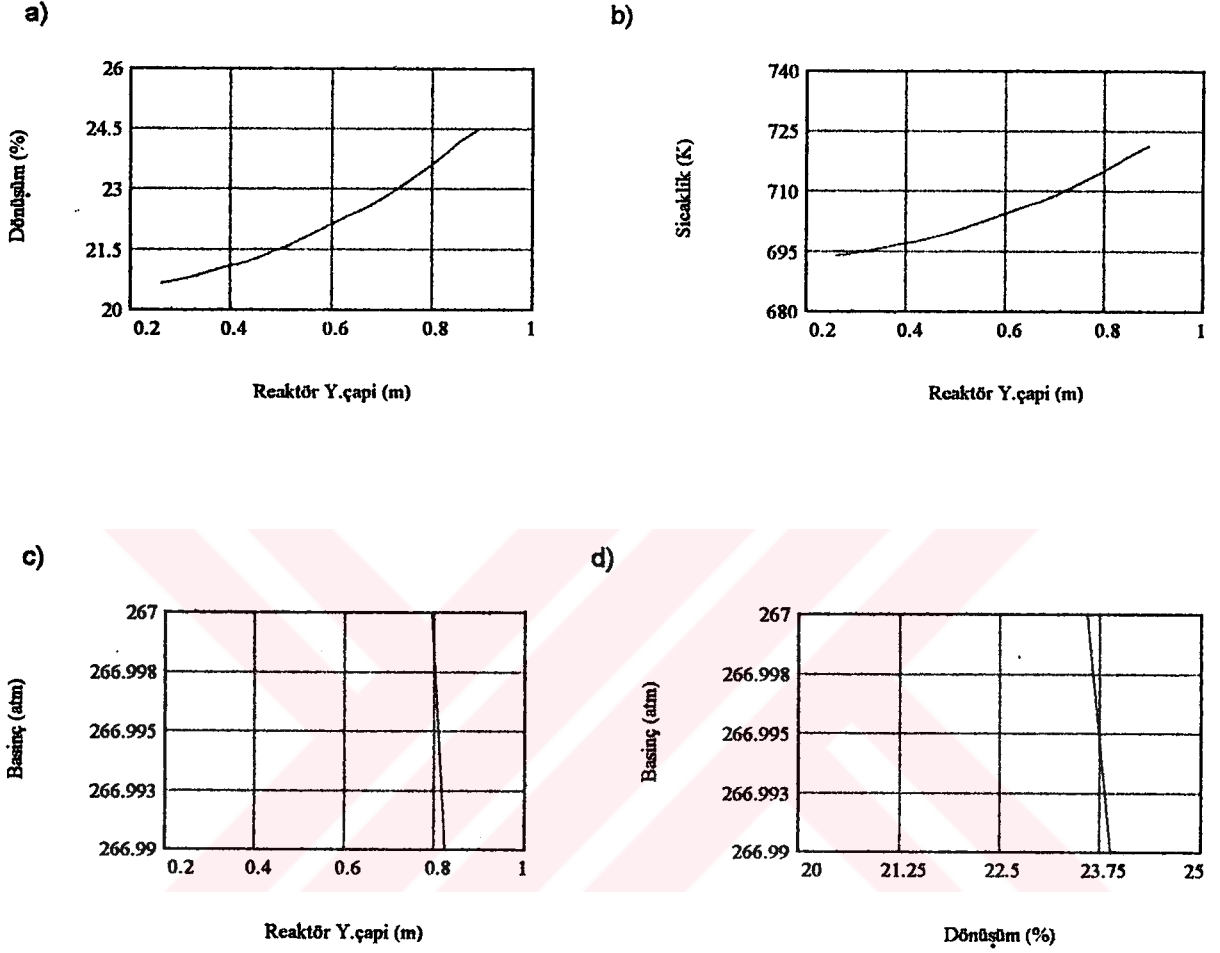
$$f = 1.0$$

a) Reaktör boyunca dönüşüm profili

b) Reaktör boyunca sıcaklık profili

c) Reaktör boyunca basınç profili

d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 1.3. Üçüncü yatakta reaktör y.çapı boyunca sıcaklık,dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.2067$$

$$T_{in} = 694 \text{ K}$$

$$P_{in} = 267 \text{ atm}$$

$$r_1 = 0.2585 \text{ m}$$

$$r_2 = 0.8850 \text{ m}$$

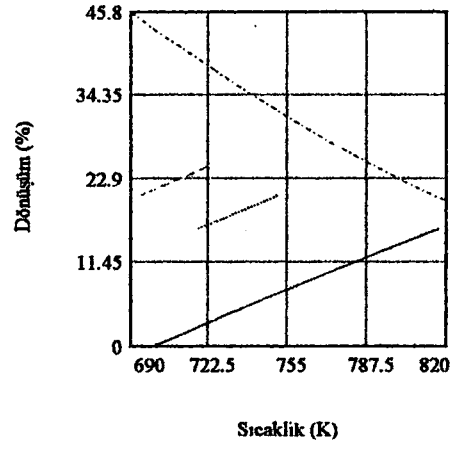
$$f = 1.0$$

a) Reaktör y.çapına göre dönüşüm profili

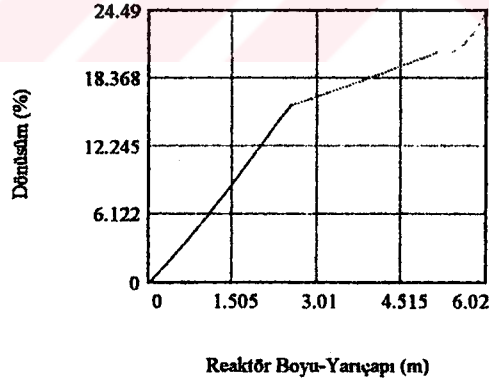
b) Reaktör y.çapına göre sıcaklık profili

c) Reaktör y.çapına göre basınç profili

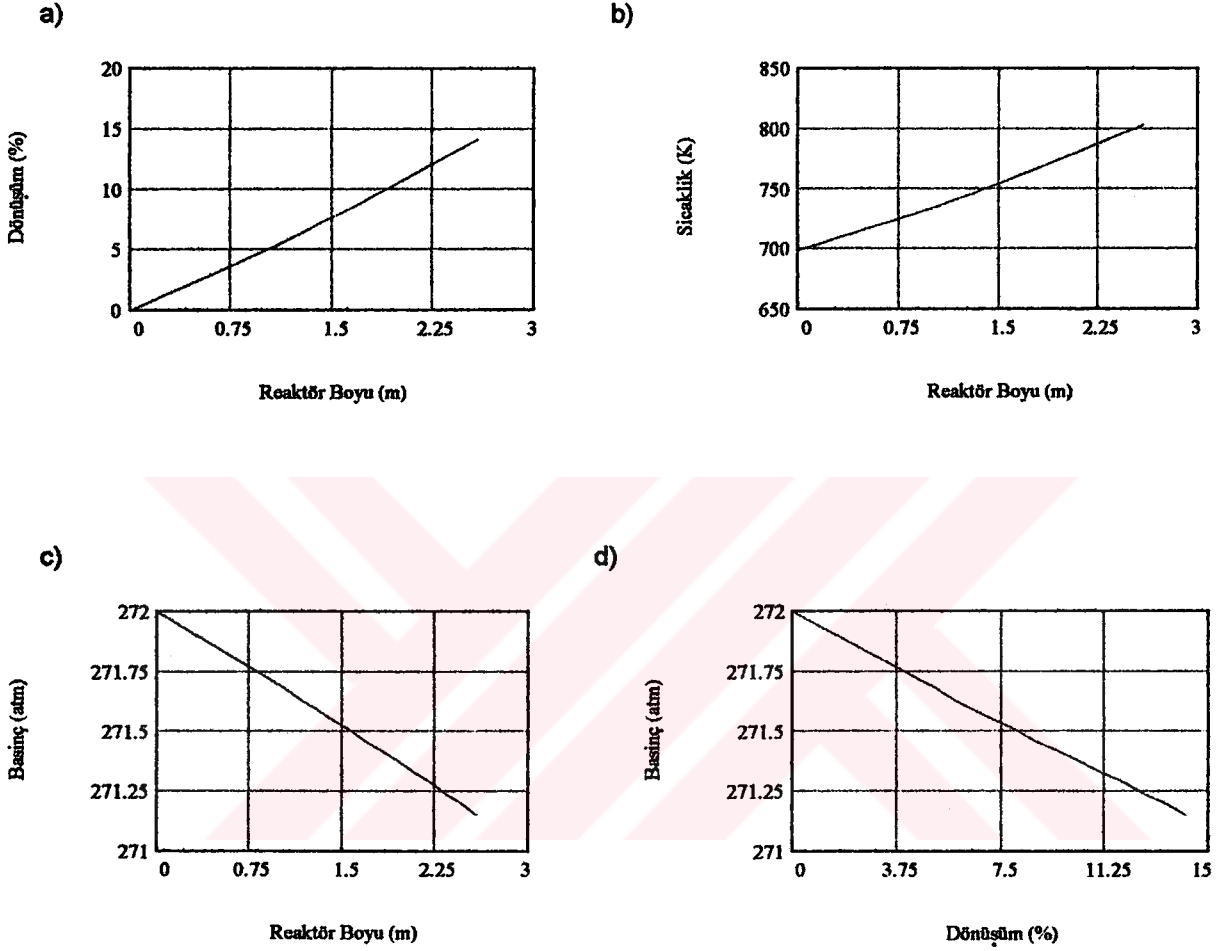
d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 1.4. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği
f = 1.0



Şekil 1.5. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda da X-L, X-r grafiği
f = 1.0



Şekil 2.1. Birinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.00$$

$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

$$f = 0.9$$

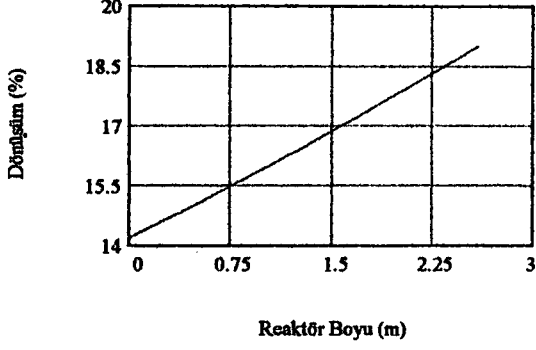
a) Reaktör boyunca dönüşüm profili

b) Reaktör boyunca sıcaklık profili

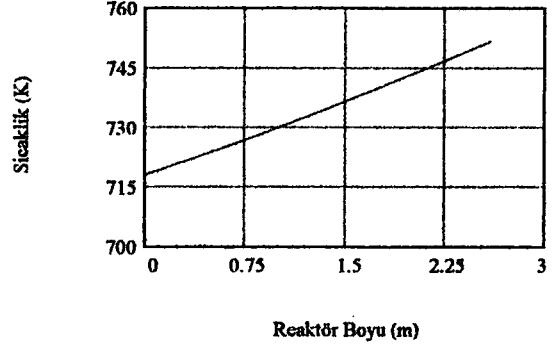
c) Reaktör boyunca basınç profili

d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç

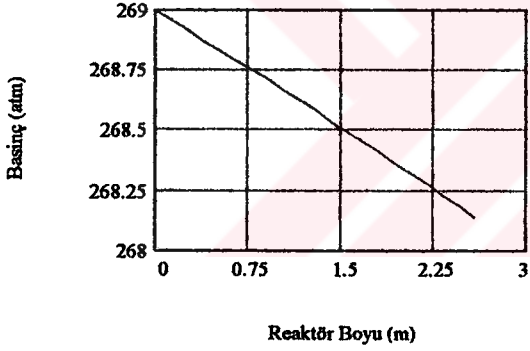
a)



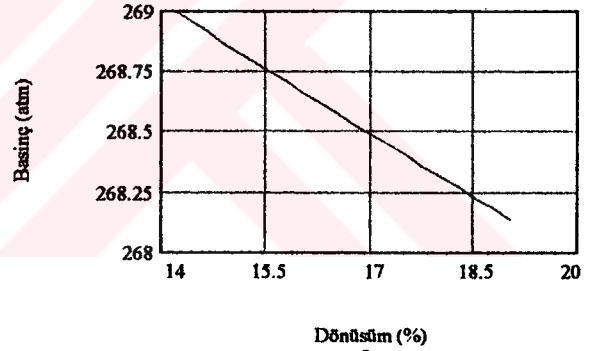
b)



c)



d)



Şekil 2.2. İkinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1421$$

$$T_{in} = 718 \text{ K}$$

$$P_{in} = 269 \text{ atm}$$

$$L = 2.59 \text{ m}$$

$$f = 0.9$$

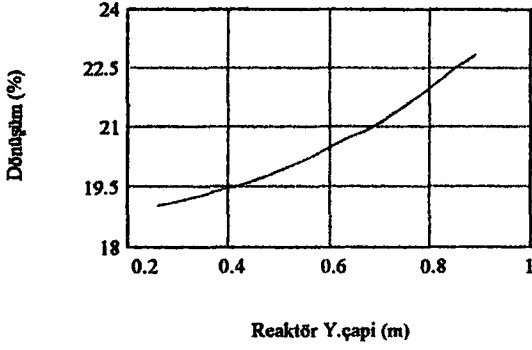
a) Reaktör boyunca dönüşüm profili

b) Reaktör boyunca sıcaklık profili

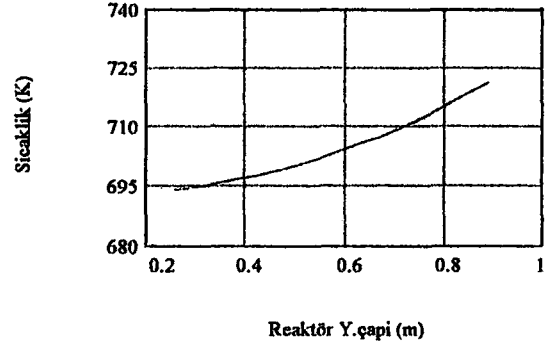
c) Reaktör boyunca basınç profili

d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç

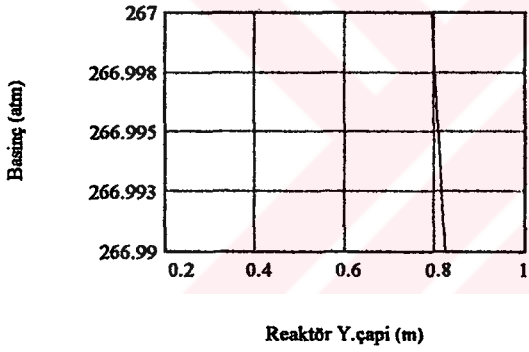
a)



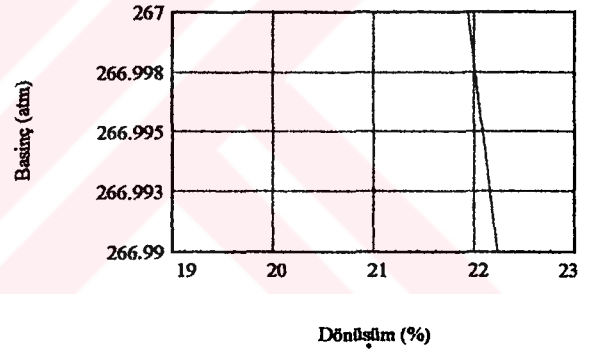
b)



c)



d)



Şekil 2.3. Üçüncü yatakta reaktör y.çapı boyunca sıcaklık,dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1903$$

$$T_{in} = 694 \text{ K}$$

$$P_{in} = 267 \text{ atm}$$

$$r_1 = 0.2585 \text{ m}$$

$$r_2 = 0.8850 \text{ m}$$

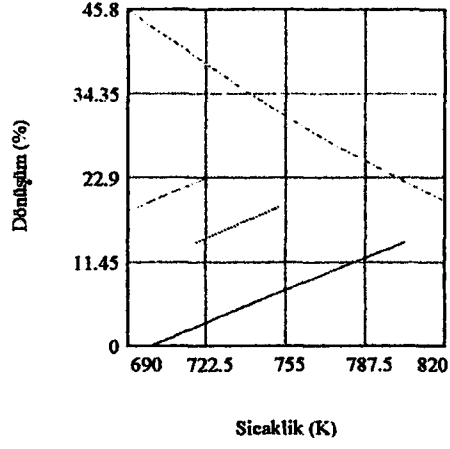
$$f = 0.9$$

a) Reaktör y.çapına göre dönüşüm profili

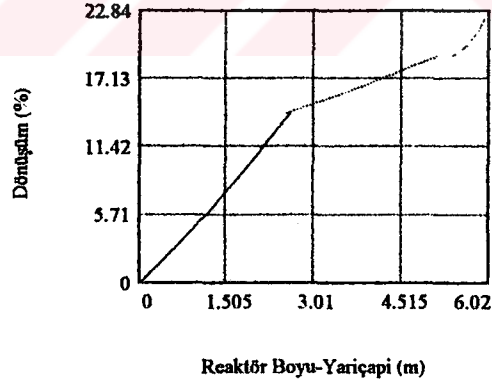
b) Reaktör y.çapına göre sıcaklık profili

c) Reaktör y.çapına göre basınç profili

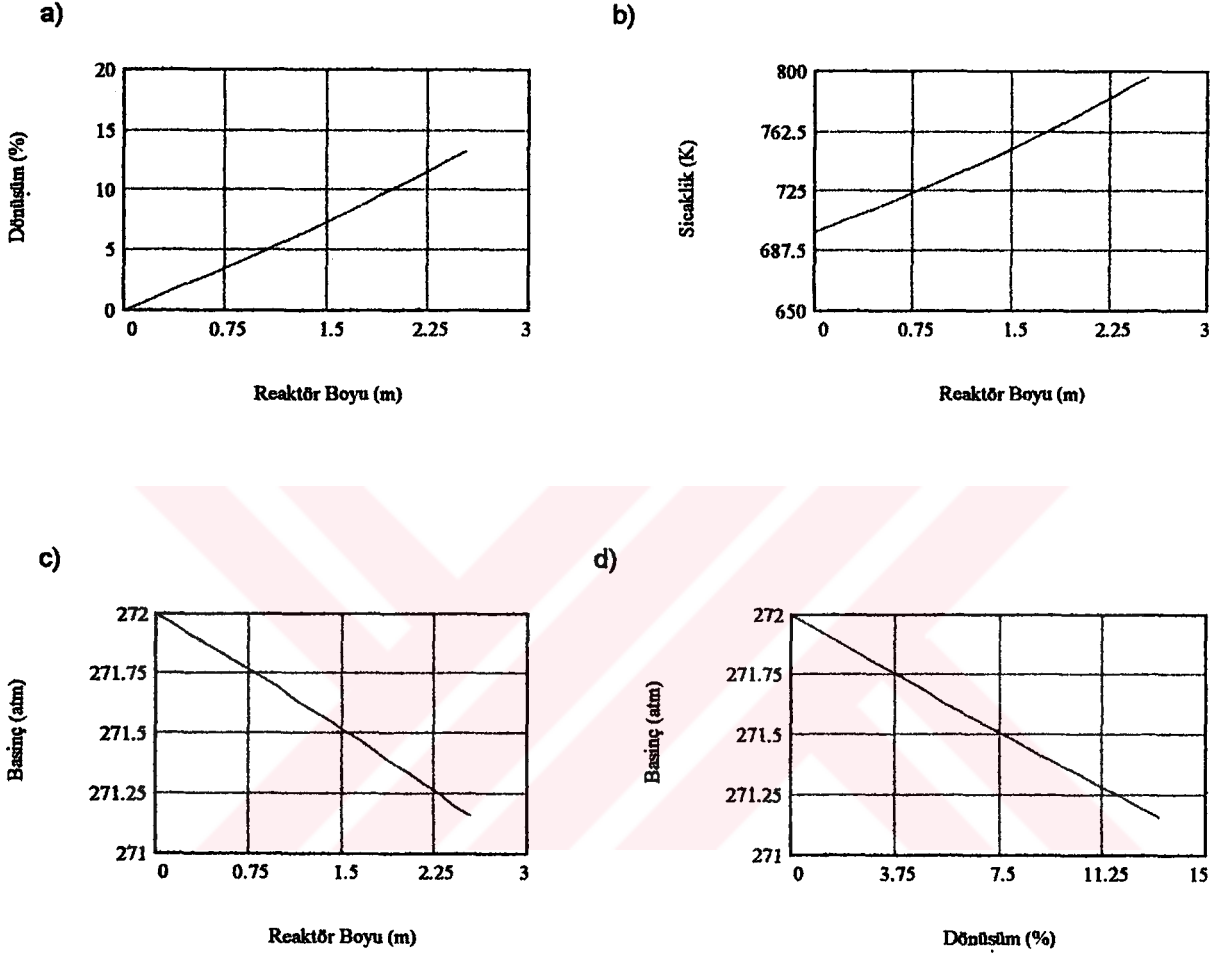
d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 2.4. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği
 $f = 0.9$



Şekil 2.5. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda da X-L, X-r grafiği
 $f = 0.9$



Şekil 3.1. Birinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.00$$

$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

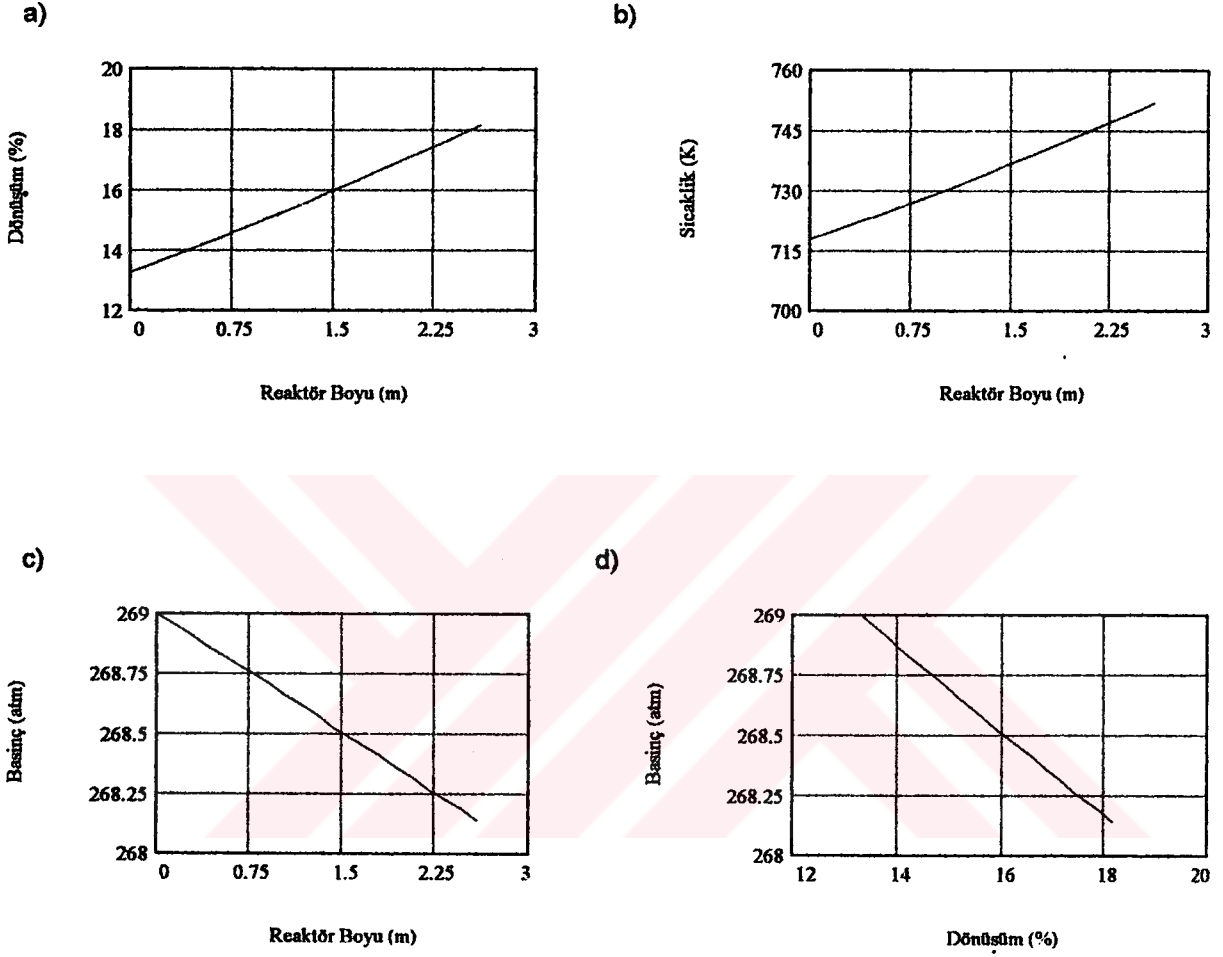
$$f = 0.85$$

a) Reaktör boyunca dönüşüm profili

b) Reaktör boyunca sıcaklık profili

c) Reaktör boyunca basınç profili

d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 3.2. İkinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1330$$

$$T_{in} = 718 \text{ K}$$

$$P_{in} = 269 \text{ atm}$$

$$L = 2.59 \text{ m}$$

$$f = 0.85$$

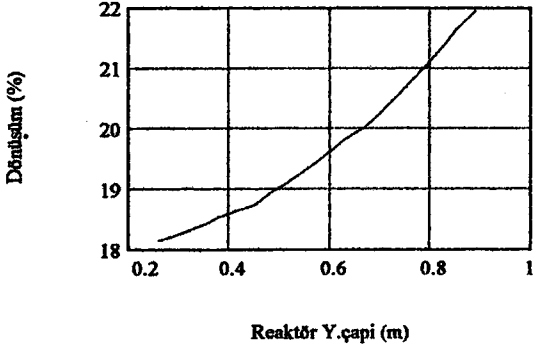
a) Reaktör boyunca dönüşüm profili

b) Reaktör boyunca sıcaklık profili

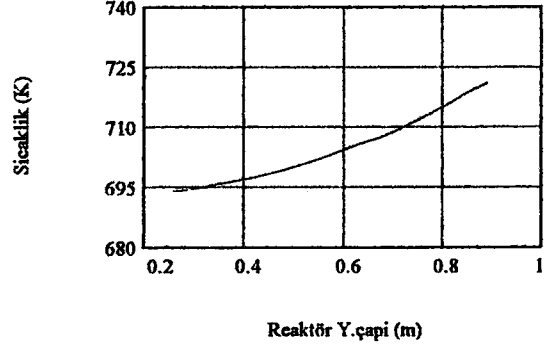
c) Reaktör boyunca basınç profili

d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç

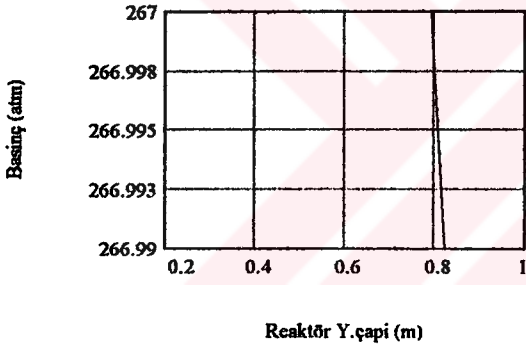
a)



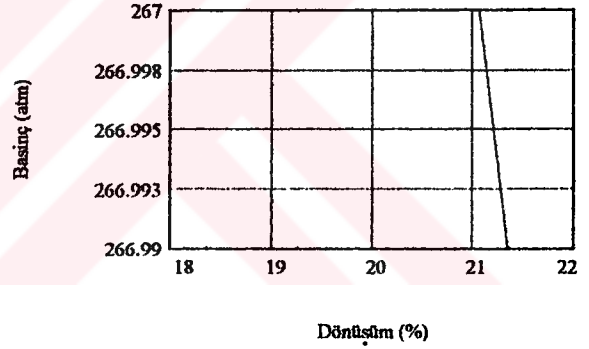
b)



c)



d)



Şekil 3.3. Üçüncü yatakta reaktör y.çapı boyunca sıcaklık,dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1816$$

$$T_{in} = 694 \text{ K}$$

$$P_{in} = 267 \text{ atm}$$

$$r_1 = 0.2585 \text{ m}$$

$$r_2 = 0.8850 \text{ m}$$

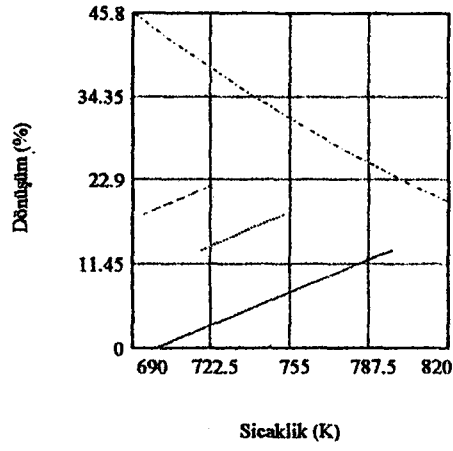
$$f = 0.85$$

a)Reaktör y.çapına göre dönüşüm profili

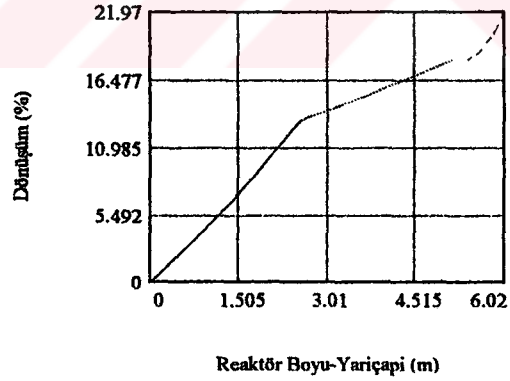
b)Reaktör y.çapına göre sıcaklık profili

c)Reaktör y.çapına göre basınç profili

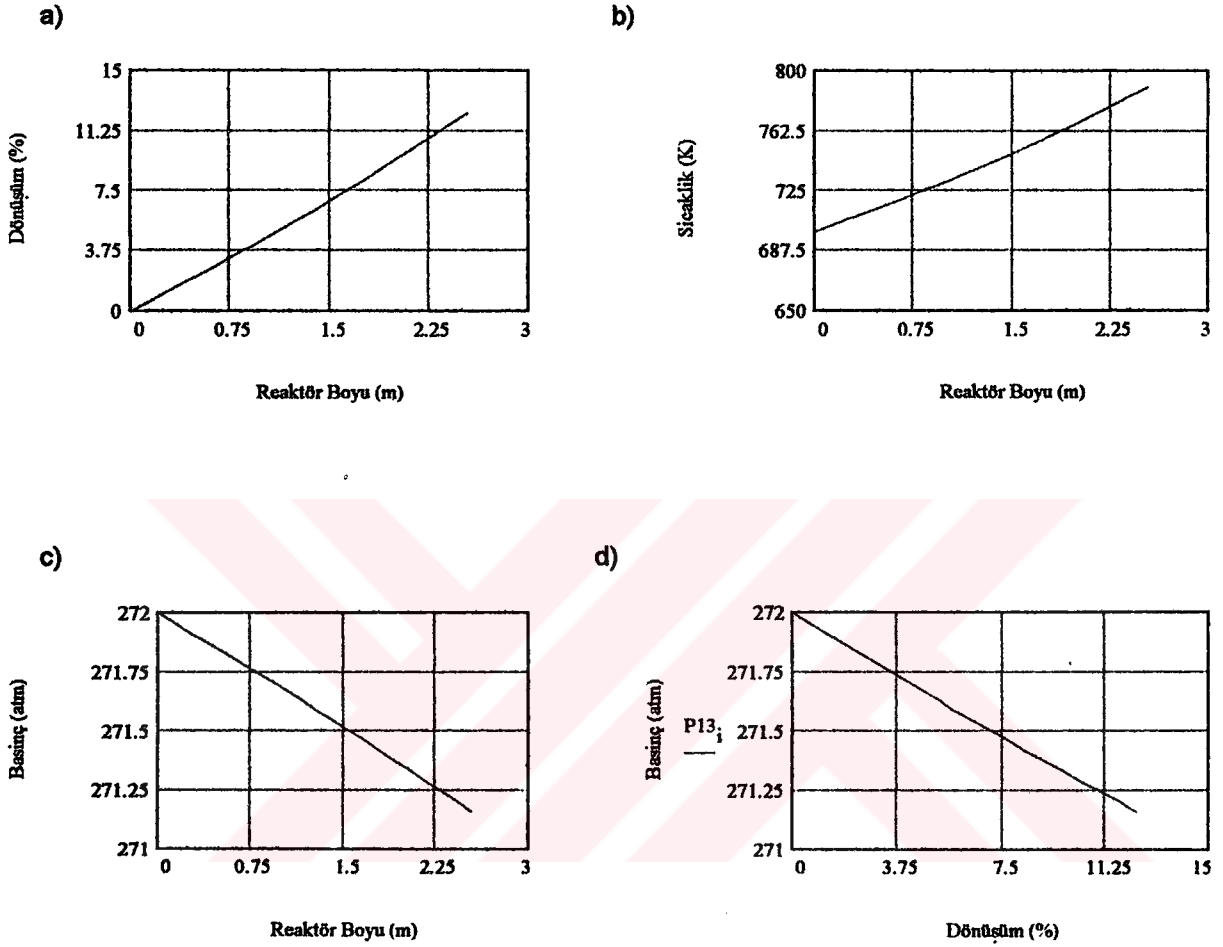
d)Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 3.4. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği
 $f = 0.85$



Şekil 3.5. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda da X-L, X-r grafiği
 $f = 0.85$



Şekil 4.1. Birinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.00$$

$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

$$f = 0.80$$

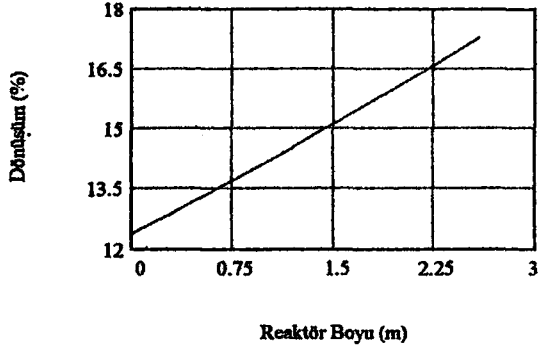
a) Reaktör boyunca dönüşüm profili

b) Reaktör boyunca sıcaklık profili

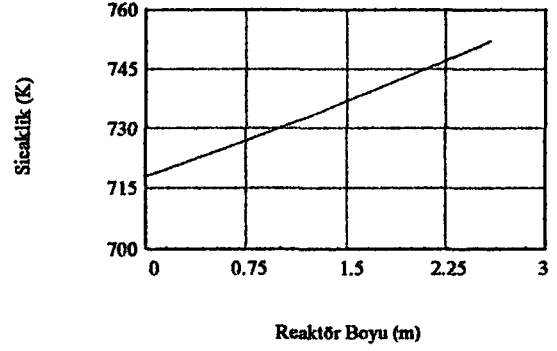
c) Reaktör boyunca basınç profili

d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç

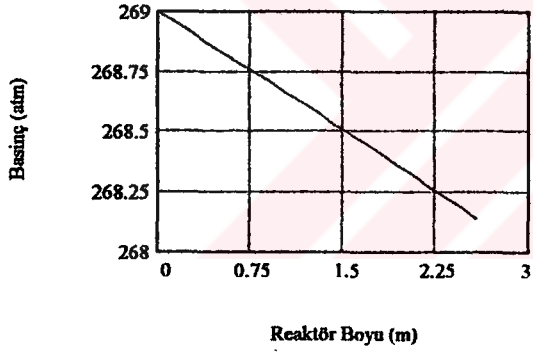
a)



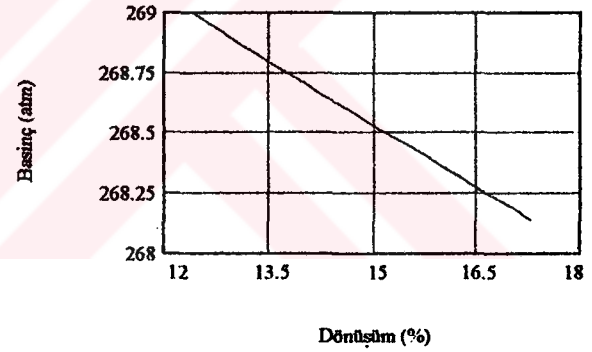
b)



c)



d)



Şekil 4.2. İkinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1240$$

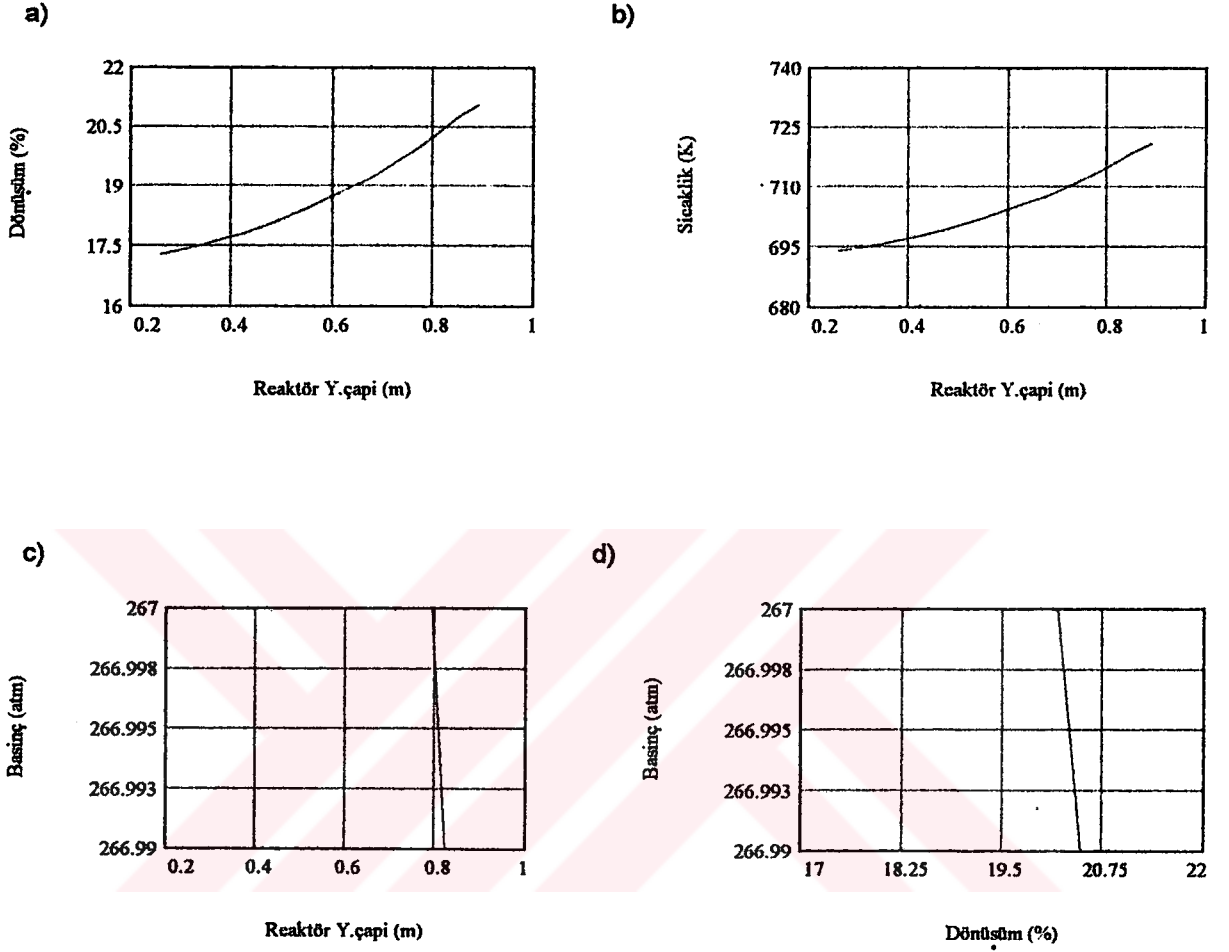
$$T_{in} = 718 \text{ K}$$

$$P_{in} = 269 \text{ atm}$$

$$L = 2.59 \text{ m}$$

$$f = 0.80$$

- a) Reaktör boyunca dönüşüm profili
- b) Reaktör boyunca sıcaklık profili
- c) Reaktör boyunca basınç profili
- d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 4.3. Üçüncü yatakta reaktör y.çapı boyunca sıcaklık,dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1729$$

$$T_{in} = 694 \text{ K}$$

$$P_{in} = 267 \text{ atm}$$

$$r_1 = 0.2585 \text{ m}$$

$$r_2 = 0.8850 \text{ m}$$

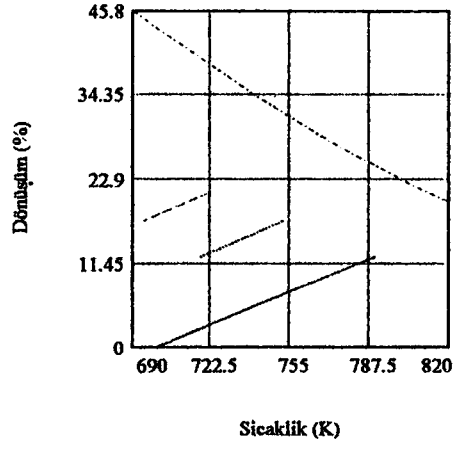
$$f = 0.80$$

a)Reaktör y.çapına göre dönüşüm profili

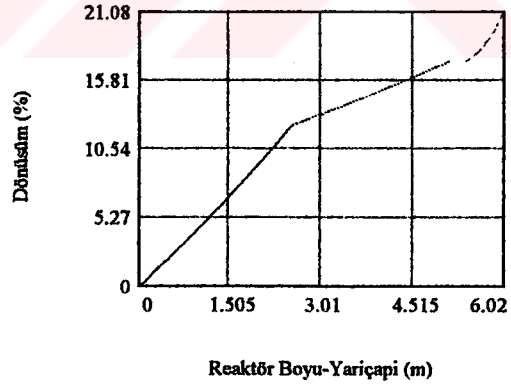
b)Reaktör y.çapına göre sıcaklık profili

c)Reaktör y.çapına göre basınç profili

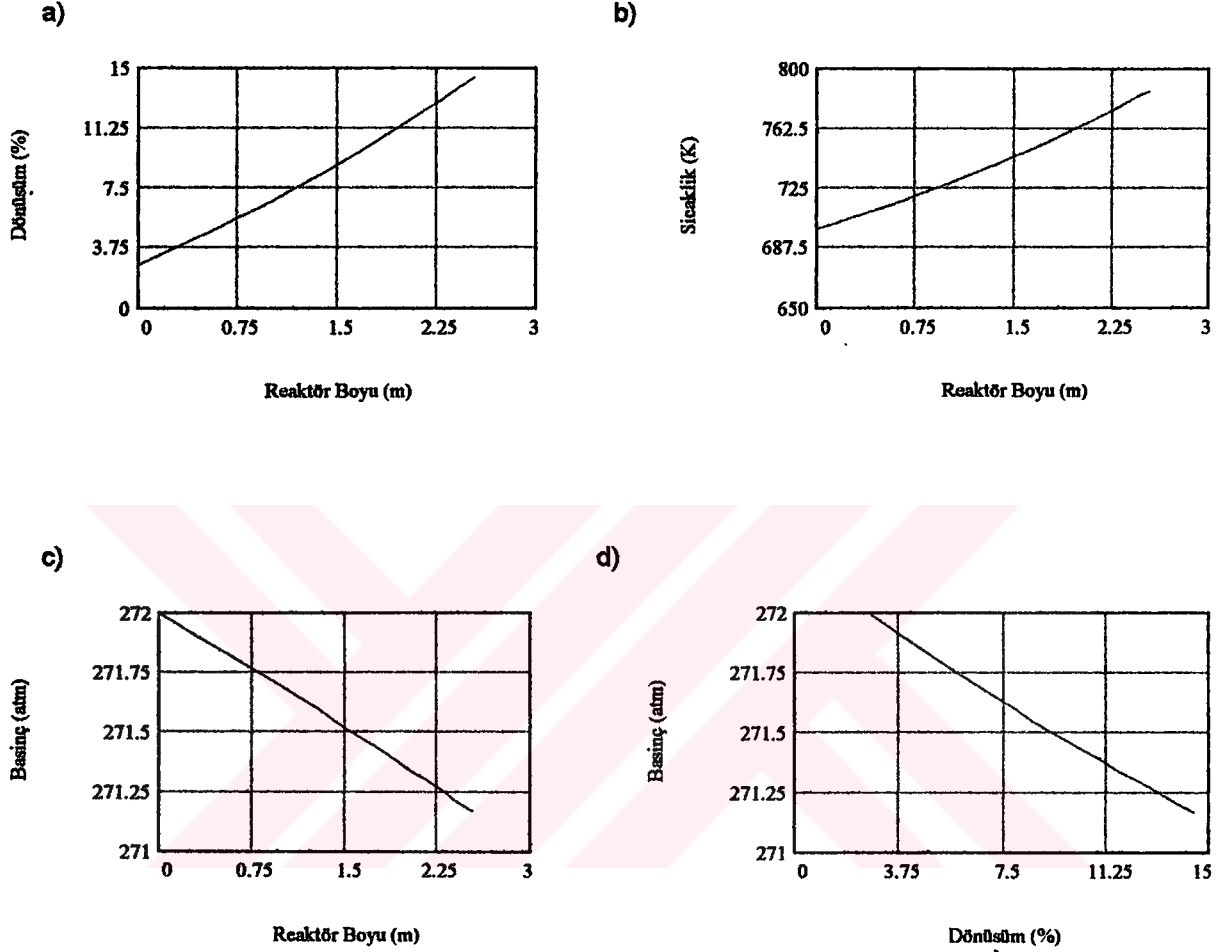
d)Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 4.4. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği
 $f = 0.80$



Şekil 4.5. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda da X-L, X-r grafiği
 $f = 0.80$



Şekil 5.1. Birinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.02689$$

$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

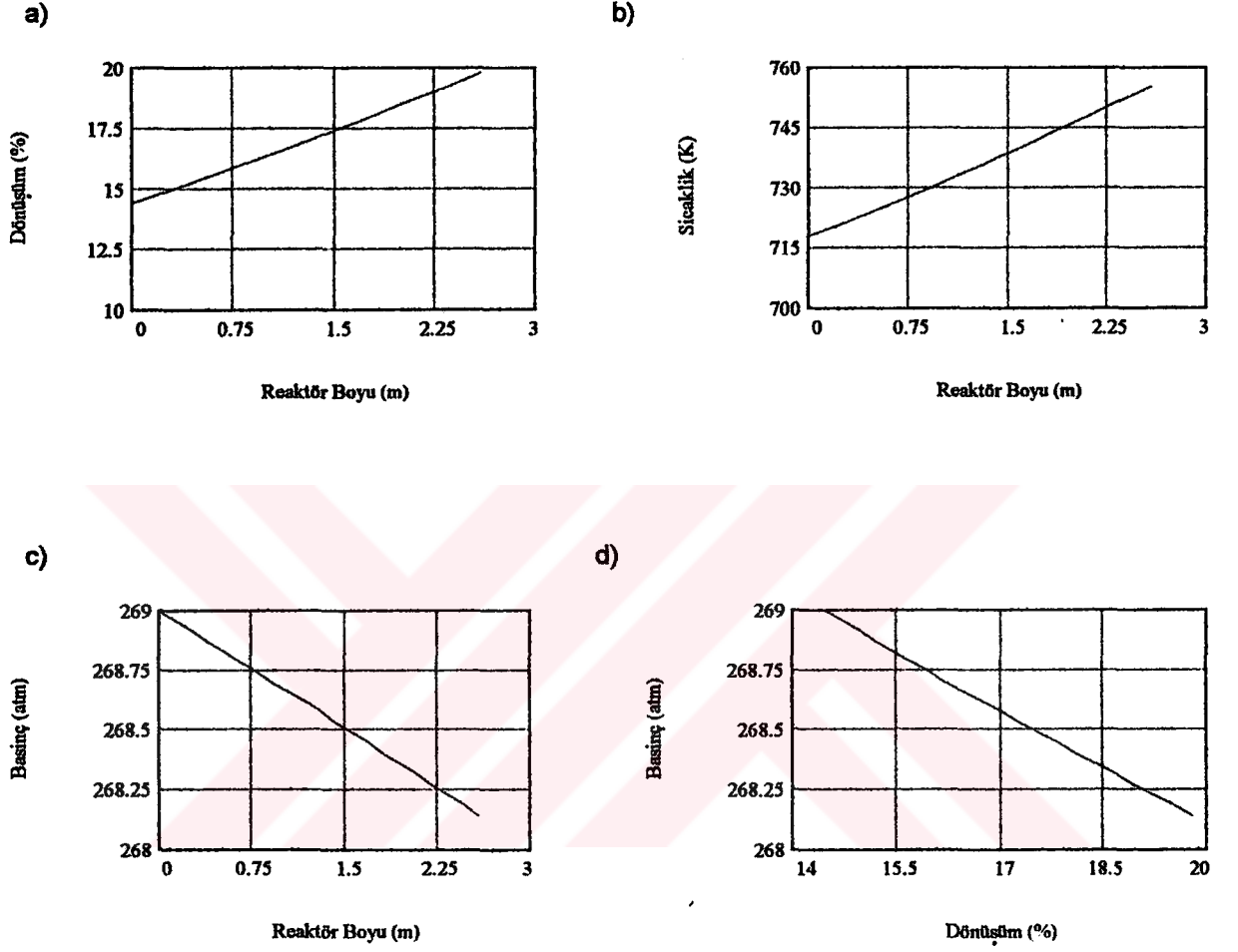
$$f = 1.0$$

a) Reaktör boyunca dönüşüm profili

b) Reaktör boyunca sıcaklık profili

c) Reaktör boyunca basınç profili

d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 5.2. İkinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.11446$$

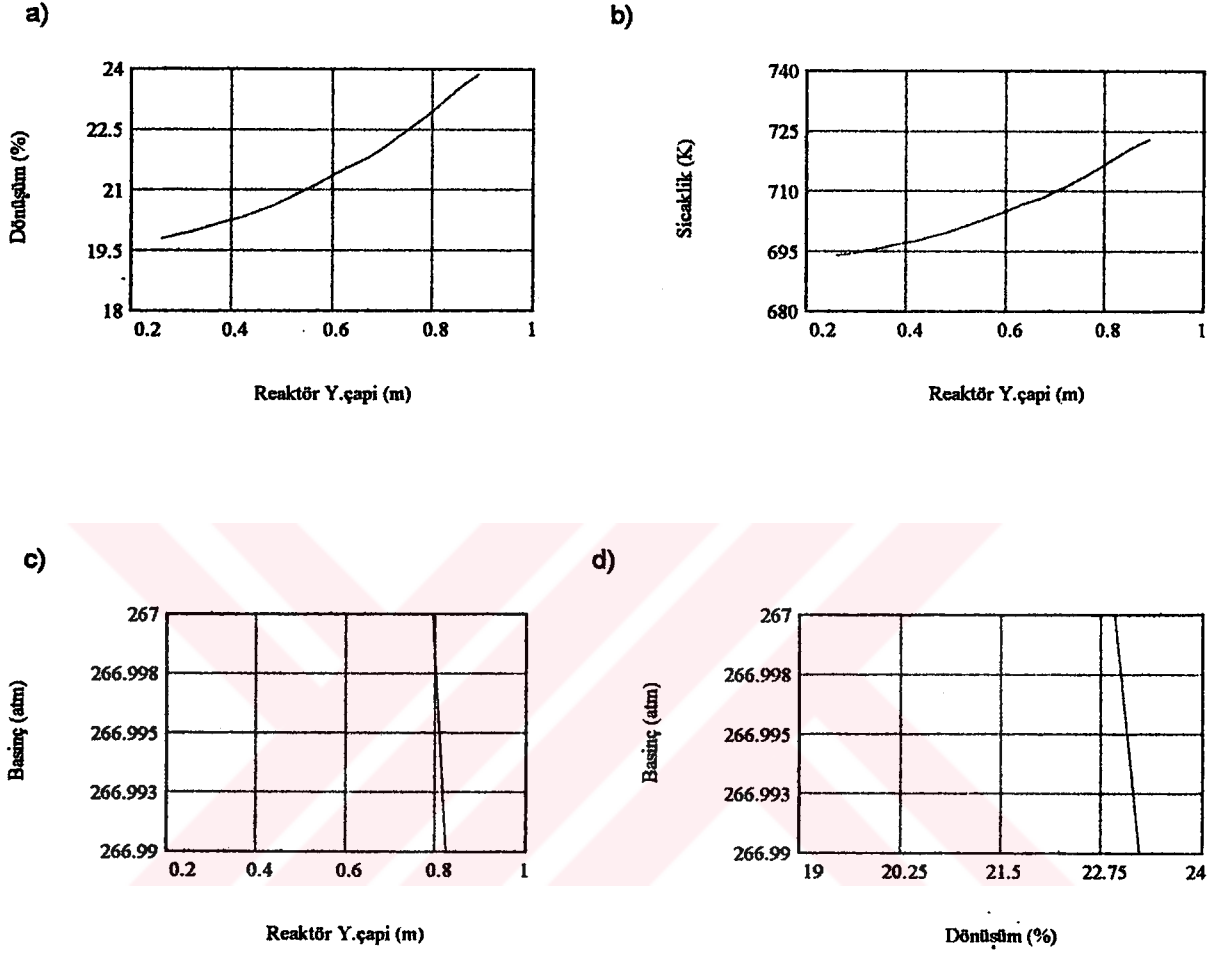
$$T_{in} = 718 \text{ K}$$

$$P_{in} = 269 \text{ atm}$$

$$L = 2.59 \text{ m}$$

$$f = 1.0$$

- a) Reaktör boyunca dönüşüm profili
 b) Reaktör boyunca sıcaklık profili
 c) Reaktör boyunca basınç profili
 d) Dönüşümüne göre reaktördeki basınç



Şekil 5.3. Üçüncü yatakta reaktör y.çapı boyunca sıcaklık,dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1981$$

$$T_{in} = 694 \text{ K}$$

$$P_{in} = 267 \text{ atm}$$

$$r_1 = 0.2585 \text{ m}$$

$$r_2 = 0.8850 \text{ m}$$

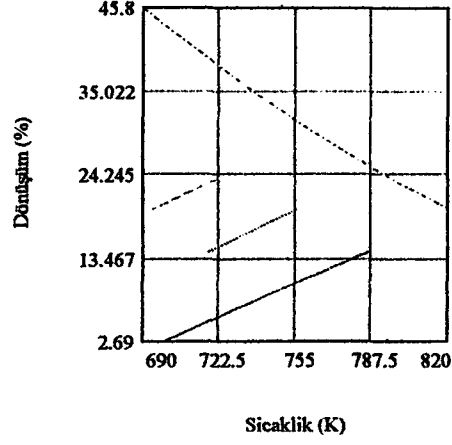
$$f = 1.0$$

a)Reaktör y.çapına göre dönüşüm profili

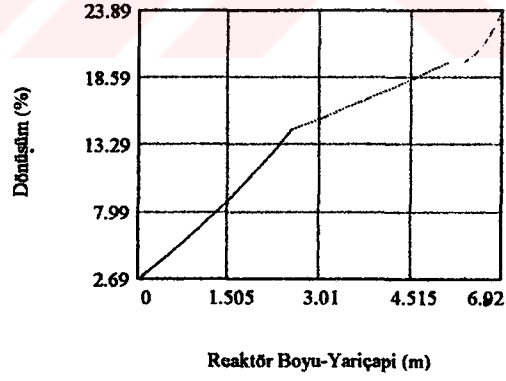
b)Reaktör y.çapına göre sıcaklık profili

c)Reaktör y.çapına göre basınç profili

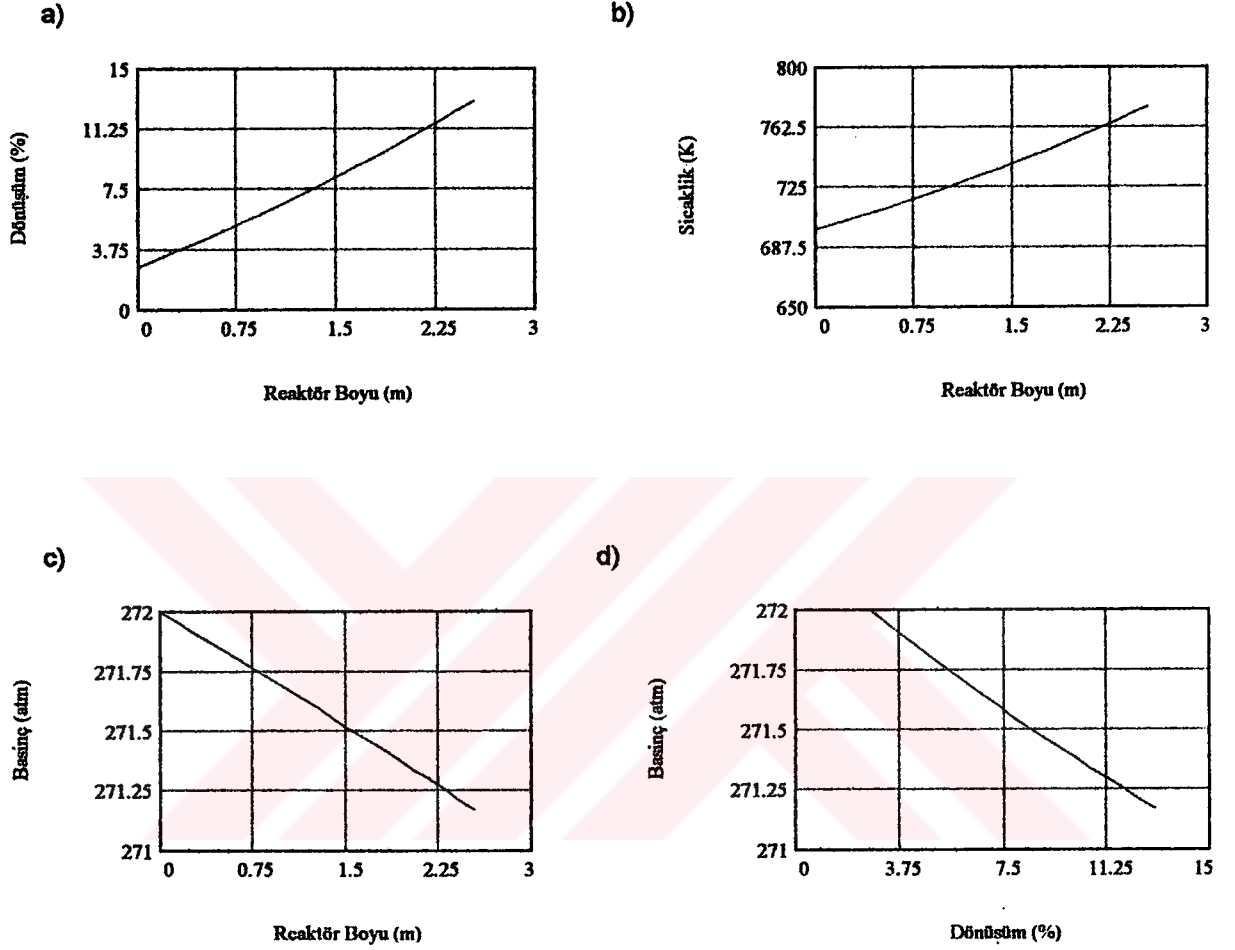
d)Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 5.4. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği
f = 1.0



Şekil 5.5. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda da X-L, X-r grafiği
f = 1.0



Şekil 6.1. Birinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.02689$$

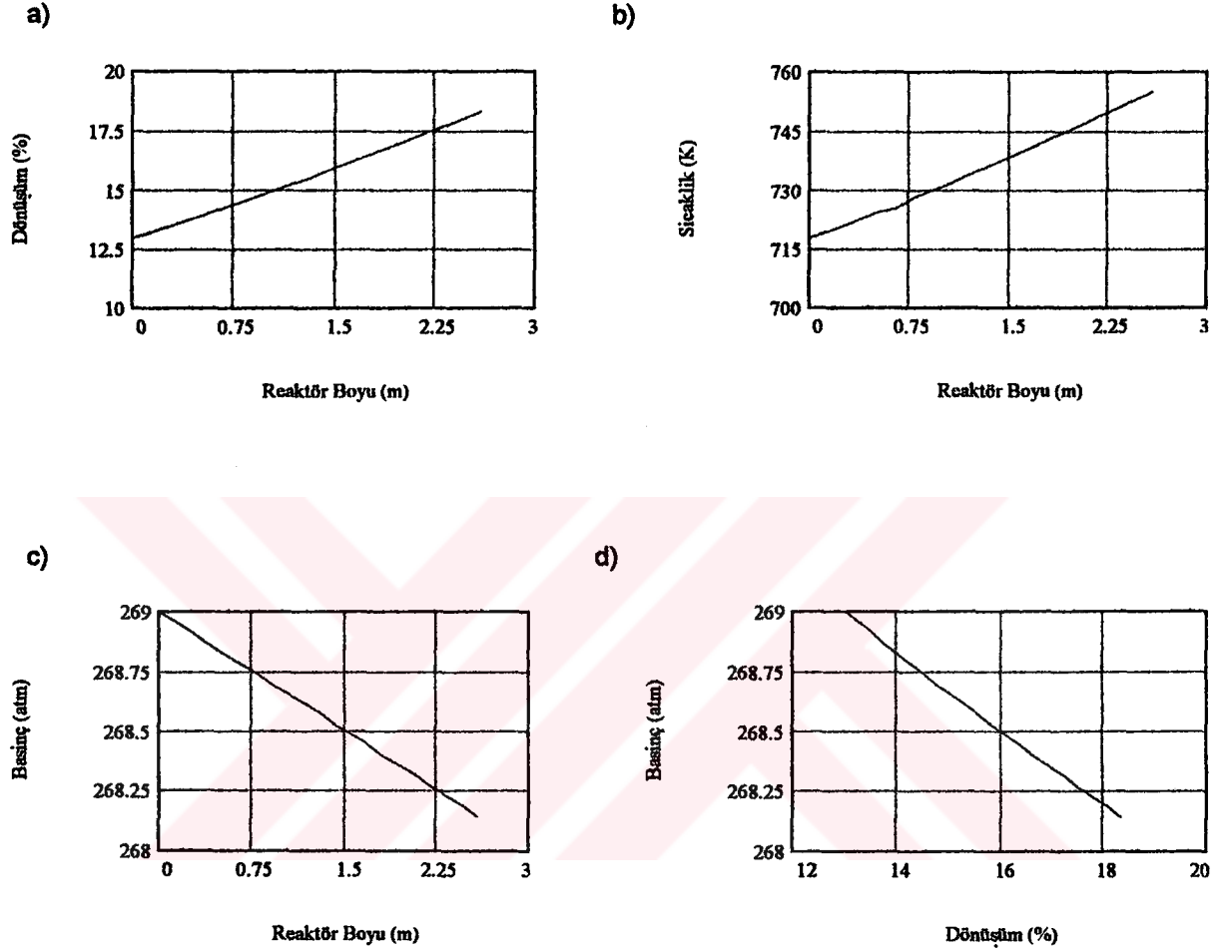
$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

$$f = 0.9$$

- a) Reaktör boyunca dönüşüm profili
 b) Reaktör boyunca sıcaklık profili
 c) Reaktör boyunca basınç profili
 d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 6.2. İkinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1301$$

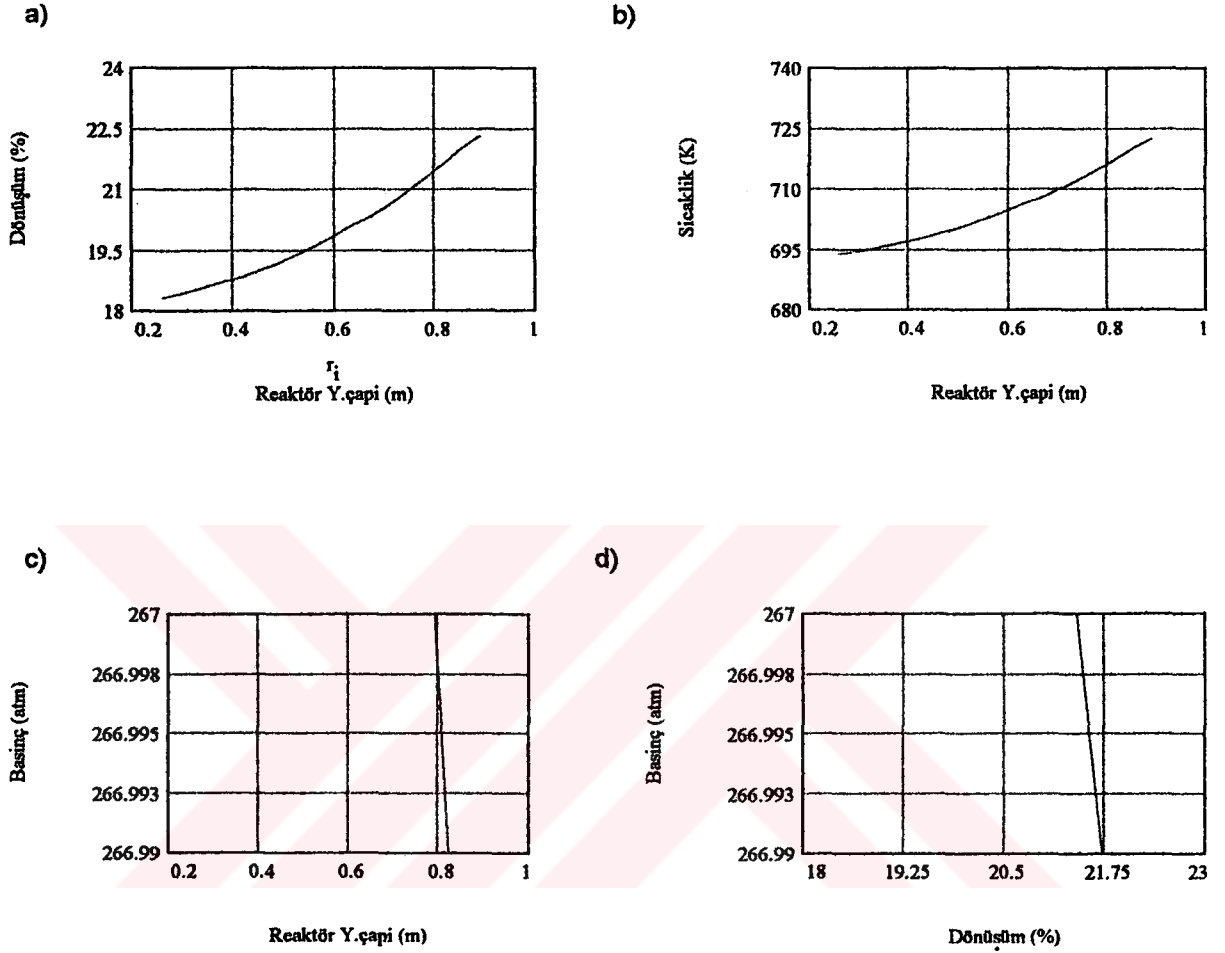
$$T_{in} = 718 \text{ K}$$

$$P_{in} = 269 \text{ atm}$$

$$L = 2.59 \text{ m}$$

$$f = 0.9$$

- a) Reaktör boyunca dönüşüm profili
 b) Reaktör boyunca sıcaklık profili
 c) Reaktör boyunca basınç profili
 d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 6.3. Üçüncü yatakta reaktör y.çapı boyunca sıcaklık,dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1834$$

$$T_{in} = 694 \text{ K}$$

$$P_{in} = 267 \text{ atm}$$

$$r_1 = 0.2585 \text{ m}$$

$$r_2 = 0.8850 \text{ m}$$

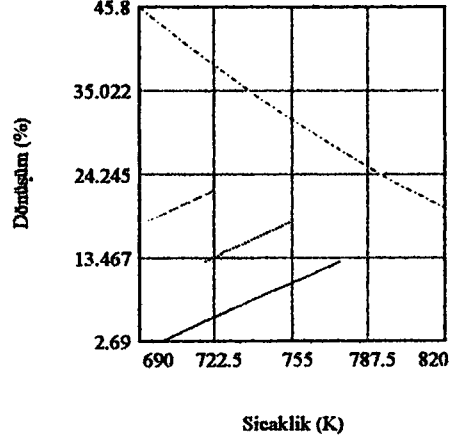
$$f = 0.9$$

a) Reaktör y.çapına göre dönüşüm profili

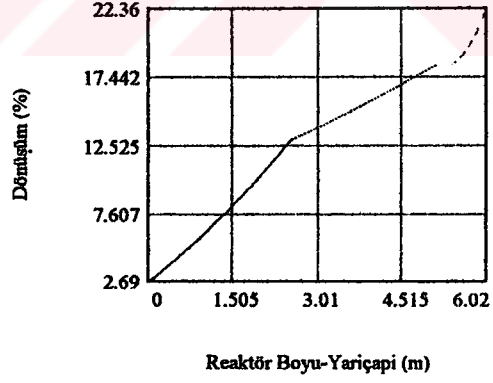
b) Reaktör y.çapına göre sıcaklık profili

c) Reaktör y.çapına göre basınç profili

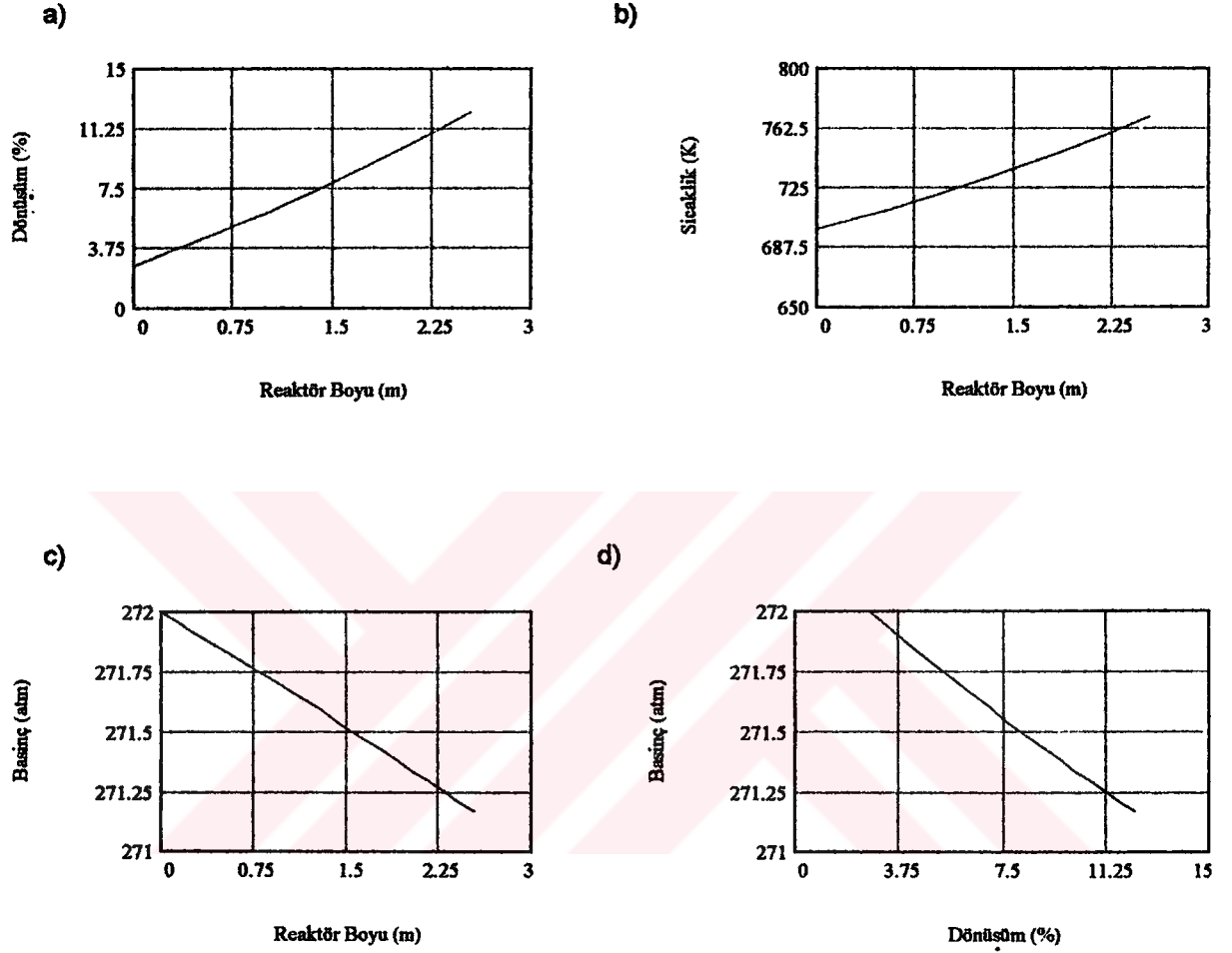
d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 6.4. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği
f = 0.9



Şekil 6.5. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda da X-L, X-r grafiği
f = 0.9



Şekil 7.1. Birinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.02689$$

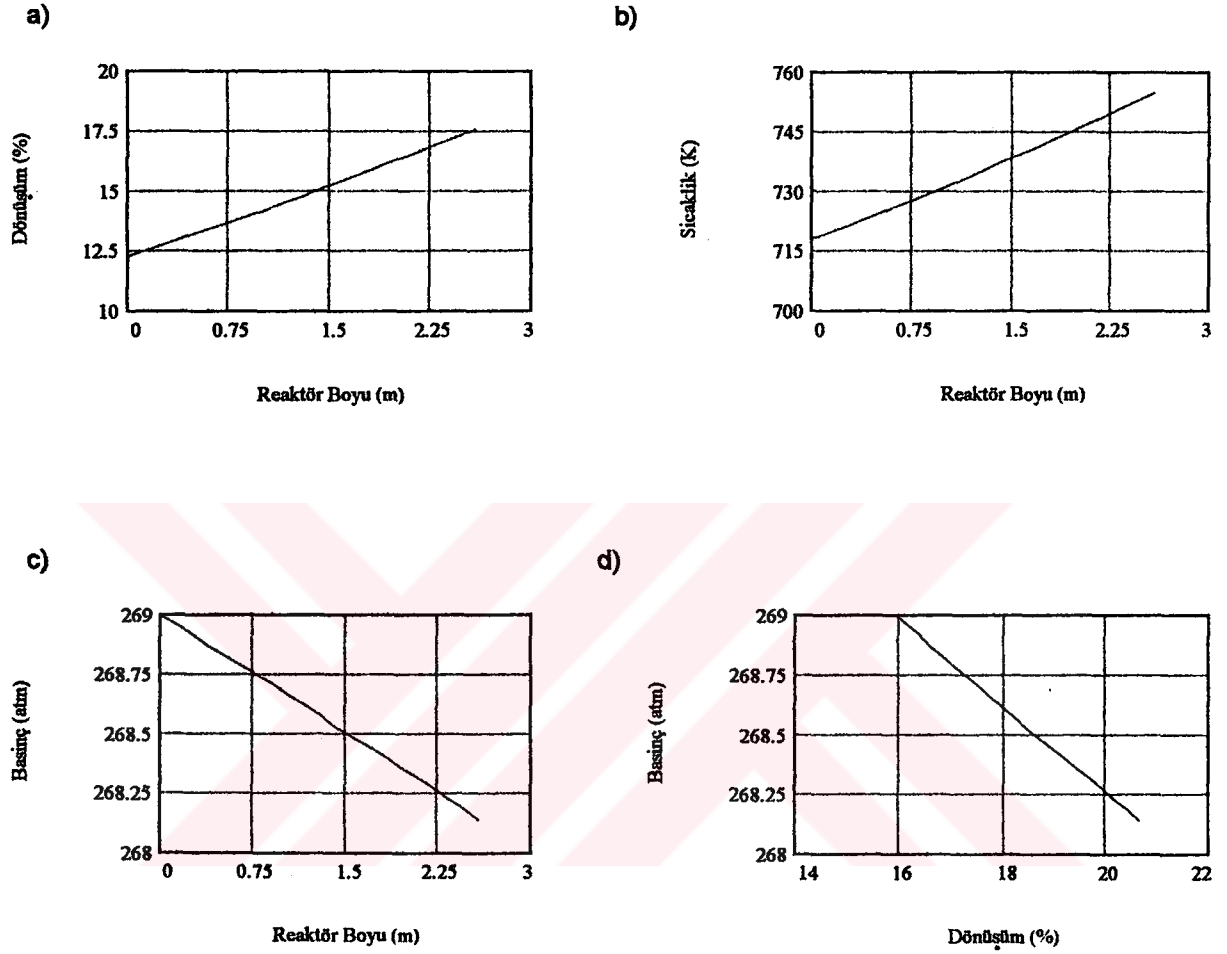
$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

$$f = 0.85$$

- a) Reaktör boyunca dönüşüm profili
 b) Reaktör boyunca sıcaklık profili
 c) Reaktör boyunca basınç profili
 d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 7.2. İkinci yatak için sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1230$$

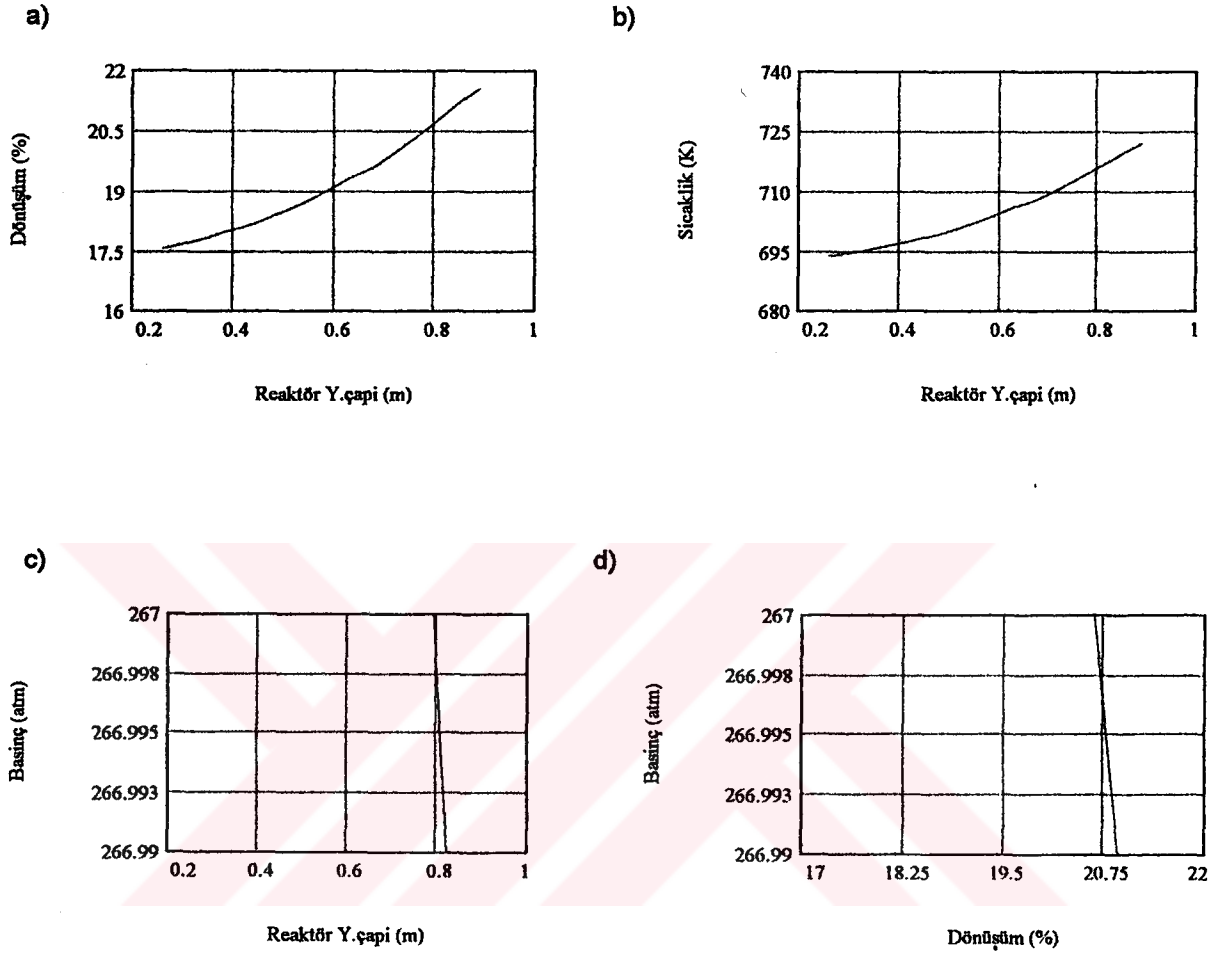
$$T_{in} = 718 \text{ K}$$

$$P_{in} = 269 \text{ atm}$$

$$L = 2.59 \text{ m}$$

$$f = 0.85$$

- a) Reaktör boyunca dönüşüm profili
 b) Reaktör boyunca sıcaklık profili
 c) Reaktör boyunca basınç profili
 d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 7.3. Üçüncü yatakta reaktör y.çapı boyunca sıcaklık, dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.1760$$

$$T_{in} = 694 \text{ K}$$

$$P_{in} = 267 \text{ atm}$$

$$r_1 = 0.2585 \text{ m}$$

$$r_2 = 0.8850 \text{ m}$$

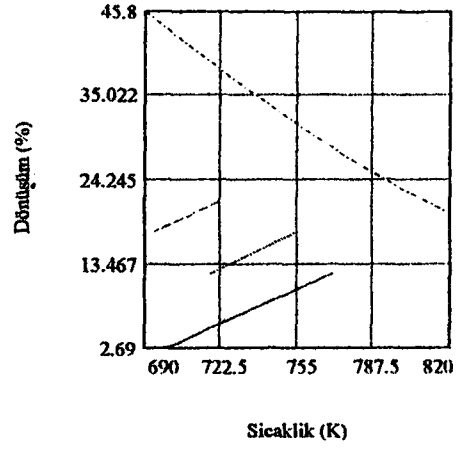
$$f = 0.85$$

a) Reaktör y.çapına göre dönüşüm profili

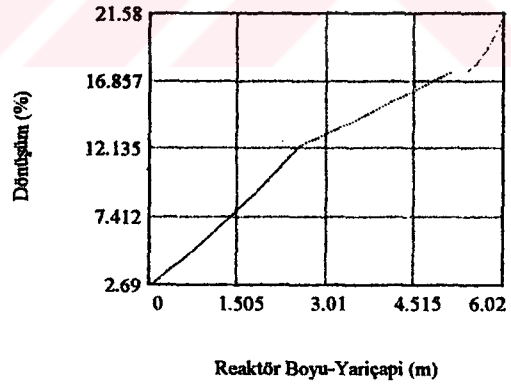
b) Reaktör y.çapına göre sıcaklık profili

c) Reaktör y.çapına göre basınç profili

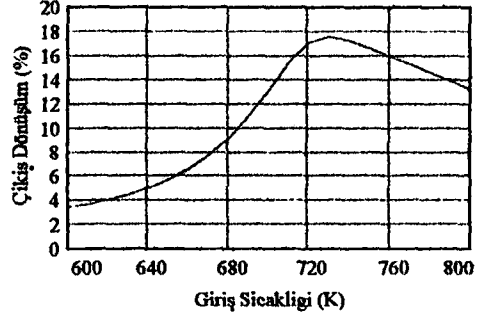
d) Dönüşüme göre reaktördeki basınç



Şekil 7.4. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda X-T grafiği
 $f = 0.85$



Şekil 7.5. Birinci, ikinci ve üçüncü yataklarda da X-L, X-r grafiği
 $f = 0.85$



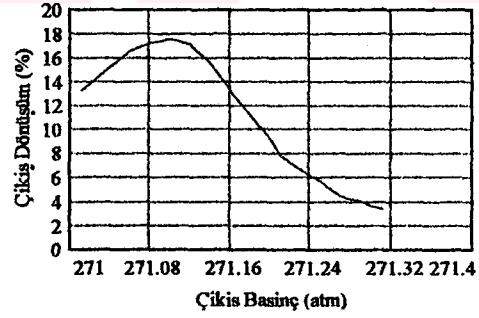
Şekil 8.1. Birinci yatak için her bir giriş sıcaklığına karşılık gelen çıkış dönüşüm profili

$$X_{in} = 0.02689$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

$$f = 0.90$$



Şekil 8.2 . Birinci yatak için her bir çıkış basınca karşılık gelen çıkış dönüşüm profili

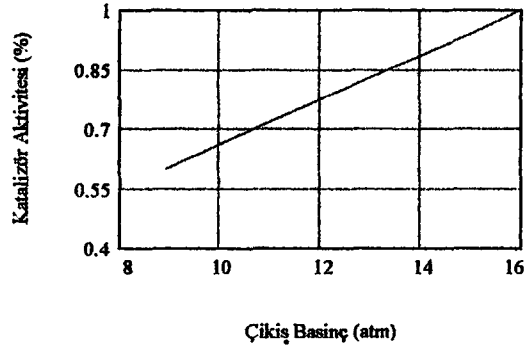
$$X_{in} = 0.02689$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

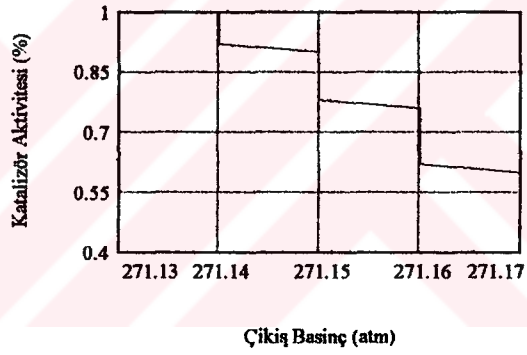
$$L = 2.54 \text{ m}$$

$$f = 0.90$$

a)



b)



Şekil 9.1. Birinci yatakta değişik katalizör aktivite katsayısı için çıkış dönüşüm ve basınç profilleri

$$X_{in} = 0.00$$

$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

a) Katalizör aktivitesi-çıkış dönüşüm grafiği

b) Katalizör aktivitesi-çıkış basınç grafiği

Tablo-E.1.1: Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.00
 T_{in}=699 K
 P_{in}=272 atm
 L=2.54 m
 f=1.0

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.00	0.00	699.00	272.00
0.06	0.35	701.51	271.98
0.13	0.70	704.01	271.96
0.19	1.05	706.51	271.94
0.25	1.40	709.01	271.92
0.32	1.75	711.52	271.90
0.38	2.10	714.04	271.88
0.44	2.45	716.57	271.86
0.51	2.81	719.13	271.84
0.57	3.16	721.70	271.82
0.64	3.52	724.29	271.80
0.70	3.88	726.91	271.78
0.76	4.25	729.56	271.76
0.83	4.62	732.24	271.74
0.89	4.99	734.96	271.72
0.95	5.37	737.71	271.70
1.02	5.75	740.49	271.67
1.08	6.13	743.32	271.65
1.14	6.53	746.19	271.63
1.21	6.92	749.10	271.61
1.27	7.32	752.06	271.59
1.33	7.73	755.06	271.57
1.40	8.14	758.11	271.55
1.46	8.56	761.21	271.53
1.52	8.98	764.36	271.50
1.59	9.41	767.55	271.48
1.65	9.85	770.79	271.46
1.71	10.29	774.07	271.44
1.78	10.73	777.40	271.42
1.84	11.18	780.76	271.40
1.90	11.63	784.15	271.37
1.97	12.08	787.56	271.35
2.03	12.53	790.99	271.33
2.10	12.99	794.41	271.31
2.16	13.44	797.83	271.28
2.22	13.88	801.21	271.26
2.29	14.32	804.55	271.24
2.35	14.75	807.82	271.22
2.41	15.16	810.99	271.19
2.48	15.56	814.06	271.17
2.54	15.94	816.98	271.15

Tablo-E.1.2: İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.1594
 T_{in}=718 K
 P_{in}=269 atm
 L=2.59
 f=1.0

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)

0.00	15.94	718.00	269.00
0.06	16.05	718.75	268.98
0.13	16.15	719.50	268.96
0.19	16.26	720.25	268.94
0.26	16.37	721.01	268.92
0.32	16.48	721.78	268.90
0.39	16.59	722.55	268.87
0.45	16.70	723.32	268.85
0.52	16.81	724.10	268.83
0.58	16.92	724.89	268.81
0.65	17.03	725.67	268.79
0.71	17.14	726.47	268.77
0.78	17.26	727.27	268.75
0.84	17.37	728.07	268.73
0.91	17.49	728.88	268.71
0.97	17.60	729.69	268.68
1.04	17.72	730.51	268.66
1.10	17.84	731.33	268.64
1.17	17.95	732.16	268.62
1.23	18.07	732.99	268.60
1.30	18.19	733.82	268.58
1.36	18.31	734.66	268.56
1.42	18.43	735.51	268.53
1.49	18.55	736.36	268.51
1.55	18.67	737.21	268.49
1.62	18.79	738.06	268.47
1.68	18.91	738.92	268.45
1.75	19.04	739.79	268.43
1.81	19.16	740.66	268.41
1.88	19.28	741.53	268.38
1.94	19.41	742.40	268.36
2.01	19.53	743.28	268.34
2.07	19.66	744.16	268.32
2.14	19.78	745.04	268.30
2.20	19.91	745.93	268.28
2.27	20.04	746.82	268.25
2.33	20.16	747.71	268.23
2.40	20.29	748.60	268.21
2.46	20.42	749.49	268.19
2.53	20.54	750.39	268.17
2.59	20.67	751.29	268.14

Tablo-E.1.3:Üçüncü yatak için,reaktör y.çapı boyunca dönüşüm sıcaklık ve basınç değerleri

Xin=0.2067
 Tin=694 K
 Pin=267 atm
 r1=0.2585 m
 r2=0.8850 m
 f=1.0

r(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.26	20.67	694.00	267.00
0.27	20.71	694.28	267.00
0.29	20.75	694.58	267.00
0.31	20.79	694.89	267.00
0.32	20.84	695.22	267.00
0.34	20.89	695.57	267.00
0.35	20.94	695.94	267.00
0.37	20.99	696.33	267.00
0.38	21.05	696.73	267.00
0.40	21.11	697.16	267.00
0.42	21.17	697.60	267.00
0.43	21.24	698.06	267.00
0.45	21.30	698.54	267.00
0.46	21.37	699.04	267.00
0.48	21.45	699.57	267.00
0.49	21.52	700.11	267.00
0.51	21.60	700.67	267.00
0.52	21.68	701.26	267.00
0.54	21.77	701.86	267.00
0.56	21.85	702.49	267.00
0.57	21.95	703.14	267.00
0.59	22.04	703.81	267.00
0.60	22.14	704.51	267.00
0.62	22.24	705.22	267.00
0.63	22.34	705.97	267.00
0.65	22.45	706.73	267.00
0.67	22.56	707.52	267.00
0.68	22.67	708.34	267.00
0.70	22.79	709.18	267.00
0.71	22.91	710.04	267.00
0.73	23.03	710.94	267.00
0.74	23.16	711.86	267.00
0.76	23.29	712.80	267.00
0.78	23.43	713.78	267.00
0.79	23.57	714.78	267.00
0.81	23.71	715.81	267.00
0.82	23.86	716.86	266.99
0.84	24.01	717.95	266.99
0.85	24.17	719.06	266.99
0.87	24.33	720.21	266.99
0.89	24.49	721.38	266.99

Tablo-E.2.1: Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.00
 T_{in}=699 K
 P_{in}=272 atm
 L=2.54 m
 f=0.9

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.00	0.00	699.00	272.00
0.06	0.32	701.26	271.98
0.13	0.63	703.51	271.96
0.19	0.95	705.76	271.94
0.25	1.26	708.01	271.92
0.32	1.58	710.26	271.90
0.38	1.89	712.52	271.88
0.44	2.21	714.79	271.86
0.51	2.52	717.08	271.84
0.57	2.84	719.37	271.82
0.64	3.16	721.69	271.80
0.70	3.49	724.02	271.78
0.76	3.81	726.37	271.76
0.83	4.14	728.75	271.74
0.89	4.47	731.15	271.72
0.95	4.80	733.57	271.70
1.02	5.14	736.03	271.68
1.08	5.48	738.51	271.66
1.14	5.82	741.02	271.63
1.21	6.17	743.56	271.61
1.27	6.52	746.14	271.59
1.33	6.87	748.75	271.57
1.40	7.23	751.40	271.55
1.46	7.60	754.08	271.53
1.52	7.96	756.80	271.51
1.59	8.34	759.55	271.49
1.65	8.71	762.34	271.46
1.71	9.09	765.17	271.44
1.78	9.48	768.03	271.42
1.84	9.87	770.93	271.40
1.90	10.26	773.86	271.38
1.97	10.65	776.81	271.36
2.03	11.05	779.79	271.33
2.10	11.45	782.80	271.31
2.16	11.85	785.81	271.29
2.22	12.25	788.83	271.27
2.29	12.65	791.85	271.24
2.35	13.05	794.86	271.22
2.41	13.44	797.85	271.20
2.48	13.83	800.80	271.18
2.54	14.21	803.70	271.15

Tablo-E.2.2: İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

Xin=0.1421
 Tin=718 K
 Pin=269 atm
 Lin=2.59 m
 f=0.9

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.00	14.21	718.00	269.00
0.06	14.32	718.76	268.98
0.13	14.43	719.52	268.96
0.19	14.54	720.28	268.94
0.26	14.65	721.05	268.92
0.32	14.76	721.83	268.90
0.39	14.87	722.61	268.87
0.45	14.98	723.40	268.85
0.52	15.09	724.19	268.83
0.58	15.21	724.98	268.81
0.65	15.32	725.78	268.79
0.71	15.44	726.59	268.77
0.78	15.55	727.39	268.75
0.84	15.67	728.21	268.73
0.91	15.79	729.03	268.71
0.97	15.90	729.85	268.68
1.04	16.02	730.68	268.66
1.10	16.14	731.51	268.64
1.17	16.26	732.35	268.62
1.23	16.38	733.19	268.60
1.30	16.50	734.04	268.58
1.36	16.62	734.89	268.56
1.42	16.74	735.74	268.53
1.49	16.87	736.60	268.51
1.55	16.99	737.47	268.49
1.62	17.11	738.34	268.47
1.68	17.24	739.21	268.45
1.75	17.36	740.08	268.43
1.81	17.49	740.96	268.41
1.88	17.61	741.85	268.38
1.94	17.74	742.73	268.36
2.01	17.87	743.62	268.34
2.07	18.00	744.52	268.32
2.14	18.12	745.41	268.30
2.20	18.25	746.31	268.28
2.27	18.38	747.21	268.25
2.33	18.51	748.12	268.23
2.40	18.64	749.02	268.21
2.46	18.77	749.93	268.19
2.53	18.90	750.84	268.17
2.59	19.03	751.75	268.14

Tablo-E.2.3:Üçüncü yatak için,reaktör y.çapı boyunca dönüşüm sıcaklık ve basınç değerleri

Xin=0.1903
 Tin=694 K
 Pin=267 atm
 r1=0.2585 m
 r2=0.8850 m
 f=0.9

r(m)	X(%)	T(K)	P(atm)

0.26	19.03	694.00	267.00
0.27	19.07	694.28	267.00
0.29	19.11	694.57	267.00
0.31	19.15	694.89	267.00
0.32	19.20	695.22	267.00
0.34	19.25	695.56	267.00
0.35	19.30	695.93	267.00
0.37	19.35	696.32	267.00
0.38	19.41	696.72	267.00
0.40	19.47	697.14	267.00
0.42	19.53	697.58	267.00
0.43	19.60	698.04	267.00
0.45	19.66	698.52	267.00
0.46	19.73	699.02	267.00
0.48	19.81	699.54	267.00
0.49	19.88	700.08	267.00
0.51	19.96	700.64	267.00
0.52	20.04	701.22	267.00
0.54	20.13	701.82	267.00
0.56	20.21	702.44	267.00
0.57	20.30	703.09	267.00
0.59	20.40	703.76	267.00
0.60	20.49	704.45	267.00
0.62	20.59	705.16	267.00
0.63	20.70	705.90	267.00
0.65	20.80	706.66	267.00
0.67	20.91	707.44	267.00
0.68	21.03	708.25	267.00
0.70	21.14	709.09	267.00
0.71	21.27	709.95	267.00
0.73	21.39	710.84	267.00
0.74	21.52	711.75	267.00
0.76	21.65	712.69	267.00
0.78	21.78	713.66	267.00
0.79	21.92	714.65	267.00
0.81	22.07	715.67	267.00
0.82	22.21	716.72	266.99
0.84	22.37	717.80	266.99
0.85	22.52	718.91	266.99
0.87	22.68	720.05	266.99
0.89	22.84	721.22	266.99

Tablo-E.3.1: Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.00
 T_{in}=699 K
 P_{in}=272 atm
 L=2.54 m
 f=0.85

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)

0.00	0.00	699.00	272.00
0.06	0.30	701.13	271.98
0.13	0.60	703.26	271.96
0.19	0.89	705.38	271.94
0.25	1.19	707.51	271.92
0.32	1.49	709.63	271.90
0.38	1.79	711.77	271.88
0.44	2.08	713.91	271.86
0.51	2.38	716.06	271.84
0.57	2.68	718.22	271.82
0.64	2.98	720.40	271.80
0.70	3.29	722.59	271.78
0.76	3.59	724.80	271.76
0.83	3.90	727.02	271.74
0.89	4.21	729.27	271.72
0.95	4.52	731.54	271.70
1.02	4.84	733.83	271.68
1.08	5.15	736.15	271.66
1.14	5.47	738.49	271.63
1.21	5.80	740.86	271.61
1.27	6.13	743.25	271.59
1.33	6.46	745.68	271.57
1.40	6.79	748.13	271.55
1.46	7.13	750.62	271.53
1.52	7.47	753.14	271.51
1.59	7.81	755.68	271.49
1.65	8.16	758.26	271.47
1.71	8.52	760.88	271.44
1.78	8.87	763.52	271.42
1.84	9.23	766.19	271.40
1.90	9.59	768.89	271.38
1.97	9.96	771.62	271.36
2.03	10.33	774.38	271.34
2.10	10.70	777.16	271.31
2.16	11.07	779.96	271.29
2.22	11.45	782.77	271.27
2.29	11.82	785.59	271.25
2.35	12.19	788.41	271.22
2.41	12.57	791.23	271.20
2.48	12.94	794.04	271.18
2.54	13.30	796.82	271.16

Tablo-E.3.2:İkinci yatak için,reaktör boyunca dönüşüm,sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.1330
 T_{in}=718 K
 P_{in}=269 atm
 L=2.59 m
 f=0.85

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.00	13.30	718.00	269.00
0.06	13.41	718.76	268.98
0.13	13.52	719.53	268.96
0.19	13.63	720.30	268.94
0.26	13.74	721.08	268.92
0.32	13.85	721.86	268.90
0.39	13.97	722.65	268.87
0.45	14.08	723.44	268.85
0.52	14.19	724.23	268.83
0.58	14.31	725.03	268.81
0.65	14.42	725.84	268.79
0.71	14.54	726.65	268.77
0.78	14.66	727.47	268.75
0.84	14.77	728.29	268.73
0.91	14.89	729.11	268.71
0.97	15.01	729.94	268.68
1.04	15.13	730.77	268.66
1.10	15.25	731.61	268.64
1.17	15.37	732.45	268.62
1.23	15.49	733.30	268.60
1.30	15.61	734.15	268.58
1.36	15.74	735.01	268.56
1.42	15.86	735.87	268.53
1.49	15.98	736.74	268.51
1.55	16.11	737.61	268.49
1.62	16.23	738.48	268.47
1.68	16.36	739.36	268.45
1.75	16.48	740.24	268.43
1.81	16.61	741.13	268.41
1.88	16.74	742.02	268.38
1.94	16.86	742.91	268.36
2.01	16.99	743.81	268.34
2.07	17.12	744.71	268.32
2.14	17.25	745.61	268.30
2.20	17.38	746.51	268.27
2.27	17.51	747.42	268.25
2.33	17.64	748.33	268.23
2.40	17.77	749.24	268.21
2.46	17.90	750.16	268.19
2.53	18.03	751.08	268.17
2.59	18.16	751.99	268.14

Tablo-E.3.3:Üçüncü yatak için,reaktör y.çapı boyunca dönüşüm sıcaklık ve basınç değerleri

Xin=0.1816
 Tin=694 K
 Pin=267 atm
 r1=0.2585 m
 r2=0.8850 m
 f=0.85

r(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.26	18.16	694.00	267.00
0.27	18.20	694.28	267.00
0.29	18.24	694.57	267.00
0.31	18.28	694.88	267.00
0.32	18.33	695.21	267.00
0.34	18.38	695.56	267.00
0.35	18.43	695.93	267.00
0.37	18.48	696.31	267.00
0.38	18.54	696.71	267.00
0.40	18.60	697.13	267.00
0.42	18.66	697.57	267.00
0.43	18.73	698.03	267.00
0.45	18.79	698.51	267.00
0.46	18.86	699.00	267.00
0.48	18.94	699.52	267.00
0.49	19.01	700.06	267.00
0.51	19.09	700.62	267.00
0.52	19.17	701.20	267.00
0.54	19.26	701.80	267.00
0.56	19.34	702.42	267.00
0.57	19.43	703.06	267.00
0.59	19.53	703.73	267.00
0.60	19.62	704.41	267.00
0.62	19.72	705.12	267.00
0.63	19.83	705.86	267.00
0.65	19.93	706.62	267.00
0.67	20.04	707.40	267.00
0.68	20.16	708.21	267.00
0.70	20.27	709.04	267.00
0.71	20.39	709.90	267.00
0.73	20.52	710.78	267.00
0.74	20.64	711.69	267.00
0.76	20.78	712.62	267.00
0.78	20.91	713.59	267.00
0.79	21.05	714.58	267.00
0.81	21.19	715.60	267.00
0.82	21.34	716.64	266.99
0.84	21.49	717.72	266.99
0.85	21.65	718.82	266.99
0.87	21.80	719.96	266.99
0.89	21.97	721.12	266.99

Tablo-E.4.1: Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.00
 T_{in}=699 K
 P_{in}=272 atm
 L=2.54 m
 f=0.80

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.00	0.00	699.00	272.00
0.06	0.28	701.01	271.98
0.13	0.56	703.01	271.96
0.19	0.84	705.01	271.94
0.25	1.12	707.01	271.92
0.32	1.40	709.01	271.90
0.38	1.68	711.01	271.88
0.44	1.96	713.02	271.86
0.51	2.24	715.04	271.84
0.57	2.52	717.07	271.82
0.64	2.81	719.11	271.80
0.70	3.09	721.16	271.78
0.76	3.38	723.23	271.76
0.83	3.66	725.31	271.74
0.89	3.95	727.41	271.72
0.95	4.24	729.52	271.70
1.02	4.54	731.66	271.68
1.08	4.83	733.82	271.66
1.14	5.13	735.99	271.64
1.21	5.43	738.19	271.61
1.27	5.74	740.41	271.59
1.33	6.04	742.66	271.57
1.40	6.35	744.93	271.55
1.46	6.67	747.23	271.53
1.52	6.98	749.55	271.51
1.59	7.30	751.90	271.49
1.65	7.62	754.28	271.47
1.71	7.95	756.68	271.45
1.78	8.28	759.11	271.42
1.84	8.61	761.57	271.40
1.90	8.94	764.06	271.38
1.97	9.28	766.57	271.36
2.03	9.62	769.10	271.34
2.10	9.96	771.66	271.32
2.16	10.31	774.23	271.29
2.22	10.65	776.83	271.27
2.29	11.00	779.44	271.25
2.35	11.35	782.06	271.23
2.41	11.70	784.68	271.21
2.48	12.05	787.31	271.18
2.54	12.40	789.93	271.16

Tablo-E.4.2: İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.1240
 T_{in}=718 K
 P_{in}=269 atm
 L=2.59 m
 f=0.8

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)

0.00	12.40	718.00	269.00
0.06	12.51	718.77	268.98
0.13	12.62	719.54	268.96
0.19	12.73	720.31	268.94
0.26	12.84	721.09	268.92
0.32	12.96	721.88	268.90
0.39	13.07	722.67	268.87
0.45	13.18	723.47	268.85
0.52	13.30	724.26	268.83
0.58	13.41	725.07	268.81
0.65	13.53	725.88	268.79
0.71	13.65	726.69	268.77
0.78	13.76	727.51	268.75
0.84	13.88	728.33	268.73
0.91	14.00	729.16	268.71
0.97	14.12	729.99	268.68
1.04	14.24	730.83	268.66
1.10	14.36	731.67	268.64
1.17	14.48	732.52	268.62
1.23	14.61	733.37	268.60
1.30	14.73	734.22	268.58
1.36	14.85	735.08	268.56
1.42	14.97	735.95	268.53
1.49	15.10	736.82	268.51
1.55	15.22	737.69	268.49
1.62	15.35	738.56	268.47
1.68	15.48	739.44	268.45
1.75	15.60	740.33	268.43
1.81	15.73	741.22	268.41
1.88	15.86	742.11	268.38
1.94	15.99	743.01	268.36
2.01	16.11	743.90	268.34
2.07	16.24	744.81	268.32
2.14	16.37	745.71	268.30
2.20	16.50	746.62	268.27
2.27	16.63	747.53	268.25
2.33	16.77	748.44	268.23
2.40	16.90	749.36	268.21
2.46	17.03	750.28	268.19
2.53	17.16	751.20	268.17
2.59	17.29	752.12	268.14

Tablo-E.4.3:Üçüncü yatak için,reaktör y.çapı boyunca dönüşüm sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.1729
 T_{in}=694 K
 P_{in}=267 atm
 r₁=0.2585 m
 r₂=0.8850 m
 f=0.80

r(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.26	17.29	694.00	267.00
0.27	17.33	694.28	267.00
0.29	17.37	694.57	267.00
0.31	17.41	694.88	267.00
0.32	17.46	695.21	267.00
0.34	17.51	695.55	267.00
0.35	17.56	695.92	267.00
0.37	17.61	696.30	267.00
0.38	17.67	696.70	267.00
0.40	17.73	697.11	267.00
0.42	17.79	697.55	267.00
0.43	17.85	698.01	267.00
0.45	17.92	698.48	267.00
0.46	17.99	698.98	267.00
0.48	18.06	699.49	267.00
0.49	18.14	700.02	267.00
0.51	18.22	700.58	267.00
0.52	18.30	701.15	267.00
0.54	18.38	701.75	267.00
0.56	18.47	702.37	267.00
0.57	18.56	703.01	267.00
0.59	18.65	703.67	267.00
0.60	18.75	704.35	267.00
0.62	18.85	705.06	267.00
0.63	18.95	705.79	267.00
0.65	19.06	706.54	267.00
0.67	19.17	707.32	267.00
0.68	19.28	708.12	267.00
0.70	19.39	708.94	267.00
0.71	19.51	709.79	267.00
0.73	19.64	710.67	267.00
0.74	19.76	711.57	267.00
0.76	19.89	712.50	267.00
0.78	20.03	713.46	267.00
0.79	20.17	714.44	267.00
0.81	20.31	715.45	267.00
0.82	20.46	716.49	266.99
0.84	20.61	717.56	266.99
0.85	20.76	718.66	266.99
0.87	20.92	719.78	266.99
0.89	21.08	720.93	266.99

Tablo-E.5.1: Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.02689
 T_{in}=699 K
 P_{in}=272 atm
 L=2.54 m
 f=1.0

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)

0.00	2.69	699.00	272.00
0.06	2.93	700.72	271.98
0.13	3.17	702.46	271.96
0.19	3.41	704.20	271.94
0.25	3.65	705.97	271.92
0.32	3.90	707.75	271.90
0.38	4.15	709.55	271.88
0.44	4.40	711.36	271.86
0.51	4.65	713.20	271.84
0.57	4.90	715.05	271.82
0.64	5.16	716.93	271.80
0.70	5.42	718.83	271.78
0.76	5.68	720.75	271.76
0.83	5.95	722.69	271.74
0.89	6.22	724.66	271.72
0.95	6.49	726.66	271.70
1.02	6.76	728.68	271.68
1.08	7.04	730.73	271.66
1.14	7.32	732.81	271.64
1.21	7.61	734.92	271.62
1.27	7.90	737.05	271.59
1.33	8.19	739.22	271.57
1.40	8.49	741.42	271.55
1.46	8.79	743.66	271.53
1.52	9.09	745.92	271.51
1.59	9.40	748.22	271.49
1.65	9.71	750.56	271.47
1.71	10.03	752.92	271.45
1.78	10.35	755.33	271.43
1.84	10.68	757.77	271.40
1.90	11.00	760.24	271.38
1.97	11.34	762.74	271.36
2.03	11.67	765.28	271.34
2.10	12.01	767.85	271.32
2.16	12.36	770.45	271.30
2.22	12.70	773.07	271.27
2.29	13.05	775.72	271.25
2.35	13.41	778.39	271.23
2.41	13.76	781.08	271.21
2.48	14.11	783.77	271.19
2.54	14.46	786.47	271.16

Tablo-E.5.2: İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.1446
 T_{in}=718 K
 P_{in}=269 atm
 L=2.59 m
 f=1.0

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)

0.00	14.46	718.00	269.00
0.06	14.58	718.83	268.98
0.13	14.70	719.66	268.96
0.19	14.82	720.51	268.94
0.26	14.94	721.35	268.92
0.32	15.06	722.21	268.90
0.39	15.18	723.06	268.87
0.45	15.31	723.93	268.85
0.52	15.43	724.80	268.83
0.58	15.56	725.68	268.81
0.65	15.68	726.56	268.79
0.71	15.81	727.45	268.77
0.78	15.94	728.34	268.75
0.84	16.07	729.24	268.73
0.91	16.19	730.15	268.70
0.97	16.32	731.06	268.68
1.04	16.46	731.98	268.66
1.10	16.59	732.91	268.64
1.17	16.72	733.84	268.62
1.23	16.85	734.77	268.60
1.30	16.99	735.72	268.58
1.36	17.12	736.66	268.56
1.42	17.26	737.62	268.53
1.49	17.40	738.57	268.51
1.55	17.53	739.54	268.49
1.62	17.67	740.51	268.47
1.68	17.81	741.48	268.45
1.75	17.95	742.46	268.43
1.81	18.09	743.44	268.40
1.88	18.23	744.43	268.38
1.94	18.37	745.42	268.36
2.01	18.51	746.41	268.34
2.07	18.66	747.41	268.32
2.14	18.80	748.42	268.30
2.20	18.94	749.42	268.27
2.27	19.09	750.43	268.25
2.33	19.23	751.44	268.23
2.40	19.37	752.46	268.21
2.46	19.52	753.47	268.19
2.53	19.66	754.49	268.16
2.59	19.81	755.51	268.14

Tablo-E.5.3:Üçüncü yatak için,reaktör y.çapı boyunca dönüşüm sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.1981
 T_{in}=694 K
 P_{in}=267 atm
 r₁=0.2585 m
 r₂=0.8850 m
 f=1.0

r(m)	X(%)	T(K)	P(atm)

0.26	19.81	694.00	267.00
0.27	19.85	694.29	267.00
0.29	19.90	694.61	267.00
0.31	19.94	694.94	267.00
0.32	19.99	695.29	267.00
0.34	20.04	695.66	267.00
0.35	20.10	696.05	267.00
0.37	20.15	696.46	267.00
0.38	20.21	696.89	267.00
0.40	20.28	697.34	267.00
0.42	20.34	697.81	267.00
0.43	20.41	698.29	267.00
0.45	20.48	698.81	267.00
0.46	20.56	699.34	267.00
0.48	20.63	699.89	267.00
0.49	20.71	700.46	267.00
0.51	20.80	701.06	267.00
0.52	20.88	701.68	267.00
0.54	20.97	702.33	267.00
0.56	21.07	702.99	267.00
0.57	21.16	703.68	267.00
0.59	21.26	704.40	267.00
0.60	21.37	705.14	267.00
0.62	21.47	705.90	267.00
0.63	21.59	706.69	267.00
0.65	21.70	707.51	267.00
0.67	21.82	708.35	267.00
0.68	21.94	709.22	267.00
0.70	22.06	710.11	267.00
0.71	22.19	711.04	267.00
0.73	22.33	711.99	267.00
0.74	22.46	712.97	267.00
0.76	22.60	713.99	267.00
0.78	22.75	715.03	267.00
0.79	22.90	716.10	267.00
0.81	23.05	717.20	267.00
0.82	23.21	718.33	266.99
0.84	23.37	719.50	266.99
0.85	23.54	720.70	266.99
0.87	23.71	721.92	266.99
0.89	23.89	723.18	266.99

Tablo-E.6.1: Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.02689
 T_{in}=699 K
 P_{in}=272 atm
 L=2.54 m
 f=0.9

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.00	2.69	699.00	272.00
0.06	2.90	700.55	271.98
0.13	3.12	702.11	271.96
0.19	3.34	703.68	271.94
0.25	3.55	705.26	271.92
0.32	3.77	706.85	271.90
0.38	4.00	708.46	271.88
0.44	4.22	710.08	271.86
0.51	4.44	711.72	271.84
0.57	4.67	713.38	271.82
0.64	4.90	715.04	271.80
0.70	5.13	716.73	271.78
0.76	5.36	718.43	271.76
0.83	5.60	720.15	271.74
0.89	5.84	721.90	271.72
0.95	6.08	723.66	271.70
1.02	6.32	725.44	271.68
1.08	6.57	727.24	271.66
1.14	6.81	729.06	271.64
1.21	7.06	730.90	271.62
1.27	7.32	732.77	271.60
1.33	7.57	734.66	271.58
1.40	7.83	736.57	271.55
1.46	8.09	738.51	271.53
1.52	8.36	740.48	271.51
1.59	8.63	742.46	271.49
1.65	8.90	744.48	271.47
1.71	9.17	746.52	271.45
1.78	9.45	748.59	271.43
1.84	9.73	750.68	271.41
1.90	10.01	752.80	271.39
1.97	10.30	754.95	271.36
2.03	10.59	757.12	271.34
2.10	10.88	759.32	271.32
2.16	11.18	761.54	271.30
2.22	11.48	763.79	271.28
2.29	11.78	766.06	271.26
2.35	12.08	768.36	271.24
2.41	12.39	770.67	271.21
2.48	12.70	773.00	271.19
2.54	13.01	775.35	271.17

Tablo-E.6.2: İkinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.1301
 T_{in}=718 K
 P_{in}=269 atm
 L=2.59 m
 f=0.9

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.00	13.01	718.00	269.00
0.06	13.13	718.83	268.98
0.13	13.25	719.66	268.96
0.19	13.37	720.50	268.94
0.26	13.49	721.34	268.92
0.32	13.61	722.19	268.90
0.39	13.73	723.05	268.87
0.45	13.86	723.91	268.85
0.52	13.98	724.78	268.83
0.58	14.11	725.65	268.81
0.65	14.23	726.53	268.79
0.71	14.36	727.41	268.77
0.78	14.49	728.30	268.75
0.84	14.61	729.20	268.73
0.91	14.74	730.10	268.70
0.97	14.87	731.01	268.68
1.04	15.00	731.92	268.66
1.10	15.14	732.84	268.64
1.17	15.27	733.76	268.62
1.23	15.40	734.69	268.60
1.30	15.53	735.63	268.58
1.36	15.67	736.57	268.56
1.42	15.80	737.51	268.53
1.49	15.94	738.46	268.51
1.55	16.08	739.42	268.49
1.62	16.22	740.38	268.47
1.68	16.35	741.35	268.45
1.75	16.49	742.32	268.43
1.81	16.63	743.29	268.40
1.88	16.77	744.27	268.38
1.94	16.91	745.26	268.36
2.01	17.05	746.24	268.34
2.07	17.20	747.23	268.32
2.14	17.34	748.23	268.30
2.20	17.48	749.23	268.27
2.27	17.62	750.23	268.25
2.33	17.77	751.23	268.23
2.40	17.91	752.24	268.21
2.46	18.06	753.25	268.19
2.53	18.20	754.26	268.16
2.59	18.34	755.27	268.14

Tablo-E.6.3:Üçüncü yatak için,reaktör y.çapı boyunca dönüşüm sıcaklık ve basınç değerleri

Xin=0.1834
 Tin=694 K
 Pin=267 atm
 r1=0.2585 m
 r2=0.8850 m
 f=0.9

r(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.26	18.34	694.00	267.00
0.27	18.38	694.29	267.00
0.29	18.42	694.60	267.00
0.31	18.47	694.93	267.00
0.32	18.52	695.27	267.00
0.34	18.57	695.64	267.00
0.35	18.62	696.02	267.00
0.37	18.68	696.42	267.00
0.38	18.74	696.84	267.00
0.40	18.80	697.29	267.00
0.42	18.87	697.75	267.00
0.43	18.93	698.23	267.00
0.45	19.00	698.73	267.00
0.46	19.08	699.26	267.00
0.48	19.15	699.80	267.00
0.49	19.23	700.37	267.00
0.51	19.32	700.95	267.00
0.52	19.40	701.56	267.00
0.54	19.49	702.19	267.00
0.56	19.58	702.85	267.00
0.57	19.68	703.53	267.00
0.59	19.78	704.23	267.00
0.60	19.88	704.96	267.00
0.62	19.98	705.71	267.00
0.63	20.09	706.48	267.00
0.65	20.21	707.28	267.00
0.67	20.32	708.11	267.00
0.68	20.44	708.97	267.00
0.70	20.56	709.85	267.00
0.71	20.69	710.75	267.00
0.73	20.82	711.69	267.00
0.74	20.96	712.65	267.00
0.76	21.10	713.64	267.00
0.78	21.24	714.67	267.00
0.79	21.39	715.72	267.00
0.81	21.54	716.80	267.00
0.82	21.70	717.91	266.99
0.84	21.86	719.05	266.99
0.85	22.02	720.23	266.99
0.87	22.19	721.43	266.99
0.89	22.36	722.67	266.99

Tablo-E.7.1: Birinci yatak için, reaktör boyunca dönüşüm, sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.02689
 T_{in}=699 K
 P_{in}=272 atm
 L=2.54 m
 f=0.85

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.00	2.69	699.00	272.00
0.06	2.89	700.46	271.98
0.13	3.09	701.93	271.96
0.19	3.30	703.41	271.94
0.25	3.51	704.90	271.92
0.32	3.71	706.41	271.90
0.38	3.92	707.92	271.88
0.44	4.13	709.45	271.86
0.51	4.34	710.99	271.84
0.57	4.56	712.54	271.82
0.64	4.77	714.11	271.80
0.70	4.99	715.69	271.78
0.76	5.21	717.29	271.76
0.83	5.43	718.90	271.74
0.89	5.65	720.53	271.72
0.95	5.88	722.18	271.70
1.02	6.10	723.84	271.68
1.08	6.33	725.52	271.66
1.14	6.56	727.22	271.64
1.21	6.80	728.94	271.62
1.27	7.03	730.68	271.60
1.33	7.27	732.43	271.58
1.40	7.51	734.21	271.56
1.46	7.76	736.01	271.53
1.52	8.00	737.83	271.51
1.59	8.25	739.67	271.49
1.65	8.50	741.54	271.47
1.71	8.75	743.43	271.45
1.78	9.01	745.33	271.43
1.84	9.27	747.27	271.41
1.90	9.53	749.22	271.39
1.97	9.80	751.20	271.37
2.03	10.07	753.20	271.34
2.10	10.34	755.23	271.32
2.16	10.61	757.27	271.30
2.22	10.88	759.34	271.28
2.29	11.16	761.43	271.26
2.35	11.44	763.54	271.24
2.41	11.73	765.67	271.22
2.48	12.01	767.82	271.19
2.54	12.30	769.99	271.17

Tablo-E.7.2:İkinci yatak için,reaktör boyunca dönüşüm,sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.1230
 T_{in}=718 K
 P_{in}=269 atm
 L=2.59 m
 f=0.85

L(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.00	12.30	718.00	269.00
0.06	12.42	718.82	268.98
0.13	12.54	719.65	268.96
0.19	12.66	720.49	268.94
0.26	12.78	721.32	268.92
0.32	12.90	722.17	268.90
0.39	13.02	723.02	268.87
0.45	13.14	723.87	268.85
0.52	13.27	724.74	268.83
0.58	13.39	725.60	268.81
0.65	13.52	726.48	268.79
0.71	13.64	727.35	268.77
0.78	13.77	728.24	268.75
0.84	13.90	729.13	268.73
0.91	14.03	730.02	268.70
0.97	14.15	730.92	268.68
1.04	14.28	731.83	268.66
1.10	14.42	732.74	268.64
1.17	14.55	733.65	268.62
1.23	14.68	734.57	268.60
1.30	14.81	735.50	268.58
1.36	14.95	736.43	268.56
1.42	15.08	737.37	268.53
1.49	15.21	738.31	268.51
1.55	15.35	739.26	268.49
1.62	15.49	740.21	268.47
1.68	15.62	741.17	268.45
1.75	15.76	742.13	268.43
1.81	15.90	743.10	268.40
1.88	16.04	744.07	268.38
1.94	16.18	745.04	268.36
2.01	16.32	746.02	268.34
2.07	16.46	747.00	268.32
2.14	16.60	747.99	268.30
2.20	16.74	748.98	268.27
2.27	16.88	749.97	268.25
2.33	17.03	750.97	268.23
2.40	17.17	751.96	268.21
2.46	17.31	752.96	268.19
2.53	17.46	753.96	268.16
2.59	17.60	754.97	268.14

Tablo-E.7.3:Üçüncü yatak için,reaktör y.çapı boyunca dönüşüm sıcaklık ve basınç değerleri

X_{in}=0.1760
 T_{in}=694 K
 P_{in}=267 atm
 r₁=0.2585 m
 r₂=0.8850 m
 f=0.85

r(m)	X(%)	T(K)	P(atm)
0.26	17.60	694.00	267.00
0.27	17.64	694.29	267.00
0.29	17.68	694.59	267.00
0.31	17.73	694.92	267.00
0.32	17.78	695.26	267.00
0.34	17.83	695.62	267.00
0.35	17.88	696.00	267.00
0.37	17.94	696.40	267.00
0.38	18.00	696.81	267.00
0.40	18.06	697.25	267.00
0.42	18.12	697.71	267.00
0.43	18.19	698.18	267.00
0.45	18.26	698.68	267.00
0.46	18.33	699.20	267.00
0.48	18.41	699.74	267.00
0.49	18.49	700.29	267.00
0.51	18.57	700.88	267.00
0.52	18.65	701.48	267.00
0.54	18.74	702.10	267.00
0.56	18.83	702.75	267.00
0.57	18.93	703.42	267.00
0.59	19.02	704.11	267.00
0.60	19.12	704.83	267.00
0.62	19.23	705.57	267.00
0.63	19.34	706.34	267.00
0.65	19.45	707.13	267.00
0.67	19.56	707.94	267.00
0.68	19.68	708.79	267.00
0.70	19.80	709.65	267.00
0.71	19.93	710.55	267.00
0.73	20.06	711.47	267.00
0.74	20.19	712.42	267.00
0.76	20.33	713.40	267.00
0.78	20.47	714.41	267.00
0.79	20.62	715.45	267.00
0.81	20.77	716.51	267.00
0.82	20.92	717.61	266.99
0.84	21.08	718.73	266.99
0.85	21.24	719.89	266.99
0.87	21.41	721.08	266.99
0.89	21.58	722.30	266.99

Ek8:Runge Kutta metodu ile üç diferansiyel denklemin
numerik çözümü

```

Program AMONIA;
Uses crt;
Const
  d1=0.3;{m}
  d2=1.87;{m}
  Pi=3.14;
  FAo=1.270175;{Kmol/s}
  FBo=3.891992;
  FDo=1.66025E-1;
  FEo=2.653916E-1;
  FMo=5.789222E-1;
  MWA=14;{Molecular Weights:Kg/Kmol}
  MWB=2;
  MWD=17;
  MWE=40;
  MWM=16;
Type
  store = array [ 1..4 , 1..3 ] of real;
Var
  k1X,k1T,k1P,
  k2X,k2T,k2P,
  k3X,k3T,k3P,
  k4X,k4T,K4P:store;
  n:integer;
  T,P,X,delL,L,r,A,B,C,D,Ac:real;
  tetaA,tetaB,tetaD,tetaE,tetaM,FTo,MWav,MWov:real;
  YAo,YBo,YDo,YEo,YMO,YA,YB,YD,YE,YM,G,TOTteta:real;

Procedure XdiffL(T,P,X:real ; var dXdL :real);
  var
    f,K1,K2:real;
  begin
    f:=0.9;
    K1:=4.9722*Exp(-10475.1/T);
    K2:=7.1389E12*Exp(-23871.1/T);
    r:=f*(K1*(1-X)*Exp(1.5*ln(3.064-
3*X)))*Exp(1.5*ln(P))/(0.131+2*X)
/Exp(1.5*ln(4.86-2*X))-K2*(0.131+2*X)*SQRT(4.86-2*X)
/Exp(1.5*ln(3.064-3*X))/SQRT(P);
    dXdL:=(Ac/FAo)*r;
  end;

Procedure TdiffL(T,P,X:real ; var dTdL :real);
  var
    H,delCp,tetaCp,CpA,CpB,CpD,CpE,CpM:real;
  begin
    CpA:=6.5+0.001*(T-273);{Cp's in Kcal/Kmol.K}
    CpB:=6.62+0.00081*(T-273);
    CpD:=6.7+0.0063*(T-273);
    CpE:=6.97;
  end;

```

```

delCp:=(2*CpD-3*CpB-CpA)*4.18;{-64.64+0.0383*T;
{KJ/Kmol.K}

tetaCp:=(tetaA*CpA+tetaB*CpB+tetaD*CpD+tetaE*CpE+tetaM*CpM)*4
.18
        {120.98+0.0399*T;{KJ/Kmol.K};
H:=-22040-15.46*(T-298)+17.12E-3*(T*T-298*298)/2
-4.89E-6*(T*T*T-298*298*298)/3; {H:Kcal/Kmol}
H:=4.18428*H; {H:KJ/Kmol}
dTdL:=(Ac/FAo)*(r*(-H))/(tetaCp+X*delCp);
end;
Procedure Pdiffl(T,P,X:real ; var dPdL :real);
var
rowgas:real;{Kg/m3}
const
R=8314.34;{J/Kmol.K}
Dp=0.003;{m}
visc=2.0764E-5;{kg/m.s}
begin
rowgas:=(MWOav*P*101325)/(R*T);
dPdL:=- (G*G/rowgas/Dp)*(6.0356)*(4.5495*visc/Dp +
1.75)/101325;
{dPdL[atm/m]}
end;
Begin
T:=699.0;P:=274;X:=0.0;
L:=0.0;
delL:=0.00254;
n:=0;
tetaA:=FAo/FAo;
tetaB:=FBo/FAo;
tetaD:=FDo/FAo;
tetaE:=FEo/FAo;
tetaM:=FMo/FAo;
TOTteta:=tetaA+tetaB+tetaD+tetaE+tetaM;
FTo:=FAo+FBo+FDo+FEo+FMo;
Yao:=FAo/FTo;
YBo:=FBo/FTo;
YDo:=FDo/FTo;
YEO:=FEo/FTo;
YMo:=FMo/FTo;
Ac:=Pi*(d2*d2-d1*d1)/4;
MWOav:=Yao*MWA+YBo*MWB+YDo*MWD+YEO*MWE+YMo*MWM;
G:=MWOav*FTo/Ac;{mass velocity:Kg/m2.s}
clrscr;
write('L(m)':25);
write('X(%)':10);
write('T(K)':10);
writeln('P(atm)':11);
writeln('*****':57);
Repeat
YA:=(tetaA-X)/(TOTteta-2*X);
YB:=(tetaB-3*X)/(TOTteta-2*X);

```

```

YE:=(tetaE)/(TOTteta-2*X);
YM:=(tetaM)/(TOTteta-2*X);
MWav:=YA*MWA+YB*MWB+YD*MWD+YE*MWE+YM*MWM;
If n mod(50)=0 then
begin
write(L:25:2);
write(X*100:10:2);
write(T:11:2);
writeln(P:10:2);
end;

Xdiffl(T,P,X,k1X[1,1]);
Tdiffl(T,P,X,k1T[1,2]);
Pdiffl(T,P,X,k1P[1,3]);

Xdiffl(T+k1T[1,2]*delL/2,P+k1P[1,3]*delL/2,X+k1X[1,1]*delL/2,
k2X[2,1]);

Tdiffl(T+k1T[1,2]*delL/2,P+k1P[1,3]*delL/2,X+k1X[1,1]*delL/2,
k2T[2,2]);

Pdiffl(T+k1T[1,2]*delL/2,P+k1P[1,3]*delL/2,X+k1X[1,1]*delL/2,
k2P[2,3]);
A:=(1/SQRT(2)-1/2)*delL;
B:=(1-1/SQRT(2))*delL;

Xdiffl(T+A*K1T[1,2]+B*K2T[2,2],P+A*K1P[1,3]+B*K2P[2,3],
X+A*K1X[1,1]+B*K2X[2,1],k3X[3,1]);
Tdiffl(T+A*K1T[1,2]+B*K2T[2,2],P+A*K1P[1,3]+B*K2P[2,3],
X+A*K1X[1,1]+B*K2X[2,1],k3T[3,2]);
Pdiffl(T+A*K1T[1,2]+B*K2T[2,2],P+A*K1P[1,3]+B*K2P[2,3],
X+A*K1X[1,1]+B*K2X[2,1],k3P[3,3]);
C:=delL/SQRT(2);
D:=delL*(1+1/SQRT(2));

Xdiffl(T-C*K2T[2,2]+D*K3T[3,2],P-C*K2P[2,3]+D*K3P[3,3],
X-C*K2X[2,1]+D*K3X[3,1],k4X[4,1]);
Tdiffl(T-C*K2T[2,2]+D*K3T[3,2],P-C*K2P[2,3]+D*K3P[3,3],
X-C*K2X[2,1]+D*K3X[3,1],k4T[4,2]);
Pdiffl(T-C*K2T[2,2]+D*K3T[3,2],P-C*K2P[2,3]+D*K3P[3,3],
X-C*K2X[2,1]+D*K3X[3,1],k4P[4,3]);

X:=X+(delL/6)*(k1X[1,1]+(2-sqrt(2))*k2X[2,1]+(2+sqrt(2))*
k3X[3,1]+k4X[4,1]);
T:=T+(delL/6)*(k1T[1,2]+(2-sqrt(2))*k2T[2,2]+(2+sqrt(2))*
k3T[3,2]+k4T[4,2]);
P:=P+(delL/6)*(k1P[1,3]+(2-sqrt(2))*k2P[2,3]+(2+sqrt(2))*
k3P[3,3]+k4P[4,3]);
L:=L+delL;
n:=n+1;
Until L>2.55;
readln;

```

EK 9 : ÖRNEK PROBLEM ÇÖZÜMÜ

Örnek olarak alınan birinci yatağa ait tasarım model denklemlerinin hesaplamalarında aşağıdaki denklemler kullanılmıştır.

$$\text{Mol denklığı} : \frac{dX}{dW} = f_1(X, T, P)$$

$$\text{Enerji denklığı} : \frac{dT}{dW} = f_2(X, T, P)$$

$$\text{Basınç denklığı} : \frac{dP}{dW} = f_3(X, T, P)$$

Giriş şartları aşağıda kısaca verilmiştir. Burada, X_{in} , P_{in} , T_{in} ve L sırasıyla giriş dönüşümünü, giriş basıncını, giriş sıcaklığını ve yatak boyunu simgelemektedir.

$$X_{in} = 2,689$$

$$P_{in} = 272 \text{ atm}$$

$$T_{in} = 699 \text{ K}$$

$$L = 2.54 \text{ m}$$

$$f = 1.0$$

Bu denklemler Runge-Kutta-Gill yöntemi ile çözülür ve aşağıdaki sonuçlar elde edilir.

$$X_{out} = 14,62$$

$$P_{out} = 271,16 \text{ atm}$$

$$T_{out} = 786,47 \text{ K}$$

Burada, X_{out} , P_{out} ve T_{out} sırasıyla çıkış dönüşümünü, çıkış basıncını ve çıkış sıcaklığını simgelemektedir.

6. KAYNAKLAR

1. Kent, J.A., "Riegel's Handbook of Industrial Chemistry", Van Nostrand Reinhold, 1974.
2. Austin, G.T., "Shreve's Chemical Process Industries", 5th Ed., 1984.
3. IGSAS, BASF Catalyst s 6-10, GCOK/V 11/71 p.65-74.
4. Robert, A.M., "Handbook of Chemicals Production Process", McGraw Hill, 1986.
5. Kjaer, J., "Measurement and Calculation of Temperature and Conversion in Fixed Bed Reactors", Gjellerup, Copenhagen, 1958.
6. Baddour, B.F., Brain, B.A., Logeais, J.P., Emmerly, P.L.T., "Steady State Simulation of Ammonia Synthesis Converter", Chem. Eng. Sci., 20, 281-292, 1965.
7. Temkin, M.I., Pyzhev, B., Advanced Catalysis, 28, 173, 1979.
8. Fogler, H.S., "Element of Chemical Reaction Engineering", 2th ed., Prantice- Hall Inc. New Jersey, 1992.
9. Bird, R.B., Steawart, E.W., Lightfoot, E.N., "Transport Phenomena", John Wiley & Sons, 1960.
10. Rose, L.M., "The Application of Mathematical Modelling to Process Development and Design", Applied Science Publishers, 1974.
11. Ergun, S., "Fluid Flow Through Packed Columns.", Chem. Eng. Prog., 48(2): 89-94, 1952.