SIVI AKIŞ PROFİLLERİNİN DAMLAMA YATAK REAKTÖRLERİNİN ÇALIŞMASINA ETKİLERİ

Dr. R. KANDİYOTİ

Eylül 1977

DOÇENTLİK TEZİ

ÖZET

Dolgulu kulelerde akan sıvının önemli bir kısmının ana dolgudan ayrılarak kule duvarlarından aşağı süzüldüğü ötedenberi bilinmektedir. Damlama yatak reaktörlerinin matematik modellerinde bu husus şimdiye kadar dikkate alınmamıştır. Bu çalışmada, sıvı fazındaki reaksiyon maddelerinin hareket ve dağılmalarını incelemek üzere reaktör içi sıvı akış profillerini, eksenel dağılma, statik sıvı gözleri ile kütle transferi ve kulenin sıvı tutma oranlarıyla birlikte hesaba alan bir damlama yatak reaktörü modeli geliştirilmiştir. Model, reaktörde kalma süresi dağılımlarının hesaplanarak, deney sonuçları ve evvelce önerilmiş modellerden elde edilen dağılım eğrileriyle karşılaştırılması yöntemi ile değerlendirilmiştir. Geliştirilen model, duvar akışı ihmal edilmek suretiyle, basitleştirildiği takdirde şimdiye kadar bilinen modellere indirgenebilmektedir. Karşılaştırma yapabilmek amacıyla bu çalışmada geliştirilen model ile birlikte evvelce önerilmiş modellerin denklemleri sonlu farklar yöntemleri ile çözülmüştür.

Bu çalışmada elde edilen sonuçlar aşağıdaki şekilde özetlenebilir:

1. Sıvı hızı profillerinin etkilerini de içeren model evvelce önerilmiş modellere oranla düşük sıvı akış hızlarında, deney sonucu elde edilen reaktörde kalma süresi dağılım eğrilerine daha yakın sonuçlar elde edilmesini sağlamıştır. Sıvı akış hızları yükseldikçe bütün modellerin deney sonuçlarına çok yaklaştığı görülmüştür.

2. Geliştirilen model duvar akışı bölgesi ile ana dolgu akışı bölgesi arasındaki kütle transferi hızlarının hesaplanmasını sağlamaktadır. İki bölge arasındaki kütle transferi hızlarının esas itibariyle konvektif karakterli olduğu ve reaktördeki diğer kütle transferi hızlarından 10^3 mertebesinde daha büyük olduğu görülmüştür.

3. Duvar akışı bölgesi ile ana dolgu akış bölgesi arasındaki kütle transferi hızlarının düşük olması halinde meydana gelmesi beklenen yan-geçme (by-pass) olayı, geliştirilen model aracılığı ile izlenebilmektedir.

4. İki bölge arasında kütle transferi hızlarının yüksek olması ve mikro-karışmanın kimyasal reaksiyondaki dönüşmeleri etkilememesi nedeniyle, birinci mertebeden reaksiyonlarda, dönüşme hesaplarında duvar akışının ihmalinin sadece % 1 civarında bir hataya yol açtığı hesaplanmıştır.

T E Ş E K K Ü R

Bu çalışmanın yapılmasına maddi olanak sağlayan Boğaziçi Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Dekanlığına, maddi ve manevi hiçbir desteği esirgemeyen Kimya Mühendisliği Bölüm Başkanlığı ve Öğretim elemanlarına teşekkür ederim.

Ayrıca, çalışmanın gerektirdiği yoğun bilgisayar kullanımı esnasında gösterdikleri yakınlıktan ötürü Boğaziçi Üniversitesi Bilgisayar Merkezi kadrosuna, tezin daktilosunu en etkin bir biçimde gerçekleştiren Sürat Daktilo ve Teksir Bürosuna, tezin toplanması ve basılmasındaki değerli yardımlarından dolayı Boğaziçi Üniversitesi İnşaat Mühendisliği Laboratuarları Şefi Erol Yamaç'a ve Boğaziçi Üniversitesi Basımevi Müdürü Mustafa Niksarlı ve personeline teşekkürü borç bilirim.

Son olarak, bu çalışmanın tüm safhalarında beni anlayış ve sabrıyla destekleyen eşim Deniz'e minnet duygularımı belirtmek isterim.

Dr.R. Kandiyoti

İ Ç İ N D E K İ L E R

TABLOLARIN LİSTESİ

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

KULLANILAN NOTASYON

a	Kule yarıçapı
a_j, a'_j	Geliştirilen modelin sonlu farklar denklemlerinin guruplandırılmış katsayıları
$\underset{\sim}{A}$	Birleştirilmiş katsayı matrisi
$A_{i,j}$	$\underset{\sim}{A}$ matrisinin elemanları
b_j, b'_j	Sonlu farklar denklemlerinin guruplandırılmış katsayıları.
$\underset{\sim}{B}$	Birleştirilmiş lineer denklem takımının zamana bağımlı vektörü
B_j	$\underset{\sim}{B}$ vektörünün elemanları
c	Ana dolgu bölgesinde izleyici konsantrasyonu
c^*	Statik sıvı bölgelerinde izleyici konsantrasyonu
c_ω	Duvar akışı bölgesinde izleyici konsantrasyonu
c_1, c_2, c_3, c_4, c_5	PDE modelinin sonlu farklar denklemlerindeki guruplandırılmış sabitler
c_j, c^*_j	Geliştirilen modelin sonlu farklar denklemlerinin guruplandırılmış katsayıları
c_o	$n/\pi a^2 L\varepsilon\beta_T$
d'_j	Geliştirilen modelin sonlu farklar denklemlerinin guruplandırılmış katsayıları
d_ω	Duvar akışında sıvı tabakası kalınlığı
D_e	Etkin difüzyon katsayısı
D_p, d_p	Etkin dolgu maddesi boyu
E	Kule geometrik sabiti
$E(\Theta)$	Reaktörde kalma süresi dağılım fonksiyonu
f	Ana dolgu bölgesi akış hızı
f_o	Kule girişindeki uniform akış hızı
F	Boyutsuzlandırılmış ana dolgu bölgesi akış hızı
$F(\Theta)$	$\int_o^\Theta E(\Theta)\, d\Theta$
g	yerçekimi ivmesi
G	Ana dolgudan duvar akışı bölgesine geçiş sınır şartındaki ampirik katsayı

$G_1, G_2, G_3, G_4, G_5, G_6, G_7, G_8$ PD-PDE modelininin sonlu farklar denklemlerindeki guruplandırılmış sabitler

i Radiyal doğrultuda hesap adımı sayısı

IM Radiyal doğrultuda toplam hesap adımı sayısı

j Eksenel doğrultuda hesap adımı sayısı

JM Eksenel doğrultuda toplam hesap adımı sayısı

k_1 Reaksiyon hız sabiti

k_s, kA Ana dolgu ile statik sıvı gözleri arasındaki kütle transferi katsayısı

k_ω Ana dolgu ile duvar akışı bölgeleri arasındaki kütle transferi katsayısı

L Kule içindeki dolgu yüksekliği

n Zaman hesap adımı sayısı

n Kuleye zerkedilen izleyici mol sayısı

N Kütle transferi ünitesi sayısı

Pe Peclet sayısı

r Radiyal koordinat

r $\Delta\Theta/(\Delta z)^2$, $\Delta R/(\Delta z)^2$

r_o r/2 Pe

Q_1, Q_2, Q_5, Q_M Geliştirilen modelin sonlu farklar denklemlerindeki guruplandırılmış sabitler

R Boyutsuz radiyal koordinat

R_N Ana dolgu ile duvar akışı bölgeleri arasındaki boyutsuzlandırılmış kütle transferi katsayısı

$S_1, S_2, S_3, S_4, S_5, S_6, S_7, S_8, S_9$ Geliştirilen modelin sonlu farklar denklemlerindeki guruplandırılmış sabitler

t zaman

u Ana dolgu bölgesindeki boyutsuzlandırılmış izleyici konsantrasyonu

u* Statik sıvı bölgelerindeki boyutsuzlandırılmış izleyici konsantrasyonu

v Duvar akışı bölgesindeki boyutsuzlandırılmış izleyici konsantrasyonu

x Eksenel koordinat

$\underset{\sim}{y}$ Birleştirilmiş lineer denklem takımının bilinmeyenler vektörü

y_j	$\underset{\sim}{y}$ vektörünün elemanları
z	Boyutsuzlandırılmış eksenel koordinat
β_D	Dinamik sıvı tutma oranı
β_S, β_T	Statik sıvı tutma oranı, toplam sıvı tutma oranı
γ	Sıvı profilleri modelinin sınır şartının boyutsuzlandırılmış katsayısı
ε	Kule boşluk oranı
ϕ_s	Dolgu maddesi şekil katsayısı
ϕ	β_D/β_T
Λ	Sıvı yayılma katsayısı
λ	Boyutsuz sıvı yayılma katsayısı
Θ	Boyutsuzlandırılmış zaman
μ	sıvı vizkositesi
σ^2	varyans
ω, ω^*	Duvara bitişik sıvının akış hızı
Ω, Ω^*	Duvar bitişik sıvının boyutsuzlandırılmış akış hızı

BÖLÜM I

GİRİŞ

I.1. Çalışmanın Tanımı ve Amacı

Dolgulu kuleler, gaz ve sıvıların birbiri ile temas ettirilmesi sırasında fazlar arasında sağladıkları geniş yüzey ve yapım kolaylıkları nedeniyle kimya mühendisliğinde çok geniş bir kullanım sahası bulmaktadır. Bu çalışmada konu olarak alınan damlama yatak reaktörleri (trickle bed reactors) gaz ve sıvıların dolgu üzerinde temas ettirilmesi nedeniyle absorpsiyon kulelerini andırdıkları gibi, kule dolgu maddesinin katalizör olmasından ötürü sabit yatak reaktörlerinin de bazı özelliklerini taşımaktadırlar.

Bu tip reaktörler, Çevre mühendisleri tarafından "damlatmalı filtre" adıyla atık sulardaki organik maddelerin ayrıştırılmasında ötedenberi kullanılmaktadır. Bunun yanı sıra Petrol sanayiinde, hidrojenasyon, hidrojenle kükürt giderme ve hidro-kraking proseslerinde de bu tip damlama yatak reaktörleri kullanılmaktadır{30, 35,48,54,56,68}. Rafineriler dışındaki Kimya Sanayiinde bu tip reaktörlerin fazla yaygın olmadığı görülmektedir{49}.

Bunun yanında, son yıllarda özellikle organik sıvıların hidrojenasyon ve oksidasyon reaksiyonlarının gerçekleştirilmesi için bu tip reaktörlerin kullanılması konusunda araştırmaların arttığı göze çarpmaktadır{31,41}. Baca gazlarının kükürtten arıtılması çabalarında da damlama yatak reaktörlerinin kullanımı araştırılmaktadır{18,57}.

Damlama yatak reaktörleri üzerindeki çalışmaların geniş bir kısmı da doğrudan proses araştırmalarından çok reaktörün kendi özelliklerini ortaya çıkarmayı hedef almaktadır{50,51,52,65}.

Buradaki problem, dönüşme hesaplarında kullanılabilecek dizayn denklemlerini ortaya çıkarmak ve kullanılacak parametrelerin büyüklüğünü tayin edebilmektedir. Bunun için gerekli olan bilgiler

a) Toplam reaksiyon hızları,
b) Reaktör içindeki temperatür profilleri ve
c) Hız ve konsantrasyon profilleri,

olarak birbirine bağımlı üç ana grupta toplanabilir.

Bu çalışmada reaktör içindeki hız ve konsantrasyon profilleri incelenecektir. Çalışmanın amacı damlama yatak reaktörlerinin işleyişinde şimdiye kadar hesaba katılmamış bazı gözlemleri de içeren bir model geliştirmektir. Geliştirilen model, hesaplanan reaktörde kalma süresi dağılımlarının (residence time distributions) deney sonuçları ile karşılaştırılması yöntemi ile değerlendirilecektir.

Damlama yatak reaktörlerinin dizaynında kule içi akış modeli seçimi yapılırken ilk yaklaşım piston akış (plug flow) rejimini kabul etmektir. Halbuki aynı anda reaktöre giren sıvı elemanlarının reaktörde kalma süreleri ölçüldüğünde bir dağılımla karşılaşılır. Genellikle bu hal reaktör veriminin düşmesine sebep olur ve istenilen dönüşmeyi sağlamak üzere boyu piston akışı modeli ile dizayn edilecek reaktörden daha uzun olan bir reaktör gerektirir{9,11}.

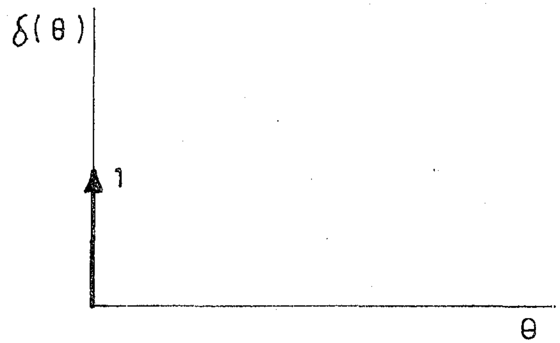
Ölçülen reaktörde kalma süresi dağılımları, sıvı elemanlarının reaktör içindeki davranışı hususunda bilgi edinilmesini sağlamaktadır. Reaktörde kalma süresi dağılımı doğru hesaplanabildiği takdirde, bu hesaplamada katkısı olan ana etkenleri reaktör hakkındaki diğer bilgilerle, reaksiyon hız sabiti, kütle transferi katsayıları gibi, birleştirerek daha doğru dönüşme hesaplarına yönelmek mümkündür{61}.

Kısaca reaktörde kalma süresi dağılımları, kararlı-haldeki bir sisteme bir izleyici zerkedip, sistem çıkışında izleyici konsantrasyonunun zamana göre değişmesini ölçerek bulunur. İzleyici, genellikle Dirac δ-fonksiyonunun yaklaşımı olan bir darbe halinde zerkedilir. Bazı hallerde Heaviside birim-basamak fonksiyonu, $\mu(t)$, şeklinde izleyici girişi metoduna başvurulur. Bu iki fonksiyonun grafiği ve damlama yatak reaktörlerde bu iki tip girişten elde edilmesi beklenen reaktörde kalma süresi dağılımları şekil I.1. de kalitatif olarak gösterilmiştir{33}. Bu iki deney şeklinin

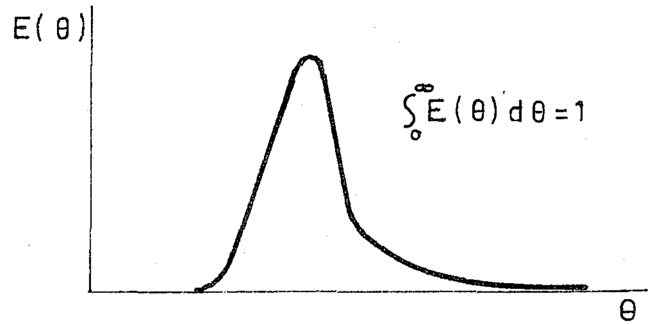
$$F(\Theta) = \int_0^\infty E(\Theta)\, d\Theta \qquad (1.1)$$

denklemi yolu ile eşdeğer olduğu bilinmektedir{46}. Burada $E(\Theta)$, Dirac δ-fonksiyonu tipi girişten beklenen reaktörde kalma süresi dağılımını; $F(\Theta)$, birim basamak fonksiyonu tipi girişten beklenen dağılım fonksiyonunu; Θ, boyutsuz zamanı ifade etmektedir. Giriş fonksiyonunun sinusoidal olarak seçilmesi{28}, deneysel zorlukları nedeni ile ilgi görmemiştir.

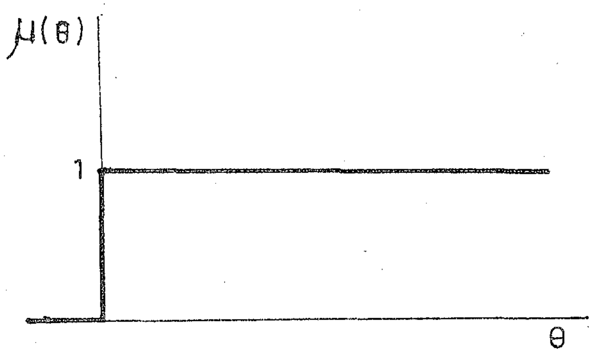
Reaktörde kalma süresi dağılım fonksiyonu aynı



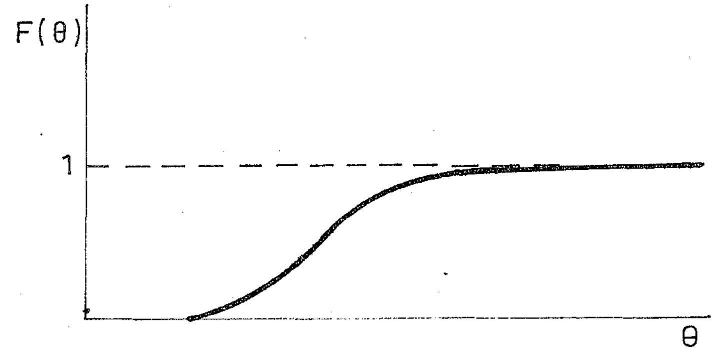
1a. Dirac δ-fonksiyonu.



1b. Beklenen reaktörde kalma süresi dağılımı.



1c. Heaviside birim-basamak fonksiyonu.



1d. Beklenen çıkış konsantrasyonu dağılımı.

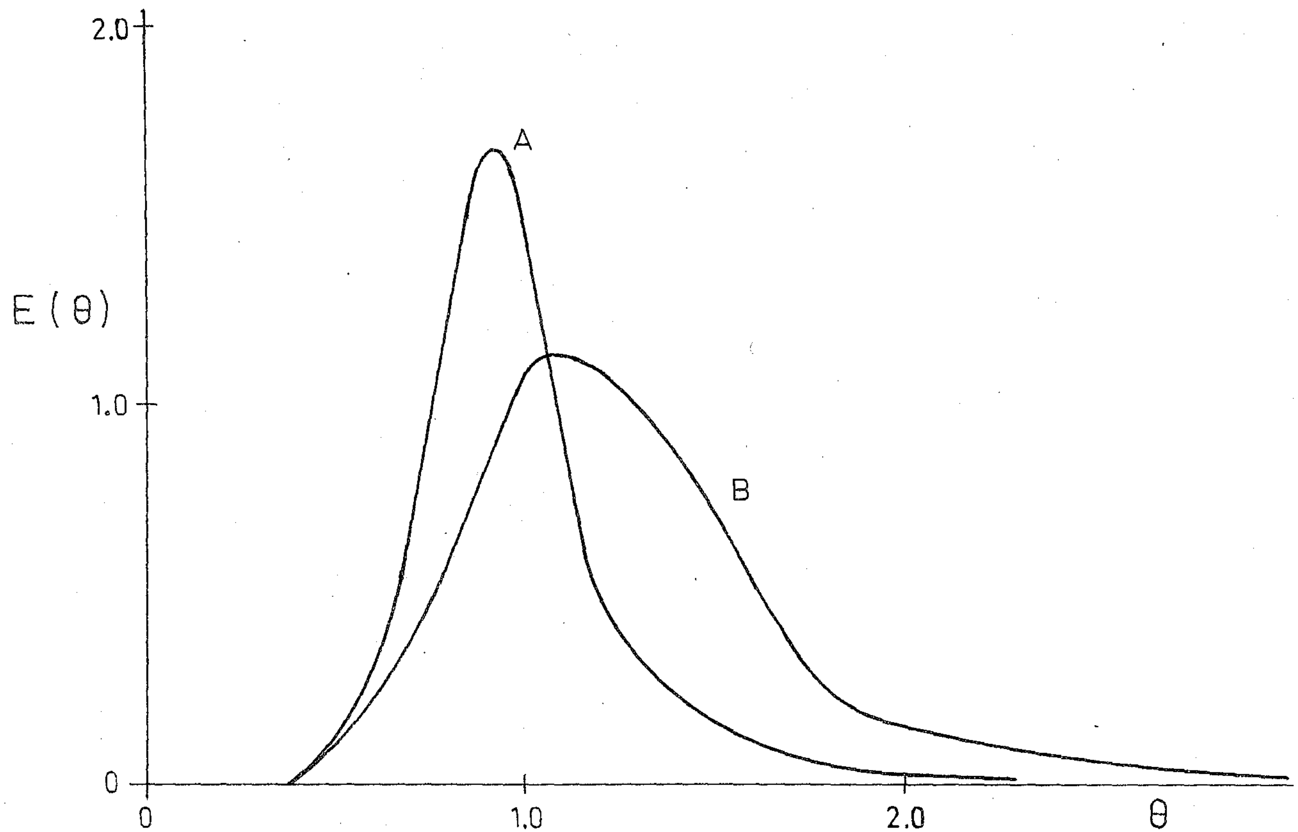
Şekil I.1.

kulede gözenekli ve gözeneksiz dolgu üzerinde ve aynı çalışma şartları altında ölçüldüğü zaman, iki eğri arasındaki fark reaksiyon maddesi moleküllerinin katalizör gözeneklerinde geçirdiği zaman dağılımları hakkında bilgi taşır (Şekil I.2). Bu bilgiyi değerlendirmek için gerekli teorik temel kısmen geliştirilmiştir{58}. Bu yoldan reaktör dönüşmesinin hesaplanması da, gözeneksiz dolgulu kulelerde kalma süresi dağılımlarının eldeki modellerden daha ayrıntılı bir biçimde açıklanmasını gerektirmektedir{16}.

Damlama yatak reaktörlerinde kalma süresi dağılımları üzerindeki çalışmalar üç genel grupta toplanır.

a) Piston Akışta Eksenel Dağılma Modeli (PD Modeli): Gözeneksiz dolgulu, isotermal bir kulede kalma süresi dağılımı, bir kısım sıvı elemanlarının dolgu içinde diğer elemanlara göre daha uzun yollar seçerek geride kalmaları, diğer bir kısmının da kısmi kanallanma olayı ile ortalama kalış süresinden önce reaktörü terketmeleri nedeniyle ortaya çıkar. Dağılım tek parametre, etkin difüzyon katsayısı (effective diffusivity), ve buna dayanarak tarif edilen Peclet sayısı yolu ile belirlenir{9,62,70,38}. Bu modeli kullanarak hesaplanan dağılım eğrilerinin şekli, kuleye bir izleyici darbesi zerkedildiğinde elde edilen dağılımın asimetrik şekline uymamaktadır.

b) Piston Akışta Eksenel Dağılma ve Statik Sıvı Gözleri ile Kütle Transferi Modeli (PDE Modeli): Dolgulu kulelerde "statik sıvı", kulede sıvı akışı kesildiğinde dışarıya dökülemeyen sıvı miktarı olarak tanımlanır. Kule içinde hareketli sıvı ile



Şekil I.2. Aynı kulede gözeneksiz dolgu (A) ve gözenekli dolgu (B) ile elde edilmesi beklenen, kalitatif reaktörde kalma süresi dağılımları.

statik sıvı gözleri arasında devamlı temas ve kütle aktarımının mevcut olduğu ötedenberi bilinmektedir{59}. PDE modeline göre deneysel kalış süresi dağılımında gözlenen asimetri, izleyici moleküllerinin statik sıvı gözlerine girip çıkmak suretiyle gecikmeleri şeklinde izah edilir{71,72,74}. Bu model PD modelinin hatalarını büyük ölçüde kapatabildiği halde hesaplanan eğriler genellikle dağılım eğrisindeki maksimum noktasına erişememektedir. Modelde kullanılan parametreler Peclet sayısı ile birlikte, statik ve dinamik sıvı bölgeleri arasındaki "Kütle Transferi Ünitesi Sayısı", N, ve dinamik sıvı tutma oranının toplam sıvı tutma oranına bölünmesi olarak tanımlanan $\phi(= \beta_D/\beta_T)$'dir.

Yukarıda özetlenen her iki modelde dolgulu kulelerde yukarıdan süzülen sıvının önemli bir kısmının kule duvarlarından aşağıya aktığı göz önüne alınmamıştır.

c) Karışma Hücresi Modelleri: Bazı araştırmalar damlama yatak reaktörlerini, ucuca konmuş uzunlamasına boru reaktörleri ve karıştırıcılı tank tipi sürekli reaktör kombinezonları ile simüle etmeye çalışmışlardır{27,45,32}. Bu modelleme metodları, yapıları itibariyle ayrı bir yaklaşım tarzını temsil etmektedirler. Bu itibarla bu tip modeller bu çalışma içinde ele alınmıyacaktır.

Sunulan çerçeve içinde bu çalışmada üzerinde özellikle durulacak olan konular şunlardır:

1. Eksenel dağılma ve statik sıvı gözleri ile kütle transferinin dağılıma olan katkılarıyla beraber, kule cidarlarına bitişik olarak akan sıvının da etkisinin hesaba katılacağı bir

kule modelinin geliştirilmesi ve bu modeli kullanarak reaktörde kalma süresi dağılımlarının hesaplanması;

2. Duvar akışı bölgesi ile ana dolgu akışı bölgesi arasındaki kütle transferinin büyüklüğünün araştırılması; iki bölge arasındaki kütle transferi katsayısının kalma süresi dağılımları üzerindeki etkisinin incelenmesi;

3. İki bölge arasındaki kütle transferi hızlarının, birinci mertebeden bir reaksiyon için, reaktör dönüşmesi üzerindeki etkilerinin incelenmesi.

BÖLÜM II

DAMLAMA YATAK REAKTÖRLERİNDE KALMA SÜRESİ DAĞILIMLARI

II.1. Reaktörde Kalma Süresi Dağılımı Fonksiyonları

Damlama yatak reaktörlerinde piston akıştan sapmalar genellikle beklenen dönüşmeyi olumsuz yönde etkiler. Reaktörün akış ve konsantrasyon profillerinde görülen bu sapmalar, özellikle ölçek büyültmede hesaba katılmazsa büyük hatalara yol açabilir. Reaksiyon maddesi moleküllerinin reaktör içinde geçirdiği aşamaları takip etmek için yararlanılan önemli bir metod reaktörde kalma süresi dağılım fonksiyonlarının değerlendirilmesidir. Bu metod nükleer ve kimyasal reaktörlerde olduğu gibi üstü açık kanal akışlarından insan vücuduna kadar çeşitli sistemlerde gaz ve sıvıların akış tarzlarını incelemek için kullanılmaktadır{1,2,58}.

Reaktörde kalma süresi dağılım fonksiyonu, $E(\Theta)$, aynı anda reaktöre giren sıvının Θ zamanı ile $\Theta + \Delta\Theta$ zamanı arasında reaktörü terkeden fraksiyonunun $E(\Theta)d\Theta$ olduğu şeklinde tarif edilir. Böylece bütün fraksiyonların toplamı

$$\int_0^\infty E(\Theta)d\Theta = 1 \qquad (2.1)$$

olur. Eğer dağılım fonksiyonu Θ'nın bütün değerleri için biliniyorsa, reaksiyon maddesi moleküllerinin reaktördeki ortalama kalma süresi, $\overline{\Theta}$, şu şekilde hesaplanır:

$$\overline{\Theta} = \int_0^\infty \Theta E(\Theta)d\Theta. \qquad (2.2)$$

$E(\Theta)$ dağılım eğrilerini, dağılımın momentleri yolu ile de tanımlamak mümkündür. $E(\Theta)$ dağılım fonksiyonun sıfır noktası etrafındaki n'inci momenti şöyle tanımlanır.

$$\mu_n = \frac{\int_0^\infty \Theta^n \, E(\Theta)d\Theta}{\int_0^\infty E(\Theta)d\Theta} = \int_0^\infty \Theta^n \, E(\Theta)d\Theta \qquad (2.3)$$

Görüldüğü gibi ortalama kalış süresi, $\bar{\Theta}$, dağılım fonksiyonunun sıfır noktası etrafındaki birinci momentidir. Bir dağılım fonksiyonunun ortalama değer , $\bar{\Theta}$, etrafındaki n'inci momenti de şöyle tanımlanır.

$$\mu_n' = \frac{\int_0^\infty (\Theta - \bar{\Theta})^n \, E(\Theta)d\Theta}{\int_0^\infty E(\Theta)d\Theta} = \int_0^\infty (\Theta - \bar{\Theta})^n \, E(\Theta)d\Theta \qquad (2.4)$$

Dağılımın varyansı, σ^2, ortalama değer etrafındaki ikinci moment olarak tarif edilir.

$$\sigma^2 = \frac{\int_0^\infty (\Theta - \bar{\Theta})^2 E(\Theta)d\Theta}{\int_0^\infty E(\Theta)d\Theta} = \int_0^\infty (\Theta - \bar{\Theta})^2 E(\Theta)d\Theta \qquad (2.5)$$

Reaksiyona girmeyen fakat fiziksel özellikleri reaksiyon maddelerinden birine yakın veya eşdeğer olan bir izleyici, damlama yatak reaktörüne zerkedildiği takdirde, bu izleyicinin takibedilmek istenen reaksiyon maddesinin molekülleriyle aynı aşamalardan geçmesi beklenir.

II.2. Reaktörde Kalma Süresi Dağılım Modelleri

Damlama yatak reaktörlerinde genel piston akışı varsayımlarından sapmaları, yatak geometrisi çerçevesi içinde kalarak açıklamayı hedef alan modelleri iki gruba ayırmak mümkündür.

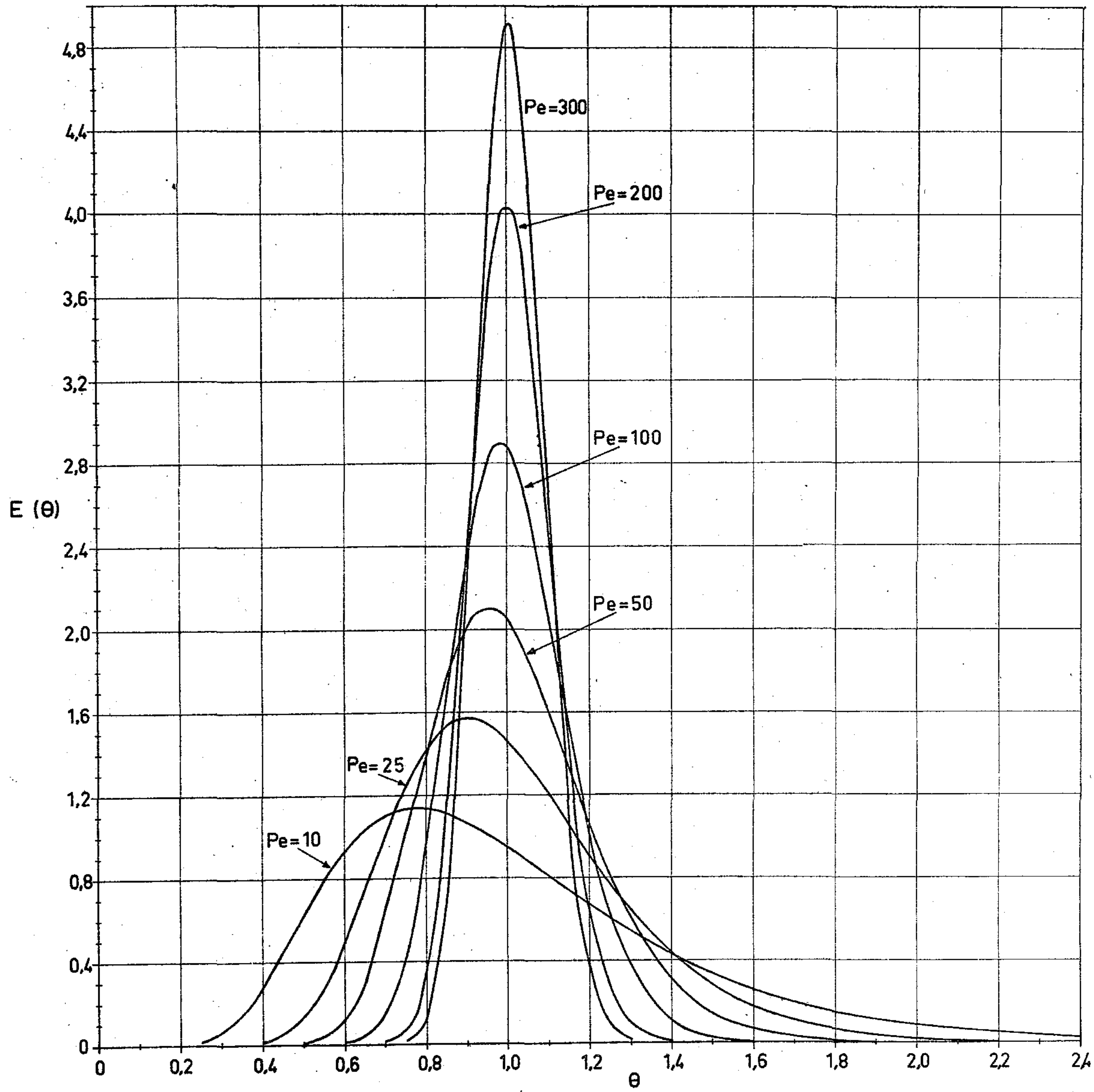
II.2.1. Piston Akışta Eksenel Dağılma Modeli{9,38}

Sıvı elemanlarının ortalama hız etrafında dağılmaları (dispersion) ile açıklanan reaktörde kalma süresi dağılımını hesaplayabilmek için gerekli izleyici kütle dengesi şöyledir

$$D_e \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial t} . \qquad (2.6)$$

Burada D_e, etkin difüzyon katsayısını; v, yüzeysel sıvı hızını; c, izleyici konsantrasyonunu; x, kule girişinden itibaren eksenel uzaklığı; t, zamanı belirtmektedir. Denklem (2.6) konveksiyon ve difüzyonlu bir ortamda izleyici konsantrasyonunun zaman içindeki değişmelerini tanımlayan bir kısmi diferansiyel denklemdir. Denklemin şekli, etkin difüzyon katsayısının, D_e, moleküler difüzyon katsayısı ile karıştırılmasına yol açabilir. Teorik olarak, izleyicinin fiziksel özellikleri bakımından sıvı moleküllerine çok yakın olması ve konsantrasyon farklarından ötürü ortaya bir difüzyon olayı çıkmaması gerekmektedir. Pratikte bu zorluk, sıvı elemanlarının öne-arkaya dağılmalarının ikili difüzyon olayından daha büyük izleyici hareketlerine yol açmasıyla çözümlenir. Etkin difüzyon katsayısı, D_e, sıvı elemanlarının bu dağılmalarını tanımlamaktadır.

Boyutsuz değişkenlerle ifade edildiğinde denklem (2.6) aşağıdaki şekle dönüşmektedir.



Şekil II.1- Piston Akışta Eksenel Dağılma Modeli -

Peclet sayısının reaktörlerde kalma süresi dağılımlarına etkisi

$$\frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial u}{\partial \Theta} \qquad (2.7)$$

Burada u, boyutsuz konsantrasyonu; z, boyutsuz uzunluğu; Θ, boyutsuz zamanı belirtmektedir*. Peclet sayısı, Pe, ise L'nin toplam kule dolgu uzunluğunu ifade ettiği aşağıdaki formülle gösterilir:

$$P_e = \frac{v\,L}{D_e} \qquad (2.8)$$

Görüldüğü gibi PD modeli tek parametrelidir. Pe büyük olduğu zaman konveksiyonun dağılmaya oranla büyüdüğü, Pe küçüldüğünde de dağılmanın önem kazandığı anlamını taşır. Pe = ∞ özel halinde ise piston akış modeli tekrar ortaya çıkar. Piston akış modelinden sapmalar damlama yatak reaktörlerinin çeşitli özellikleri yüzünden ortaya çıkmaktadır. Oysa ki, bu modelde tek parametre ile bütün sapmaları açıklamak gerekmektedir. Peclet sayısını küçük tutarak, deneysel dağılım eğrileri ile hesaplanan eğri arasındaki farkı kısmen gidermek mümkün ise de reaktör içinde reaksiyon maddesi moleküllerinin geçirdiği aşamaları açıklamak bakımından PD modeli yetersiz kalır.

II.2.2. Piston Akışta Eksenel Dağılma ve Statik Sıvı Gözleri ile Kütle Transferi Modeli (PDE Modeli)

Deneysel reaktörde kalma süresi dağılımlarındaki asimetri ve eğrinin uzun kuyruğu PD-modeliyle simüle edilemez. İzleyici moleküllerinin kuleden çıkmakta gecikmelerini Hoogendorn ve Lips{22} kuledeki statik sıvı

---

* Boyutsuzlandırma denklemleri ve sınır şartları Bölüm III'de ayrıntılı olarak ele alınmış olduğundan bunlara burada ve Bölüm II.2.2. de yer verilmemiştir.

gözleri ile hareketli sıvı akışı arasındaki kütle alış verişi ile açıklamayı önermişlerdir. Diğer bir deyişle izleyici molekülleri statik sıvı gözlerine de girebilmekte ve burada bekleyerek çıkışa varmakta gecikmektedirler. Bu yaklaşımda eksenel dağılma olmadığı varsayılmıştır. Bu modeli PD- modeli ile birleştirerek her iki olayın etkisini de dağılım fonksiyonuna katmak mümkündür{72}. Denklemlerin boyutsuzlandırılmış şekli şöyledir:

$$\frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{1}{\phi}\frac{\partial u}{\partial z} - N(u - u^*) = \frac{\partial u}{\partial \Theta} \qquad (2.9)$$

$$\frac{\partial u^*}{\partial \Theta} = \frac{N\phi}{1-\phi}(u - u^*) \qquad (2.10)$$

Burada u, boyutsuz konsantrasyonu; z, kule girişinden itibaren boyutsuz uzaklığı; Θ, boyutsuz zamanı; Pe, Peclet sayısını; u*, statik sıvı gözlerindeki izleyici konsantrasyonunu; N, statik ve dinamik sıvı bölümleri arasındaki kütle transferini tarif eden transfer ünitesi sayısını; ϕ, dinamik sıvı tutma oranının toplam sıvı tutma oranına bölümünü ifade etmektedir.

Denklem (2.9)'un (2.7) ye göre farkı, bir miktar izleyicinin ana akış bölgesinden ayrılabilmesi veya tekrar katılabilmesidir. Ana akıştan ayrılan izleyici, konsantrasyon itici gücünün doğrultusuna bağlı olarak, birbiri ile teması olmayan statik gözlere veya bu gözlerden tekrar ana akış fazına girer. Statik sıvı gözlerindeki konsantrasyon böylece yerel ana akış konsantrasyonu ile kendi konsantrasyonuna bağlı olarak değişir: denklem (2.10).

PDE Modeli deneysel reaktörde kalma süresi dağılım eğrilerini hesaplamakta büyük ölçüde başarılı olmuştur. Ancak içinden sıvı geçirilen herhangi bir dolgulu kulede gözlenebileceği gibi, akış rejimi piston akış rejimine uymaz. Özellikle pilot tesis ve laboratuar kulesi boyutlarındaki cihazlarda, aşağıya süzülen sıvının koşullara bağlı olarak % 25 ilâ % 55'inin duvarlarda toplanarak aşağıya indiği kaydedilmiştir{67,24,40}. Bu durumda PDE modeli, sadece dağılım fonksiyonunun hesaplanmasında kullanılabilirsede, damlama yatak reaktörlerinin içinde vuku bulan olayları tarif ve izah edememektedir. Bu nedenle, deneysel değerler ile hesaplanmış eğriler karşılaştırıldığında model kapsamına alınan olayların relatif büyüklüklerini tayin eden üç parametrenin, Pe, N ve ϕ, denklem yapısı içinde gözükmeyen olaylar yüzünden çıkan farkları da gidermesi gerekmektedir. Probleme bu açıdan bakıldığında, PDE modelinde Pe, N ve ϕ parametrelerinin daha gerçekçi akış profillerini içeren bir modele kıyasla değişik değerler alması beklenir.

II.3. Dolgulu Kulelerde Sıvı Akış Profilleri

Dolgulu kulelerde sıvı, yüksek eksenel akış hızı bölgelerinden düşük eksenel akış hızı bölgelerine süzülerek akış dağılılımlarını bir dengeye doğru götürür; sıvının gözlenen diğer bir hareketi de kule cidarında toplanma eğilimidir. Sıvı akış profillerinin bu denge arama karakteristiği, olayın difüzyon denklemi tipinde bir denklemle tarif edilmesine yol açmıştır{7}.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \Lambda\left[\frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial^2 f}{\partial r^2}\right] \quad ; L \geq x \geq 0, \quad a \geq r \geq 0 \quad (2.11)$$

Burada f, sıvı akış hızını (m^3/m^2-san); x, dolgu yatağının başlangıcından itibaren uzaklığı; r, kulenin merkezinden yarıçap yönünde uzaklığı; Λ, sıvının yarıçap istikametinde dağılma katsayısını; a, kule yarıçapını; L, dolgu boyu yüksekliğini ifade eder. Denklem (2.11) değişik cidar sınır şartları için çözülmüştür{21,43,44, 13}.

Bu sınır şartlarının ayrıntılı eleştirisi ve gerçekçi sınır şartları Onda ve yardımcıları{40} tarafından verilmiştir. Buna göre sınır civarındaki ana dolgu sıvı akış hızı f(a,x) duvar üzerindeki akış hızı $\omega(x)$ ile dengede olmadığı takdirde ana dolgu akış bölgesinden duvar akış bölgesine net sıvı geçişi olacaktır. Her f(a,x) için, kendisi ile dengede olan bir duvar sıvı akış hızı $\omega^*(x)$ deneysel olarak bulunabilir. Bu durumda ana akış bölgesinden duvar akışı bölgesine sıvı geçiş miktarı $\{\omega^*(x) - \omega(x)\}$ itici gücüne orantılıdır.

Böylece:

$$-2\pi a\Lambda \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_{r=a} = G\{\omega^*(x) - \omega(x)\} = \frac{d\,\omega(x)}{dx} \qquad (2.12)$$

Burada G ampirik olarak hesaplanan bir katsayıdır. Denklemin çözümü için gerekli diğer sınır şartı, radiyal simetri şartıdır:

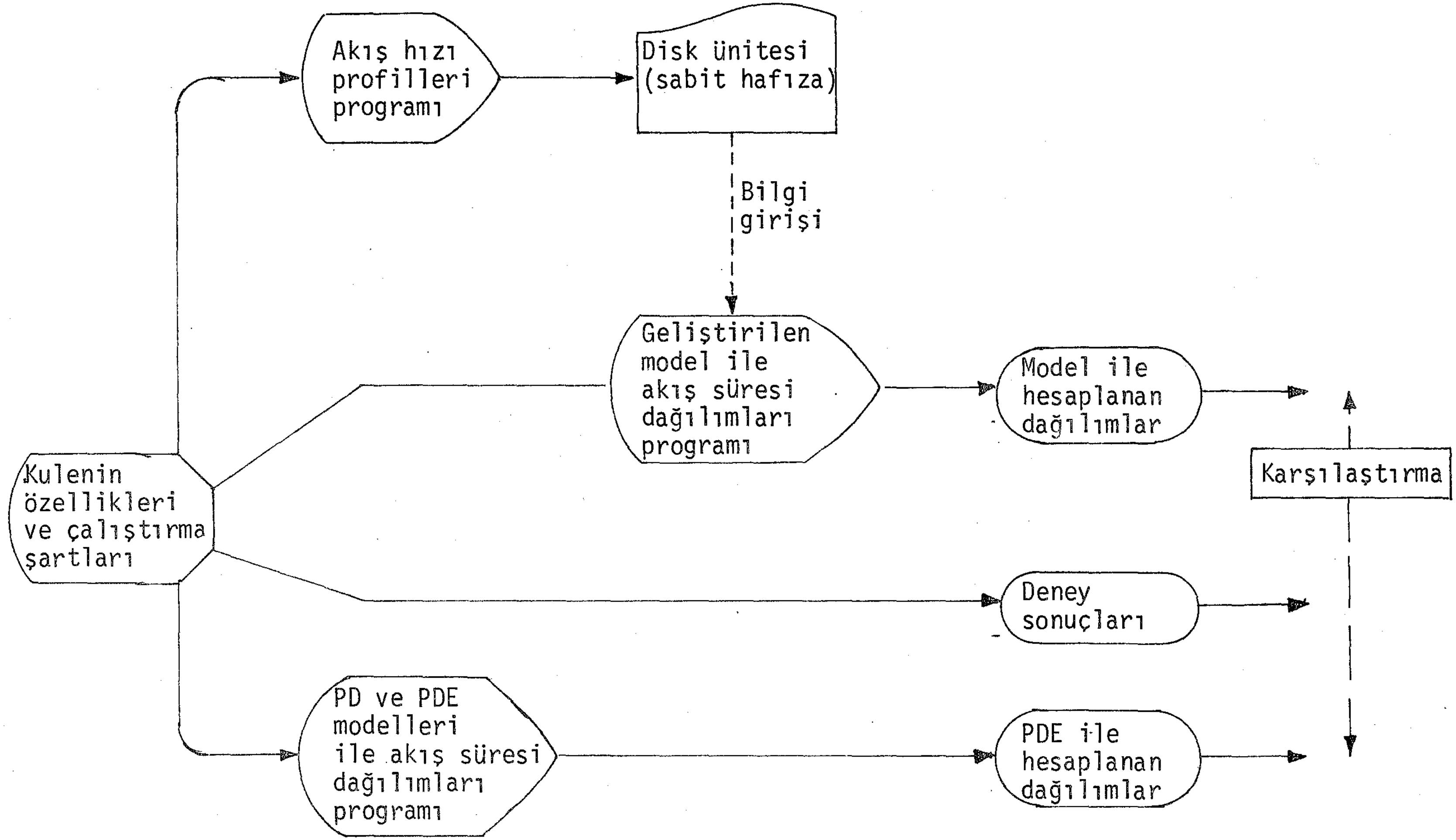
$$\frac{\partial f(0,x)}{\partial r} = 0 \qquad (2.13)$$

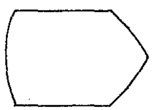
Bu denklem takımı (2.11-2.13), x = 0'da

$$f(r,0) = f_o,\ (f_o \text{ sabit}) \qquad (2.14)$$

başlangıç şartı ile çözüldüğünde deneysel sonuçlara çok yakın sıvı akış profilleri ve duvar fazı akış hızları elde edilmiştir. G ve $\omega^*(x)$ parametrelerinin değerleri Raschig halkaları üzerinden akan susistemi için tesbit edilmiştir. Bu denklem takımının çözümü Bölüm III ve Bölüm IV'de ele alınacaktır.

Bu çalışmada duvar akışı bölgesindeki sıvı akışını, eksenel dağılmayı ve statik sıvı ile kütle transferini içeren bir kule modeli geliştirilecektir. Bu modelin işlerliği, modelden hesaplanan ve deney sonucu bulunan, reaktörde kalma süresi dağılım eğrilerinin karşılaştırılması ile incelenecektir. Geliştirilen modelden reaktörde kalma süresi dağılımlarının hesaplanmasında, yukarıda anlatılan "Onda" modelinin sıvı akış hızları kullanılacaktır. Çalışmanın bilgi akım şeması özeti Şekil II.1. de gösterilmiştir.



NOT:  Sembolü, bu çalışma çerçevesinde hazırlanan programları ifade etmektedir.

Şekil II.2 - Çalışmanın bilgi akış şeması özeti.

BÖLÜM III

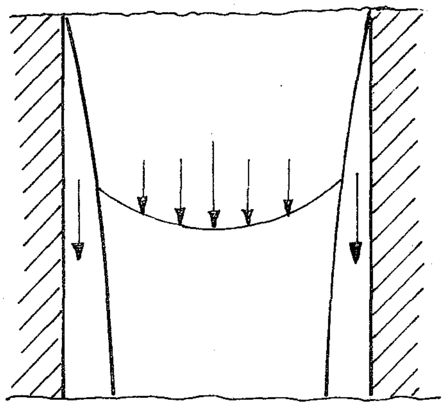
DAMLAMA YATAK REAKTÖRLERİNDE SIVI FAZ

III.1. Modelin Anahatları

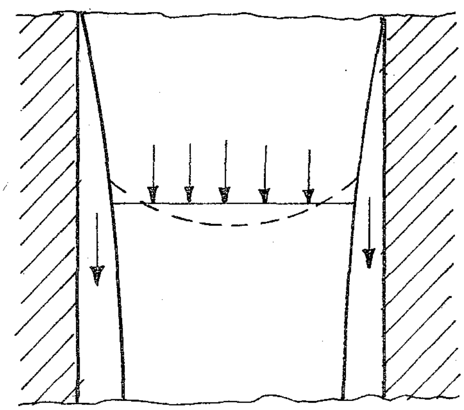
Dolgu üzerinden akan sıvının bir kısmının kule cidarlarından aşağıya süzülme eğiliminde olduğu Bölüm II de açıklanmıştı. Dolgulu kulelerin bu özelliğini de içeren bir matematik modelde cidar akışı bölgesinin ana dolgu akışından ayrı bir bölge olarak tanımlanması gerekir. Bu ikinci bölge, ana dolgu akış bölgesi ile kule boyunca temas halindedir. İki bölgeyi ayıran sınırda Denklem (2.12) ile belirlenen net konveksiyon ile ana dolgu akış bölgesinden duvar akış bölgesine sıvı geçişi vardır. Buna ilave olarak sıvının taşıdığı komponentlerden her biri konsantrasyon itici gücü doğrultusunda difüzyonla da bölge değiştirebilir.

Ana akış bölgesinde sıvı elemanlarının akış hızı üniform değildir. Bu çalışmada bilgisayar hesap zamanı ve bilgisayar hafıza ihtiyaçlarını sınırlamak amacı ile ana dolgu akış bölgesindeki hız dağılımlarının ortalaması bu bölgedeki üniform hız olarak kabul edilmiştir. Akış profillerinin genel karakteri ve yapılan kabul Şekil III.1. de kalitatif olarak gösterilmiştir.

Ana akış bölgesinin diğer bir özelliği, bu bölge içinde statik sıvı gözleri bulunması ve reaksiyon maddesi veya izleyici moleküllerinin bu statik bölgelere girerek zaman kaybetmeleridir. Genellikle bu olay reaktör performansını olumsuz yönde etkiler. Statik bölgeler, PDE modelinde olduğu gibi bu çalışmada önerilen modelde de ana akış bölgesinden ayrı bir bölge olarak



a- Dolgulu kulede sıvı akış profilleri



b- Sıvı akış profillerinin bu çalışmada kabul edilen şekli.

Şekil III.1

ele alınacak ve bu iki bölge arasındaki kütle transferi katsayısı yeni baştan değerlendirilecektir.

Geliştirilen model vasıtasıyla, reaktör içine zerkedilen bir izleyici darbesinin konsantrasyon dağılımlarını, zaman fonksiyonu olarak hesaplamak üzere, belirtilen her üç bölge için birer kütle dengesi denklemi yazılması gerekmektedir.

a) Ana dolgu akış bölgesinde konsantrasyon dağılımlarını tanımlayan bir kısmi diferansiyel denklem,

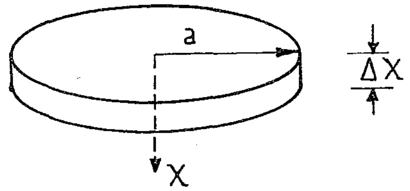
b) Kule cidarından akan sıvı içindeki izleyici konsantrasyonunu tanımlayan bir kısmi diferansiyel denklem ve,

c) Ana dolgu içindeki statik sıvı gözlerinin konsantrasyon dinamiğini tanımlayan bir adi diferansiyel denklem.

Bu bölümün geri kalan kısmı bahsedilen denklemlerin geliştirilmesine hasredilmiştir.

III.2. Damlama yatak reaktörü modeli.

a) Ana akış bölgesi denklemleri



Şekil III.2. Reaktör elemanı ve reaktörün koordinat eksenleri

Ana akış bölgesinde izleyicinin hareketini tarif eden denklemler, Şekil III.2. de gösterilen reaktör elemanı gözönüne alınarak kurulan kütle dengesi vasıtasıyla yazılacaktır.

Eleman içine eksene paralel doğrultuda giren izleyici miktarı

$$-D_e \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \pi a^2 \varepsilon \beta_D + f(x)\, c(x,t)\, \pi a^2 \qquad (3.1a)$$

denklemiyle ifade edilir. Burada, D_e, etkin difüzyon katsayısını; $-D_e \frac{\partial c}{\partial x}$ dağılma kütle akısını; a, kule yarıçapını; ε, dolgulu kulenin boşluk oranını; β_D, kulenin dinamik sıvı tutma oranını (dynamic holdup); f(x), sıvının akış hızını (m^3/m^2san); c, zaman ve yere bağımlı ana dolgu bölgesi izleyici konsantrasyonunu göstermektedir. Böylece ilk terim difüzyon, ikinci terim de konveksiyon yolu ile elemana giren izleyici miktarını belirtmektedir. Şekil III.2. deki kule elemanından eksenel doğrultuda çıkan izleyici miktarı ise,

$$-D_e \frac{\partial c(x + \Delta x, t)}{\partial x} \pi a^2 \varepsilon \; \beta_D + f(x + \Delta x)\; c(x + \Delta x, t)\; \pi a^2 \tag{3.1b}$$

denklemiyle ifade edilir.

Reaktör elemanına giren ve çıkan izleyici miktarları arasındaki fark şöyle açıklanır.

a) Reaktör elemanı içinde birikme:

Bu husus aşağıdaki ifade ile belirlenir;

$$\frac{\partial \bar{c}(x,t)}{\partial t} \pi a^2 \Delta x \varepsilon \; \beta_D. \tag{3.2a}$$

Burada $\bar{c}(x,t)$, Δx kalınlığındaki reaktör elemanındaki ortalama izleyici konsantrasyonudur. Δx limitte sıfıra yaklaştığında $\bar{c}$ de c ye yaklaşmaktadır.

b) Statik sıvı gözleri ile konsantrasyon itici gücü doğrultusunda kütle transferi:

Burada

$$k_s \; \{\bar{c}(x,t) - \bar{c}^*(x,t)\} \quad \pi a^2 \Delta x. \tag{3.2b}$$

bağıntısı söz konusudur.

c) Reaktörün ana eksenine dik doğrultuda duvar akışı bölgesine konvektif akım ile geçiş:

$$\bar{c}(x,t)\ \frac{d\omega(x)}{dx}\ \Delta x\ . \tag{3.2c}$$

Bu ifade denklem (2.6) da görülen konvektif sınır şartından ileri gelir. İfadenin $2\pi a$ ile çarpılmaması $\omega(x)$' in toplam duvar akışı olarak tanımlanması nedeniyledir.

d) Reaktörün ana eksenine dik doğrultuda duvar akışı bölgesine difüzyon ile geçiş hususu da

$$k_{\omega}\ \{c(x,t) - c_{\omega}(x,t)\}\ \ 2\pi a\Delta x \tag{3.2d}$$

ifadesiyle belirlenir ki burada k_{ω} ana akış bölgesi ile duvar akışı bölgesi arasındaki kütle transferi katsayısıdır.

e) Varsa reaksiyon ile kaybolma:

$$k_1\ c(x,t)\ \pi a^2\Delta x. \tag{3.2e}$$

Burada k_1, birinci mertebeden reaksiyon hız sabitini ifade eder. Önerilen modelin reaktör dönüşmeleri üzerindeki etkilerini de incelemek amacı ile denklem takımına reaksiyon teriminin de katılması gerekir. $k_1\ c(x,t)$ reaktör hacmi içindeki dönüşmeyi mol/hacim cinsinden vermektedir. Burada denklem takımının çözümünü daha çapraşık hale getirmemek için birinci mertebeden ve irreversibl bir reaksiyon seçilmiştir.

Bütün terimlerin yazılmasında ana dolgu akış bölgesinin yarı çapı kule yarı çapına eşit tutulmuştur.

Bu yaklaşım kule cidarından aşağıya akan sıvı tabakasının kalınlığının kule yarıçapına oranla pek küçük kaldığı gözlemine dayandırılmıştır. (3.1a) ve (3.1b) deki ifadelerle (3.2a-c) ifadelerini birleştirip, $\pi a^2(\Delta x)\varepsilon\beta_D$'ye bölüp, Δx sıfıra giderken denklemin her iki yanının da limitini alarak aşağıdaki denklem elde edilir.

$$D_e \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{1}{\varepsilon\beta_D} \frac{\partial}{\partial x}(fc) - \frac{k_s}{\varepsilon\beta_D}(c - c^*) - \frac{c}{\pi a^2 \varepsilon\beta_D} \frac{d\omega}{dx}$$

$$- \frac{k_1}{\varepsilon\beta_D} c - \frac{2 k_\omega}{a\varepsilon\beta_D}(c - c_\omega) = \frac{\partial c}{\partial t} \qquad (3.3)$$

Ana dolgu akış bölgesindeki izleyici konsantrasyonlarını veren bu denklemin sol tarafındaki terimler, sırasıyla eksenel dağılma, konveksiyon, statik bölgelere kütle transferi, duvar akışı bölgesine konveksiyon ve difüzyon ile geçiş ve nihayet reaksiyonla kaybolmayı ifade eder.

Statik sıvı gözlerindeki konsantrasyon da yer ve zamana bağlı olarak değişir. Bu gözlerin toplam hacmi kulenin statik sıvı tutma oranı, β_s, ile kule boşluk oranı ε'un çarpımından bulunur. Kütle dengesi denklemi şöyledir:

$$\pi a^2 \Delta x\ \varepsilon\beta_s \frac{\partial \bar{c}^*(x,t)}{\partial t} = k_s \{\bar{c}(x,t) - \bar{c}^*(x,t)\}\ \pi a^2 \Delta x. \qquad (3.4)$$

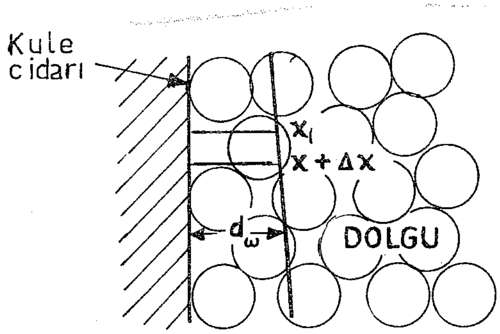
Sadeleştirince

$$\frac{\partial c^*}{\partial t} = \frac{k_s}{\varepsilon\beta_s}(c - c^*) \qquad (3.5)$$

elde edilir.

Görüldüğü gibi k_s (zaman)$^{-1}$ boyutunu taşımaktadır. Van Swaaij{71} PDE modelinde k_s'i birim hacımda statik ve dinamik akış bölgeleri arasındaki alan A ile bu alandaki kütle akısını tanımlayan, k , kütle transfer katsayısının çarpımı olarak tanımlamıştır. Bu tanımlama absorpsiyon kulelerinde kullanılan birleşik kütle transferi katsayısına ($k_G a$ veya $k_L a$) benzemektedir. Ancak statik sıvı gözlerinin karakteri itibariyle, k_s'in aynı zamanda sürekli, karıştırmalı tank reaktörlerin ortalama reaktörde kalma süresini de andırdığına dikkat etmek gerekmektedir. Şöyle ki, statik sıvı gözlerini, konsantrasyonu giren sıvı ile sürekli değişen, ve bu değişmesi, giren sıvının hızı, k_s, ile ayarlanan birer küçük sürekli, karıştırmalı kap olarak kabul etmek mümkündür.

Duvar akışı bölgesi izleyici konsantrasyon profilleri denklemi de, sıvı tabakası etrafında yazılacak kütle dengesinden bulunur. Burada sıvı tabakasının yarıçap doğrultusundaki konsantrasyonlarının eşdeğer olduğu varsayımı kullanılacaktır. Bu varsayımın tabakanın inceliği ve türbülanslı karışma oranının yüksekliği nedeniyle iyi bir yaklaşım olduğu bilinmektedir{25}.



Şekil III.3. Duvar akışı bölgesinde hacım elemanı.

Duvara bitişik akan sıvı tabakasında diferansiyel hacım aşağıdaki ifade ile tanımlanır.

$$\varepsilon\{\pi a^2 - \pi(a^2 - d_\omega^2)\} \quad \Delta x = \varepsilon\{2\pi a d_\omega - \pi d_\omega^2\}\Delta x \qquad (3.6)$$

Bu ifadede ε kule boşluk oranı, d_ω'da sıvı tabaka kalınlığıdır. Burada $a >> d_\omega$ kabul edilecektir. Bölüm IV.5 te verilen (d_ω/L) değerleri bu varsayımı doğrular niteliktedir. Böylece duvar akışı tabakasında hacım elemanı

$$\varepsilon\{2\pi a d_\omega - \pi d_\omega\} \;\Delta x \cong 2\pi a d_\omega \varepsilon \Delta x \qquad (3.7)$$

olarak bulunmuştur.

Görüldüğü gibi duvar akış bölgesinde dinamik sıvı tutma oranı,

$$\beta_D = 1 \qquad (3.8)$$

olarak kabul edilmiştir. Bu da dolgu maddesi arasındaki boşlukların tamamının sıvı tabakası tarafından doldurulduğu gözlemine dayanmaktadır. Tanımlanan hacım elemanına düşey olarak giren izleyici miktarı

$$-2\pi a \varepsilon d_\omega(x)\; D_e \;\frac{dc_\omega(x,t)}{dx} + \omega(x)\; c_\omega(x,t) \qquad (3.9)$$

şeklinde ifade edilir.

Daha evvel de görüldüğü gibi $\omega(x)$ cidara bitişik olarak süzülen sıvı miktarının tümü şeklinde tanımlanmıştır. Denklem (3.9) daki ifadenin ilk terimi etkin difüzyon katsayısı ile orantılı dağılmayı, ikinci terim de izleyicinin konveksiyon ile hareketini tanımlamaktadır. Veri eksikliği nedeniyle, bu bölgedeki etkin difüzyon katsayısı ana akış bölgesindeki D_e ile aynı kabul edilmiştir.

Hacım elemanının ana akış bölgesi ile izleyici transfer ilişkisi aşağıdaki şekildedir.

$$\frac{d\omega(x)}{dx}\,\overline{c}(x,t)\,\Delta x + 2\pi\{a - d_{\omega}(x)\}\;k_{\omega}\{\overline{c}(x,t)$$
$$-\;\overline{c}_{\omega}(x,t)\}\;\Delta x \qquad (3.10)$$

Bu ifadede ilk terim net konveksiyon ile duvar akışı bölgesine izleyici girişini, ikinci terim ise konsantrasyon itici gücü doğrultusunda net izleyici hareketini gösterir.

Düşey doğrultuda hacım elemanını terkeden izleyici miktarı şöyle ifade edilir.

$$-2\pi a\varepsilon d_{\omega}(x + \Delta x)\;D_e\frac{dc_{\omega}(x + \Delta x,t)}{dx}$$

$$+\;\omega(x + \Delta x)\;c_{\omega}(x + \Delta x,t) \qquad (3.11)$$

Hacım elemanında birikme ise şöyle ifade edilir:

$$2\pi a\overline{d}_{\omega}(x)\varepsilon\;\Delta x\;\frac{\partial\overline{c}_{\omega}(x,t)}{\partial t} \qquad (3.12)$$

Denklem (3.9-3.12) deki ifadeleri derleyip, girdilerle çıktılar arasındaki farkı birikmeye eşitleyerek, bütün denklemi $2\pi a\overline{d}_{\omega}(x)\varepsilon\;\Delta x$'e böldükten sonra, denklemin her iki yanında Δx sıfıra giderken limitini alınca, duvar akışı bölgesi izleyici konsantrasyonu denklemi elde edilir.

$$\frac{D_e}{d_\omega}\frac{\partial}{\partial x}\left[d_\omega\frac{\partial c_\omega}{\partial x}\right] - \frac{1}{2\pi a\varepsilon d_\omega}\frac{\partial}{\partial x}(\omega c_\omega) + \frac{1}{2\pi a d_\omega \varepsilon}\, c\,\frac{d\omega}{dx}$$

$$+ \frac{k_\omega}{\varepsilon d_\omega}(c - c_\omega) = \frac{\partial c_\omega}{\partial t} \qquad (3.13)$$

Bu denklemin yazılışında $(a - d_\omega) \cong a$, olarak kabul edilmiştir.

Bu bölümde geliştirilen model, denklem (3.3), (3.5) ve (3.13) de verilen birbirine bağımlı üç denklem ile gösterilmiştir. Bu denklemlerde bağımlı değişken olarak gözüken c, c^* ve c_ω sırasıyla ana dolgu akış bölgesindeki, statik sıvı gözleri bölgesindeki ve duvar akışı bölgesindeki izleyici konsantrasyonlarıdır. Reaktöre Dirac fonksiyonu şeklinde bir izleyici darbesi zerkedildiğinde uygulanması gereken başlangıç şartları çok basittir.

$$\left.\begin{aligned} c(x,0) &= 0 \\ c^*(x,0) &= 0 \\ c_\omega(x,0) &= 0 \end{aligned}\right\} \quad 0 \le x \le L \qquad (3.14)$$

Buna karşın sınır şartlarının ayrıntılı olarak ele alınması gerekmektedir.

III.2.1. Sınır Şartları

Eksenel dağılmalı sistemlerde izleyici konsantrasyonu üzerindeki sınır şartları uzun tartışmalara yol açmıştır{6,63,69,75}. Dirac δ-fonksiyonu cinsinden bir darbe ile izleyici girişi yapıldığında doğru sınır şartları şöyle yazılır{61,63}.

$$x = 0;\ f(0) = f_o \tag{3.15}$$

$$x = 0;\ \frac{n\delta(t)}{\pi a^2} = f_o\ c(0,t) - D_e \varepsilon \beta_D \frac{\partial c(0,t)}{\partial x}\ . \tag{3.16}$$

Burada $f(x)$ ana dolgu bölgesinde akış hızını; f_o, kulenin dolgulu kısmının başlangıcındaki üniform akış hızını; n, kuleye giren izleyicinin mol cinsinden miktarını ifade eder. Ana dolgudan çıkış sınır şartı ise şöyledir.

$$x = L;\ \frac{\partial c(L,t)}{\partial x} = 0 \tag{3.17}$$

Bu sınır şartı çıkışta, yani kule içindeki etkenlerin kesildiği sınırdan itibaren, konsantrasyonda azalma veya çoğalma olamayacağını ifade eder. Bu hususun termodinamiğin ikinci kanununun gereği olduğu Standart{63} tarafından gösterilmiştir.

Bu şartlara ek olarak bu çalışmada geliştirilen model ek bazı sınır şartları getirilmesini gerektirmektedir. Giriş sınırında duvar akışı bölgesi henüz oluşmamıştır; bu sınırda:

$$x = 0;\ \omega(0) = 0\ . \tag{3.18}$$

Bu nedenle duvar akışı izleyici konsantrasyonu ancak sınırın hemen içerisinde, yani duvar akışının sıfırdan değişik olduğu ilk x- uzaklığında tarif edilebilir. Bu ilk duvar akışı izleyici konsantrasyonu yerel ana dolgu izleyici konsantrasyonuna eşittir.

$$x = 0^+ \; ; \quad c_\omega(0^+,t) = c(0^+,t) \, . \tag{3.19}$$

Duvar akışı bölgesinden çıkış sınır şartı (3.17) nin benzeridir.

$$x = L; \quad \frac{\partial c_\omega}{\partial x}(L,t) = 0 \, . \tag{3.20}$$

III.2.2. Modeli Tanımlayan Denklemlerin Özeti

Bu çalışmaya esas teşkil eden modelin denklemleri aşağıdaki şekilde özetlenebilir.

$$D_e \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{1}{\varepsilon\beta_D}\frac{\partial}{\partial x}(fc) - \frac{k_s}{\varepsilon\beta_D}(c - c^*) - \frac{c}{\pi a^2 \varepsilon\beta_D}\frac{d_\omega}{dx}$$

$$- \frac{k_1}{\varepsilon\beta_D} c - \frac{2k_\omega}{a\varepsilon\beta_D}(c - c_\omega) = \frac{\partial c}{\partial t} \tag{3.3}$$

$$\frac{\partial c^*}{\partial t} = \frac{k_s}{\varepsilon\beta_S}(c - c^*) \tag{3.5}$$

$$\frac{D_e}{d_\omega}\frac{\partial}{\partial x}\left[d_\omega \frac{\partial c_\omega}{\partial x}\right] - \frac{1}{2\pi a\varepsilon d_\omega}\frac{\partial}{\partial x}(\omega c_\omega) + \frac{1}{2\pi a d_\omega \varepsilon} c \frac{d\omega}{dx}$$

$$+ \frac{k_\omega}{\varepsilon d_\omega}(c - c_\omega) = \frac{\partial c_\omega}{\partial t} \tag{3.13}$$

Başlangıç şartı: $c(x,0) = c^*(x,0) = c_\omega(x,0) = 0; \; 0 \le x \le L$.(3.14) x = 0 da sınır şartları:

$$f(0) = f_o \qquad (3.15)$$

$$\omega(0) = 0; \; c_\omega(0^+,t) = c(0^+,t) \qquad (3.18);(3.19)$$

$$\frac{n\delta(t)}{\pi a^2} = f_o\, c(0,t) - D_e \varepsilon \beta_D \frac{\partial c(0,t)}{\partial x} \quad . \qquad (3.16)$$

x = L de sınır şartları:

$$\frac{\partial c}{\partial x}(L,t) = 0; \quad \frac{\partial c_\omega}{\partial x}(L,t) = 0 \quad . \qquad (3.17);(3.20)$$

Duvar akışının ve reaksiyon teriminin hesaba katılmadığı hallerde model şu hale indirgenebilir:

$$D_e \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{1}{\varepsilon\beta_D}\frac{\partial}{\partial x}(fc) - \frac{k_s}{\varepsilon\beta_D}(c - c^*) = \frac{\partial c}{\partial t} \qquad (3.21)$$

$$\frac{\partial c^*}{\partial t} = \frac{k_s}{\varepsilon\beta_D}(c - c^*) \qquad (3.5)$$

Başlangıç ve sınır şartları

$$t=0 \quad c(x,0)=c^*(x,0) = 0 \qquad (3.22)$$

$$x = 0\text{'da:} \quad \frac{n\delta(t)}{\pi a^2} = f_o c(0,t) - D_e \varepsilon\beta_D \frac{\partial c(0,t)}{\partial x} \qquad (3.16)$$

$$x = L\text{'de} : \frac{\partial c(L,t)}{\partial x} = 0 \qquad (3.17)$$

denklemleriyle verilir.

Çalışmamıza esas teşkil eden model bu şekilde sadeleştirince PDE modeline indirgenmektedir. Statik sıvı gözlerinin de hesaba katılmadığı durumda eldeki denklem takımı bir kademe daha basitleştirilebilir.

$$D_e \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{1}{\varepsilon \beta_T} \frac{\partial}{\partial x}(fc) = \frac{\partial c}{\partial t} \tag{3.23a}$$

Başlangıç şartı:

$$c(x,0) = 0 \tag{3.23b}$$

olarak verilir.

Sınır Şartları

$$x = 0\text{'da } \frac{n\delta(t)}{\pi a^2} = f_o\, c(0,t) - D_e \varepsilon \beta_D \frac{\partial c(0,t)}{\partial x} \tag{3.23c}$$

ve

$$x = L\text{'de } \frac{\partial c\,(L,t)}{\partial x} = 0 \tag{3.23d}$$

şekline dönüşür.

Böylece denklem takımının PD modeline de indirgenebileceği görülmektedir.

Görüldüğü gibi literatürde evvelce önerilmiş olan damlama yatak reaktörü modelleri, çalışmamıza esas teşkil eden modelin özel ve basitleştirilmiş halleri olarak ortaya çıkmaktadır.

III.3. SIVI AKIŞ PROFİLLERİ MODELİ

Yukarıda açıklanan model, sıvı akış hızları f_o, $f(x)$ ve $\omega(x)$ ile duvar akışı sıvı tabakası kalınlığı $d_\omega(x)$ değerleri veri olarak kabul edilerek geliştirilmiştir. Bunları kule içinde ayrıntılı olarak ölçmek mümkün olsa idi, elde edilen deneysel değerler doğrudan kullanılabilirdi. Elimizde bu nitelikte veri bulunmadığından Bölüm II.3 de özetlenen çalışmalar arasında en geliştirilmiş sıvı akış profilleri modelinden elde edilecek $f(x)$, $\omega(x)$ ve $d_\omega(x)$ değerlerinin önerilen denklem takımı içinde kullanılması yoluna gidilmiştir. Onda ve yardımcıları{40}, modeli açıkladıkları makalede sadece kısmi diferansiyel denklem takımı ile sonuçlarını göstermişlerdir. Bu nedenle denklem takımı bu çalışmanın çerçevesi içinde tekrar çözülmüştür. Denklemin boyutsuzlaştırılması, III.4 de, sonlu farklarla çözümü de Bölüm IV'te gösterilmiştir. Anahatları Bölüm II'de anlatılan modelin matematik tarifi şöyledir:

$$\frac{\partial f(r,x)}{\partial x} = \Lambda\left[\frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial^2 f}{\partial r^2}\right] \quad ; \quad x \geq 0 \tag{3.24}$$

$$x = 0 \qquad f(r,0) = f_o \;; \tag{3.25}$$

$$r = 0 \qquad \frac{\partial f}{\partial r}(0,x) = 0\;; \tag{3.26}$$

$$r = a \qquad -2\pi a\,\Lambda\left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_{r=a} = G\{\omega^*(x)-\omega(x)\} = \frac{d\omega(x)}{dx}\;; \tag{3.27}$$

Burada x, dolgu başlangıcından itibaren uzaklığı; r, kule ekseninden uzaklığı; f, r ve x'e bağımlı sıvı akış hızını (m^3/m^2 san); f_o, f'in $x = 0$ daki değerini;a, kule yarıçapını; Λ,sıvı yayılma katsayısını; ω, duvardan aşağıya süzülen sıvı akışını; ω^* mahalli sınırdaki ana dolgu akışı hızı ile dengeyi sağlıyan duvar akışı hızını göstermektedir; G ise ana dolgudan duvar akışı bölgesine konveksiyon yolu ile geçişin ampirik katsayısıdır. Yukarıdaki denklem takımında (3.24-3.27), denklem (3.24) dolgu içinde düşük akış hızı bölgelerine yüksek akış hızı bölgelerinden radiyal geçiş olduğunu, denklem (3.25) girişte sıvı akış hızlarının üniformluğunu ve denklem (3.27) akış profillerindeki radiyal simetriyi göstermektedir. Denklem (3.27) $\omega^*(x)$ değeriyle aynı yerdeki $\omega(x)$ değeri arasındaki farkı net konveksiyon itici gücü olarak kabul eden, iki bölge arasındaki sınır şartıdır. Denklem takımının parametreleri kuleden geçirilen sıvının su olduğu deneylerde ölçülerek aşağıdaki korelasyonlarla verilmiştir.

$$\Lambda = .00231\ d_p^{.5}\sigma \tag{3.28}$$

$$\omega^*(x) = .404\ \pi\, a \left[f(a,x)\right]^{.764} \tag{3.29}$$

σ'nın yüzey gerilimini, d_p'nin de nominal dolgu boyunu ifade ettiği bu denklemde Λ, metre cinsinden tarif edilmiştir. G parametresi de 18°C'da 4.2 m^{-1} olarak tesbit edilmiştir.

III.4. Denklemlerin Boyutsuzlandırılması

Yukarıda geliştirilen denklemlerin sonlu farklar yöntemi ile çözülebilmesi ve sonuçların daha evvelki modellerle karşılaştırılabilmesi için boyutsuzlandırılması gerekmektedir. Boyutsuz değişkenler şöyle tanımlanmıştır.

$u = \frac{c}{c_o}$ = boyutsuz ana dolgu bölgesi konsantrasyon değişkeni; z ve Θ'ya bağımlıdır. (3.30)

Burada $c_o = n/\pi a^2 L\varepsilon\beta_T$ olarak, n de giren izleyici mol sayısı olarak tanımlanır. (3.31)

$u^* = \frac{c^*}{c_o}$ = boyutsuz statik sıvı gözleri konsantrasyon değişkeni; z ve Θ'ya bağımlıdır. (3.32)

$v = \frac{c\omega}{c_o}$ = boyutsuz duvar akışı bölgesi konsantrasyon değişkeni; z ve Θ'ya bağımlıdır. (3.33)

$\Omega = \frac{\omega}{\pi a^2 f_o}$ = boyutsuz duvar bölgesi sıvı akış hızı; z'ye bağımlıdır. (3.34)

$z = x/L$ = boyutsuz eksenel koordinat. (3.35)

$\Theta = \frac{t f_o}{L\varepsilon\beta_T}$ = boyutsuz zaman değişkeni. (3.36)

$\Delta = \frac{d_\omega}{L}$ = boyutsuz duvar akışı bölgesi sıvı tabakası kalınlığı; z'ye bağımlıdır. (3.37)

$F = \frac{f}{f_o}$ = boyutsuz ana dolgu akış hızı (3.38)

$E = \frac{L}{a\beta_T}$ = boyutsuz kule geometrik sabiti. (3.39)

Kule içindeki konsantrasyon profillerini tarif eden denklemlerin boyutsuzlandırılması ile ortaya çıkan boyutsuz katsayı grupları şunlardır.

$$Pe = \frac{f_o}{\varepsilon\beta_T}\frac{L}{D_e} = \text{Peclet sayısı} \qquad (3.40)$$

$(f_o/\varepsilon\beta_T)$ kule girişindeki sıvı akış hızı olduğuna göre Pe'nin buradaki tanımlanması PD ve PDE modellerinde tanımlanan Pe sayısının aynıdır.

$$\phi = \frac{\beta_D}{\beta_T} = \text{dinamik sıvı tutma oranının toplam sıvı tutma oranına bölümü.} \qquad (3.41)$$

Bu parametre kule içindeki sıvının dinamik ve statik iki ayrı bölge olarak tanımlanması ile ortaya çıkar.

$$N = \frac{k_s L}{\phi f_o} = \text{dinamik ve statik sıvı bölgeleri arasındaki izleyici kütle transferini tanımlayan kütle transfer ünitesi sayısı.} \qquad (3.42)$$

N, Van Swaaij{71} tarafından aşağıda gösterilen terimler yolu ile tanımlanmaktadır.

$$N = \frac{KL}{u} \; ; \; K = \frac{kA}{\varepsilon\beta_D} \qquad (3.43a)$$

Burada k,iki sıvı bölgesi arasındaki kütle transferi katsayısını; A,iki sıvı arasındaki alanı; L,kule dolgusunun toplam yüksekliğini; ve u, sıvı akış hızını ifade etmektedir. kA,bu çalışmada k_s olarak, u da $f_o/\varepsilon\beta_T$ olarak tanımlanmıştır.

$$N = \frac{k_s L}{\varepsilon\beta_D u} = \frac{k_s L}{\varepsilon\beta_D}\left(\frac{\varepsilon\beta_T}{f_o}\right) = \frac{k_s L}{\phi f_o} \qquad (3.43b)$$

Böylece iki çalışmada kullanılan N parametresinin aynı şekilde tanımlandığı görülmektedir. PD ve PDE modellerinin Pe, ϕ, ve N parametrelerine bu çalışmada önerilen damlama yatak reaktör modeli ile R_N parametresi eklenir. Buna göre

$$R_N = \frac{2k_\omega L}{f_o a} \quad . \tag{3.44}$$

R_N duvar akışı bölgesi ile ana dolgu akışı bölgesi arasındaki difüzyona bağlı kütle transferinin boyutsuzlandırılmış katsayısıdır. Son olarak,

$$R_x = \frac{k_1 L}{f_o \phi} = \text{boyutsuzlandırılmış birinci mertebeden reaksiyon hızı sabiti olarak tanımlanır.} \tag{3.45}$$

Bu değişkenler ve parametrelerin kullanılması ile bu çalışmada önerilen model aşağıda gösterilen şekle dönüşmektedir.

$$\frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{1}{\phi}\frac{\partial}{\partial z}(F\,u) - N(u - u^*) - \frac{1}{\phi}\,u\frac{d\Omega}{dz} - R_x\,u - \frac{R_N}{\phi}(u-v) = \frac{\partial u}{\partial \Theta} \tag{3.46}$$

$$\frac{\partial u^*}{\partial \Theta} = \left(\frac{\phi}{1-\phi}\right)N(u-u^*) \tag{3.47}$$

$$\frac{1}{\Delta}\frac{1}{Pe}\frac{\partial}{\partial z}\left[\Delta\frac{\partial v}{\partial z}\right] - \frac{1}{2E\,\Delta}\frac{\partial}{\partial z}(\Omega\, v) + \frac{1}{2E\Delta}\,u\,\frac{d\Omega}{dz} + \frac{R_N}{2\,E\Delta}(u - v) = \frac{\partial v}{\partial \Theta} \tag{3.48}$$

Başlangıç şartları aşağıdaki gibidir.

$$\Theta = 0:\ u(z,0) = 0 \tag{3.49a}$$

$$\Theta = 0:\ u^*(z,0) = 0 \tag{3.49b}$$

$$\Theta = 0:\ v(z,0) = 0 \tag{3.49c}$$

Sınır şartları da aşağıda gösterilen şekli almaktadır.

$$z = 0:\ F(0) = 1 \tag{3.50a}$$

$$z = 0:\ \Omega(0) = 0 \tag{3.50b}$$

$$z = 0^+:v(0^+,\Theta) = u(0^+,\Theta) \tag{3.50c}$$

$$z = 0:\ \delta(\Theta) = u(0,\Theta) - \frac{\phi}{Pe}\ \frac{\partial u\ (0,\Theta)}{\partial z} \tag{3.50d}$$

$$z = 1:\ \frac{\partial u(1,\Theta)}{\partial z} = 0 \tag{3.50e}$$

$$z = 1:\ \frac{\partial v(1,\Theta)}{\partial z} = 0 \tag{3.50f}$$

Sıvı akış profillerini boyutsuzlandırmakta üç yeni tanımlamaya gerek vardır.

$\lambda = \dfrac{\Lambda}{a}$; boyutsuzlandırılmış sıvı yayılma katsayısı. (3.51a)

$\gamma = \dfrac{Ga}{2}$; boyutsuzlandırılmış duvar akışı bölgesine geçiş parametresi. (3.51b)

$\Omega^* = \omega^*/\pi a^2 f_0 =$ boyutsuzlandırılmış denge duvar akış hızı (3.51c)

Bu tanımlamalarla sıvı akış profillerini tanımlayan denklem, başlangıç ve sınır şartları aşağıdaki şekli almaktadırlar.

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \lambda \left[\frac{1}{R}\frac{\partial F}{\partial R} + \frac{\partial^2 F}{\partial R^2} \right] \tag{3.52}$$

$$z = 0;\ F(R,0) = 1 \tag{3.53}$$

$$R = 0;\ \frac{\partial F\ (0,z)}{\partial R} = 0 \tag{3.54}$$

Denklem (3.27) deki sınır şartı ikiye ayrılarak aşağıda gösterilen şekile dönüşür.

$$R = 1;\ \frac{\partial F(1,z)}{\partial z} = -\frac{\gamma}{\lambda}\left[\Omega^*(z) - \Omega(z)\right] \tag{3.55}$$

$$R = 1;\ \frac{d\Omega(z)}{dz} = 2\gamma\left[\Omega^*(z) - \Omega(z)\right] \tag{3.56}$$

Denklem (3.46) - (3.50)'de gösterilen reaktörde kalma süresi dağılım modeli ile denklem (3.52) - (3.56)'da gösterilen sıvı akış profilleri modellerinin denklemleri Bölüm IV de sonlu farklar yöntemleri ile çözülecektir.

BÖLÜM IV

DENKLEM TAKIMLARININ ÇÖZÜMLERİ

IV.1. Sonlu Farklar Metodları

u(x) fonksiyonu ve türevleri tek-değerli, sonlu, ve sürekli olduğunda, Taylor teoremine göre, b'nin ufak değerleri için

$$u(x + b) = u(x) + bu'(x) + \frac{1}{2} b^2 u''(x) + \frac{1}{6} b^3 u'''(x) + \ldots . \tag{4.1}$$

Burada u', u", u"' ..., sırası ile u fonksiyonunun birinci, ikinci, üçüncü, v.s., türevlerini ifade etmektedir. Gene Taylor teoremine göre

$$u(x - b) = u(x) - b\, u'(x) + \frac{1}{2} b^2 u''(x) - \frac{1}{6} b^3 u'''(x) + \ldots \tag{4.2}$$

Denklem (4.2), denklem (4.1)'den çıkarıldığında

$$u'(x) \cong \frac{1}{2b} \{u(x + b) - u(x - b)\} . \tag{4.3}$$

Bu denklemin yazılışında b^3 ve daha küçük terimler ihmal edilmiştir. Diğer taraftan (4.1) ve (4.2) deki denklemler toplanır ise, aynı yaklaşım kullanılarak

$$u''(x) \cong \frac{1}{b^2} \{u(x + b) - 2\, u(x) + u(x - b)\} \tag{4.4}$$

elde edilir.

Denklem (4.3) ve denklem (4.4) deki ifadeler u(x) fonksiyonunun birinci ve ikinci türevlerinin sonlu farklarda ve merkezi farklar yaklaşımı ile yazılmış halleridir.

Bu denklemler biraz değişik bir notasyonla şöyle yazılabilir.

$$u'(x) \cong \frac{1}{2(\Delta x)} (u_{j+1} - u_{j-1}) , \tag{4.5}$$

$$u''(x) \cong \frac{1}{(\Delta x)^2} (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}). \tag{4.6}$$

u fonksiyonu iki değişkene bağımlı ise, x'e göre kısmi türevleri benzer şekilde yazılır.

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \cong \frac{1}{2(\Delta x)} (u_{j+1,n} - u_{j-1,n}), \tag{4.7}$$

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \cong \frac{1}{(\Delta x)^2} (u_{j+1,n} - 2u_{j,n} + u_{j-1,n}). \tag{4.8}$$

Burada $x = j\ \Delta x$ ve $\Theta = n\ \Delta\Theta$ anlamını taşır. Böylece $u(x,\Theta) = u_{j,n}$ olarak yazılır. Bu tanımlamaları kısmi diferansiyel denklemlere ithal ederekdenklemleri çözmekte kullanılan metodlara{47,60,37} sonlu farklar metodları denir. Burada kullanılacak olan Crank-Nicolson kapalı (implicit) metodu, burada elde edilen parabolik tip kısmi diferansiyel denklemlerin çözümünde mutlak stabiliteyi sağlamaktadır. Buna göre u, u', ve u" nun değerleri, n ve n + 1'inci zaman adımlarındaki değerlerinin aritmetik ortalaması olarak hesaplanır.

Örneğin $\frac{\partial u}{\partial \Theta} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ denklemi açık (explicit) metodla

$$\frac{1}{\Delta\Theta} (u_{j,n+1} - u_{j,n}) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[u_{j+1,n} - 2u_{j,n} + u_{j-1,n} \right] \tag{4.9}$$

şeklinde yazılarak $u_{j,n+1}$ için çözülecek yerde, Crank-Nicolson metodu ile yazıldığında şu şekli alır.

$$\frac{1}{\Delta\Theta}(u_{j,n+1} - u_{j,n}) = \frac{1}{2}\left[\frac{u_{j+1,n+1} - 2u_{j,n+1} + u_{j-1,n+1}}{(\Delta x)^2}\right.$$

$$\left. + \frac{u_{j+1,n} - 2u_{j,n} + u_{j-1,n}}{\Delta x^2}\right] \qquad (4.10)$$

Kapalı metod çözümleri, açık metod çözümüne nazaran biraz daha çapraşık olmakla beraber, çözümlerin stabilitesini sağlama açısından genellikle tercih edilirler.

IV.2. Duvar Akışı Bölgesini İçeren Damlama Yatak Reaktör Modelinde Kalma Süresi Dağılımlarının Hesaplanması

Crank-Nicolson metoduyla açıldığında denklem (3.41) şu şekli alır:

$$u_{j,n+1}-u_{j,n}= \frac{r}{2Pe}u_{j+1,n+1}-\frac{r}{Pe}u_{j,n+1}+\frac{r}{2Pe}u_{j-1,n+1}$$

$$- \frac{\Delta\Theta}{4\phi\Delta z}F_{j+1}u_{j+1,n+1}+\frac{\Delta\Theta}{4\phi\Delta z}F_{j-1}u_{j-1,n+1}-\frac{N\Delta\Theta}{2}u_{j,n+1}$$

$$+ \frac{N\Delta\Theta}{2}u^*_{j,n+1}-\frac{\Delta\Theta}{4\phi\Delta z}(\Omega_{j+1}-\Omega_{j-1})u_{j,n+1}- \frac{R_x\Delta\Theta}{2}u_{j,n+1}$$

$$-\frac{R_N\Delta\Theta}{2\phi}u_{j,n+1}+\frac{R_N\Delta\Theta}{2\phi} v_{j,n+1}+\frac{r}{2Pe}u_{j+1,n}-\frac{r}{Pe}u_{j,n}$$

$$+ \frac{r}{2Pe}u_{j-1,n}-\frac{\Delta\Theta}{4\phi\Delta z}F_{j+1}u_{j+1,n}+\frac{\Delta\Theta}{4\phi\Delta z}F_{j-1}u_{j-1,n}$$

$$- \frac{N\Delta\Theta}{2}u_{j,n}+\frac{N\Delta\Theta}{2}u^*_{j,n}-\frac{\Delta\Theta}{4\phi\Delta z}(\Omega_{j+1}-\Omega_{j-1})u_{j,n}-\frac{R_x\Delta\Theta}{2}u_{j,n}$$

$$- \frac{R_N\Delta\Theta}{2\phi}u_{j,n}+\frac{R_N\Delta\Theta}{2\phi} v_{j,n} \quad . \tag{4.11}$$

Sonlu farklar metodlarında denklem, ilk zaman adımı ($n = 1$) de, başlangıç ve sınır şartlarının da kullanılması ile çözülür. Bundan sonraki her zaman adımı ($n+1$) de denklem, n'inci zaman adımı için elde edilmiş olan çözümdeki değerlerin de denklem (4.11)'e ithali ile, ve sınır şartları ile beraber çözülür. Burada üç bağımlı değişken, u, u^* ve v bulunmaktadır. Bunlardan $u_{j,n+1}$ denklem (4.11) den aşağıda gösterilen şekilde tasfiye edilir.

Denklem (3.47) yi sonlu farklar yaklaşımında

$$\frac{1}{\Delta\Theta}\left(u^*_{j,n+1} - u^*_{j,n}\right) = \frac{N\phi}{1-\phi}\left(u_{j,n+1} - u^*_{j,n+1}\right) \qquad (4.12a)$$

şeklinde yazıp, $u^*_{j,n+1}$'ya göre çözerek

$$u^*_{j,n\;1} = S_1 S_2\, u^*_{j,n+1} + S_1\, u^*_{j,n} \qquad (4.12b)$$

denklemi elde edilir. Burada

$$S_1 = \frac{1}{1+S_2} \quad \text{ve} \qquad (4.13a)$$

$$S_2 = \left(\frac{N\phi}{1-\phi}\right)\Delta\Theta \qquad (4.13b)$$

olarak tanımlanmıştır. Denklem (4.12b)'yi denklem (4.11) e ithal edip, bilinmiyenleri (n + 1 alt simgeli terimleri) denklemin sol tarafında toplıyarak

$$a_j u_{j-1,n+1} + b_j u_{j,n+1} + c_j u_{j+1,n+1} + S_5 v_{j,n+1} =$$

$$-a_j u_{j-1,n} + (S_8 - b_j) u_{j,n} - c_j u_{j+1,n} + S_7 u^*_{j,n}$$

$$- S_5 v_{j,n} \tag{4.14}$$

denklemi elde edilir. Bu denklemi gruplamak için denklem (4.13) deki S_1 ve S_2'ye ilave olarak aşağıdaki sabitler tanımlanmıştır.

$$S_3 = \frac{N\Delta\Theta}{2} \; ; \quad S_4 = 1 \tag{4.15a}$$

$$S_5 = \frac{R_N \; \Delta\Theta}{2\phi} \tag{4.15b}$$

$$S_6 = \frac{\Delta\Theta}{4\phi\Delta z} \tag{4.15c}$$

$$S_7 = -S_3(1 + S_1) \tag{4.15d}$$

$$S_8 = S_1 S_2 S_3 - 2 \tag{4.15e}$$

$$S_9 = \frac{R_x \; \Delta\Theta}{2} \tag{4.15f}$$

$$r = \frac{\Delta\Theta}{(\Delta z)^2} \qquad ; \; r_o = \frac{r}{2Pe} \tag{4.15g}$$

$$r_s = - \left(\frac{r}{Pe} + 1 + S_3 + S_5 + S_9 - S_1 S_2 S_3\right) \tag{4.15h}$$

$$a_j = r_o + S_6 F_{j-1} \qquad (4.15i)$$

$$b_j = r_s - S_6 (\Omega_{j+1} - \Omega_{j-1}) \qquad (4.15j)$$

$$c_j = r_o - S_6 F_{j+1} \qquad (4.15k)$$

F ve Ω terimleri akış hızları olup, ayrıca hesaplanarak bu denklemlerin çözümünde veri olarak kullanılacaktır. Buraya kadar yapılan işlem, $u_{j,n+1}$'ı taşıyan adi diferansiyel denklemi çözüp (4.11) e ithal ettikten sonra bu denklemi gruplamaktan ibarettir. Denklem (4.14) halen $v_{j,n+1}$ fonksiyonunu taşımaktadır. v'yi (4.11) den basit bir tasfiye yolu yoktur. İki kısmi diferansiyel denklemi ayırabilmek için denenen yarı açık bir çözüm metodu sayısal instabiliteye yol açmıştır. Bu nedenle ana dolgu akış bölgesi ile duvar akışı bölgesine ait iki kısmi diferansiyel denklemi birarada çözmek gerekecektir. Bu safhada yapılması gereken işlem denklem (3.46) dan, başlangıç ve sınır şartlarından ortaya çıkan matrisleri, v fonksiyonunu taşır halleri ile yazıp denklem (3.48)'in sonlu farklarda yazılması ile ortaya çıkacak matrislerle birleştirerek problemi peşpeşe çözülecek bir tek matris dizisine indirgemektir.

Bu noktada sınır şartlarının (3.50a-f) sonlu farklara uygulanmasına biraz daha yakından bakılmalıdır. Denklem (4.14) F_{j-1}, F_{j+1}, Ω_{j-1}, ve Ω_{j+1} terimlerini içermektedir. Giriş sınırında F_{j-1} ve Ω_{j-1}, çıkış sınırında da F_{j+1} ve Ω_{j+1} reaktör dışında kalır. Bu nedenle girişte bu terimleri taşıyan kısmi türevleri "ileri doğrultuda fark yaklaşımı" (forward difference approximation) ile yazmak gerekmektedir.

Diğer taraftan giriş sınırında ($j = 1$) duvar akış bölgesi henüz teşekkül etmemiştir. Bu yüzden $R_N(u-v)$ terimi ile $u \frac{d\Omega}{dz}$ terimi, yani duvar akışı bölgesine difüzyon ve konveksiyonla geçiş terimleri, kule girişi sınır şartlarını içeren denklemden düşer.

IV.2.1. Birinci Zaman Adımı

Birinci zaman adımında, denklem (4.11) $j = 1$ etrafında yazıldığında başlangıç şartları da kullanılarak aşağıda gösterilen hali alır.

$$u_{1,1} = \frac{r}{2Pe} u_{2,1} - \frac{r}{Pe} u_{1,1} + \frac{r}{2Pe} u_{0,1} - \frac{\Delta\Theta}{2\phi\Delta z} F_2 u_{2,1}$$

$$+\frac{\Delta\Theta}{2\phi\Delta z} F_1 u_{1,1} - \frac{N\Delta\Theta}{2} u_{1,1} + \frac{N\Delta\Theta}{2} u^*_{1,1} - \frac{R_x \, \Delta\Theta}{2} u_{1,1} \quad (4.16)$$

Bu denklemden $u_{0,1}$'in tasfiyesi gerekir. Denklem (3.50d),

$$\delta(\Theta) = u(0,\Theta) - \frac{\phi}{Pe} \frac{\partial u(0,\Theta)}{\partial z}$$

sonlu farklarla yazıldığında şu hali alır.

$$\frac{1}{\Delta\Theta} = u_{1,1} - \frac{\phi}{2Pe\Delta z} (u_{2,1} - u_{0,1}); \; n = 0 \; . \qquad (4.17a)$$

$$0 = u_{1,m} - \frac{\phi}{2Pe\Delta z} (u_{2,m} - u_{0,m}); \; m \geq 2 \; . \qquad (4.17b)$$

Denklem (4.17a) nın (4.16)'ya ithali ile birinci zaman adımı ($n+1 = 1$) için $j=1$ etrafındaki denklem şöyle yazılır.

$$b_1 u_{1,1} + c_1 u_{2,1} = - \frac{r\Delta z}{\phi\Delta\Theta} \; . \qquad (4.18)$$

Burada

$$b_1 = r_s - \frac{r\Delta z}{\phi} + 2S_6\ F_1 + S_5 \qquad (4.19a)$$

ve

$$c_1 = \frac{r}{Pe} - 2S_6F_2 \qquad (4.19b)$$

olarak tanımlanmıştır.

$j = 2$ etrafında yazılan denklemde (3.50c) de gösterilen sınır şartı geçerlidir:

$$v(0^+,\Theta) = u(0^+,\Theta). \qquad (3.50c)$$

Bu şart

$$v_{2,1} = u_{2,1} \qquad (4.20)$$

eşitliğini gerektirir. Bu durumda denklem (3.46) daki $R_N(u - v)$ terimi tekrar düşer. Genel sonlu farklar denklemi (4.11) şu şekile indirgenir.

$$a_2v_{1,1} + b_2\ v_{2,1} + c_2\ v_{3,1} = 0 \qquad (4.21)$$

Buradaki a_2 ve c_2 (4.15i) ve (4.15k) denklemlerinde tanımlanmıştır. b_2 ise genel terimden farklı olarak aşağıdaki şekilde tanımlanır:

$$b_2 = r_s + S_5 - S_6(\Omega_3 - \Omega_1) \qquad (4.22)$$

Birinci zaman adımı matrisinde j'nin ($2 < j < JM$) değerlerini taşıdığı denklemler ise şöyle yazılır.

$$a_j u_{j-1,1} + b_j u_{j,1} + c_j u_{j+1,1} + S_5 v_{j,1} = 0; \quad 3 \le j < JM \qquad (4.23)$$

Burada a_j, b_j, c_j ve S_5, (4.15) te tanımlanmıştır.

Çıkışta (j = JM), sınır şartı (3.50e) geçerlidir.

$$\frac{\partial u(1,\Theta)}{\partial z} = 0 \qquad (3.50e)$$

u fonksiyonunun birinci türevleri sıfıra eşitlenip diğer gruplamalar tamamlanınca, (4.11)'den çıkış sınırı denklemi elde edilir.

$$\frac{r}{Pe} u_{JM,1} + \left[r_s - 2S_6(F_{JM} - F_{JM-1} + \Omega_{JM} - \Omega_{JM-1}) \right] u_{JM,1} + S_5 v_{JM,1} = 0 \qquad (4.24)$$

IV.2.2. İkinci ve Sonraki Zaman Adımları

Birinci matrisde olduğu gibi burada da (j=1) de duvar akış bölgesi olmadığından, bu bölgeye konveksiyon ve difüzyon vasıtasıyla izleyici transferini tanımlayan terimler düşer. Gene birinci matrisde olduğu gibi, F'-nin türevlerini içeren terimler ileri doğrultuda fark yaklaşımı ile yazılır. Denklem (4.11) bu şartlar altında şu hali alır:

$$u_{1,2} - u_{1,1} = \frac{r}{2Pe} u_{2,2} - \frac{r}{Pe} u_{1,2} + \frac{r}{2Pe} u_{0,2} - \frac{\Delta\Theta}{2\phi\Delta z} F_2 u_{2,2}$$

$$+ \frac{\Delta\Theta}{2\phi\Delta z} F_1 u_{1,2} - \frac{N\Delta\Theta}{2} u_{1,2} + \frac{N\Delta\Theta}{2} u^*_{1,2} - \frac{R_x\Delta\Theta}{2} u_{1,2} + \frac{r}{2Pe} u_{2,1} - \frac{r}{Pe} u_{1,1}$$

$$+ \frac{r}{2Pe} u_{0,1} - \frac{\Delta\Theta}{2\phi\Delta z} F_2 u_{2,1} + \frac{\Delta\Theta}{2\phi\Delta z} F_1 u_{1,1} - \frac{N\Delta\Theta}{2} u_{1,1} + \frac{N\Delta\Theta}{2} u^*_{1,1}$$

$$- \frac{R_x\Delta\Theta}{2} v_{1,1} \qquad (4.25)$$

$u_{0,1}$, $u_{0,2}$ ve $u^*_{1,2}$'nun tasfiyesi için sırasıyla denklem (4.17a-b) ve denklem (4.12) denklem (4.25)'e ithal edilerek, ikinci zaman adımının (j=1) etrafındaki denklemi şu şekilde yazılır:

$$b_1u_{1,2} + c_1u_{2,2} = (S_8-b_1)u_{1,1}-c_1u_{2,1}+S_7u^*_{1,1} - \frac{r\Delta z}{\phi\Delta\Theta} \quad (4.26)$$

Denklemin sabitleri denklem (4.15) ve denklem (4.19a-b) ile tanımlanmıştır.

İkinci zaman adımının (j=2) etrafındaki denklemi yazılırken denklem (3.50c) ve denklem (4.20) gözönünde bulundurulur. $R_N(u-v)$ terimi gene sıfıra eşittir. Denklem (4.11) den başlıyarak

$$a_2u_{1,2}+b_2u_{2,2}+c_2u_{3,2} = S_7u^*_{2,1}-a_2u_{1,1}+(S_8-b_2)u_{2,1} - c_2u_{3,1} \quad (4.27)$$

elde edilir. Burada b_2 denklem (4.22), diğer sabitler de denklem (4.15) ile tanımlanmıştır.

İkinci zaman adımının ($3\leq j<JM$) denklemleri denklem (4.11)'den, n+1 = 2 eşitliğinden faydalanılarak yazılır.

$$a_ju_{j-1,2}+b_ju_{j,2}+c_ju_{j+1,2}+S_5v_{j,2} = -a_ju_{j-1,1}+(S_8-b_j)u_{j,1} - c_ju_{j+1,1}+S_7u^*_{j,1}-S_5v_{j,1} \quad (4.28)$$

Bu denklemin sabitleri denklem (4.15) te tanımlanmıştır.

İkinci zaman adımının son denklemi, ($j=JM$), denklem (4.24) ile aynı şekilde elde edilir. u fonksiyonunun birinci türevleri sıfıra eşitlendikten sonra elde edilen denklem aşağıda gösterilmiştir.

$$a_{JM}u_{JM-1,2}+b_{JM}u_{JM,2}+S_5v_{JM,2}=-S_5v_{JM,1}+S_7u^*_{JM,1}-\frac{r}{Pe}u_{JM-1,1}$$

$$+(S_8-b_{JM})u_{JM,1} \qquad (4.29a)$$

Burada a_{JM} ve b_{JM}

$$a_{JM} = r/Pe \qquad (4.29b)$$

$$b_{JM} = r_s-2S_6(F_{JM}-F_{JM-1}+\Omega_{JM}-\Omega_{JM-1}) \qquad (4.29c)$$

ifadeleriyle tanımlanır.

Üçüncü ve sonraki zaman adımları için yazılan denklemler ikinci zaman adımı için yazılanlara çok benzemektedir. Aradaki tek fark üçüncü zaman adımından itibaren denklem (4.26) nın sağ tarafındaki $-\frac{r\Delta z}{\phi\Delta\Theta}$ teriminin düşmesidir:

$$b_1u_{1,m}+c_1u_{2,m}=(S_8-b_1)u_{1,m-1}-c_1u_{2,m-1}+S_7u^*_{1,m-1}; \quad m \geq 3$$

$$(4.30)$$

Burada elde edilen tüm denklemler, Bölüm IV.2.4 te özetlenecektir.

IV.2.3. Duvar Akışı Bölgesi

Duvar akışı bölgesindeki konsantrasyon profillerini tanımlayan denklem (3.48), u ve v bağımlı fonksiyonlarını içermektedir. Sıvı tabakası kalınlığı, Δ, ve duvar akışı hızı Ω'nın değerleri Onda modeli ile hesaplanarak denkleme sayısal veri olarak katılacaktır. Burada yapılacak olan işlem, her zaman adımında, kule boyunca duvar akışı konsantrasyonlarını hesaplıyacak matrisi yazıp ortaya çıkan matris dizisini ana dolgu matrisleri ile birleştirerek tek matris dizisi elde etmektir. Denklem (3.48) Crank-Nicolson metodunda şöyle yazılır.

$$
\begin{aligned}
v_{j,n+1}-v_{j,n} = {} & \frac{r}{2Pe}\, v_{j+1,n+1}-\frac{r}{Pe}v_{j,n+1}+\frac{r}{2Pe}v_{j-1,n+1} \\
& +\frac{r}{8Pe}\left[\frac{\Delta_{j+1}-\Delta_{j-1}}{\Delta_j}\right] v_{j+1,n+1}-\frac{r}{8Pe}\left[\frac{\Delta_{j+1}-\Delta_{j-1}}{\Delta_j}\right] v_{j-1,n+1} \\
& -\frac{\Delta\Theta}{8E\Delta z}\,\frac{\Omega_{j+1}}{\Delta_j}\, v_{j+1,n+1}+\frac{\Delta\Theta}{8E\Delta z}\,\frac{\Omega_{j-1}}{\Delta_j}\, v_{j-1,n+1} \\
& +\frac{\Delta\Theta}{8E\Delta z}\left[\frac{\Omega_{j+1}-\Omega_{j-1}}{\Delta_j}\right] u_{j,n+1}+\frac{R_N\Delta\Theta}{4E\Delta_j}\, u_{j,n+1}-\frac{R_N\Delta\Theta}{4E\Delta_j}\, v_{j,n+1} \\
& +\frac{r}{2Pe}\, v_{j+1,n}-\frac{r}{Pe}\, v_{j,n}+\frac{r}{2Pe}\, v_{j-1,n}+\frac{r}{8Pe}\left[\frac{\Delta_{j+1}-\Delta_{j-1}}{\Delta_j}\right] v_{j+1,n} \\
& -\frac{r}{8Pe}\left[\frac{\Delta_{j+1}-\Delta_{j-1}}{\Delta_j}\right] v_{j-1,n}-\frac{\Delta\Theta}{8E\Delta z}\,\frac{\Omega_{j+1}}{\Delta_j}\, v_{j+1,n} \\
& +\frac{\Delta\Theta}{8E\Delta z}\,\frac{\Omega_{j-1}}{\Delta_j}v_{j-1,n}+\frac{\Delta\Theta}{8E\Delta z}\left[\frac{\Omega_{j+1}-\Omega_{j-1}}{\Delta_j}\right] u_{j,n}+\frac{R_N\Delta\Theta}{4E\Delta_j}u_{j,n} \\
& -\frac{R_N\Delta\Theta}{4E\Delta_j}\, v_{j,n+1}. \qquad (4.31)
\end{aligned}
$$

Denklem (4.31) deki (n+1) alt simgeli terimleri sol tarafta toplayıp , (n) alt simgeli terimleri de sağ tarafta grupladıktan sonra, denklemi daha sade bir şekilde yazabilmek için şu tanımlamalar yapılmıştır.

$$Q_1 = \frac{R_N \Delta\Theta}{4E} \tag{4.32a}$$

$$Q_2 = -\frac{\Delta\Theta}{8E\Delta z} \tag{4.32b}$$

$$Q_5 = -\frac{Q_2}{S_6} \tag{4.32c}$$

$$Q_M = -Q_2 \tag{4.32d}$$

$$a'_j = \frac{r}{2Pe} - \left[\frac{\Delta_{j+1}-\Delta_{j-1}}{\Delta_j}\right]\frac{r}{8Pe} + \frac{\Delta\Theta}{8E\Delta z}\,\frac{\Omega_{j-1}}{\Delta_j} \tag{4.33a}$$

$$b'_j = -\left[\frac{r}{Pe}+1+\frac{R_N\Delta\Theta}{4E}\,\frac{1}{\Delta_j}\right] \tag{4.33b}$$

$$c'_j = \frac{r}{2Pe} + \left[\frac{\Delta_{j+1}-\Delta_{j-1}}{\Delta_j}\right]\frac{r}{8Pe} - \frac{\Delta\Theta}{8E\Delta z}\,\frac{\Omega_{j+1}}{\Delta_j} \tag{4.33c}$$

$$d'_j = Q_M\left[\frac{\Omega_{j+1}-\Omega_{j-1}}{\Delta_j}\right] + \frac{Q_1}{\Delta_j} \tag{4.33d}$$

Bu tanımlamalarla, duvar akışı bölgesi genel denklemi (4.31) aşağıdaki şekle dönüşür.

$$a'_j v_{j-1,n+1} + b'_j v_{j,n+1} + c'_j v_{j+1,n+1} + d'_j u_{j,n+1} = -a'_j v_{j-1,n} + \left[\frac{r}{Pe} - 1 + \frac{Q_1}{\Delta_j}\right] v_{j,n} - c'_j v_{j+1,n} - d'_j u_{j,n} \tag{4.34}$$

Sınır şartları, duvar akışının kule girişinin hemen altında başlamasını gerektirir. Bu itibarla denklem (3.48) in çözüm bölgesi (domain of solution) j=2 den itibaren başlar. Denklem (3.50c)'ye göre de j=2 noktasında, yani sınırın hemen içinde, iki akış bölgesi konsantrasyonlarının eşit olmasını gerektirir. Bu durumda duvar akışı bölgesinde bilinmeyen konsantrasyonlar j=3'ten başlamaktadır.

Birinci zaman adımında j=3 etrafındaki denklem, $u_{2,1}=v_{2,1}$ eşitliği de kullanıldığında şöyledir:

$$a_3^{\prime}u_{2,1}+d_3^{\prime}u_{3,1}+b_3^{\prime}v_{3,1}+c_3^{\prime}v_{4,1}=0 \qquad (4.35)$$

Bu denklem dizisinde j'nin (3 < j < JM) değerlerini taşıdığı denklemler de şöyle yazılır.

$$a_j^{\prime}v_{j-1,1}+d_j^{\prime}u_{j,1}+b_j^{\prime}v_{j,1}+c_j^{\prime}v_{j+1,1}=0 \qquad (4.36)$$

Kulenin alt sınırında $(\partial v/\partial z)_{z=1}=0$. Denklem (3.48), v fonksiyonunun birinci türevlerinin sıfıra eşitlendiği durumda aşağıdaki şekle indirgenir.

$$\frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 v}{\partial z^2}-\frac{1}{2E\Delta}v\frac{\partial\Omega}{\partial z}\frac{u}{2E\Delta}\frac{\partial\Omega}{\partial z}\frac{R_N}{E\Delta}(u-v)=\frac{\partial v}{\partial\Theta} \qquad (4.37)$$

Burada Ω'yı içeren türevleri geri doğrultuda fark yaklaşımı ile yazılınca j=JM etrafındaki denklem aşağıda gösterilen şekli alır.

$$\frac{r}{Pe}v_{JM-1,1}+\left[2Q_M\frac{(\Omega_{JM}-\Omega_{JM-1})}{\Delta_{JM}}+\frac{Q_1}{\Delta_{JM}}\right]u_{JM,1}$$

$$-\left[\frac{r}{Pe}+1+2Q_M\frac{(\Omega_{JM}-\Omega_{JM-1})}{\Delta_{JM}}+\frac{Q_1}{\Delta_{JM}}\right]v_{JM,1}=0 \qquad (4.38a)$$

Burada

$$a_{JM}^{\prime}=\frac{r}{Pe} \qquad (4.38b)$$

$$d'_{JM} = 2Q_M \frac{(\Omega_{JM}-\Omega_{JM-1})}{\Delta_{JM}} + \frac{Q_1}{\Delta_{JM}} \tag{4.38c}$$

$$b'_{JM} = -\left[\frac{r}{Pe}+1+2Q_M \frac{(\Omega_{JM}-\Omega_{JM-1})}{\Delta_{JM}} + \frac{Q_1}{\Delta_{JM}}\right] \tag{4.38d}$$

olarak tanımlanarak denklem (4.38a) şöyle yazılır.

$$a'_{JM}v_{JM-1,1}+d'_{JM}u_{JM,1}+b'_{JM}v_{JM,1} = 0 \tag{4.38e}$$

Duvar akışı bölgesinde giriş sınır şartının şekli, ana akış bölgesindeki gibi zamana bağlı ve kademeli değildir. Bu yüzden başlangıç şartını taşıyan birinci zaman adımından sonra, $n \geq 1$ için kurulan matrisler birbirinin aynıdır. $j=3$ etrafındaki denklem yazılırken tekrar $u_{2,n+1} = v_{2,n+1}$ eşitliği kullanılır.

$$a'_3u_{2,n+1}+d'_3u_{3,n+1}+b'_3v_{3,n+1}+c'_3v_{4,n+1} = -a'_3v_{2,n} + \left[\frac{r}{Pe} -1 + \frac{Q_1}{\Delta_3}\right] v_{3,n}-c'_3v_{4,n}-d'u_{3,n} \tag{4.39}$$

j'nin $(3 < j < JM)$ değerleri etrafında yazılan denklemler ise aşağıda gösterilen şekilde yazılır.

$$a'_jv_{j-1,n+1}+d'_ju_{j,n+1}+b'_jv_{j,n+1}+c'_jv_{j+1,n+1} =-a'_jv_{j-1,n} \left\{\frac{r}{Pe} - 1+\frac{Q_1}{\Delta_j}\right\} v_{j,n} - c'_jv_{j+1,n}-d'_ju_{j,n} \tag{4.40}$$

Kule çıkış sınırında $(j=JM)$, denklem (4.37), Ω'nın geri doğrultuda fark yaklaşımı ile yazılan türevleri de kullanılarak aşağıdaki hali alır.

$$\frac{r}{Pe}v_{JM-1,n+1}+\left[2Q_M\frac{(\Omega_{JM}-\Omega_{JM-1})}{\Delta_{JM}}+\frac{Q_1}{\Delta_{JM}}\right]u_{JM,n+1}-\left[\frac{r}{Pe}+1\right.$$

$$\left.+2Q_M\frac{(\Omega_{JM}-\Omega_{JM-1})}{\Delta_{JM}}+\frac{Q_1}{\Delta_{JM}}\right]v_{JM,n+1} = -\frac{r}{Pe}v_{JM-1,n}$$

$$-\left[2Q_M\frac{(\Omega_{JM}-\Omega_{JM-1})}{\Delta_{JM}}+\frac{Q_1}{\Delta_{JM}}\right]u_{JM,n}+\left[\frac{r}{Pe}-1\right.$$

$$\left.+2Q_M\frac{(\Omega_{JM}-\Omega_{JM-1})}{\Delta_{JM}}+\frac{Q_1}{JM}\right]v_{JM,n} \qquad (4.41)$$

IV.2.4. Denklem Dizisinin Çözümü

Bölüm II.2 ve II.3 de ana dolgu akış bölgesi ve duvar akışı bölgesindeki izleyici konsantrasyonlarını tanımlayan iki kısmi diferansiyel denklem birer lineer denklem dizisine indirgenmişlerdir. Her zaman adımı için bir defa çözülmesi gereken bu iki dizi denklem ilkinde v ikincisinde de u fonksiyonlarının bulunması nedeniyle birbirine bağımlıdırlar. (n+1) zaman adımında bilinmeyenler ($u_{1,n+1}$, $u_{2,n+1}$, $u_{3,n+1}$, $u_{4,n+1}$........ $u_{JM-1,n+1}$, $u_{JM,n+1}$) dizisi ile ($v_{3,n+1}$, $v_{4,n+1}$, ..., $v_{JM-1,n+1}$, $v_{JM,n+1}$) dizisidir. $u^*_{j,n}$ ise denklem (4.12) yolu ile $u_{j,n}$ dizisinden yararlanarak hesaplanabilmektedir. Bu aşamada iki bilinmeyen dizisini aşağıda gösterilen yöntemle bir tek bilinmeyen dizisine indirgemek gerekmektedir.

$$j = 1;\ y_{1,n+1} = u_{1,n+1};$$

$$j = 2;\ y_{2,n+1} = u_{2,n+1};$$

$$j = 3;\ y_{3,n+1} = u_{3,n+1};\ y_{4,n+1} = v_{3,n+1}.$$

$$j = 4;\ y_{5,n+1} = u_{4,n+1};\ y_{6,n+1} = v_{4,n+1}.$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \tag{4.42}$$

$$j = J;\ y_{2J-3,n+1} = u_{J,n+1};\ y_{2J-2,n+1} = v_{J,n+1}.$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$j = JM;\ y_{2JM-3,n+1} = u_{JM,n+1};\ y_{2JM-2,n+1} = v_{JM,n+1}.$$

Böylece birbirine akuple iki lineer denklem dizisi birleştirilebilir. Ortaya çıkan denklem dizisi beşli bir bant matrisine dönüşebilecek niteliktedir. Buna uyarak diyagonal elementin alt simgeleri (j,3) olarak yazılır. (n+1)'inci zaman adımında denklem dizisi şu hali alır.

Giriş Sınır Denklemleri

$$j=1 \qquad A_{1,3}y_1+A_{1,4}y_2 = B_1$$

$$j=2 \qquad A_{2,2}y_1+A_{2,3}y_2+A_{2,4}y_3 = B_2$$

$$j=3 \qquad A_{3,2}y_2+A_{3,3}y_3+A_{3,4}y_4+A_{3,5}y_5 = B_3$$

$$j=3 \qquad A_{4,1}y_2+A_{4,2}y_3+A_{4,3}y_4 \qquad +A_{4,5}y_6 = B_4$$

$$j=4 \qquad A_{5,1}y_3 \qquad +A_{5,3}y_5+A_{5,4}y_6+A_{5,5}y_7 = B_5$$

$$j=4 \qquad A_{6,1}y_4+A_{6,2}y_5+A_{6,3}y_6 \qquad +A_{6,5}y_8 = B_6$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

Kule Gövdesi

$$j=J \qquad A_{2J-3,1}y_{2J-5} \qquad +A_{2J-3,3}y_{2J-3}+A_{2J-3,4}y_{2J-2}+A_{2J-3,5}y_{2J-1} = B_{2J-3}$$

$$j=J \qquad A_{2J-2,1}y_{2J-4}+A_{2J-2,2}y_{2J-3}+A_{2J-2,3}y_{2J-2} \qquad +A_{2J-2,1}y_{2J} = B_{2J-2}$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

Çıkış Sınırı Denklemleri

$$j=JM \qquad A_{2JM-3,1}y_{2JM-5} \qquad +A_{2JM-3,3}y_{2JM-3}+A_{2JM-3,4}y_{2JM-2} = B_{2JM-3}$$

$$j=JM \qquad A_{2JM-2,1}y_{2JM-4}+A_{2JM-2,2}y_{2JM-3}+A_{2JM-2,3}y_{2JM-2} = B_{2JM-2}$$

.... (4.43)

Burada bütün y terimlerinin ikinci alt simgesi olan (n+1) yazı işlemini kısaltmak amacı ile yazılmamıştır. Matris notasyonunda denklem (4.43) aşağıda gösterilen şekilde yazılabilir.

$$\underset{\approx}{A}\,\underset{\sim}{y} = \underset{\sim}{B} \qquad (4.44)$$

$\underset{\approx}{A}$ matrisi beş eleman genişlikli bir bant matrisi olup zaman adımlarının yürümesi ile değişmez. Vektör $\underset{\sim}{y}$, denklem (4.42) nin yazılışından da görülebileceği gibi her zaman adımındaki konsantrasyon dağılımlarıdır. $\underset{\sim}{B}$ vektörü ise, sonlu farklar denklemlerinin sağ tarafı olup, u_n ve v_n fonksiyonlarını içerdiğinden, elemanları olan B_{2j-3} ve B_{2j-2} her bir zaman adımı için değişik değerler alır.

$\underset{\approx}{A}$ matrisinin elemanları bir araya getirilen iki denklem dizisinin sol tarafındaki katsayılardan oluşan matrisdir.

$$\begin{array}{lllllll}
 & & A_{1,3}=b_1; & A_{1,4}=c_1; & A_{1,5}=0 & & j=1 \\
 & A_{2,2}=a_2; & A_{2,3}=b_2; & A_{2,4}=c_2; & A_{2,5}=0 & & j=2 \\
A_{3,1}=0\ ; & A_{3,2}=a_3; & A_{3,3}=b_3; & A_{3,4}=S_5; & A_{3,5}=c_3 & \rbrace & j=3 \\
A_{4,1}=a'_3; & A_{4,2}=d'_3; & A_{4,3}=b'_3; & A_{4,4}=0\ ; & A_{4,5}=c'_3 & & \\
A_{5,1}=a_4; & A_{5,2}=0\ ; & A_{5,3}=b_4; & A_{5,4}=S_5; & A_{5,5}=c_4 & \rbrace & j=4 \\
A_{6,1}=a'_4; & A_{6,2}=d'_4; & A_{6,3}=b'_4; & A_{6,4}=0\ ; & A_{6,5}=c'_4 & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\
A_{2J-3,1}=a_J; & A_{2J-3,2}=0\ ; & A_{2J-3,3}=b_J; & A_{2J-3,4}=S_5; & A_{2J-3,5}=c_J & \rbrace & j=J \\
A_{2J-2,1}=a'_J; & A_{2J-2,2}=d'_J; & A_{2J-2,3}=b'_J; & A_{2J-2,4}=0\ ; & A_{2J-2,5}=c'_J & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & &
\end{array}$$

$$\left.\begin{array}{l} A_{2JM-3,1}=a_{JM};\ A_{2JM-3,2}=0\ ;\ A_{2JM-3,3}=b_{JM};\ A_{2JM-3,4}=S_5 \\ A_{2JM-2,1}=a'_{JM};\ A_{2JM-2,2}=d'_{JM};\ A_{2JM-2,3}=b'_{JM} \end{array}\right\} j=JM$$

$$\text{............} \qquad (4.45)$$

Burada b_1 ve c_1 denklem (4.29a-b) ile; b_2 denklem (4.22) ile; a_j, b_j, c_j, S_5, denklem (4.15) ile; a_{JM} ve b_{JM} denklem (4.29 b-c) ile; a'_j, b'_j, c'_j, d'_j, denklem (4.33 a-d) ile; a'_{JM}, b'_{JM}, d'_{JM}, denklem (4.38 b-d) ile tanımlanmışlardır.

$\underset{\sim}{B}$ vektörü herbir zaman adımı için değerleri değişen elemanlardan oluşur. Birinci zaman adımı (n=0, n+1 = 1) de $\underset{\sim}{B}$ vektörü elemanlarının değerleri şöyledir:

$$n+1 = 1 \ ; \qquad B_1 = -\frac{r\Delta z}{\phi\Delta\Theta} \qquad (4.46a)$$

$$B_m = 0 \ ; \ (1 < m \leq 2JM-2) \qquad (4.46b)$$

İkinci zaman adımında $\underset{\sim}{B}$ vektörünün elemanları aşağıda gösterilen denklemler yolu ile değerlendirilirler.

$$B_1 = -\frac{r\Delta z}{\phi\Delta\Theta} + (S_8 - A_{1,3})u_{1,1} - A_{1,4}u_{2,1} + S_7 u^*_{1,1}$$

$$B_2 = -A_{2,2}u_{1,1} + (S_8 - A_{2,3})u_{2,1} - A_{2,4}u_{3,1} + S_7 u^*_{2,1}$$

$$B_3 = -A_{3,2}u_{2,1} + (S_8 - A_{3,3})u_{3,1} - A_{3,5}u_{4,1} + S_7 u^*_{3,1} - S_5 v_{3,1}$$

$$B_4 = -A_{4,1}v_{2,1} - A_{4,2}u_{3,1} - (A_{4,3}+2)v_{3,1} - A_{4,5}v_{4,1}$$

$\vdots$

$$B_{2J-3} = -A_{2J-3,1}u_{J-1,1} + (S_8 - A_{2J-3,3})u_{J,1} - A_{2J-3,5}u_{J+1,1} + S_7 u^*_{J,1} - S_5 v_{J,1}$$

$$B_{2J-2} = -A_{2J-2,1}v_{J-1,1} - A_{2J-2,2}u_{J,1} - (A_{2J-2,3}+2)v_{J,1} - A_{2J-2,5}v_{J+1,1}$$

$\vdots$

$$B_{2JM-3} = -A_{2JM-3,1}u_{JM-1,1} + (S_8 - A_{2JM-3,3})u_{JM,1} + S_7 u^*_{JM,1} - S_5 v_{JM,1}$$

$$B_{2JM-2} = -A_{2JM-2,1}v_{JM-1,1} - A_{2JM-2,2}u_{JM,1} - (A_{2JM-2,3}+2)v_{JM,1} \quad \ldots(4.47)$$

Üçüncü ve daha sonraki zaman adımlarında, $(n+1>2)$, u, u*, ve v fonksiyonlarının ikinci alt simgesi (n) olarak değişir. Yalnız B_1 bir terim eksiği ile şu hali alır.

$$B_1 = (S_8 - A_{1,3})u_{1,n} - A_{1,4}u_{2,n} + S_7 u^*_{1,n} \qquad (4.48)$$

$\underset{\sim}{B}$ vektörünün diğer elemanları (4.47) de gösterilen ifadelerle, her zaman adımı için baştan, hesaplanır.

Böylece Bölüm III.4'te, iki kısmi diferansiyel denklem, bir adi diferansiyel denklem ile gerekli başlangıç ve sınır şartlarından oluşan denklem takımı, denklem (4.44)'e göre

$$\underset{\approx}{A}\,\underset{\sim}{y} = \underset{\sim}{B} \qquad (4.44)$$

şeklinde özetlenen, birlikte çözümlenecek lineer cebirsel bir denklem dizisine indirgenmiştir. Bu dizi her zaman adımı için bir defa çözülerek, kule boyunca JM adet noktada u, u*, ve v fonksiyonlarının değerlerinin bulunmasını sağlamaktadır. Bu çözüme göre, her bir zaman adımında alt (çıkış)sınırında, $u_{JM,n+1}$ ve $v_{JM,n+1}$, yani ana dolgu akışı bölgesi çıkış konsantrasyonu değeri ile duvar akışı bölgesi çıkış konsantrasyonu değeri tesbit edilir. $u_{JM,n+1}$ ve $v_{JM,n+1}$'in akış hızlarına göre ağırlıklı ortalaması alınarak reaktörde kalış süresi dağılım fonksiyonununΘ'ya bağımlı değerleri

$$E(\Theta) = \frac{F_{JM}\ u_{JM}(\Theta) + \Omega_{JM}\ v_{JM}(\Theta)}{F_{JM} + \Omega_{JM}} \qquad (4.49)$$

denklemiyle hesaplanır.

Burada boyutsuzlandırılmış zaman, Θ,

$$\Theta = (n + 1)\ \Delta\Theta \qquad (4.50)$$

denklemi ile verilir.

$E(\Theta)$ elde edildikten sonra dağılımın sıfır noktası etrafındaki üç momenti hesaplanmıştır.

Kalış süresi dağılımlarını ve momentlerini hesaplamak üzere, bu çalışmada hazırlanan bilgisayar programı Ek 1'de gösterilmiştir. Beşli bant matrisini dönüştürme işlemi IMSL{23} program paketi, LEQT1B altprogramı ile gerçekleştirilmiştir. İntegrasyonlarda CUBINT alt-programı{10} kullanılmıştır.

IV.3. PDE Modelinden Reaktörde Kalma Süresi Dağılımlarının Hesaplanması

Bu çalışmada geliştirilen modelin, duvar akışı ihmal edilerek PDE modeline indirgenebileceği Bölüm III. 2 de gösterilmiştir. PDE modelinde, Dirac δ-fonksiyonu biçiminde bir darbe ile izleyici girişi yapıldığında, reaktörde kalma süresi dağılımları aşağıdaki denklem takımından yararlanarak hesaplanır.

$$\frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{1}{\phi}\frac{\partial u}{\partial z} - N(u - u^*) - R_x u = \frac{\partial u}{\partial \Theta} \tag{4.51}$$

$$\frac{\partial u^*}{\partial \Theta} = N\left(\frac{\phi}{1-\phi}\right)(u-u^*) \tag{4.52}$$

$$u(z,0) = 0;\ u^*(z,0) = 0 \tag{4.53}$$

$$\delta(\Theta) = u(0,\Theta) - \frac{\phi}{Pe}\frac{u(0,\Theta)}{\partial z} \tag{4.54}$$

$$\frac{\partial u}{\partial z}(1,\Theta) = 0 \tag{4.55}$$

Yukarıdaki terimlerin tanımlamaları Bölüm III de verilmiştir. Bu denklem takımının çözümü Bölüm IV.2 de özetlenen yöntemlere benzer olmakla birlikte daha sade işlemler gerektirmektedir. Villermaux ve van Swaaij{74} reaksiyon teriminin ihmal edildiği yarı sonsuz bir damlama yatak reaktöründe kalma süresi dağılımlarını analitik bir çözümle elde etmişlerdir. Gene reaksiyon terimini ihmal eden, fakat kapalı reaktör sınır şartını (denklem 4.55) kabul eden PDE modeli kullanılarak reaktörde kalma süresi dağılımlarının yaklaşık çözümü de analitik olarak elde edilmiştir{4}.

Bu çalışmada geliştirilen model ile PDE modelini hem reaksiyonlu, hem de reaksiyonsuz durumlarda karşılaştırmak amacıyla denklem (4.51-4.55) de gösterilen denklem takımı burada Crank-Nicolson kapalı şeması ile çözülmüştür. Denklem (4.51) bu yöntemle açılarak, terimler daha evvel görüldüğü şekilde gruplandırılmak suretiyle, aşağıda gösterilen hali almıştır.

$$c_1u_{j-1,n+1}+c_2u_{j,n+1}+c_3u_{j+1,n+1}=-c_1u_{j-1,n}+c_4u_{j,n}$$
$$-\,c_3u_{j+1,n}+c_5u^*_{j,n} \qquad (4.56)$$

Denklemin kısa halde yazılabilmesi için aşağıdaki tanımlamalar yapılmıştır.

$$c_1 = \frac{r}{2Pe} + \frac{\Delta\Theta}{4\phi\Delta z} \qquad (4.57a)$$

$$c_2 = -\left(\frac{r}{Pe} + 1 + G_3 - G_1G_2G_3 + G_4\right) \qquad (4.57b)$$

$$c_3 = \frac{r}{2Pe} - \frac{\Delta\Theta}{4\phi\Delta z} \qquad (4.57c)$$

$$c_4 = \frac{r}{Pe} - 1 + G_3 + G_4 \qquad (4.57d)$$

$$c_5 = -G_3(G_2 + 1) \qquad (4.57e)$$

$$G_1 = N\Delta\Theta\left(\frac{\phi}{1-\phi}\right) \qquad (4.57f)$$

$$G_2 = \frac{1}{1+G_1} \qquad (4.57g)$$

$$G_3 = \frac{N\Delta\Theta}{2} \qquad (4.57h)$$

$$G_4 = \frac{R_x\Delta\Theta}{2} \qquad (4.57i)$$

Başlangıç ve sınır şartlarının denklem (4.56)'ya Bölüm IV.2 de görülen yöntemlerle ithali, aşağıda gösterilen denklem dizilerinin elde edilmesini sağlamıştır:

a) Birinci zaman adımında (n=0) reaktör içindeki konsantrasyon dağılımı

$$G_5 u_{1,1} + G_6 u_{2,1} = G_8; \ (j=1) \tag{4.58a}$$

$$c_1 u_{j-1,1} + c_2 u_{j,1} + c_3 u_{j+1,1} = 0; \ (1<j<JM) \tag{4.58b}$$

$$G_6 u_{JM-1,1} + c_2 u_{JM,1} = 0; \ (j = JM) \tag{4.58c}$$

denklem dizisi ile hesaplanır. Denklemlerin kısa halde yazılabilmesi için aşağıda gösterilen sabitler tanımlanmıştır.

$$G_5 = c_2 - \frac{2Pec_1\Delta z}{\phi} \tag{4.59a}$$

$$G_6 = c_1 + c_3 \tag{4.59b}$$

$$G_7 = \frac{2Pec_1\Delta z}{\phi} + c_4 \tag{4.59c}$$

$$G_8 = -\frac{2Pe\ c_1\Delta z}{\phi\Delta\Theta} \tag{4.59d}$$

b) İkinci zaman adımında (n=1) denklem dizisi aşağıda gösterilen şekli alır.:

$$G_5 u_{1,2} + G_6 u_{2,2} = G_8 + G_7 u_{1,1} - G_6 u_{2,1} + c_5 u^*_{1,1}; \ j = 1 \tag{4.60a}$$

$$c_1 u_{j-1,2} + c_2 u_{j,2} + c_3 u_{j+1,2} = -c_1 u_{j-1,1} + c_4 u_{j,1} - c_3 u_{j+1,1} + c_5 u^*_{j,1}; \ (1 < j < JM) \tag{4.60b}$$

$$G_6u_{JM-1,2}+c_2u_{JM,2}=-G_6u_{JM-1,1}+c_4u_{JM,1}+c_5u^*_{JM,1} \; ; \; (j=JM) \qquad (4.60c)$$

c) Üçüncü ve sonraki zaman adımlarında denklem dizisi aşağıdaki şekilde yazılır.

$$G_5u_{1,n+1}+G_6u_{2,n+1}=G_7u_{1,n}-G_6u_{2,n}+c_5u^*_{1,n} \; ; \; (j=1) \qquad (4.61a)$$

$$c_1u_{j-1,n+1}+c_2u_{j,n+1}+c_3u_{j+1,n+1} = -c_1u_{j-1,n}+c_4u_{j,n}$$

$$- c_3u_{j+1,n}+c_5u^*_{j,n} \; ; \; (1 < j < JM) \qquad (4.61b)$$

$$G_6u_{JM-1,n+1}+c_2u_{JM,n+1} =-G_6u_{JM-1,n}+c_4u_{JM,n}+c_5u^*_{JM,n} \; ;(j=JM) \qquad (4.61c)$$

Yukarıdaki denklem dizisinden yararlanılarak elde edilen reaktörde kalma süresi dağılımları, Bölüm V'te, bu çalışmada geliştirilen model ve deney sonuçları ile karşılaştırılacaktır.

Hesaplamaları yapmak üzere hazırlanan bilgisayar programı Ek 2 de gösterilmiştir. Matris çözümü TRIDAG adlı alt-program ile yapılmıştır{5}.

IV.4. Sıvı Akış Profillerinin Hesaplanması

Sıvı akış profilleri modelinin geliştirildiği makalede {40} denklem takımının hangi yöntemle çözüldüğü açıklanmamıştır. Bu çalışmada geliştirilen modelde sıvı akış hızlarının veri olarak kullanılabilmesi için "Onda" modelinin denklemleri {(3.24)-(3.29)} boyutsuzlandırılarak denklem (3.52)-(3.56)'da gösterilen şekile dönüştürülmüştür. Bu bölümde denklem (3.52)-(3.56)'nın sonlu farklar yöntemi ile çözümü özetlenecektir. Çözüm, denklem (3.29)'un lineer olmayışı nedeniyle Gauss-

Siedel{60} iterasyonları yolu ile elde edilmiştir.

Denklem (3.52) Crank-Nicolson kapalı şeması ile şu şekilde yazılır.

$$\frac{1}{\Delta z}(F_{i,j+1}-F_{i,j})=\frac{\lambda}{2}\left[\frac{1}{2i(\Delta r)^2}(F_{i+1,j+1}-F_{i-1,j+1})\right.$$

$$+\frac{1}{(\Delta r)^2}(F_{i+1,j+1}-2F_{i,j+1}+F_{i-1,j+1})$$

$$\left.+\frac{1}{2i(\Delta r)^2}(F_{i+1,j}-F_{i-1,j})+\frac{1}{(\Delta r)^2}(F_{i+1,j}-2F_{i,j}+F_{i-1,j})\right] \quad \ldots\ldots (4.62)$$

Burada F ana dolgu akış hızını; i, radiyal doğrultudaki adım sayısını, j de eksenel doğrultudaki adım sayısını belirtmektedir. Gauss-Seidel iterasyon yöntemini kullanmak için denklem (4.62) nin, i'nin her değeri için yazılıp, $F_{i,j+1}$'e göre çözülmesi gerekir. Sınır şartları için de aynı denklemler yazıldıktan sonra, j adımı için evvelce hesaplanmış olan değerler bu denklemlere ithal edilerek F fonksiyonunun j + 1 adımındaki ilk yaklaşımı bulunur. Bundan sonra $F_{i,j}$ ve $F^{(1)}_{i,j+1}$ değerleri aynı denklemlerde kullanılarak, hesaplanan değerler stabilize olana kadar iterasyonlara devam edilir. Denklem (4.62) den $F_{i,j+1}$'e göre çözerek elde edilen (n+1)' inci iterasyon denklemi şöyledir:

$$F^{(n+1)}_{i,j+1}=\frac{\lambda r}{4(1+\lambda r)}\left[\left(\frac{2i+1}{i}\right)F^{(n)}_{i+1,j+1}+\left(\frac{2i-1}{i}\right)F^{(n+1)}_{i-1,j+1}\right]$$

$$+\frac{D_j}{(1+\lambda r)} \qquad (4.63)$$

Bu denklemde

$$r = \Delta R/(\Delta z)^2 \qquad \text{ve} \qquad (4.64a)$$

$$D_j = \frac{\lambda r}{4}\left(\frac{2i+1}{i}\right)F_{i+1,j}+(1-\lambda r)F_{i,j}-\frac{\lambda r}{4}\left(\frac{1-2i}{i}\right)F_{i-1,j} \qquad (4.64b)$$

olarak tanımlanmıştır. Denklemin sınır şartları, R = 0 ile R = 1'de verilmelidir. Radiyal simetri şartı, R= 0 da,

$$\frac{\partial F}{\partial z} \cong 2\lambda \frac{\partial^2 F}{\partial R^2} \qquad (4.65)$$

eşitliğini gerektirir. Bu denklem (4.62)'ye ithal edilerek F fonksiyonunun ana eksen üzerindeki değeri aşağıda gösterilen şekilde bulunur.

$$F_{1,j+1}^{(n+1)} = \frac{2\lambda r}{1+2\lambda r} F_{2,j+1}^{(n)}+\left(\frac{1}{1\ 2\lambda r}\right)\Big[2\lambda r F_{2,j} + (1-2\lambda r)\ F_{1,j}\Big] \qquad (4.66)$$

Ana dolgu sıvı akış hızının kule cidarındaki değerini hesaplıyabilmek için ise denklem (3.55) ve (3.56)'ın sonlu farklar yöntemi ile yazılması gerekmektedir.

$$\frac{1}{2\Delta r}(F_{IM+1,j+1}-F_{IM-1,j+1})=-\frac{\gamma}{\lambda}(AF_{IM,j+1}^{.764}-\Omega_{j+1}) \qquad (4.67a)$$

$$\frac{1}{2\Delta r}(F_{IM+1,j}-F_{IM-1,j})= -\frac{\gamma}{\lambda}(AF_{IM,j}^{.764} - \Omega_J) \qquad (4.67b)$$

$$\frac{1}{\Delta z}(\Omega_{j+1}-\Omega_j) = 2\gamma(AF_{IM,j+1}^{.764}- \Omega_{J+1}) \qquad (4.68)$$

Burada IM, radiyal doğrultudaki hesap adımı sayısı i' nin sınırdaki değeridir. A sabiti denklem (3.29)'un boyutsuzlaştırılmasından elde edilen sınır denge katsayısıdır. Denklem (4.67a)'yı $F_{IM+1,j+1}$'ye ve denklem (4.67b)'yi $F_{IM+1,j}$'ye göre çözüp sonuçları denklem (4.63) ye ithal ederek Gauss-Seidel iterasyon yönteminde F fonksiyonunun sınırdaki değerini tanımlayan denklem aşağıdaki şekilde yazılır:

$$F^{(n+1)}_{IM,j+1}+B\left(\frac{2i+1}{i}\right)\left(\frac{2\Delta r\gamma A}{\lambda}\right)\left(F^{(n+1)}_{IM,j+1}\right)^{.764}= 4BF^{(n+1)}_{IM-1,j+1}+B\left(\frac{2i+1}{i}\right)\frac{2\Delta r\gamma\Omega^{(n)}_{j+1}}{\lambda}$$

$$+\ \frac{D^{(IM)}_j}{1+\lambda r} \qquad (4.69)$$

Burada kullanılan B ve $D^{(IM)}_j$ terimleri şöyle tanımlanır.

$$B = \lambda r/4(1 + \lambda r) \qquad (4.70)$$

$$D^{(IM)}_j= (1-\lambda r)F_{IM,j}-\frac{\lambda r}{4}\left(\frac{2i+1}{i}\right)\left(\frac{2\Delta r\gamma A}{\lambda}\right)F^{.764}_{IM,j}$$

$$+\ \lambda r\ F_{IM-1,j}+\ \frac{\lambda r}{2}\left(\frac{2i+1}{i}\right)\ \frac{\Delta r\gamma}{\lambda}\ \Omega_j \qquad (4.71)$$

Kule ekseninden cidar doğrultusunda yürüyerek hesaplanan değerlerin sonuncusu duvar akış hızı Ω_{j+1}'dır. Denklem (4.68)'i Ω_{j+1} ya göre çözdükten sonra Gauss-Seidel iterasyon yöntemine göre yazarak

$$\Omega^{(n+1)}_{j+1} = \frac{1}{(1+2\gamma\Delta z)}\left[2\gamma\Delta z\ A\left(F^{(n+1)}_{IM,j+1}\right)^{.764}+\Omega_j\right] \qquad (4.72)$$

denklemi elde edilir.

Böylece, F fonksiyonu, kule ekseninde denklem (4.66), i'nin ($1 < i < IM$) değerlerinde denklem (4.63-4.64), radiyal sınırda denklem (4.69-4.71) ile hesaplanır. Dizinin son denklemi, duvara bitişik sıvı akış hızı Ω_{j+1} yı tanımlayan denklem (4.72) dir. İterasyonlar, yarıçap doğrultusundaki sıvı akış hızı profilinin ve duvar akış hızı Ω'ının değerlerini yakınsak hale getirene kadar devam ettirilmiştir.

Damlama yatak reaktörlerinde, cidara bitişik akan sıvı tabakasının kalınlığı ölçümlerine literatürde rastlanmamıştır. Burada, en iyi yaklaşım olarak, duvar tabakası (falling film) absorpsiyon cihazlarından elde edilen sıvı tabakası kalınlığı korelasyonundan faydalanılmıştır{42}.

$$d_\omega = \frac{.315\ \mu^{2/3}}{g^{1/3}\rho_f^{2/3}} \left[.079\ Re^{3/4}\right]^{2/3} \tag{4.73}$$

Bu denklemde, μ, sıvı viskozitesini, g yerçekimi ivmesini; ρ_f sıvı özgül ağırlığını; Re de Reynolds sayısını belirtmektedir. Burada Reynolds sayısının dolgulu kuleler için geçerli tanımı, duvar boyunca akan sıvının yüzeysel sıvı hızı ile birlikte kullanılacaktır{77}.

$$Re = \frac{D_p}{\mu} \frac{\omega\ \rho_f}{\pi(2ad_\omega - d_\omega^2)} \tag{4.74}$$

Reynolds sayısının tanımlanmasında kullanılan etkin dolgu maddesi boyu, D_p,

$$D_p = \frac{6(1-\varepsilon)}{\phi_s S} \tag{4.75}$$

denklemi ile ifade edilir. Bu son ifadede ε, kule boşluk oranını; ϕ_s, şekil faktörünü; $(\frac{S}{1-\varepsilon})$, dolgu maddesinin spesifik alanını ifade etmektedir{3}. ϕ_s Raschig halkaları için 0.3 değerini alır{78}.

ε ve $\frac{S}{1-\varepsilon}$ sabitlerinin değerleri, kullanılan dolgu boyları ile birlikte Tablo V.1 de gösterilmiştir. Kule ekseni boyunca her j hesap adımında, d_ω ve Δ denklem (4.73) ve denklem (4.74)'ün iterasyon yöntemi ile çözülmesi yoluyla hesaplanmıştır.

Bu çalışmada geliştirilen modelde veri olarak kullanılan Ω, Δ ve her kesitte F'nin ortalama değerini hesaplamak amacı ile hazırlanan bilgisayar programı, Ek 3'de gösterilmiştir.

IV.5. Reaktörde Kalma Süresi Dağılımlarının Hesaplanmasında Kullanılan Sayısal Veriler

Bu çalışmada geliştirilen model yolu ile reaktörde kalma süresi dağılımlarının hesaplanmasında kullanılan sayısal veriler çeşitli kaynaklardan elde edilmiştir.

Ana dolgunun boyutsuz ortalama sıvı akış hızı F, duvar bölgesi boyutsuz sıvı akış hızı Ω,ve duvar akışı boyutsuz sıvı tabakası kalınlığı Δ, Bölüm IV.4 te özetlenen yöntemlerle Ek 3'de gösterilen bilgisayar programı vasıtası ile hesaplanmıştır. Her üç fonksiyonun, eksenel koordinat z'ye bağımlı olarak hesaplanan değerleri sabit hafızada tutularak dağılımların hesaplanmasında kullanılmışlardır. F ve Ω birbirlerine $F = 1-\Omega$ denklemiyle bağımlı olduklarından, bu çalışmada yararlanılan altı deneyin akış profilleri sonuçları sadece Ω için gösterilmiştir (Şekil IV.1 ve Şekil IV.2). Boyutsuz sıvı tabakası kalınlığı Δ'nın değerleri sıfırdan başlıyarak hızla aşağıda gösterilen nihai değerlerine yaklaşmışlardır.

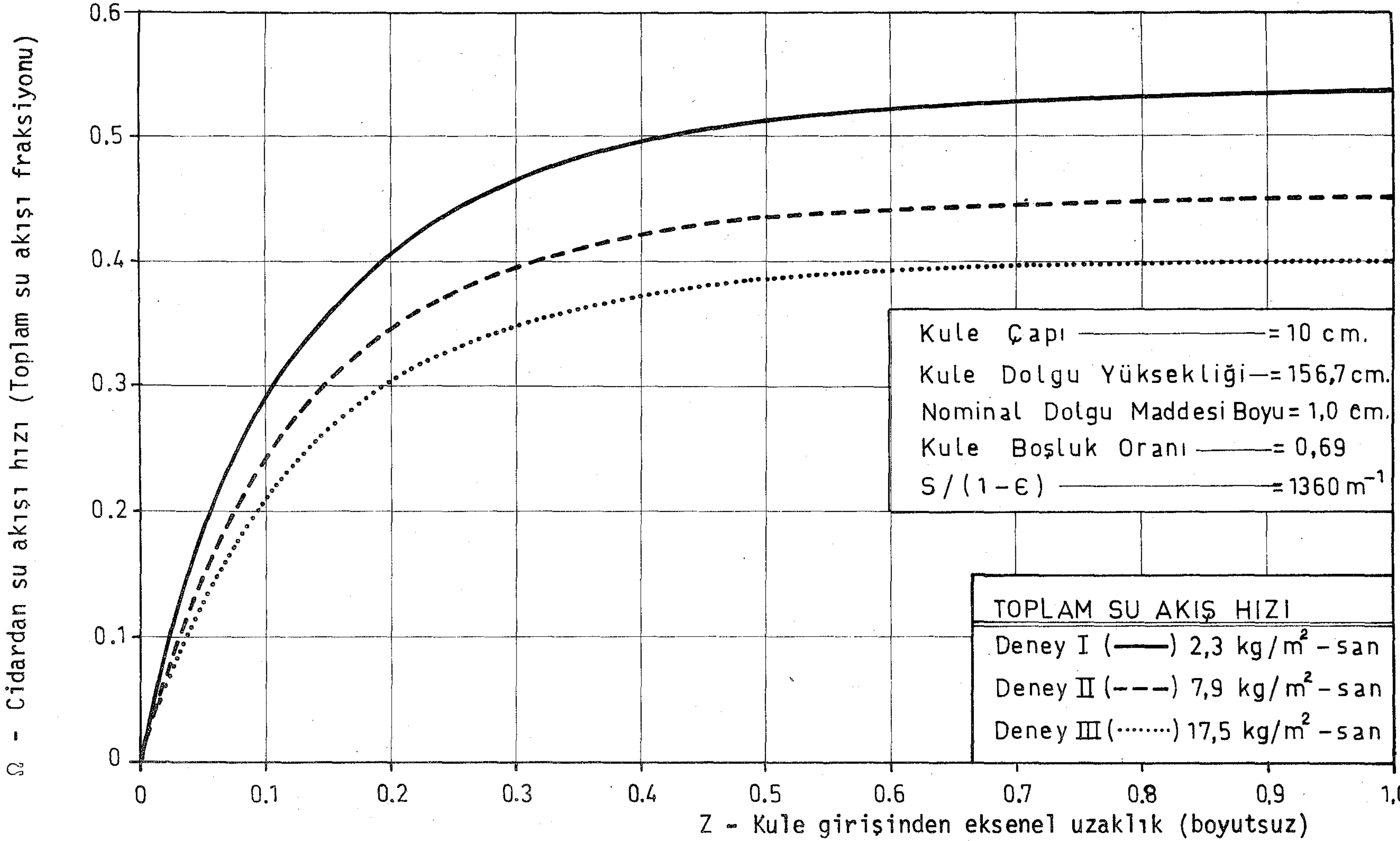
DENEY NO:	I	II	III	IV	V	VI
NİHAİ Δ DEĞERİ	3.56×10^{-4}	5.29×10^{-4}	6.79×10^{-4}	2.5×10^{-4}	3.36×10^{-4}	4.32×10^{-6}

Sonlu farklar yöntemlerinden yararlanarak denklem çözümleri hesaplanırken, fiziksel sistemin kaç elemana ayrıldığı ve zaman adımlarının büyüklüğü, çözüme varılmasında büyük önem taşır. $\Delta\Theta$'nın fazla büyük olması çözümün stabilitesini engelliyebileceği gibi, çok küçük olması da hesap sayısının çokluğu nedeniyle, sayıların yuvarlama hatalarının birikmesine yol açabilir. Gene $\Delta\Theta$'nın küçük olması, sonuçları etkilememekle beraber bilgisayarda hesap zamanının gereksiz şekilde uzamasına yol açabilir.

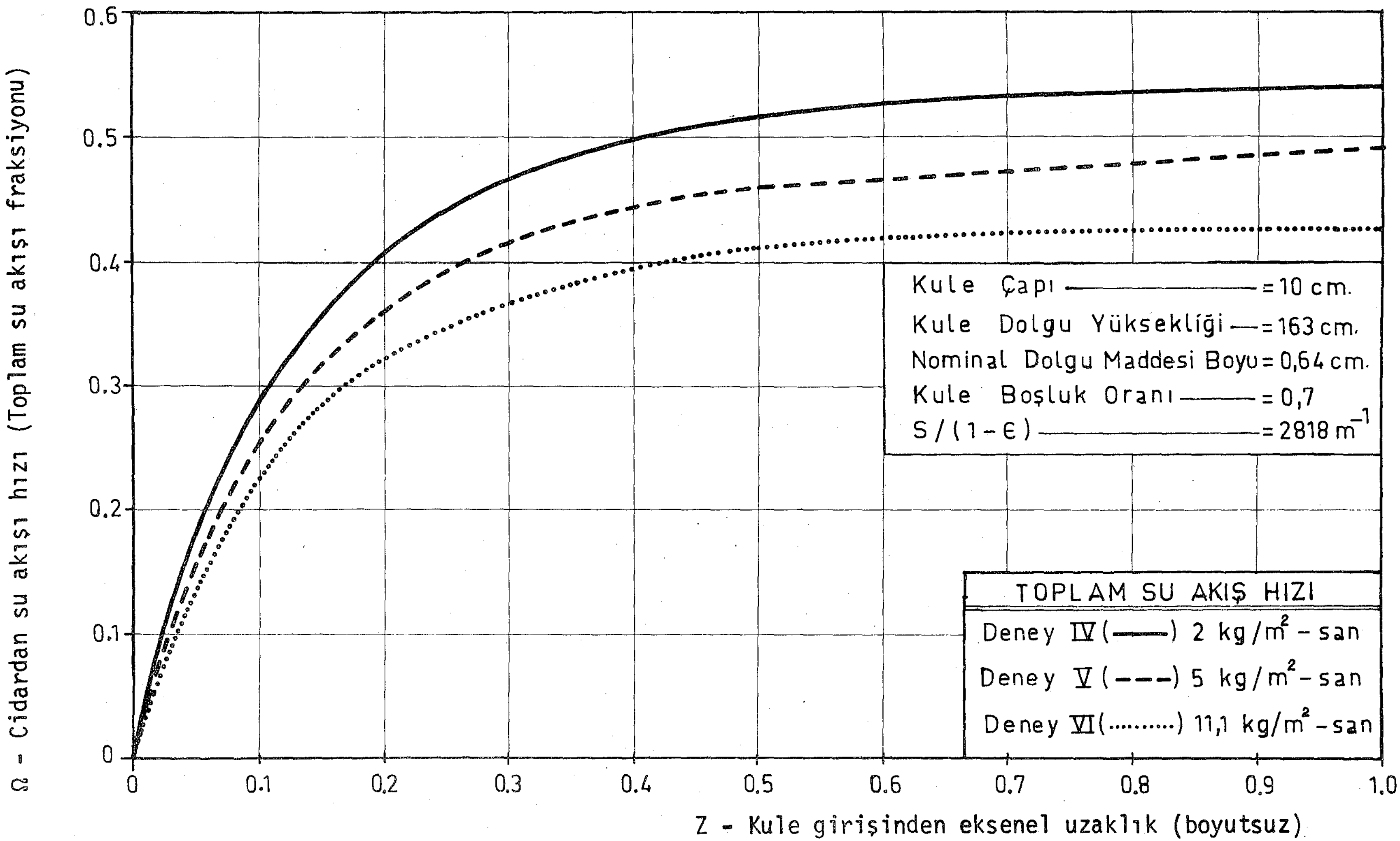
Bu çalışmada stabil çözüme varıldıktan sonra Δz ve $\Delta\Theta$'nın stabiliteyi ve çözüm hassasiyetini bozmayacak mümkün en yüksek değerleri almasına çalışılarak, bilgisayar hesap zamanını sınırlamaya gayret gösterilmiştir. Çözümlerde

$$\Delta z = .0025 \text{ ve } \Delta\Theta = .01$$

değerleri kullanılmıştır. $\Delta\Theta$'nın on misli küçülmesinin veya Δz'nin 2.5 kere küçültülmesinin, sonuçları % 0.5



Şekil IV.1 - Cidardan su akışı hızının eksenel uzaklığa bağlı olarak değişmesi.



Şekil IV.2 - Cidardan su akışı hızının eksenel uzaklığa bağlı olarak değişmesi mertebesinden fazla etkilemediği görülmüştür. Buna karşın hem Δz ve hem de $\Delta\Theta$'nın iki ilâ beş defa büyütülmesinin maksimum noktasının yüksekliğini ve boyutsuz zamanını % 1 ilâ % 2 civarında değiştirdiği görülmüştür.

Elde edilen eğriler

$$\int_0^\infty E(\Theta)d\Theta$$

integralinin bire eşit olup olmadığı kıstası ile değerlendirilmiş, ve hatanın binde 2 ilâ binde 7 arasında değiştiği görülmüştür. Her eğrinin hesaplanması 4 dakika civarında bilgisayar zamanı almıştır. PDE modelinden elde edilen dağılım eğrilerinin hesaplanması da takriben 2 dakika bilgisayar zamanı almıştır. Toplam olarak 350 kadar dağılım eğrisi hesaplanmıştır.

Reaktörde kalma süresi dağılımlarının hesaplanmasındaki diğer önemli bir parametre ϕ dir.

$$\phi = \frac{\beta_D}{\beta_T} \qquad (4.76)$$

Burada β_D, dinamik sıvı tutma oranını; β_T da toplam sıvı tutma oranını belirtmektedir. ϕ parametresinin gerek reaktörde kalma süresi dağılımlarını, ve gerekse de reaktör içindeki kimyasal dönüşmeyi büyük ölçüde etkilediği ötedenberi bilinmektedir{74,55}. ϕ parametresinin, sıvı akış hızları yükseldikçe arttığı, model hesaplamalarında da eğrinin dikleşmesini sağladığı görülmüştür. Bu çalışmada, deneysel reaktörde kalma süresi dağılımları ile birlikte ölçülen{71} kulede sıvı tutma oranlarından yararlanılmış, parametrenin değeri ancak ölçüm hatası seviyesinde düzeltmelerle denklem çözümleri içerisinde kullanılmıştır.

BÖLÜM V

SONUÇLARIN DEĞERLENDİRİLMESİ VE TARTIŞILMASI

V.1. Ölçülen ve Hesaplanan Reaktörde Kalma Süresi Dağılımlarının Karşılaştırması

Teorik olarak bir dağılım eğrisini sadece momentlerinin değerleri ile tamamen tanımlamak mümkündür{17}. Damlama yatak reaktörlerindeki dağılımların değerlendirilmesi de ötedenberi deneysel ve teorik momentlerin karşılaştırılması ile yapılmaktadır{34}. Örneğin PD modelinde, sıfır noktası etrafındaki birinci moment şöyledir:

$$\mu_1 = 1 \tag{5.1}$$

Ortalama değer, yani μ_1, etrafındaki ikinci moment (varyans) de şöyle ifade edilir{69}.

$$\sigma^2 = \frac{2}{Pe^2}\,(Pe-1+e^{-Pe}) \tag{5.2}$$

Elde edilen deneysel varyans ile bu denklemi karşılaştırarak Pe sayısı derhal hesaplanabilir.

Dağılım eğrisinin analizini momentlerinden giderek yapmanın bir cazip yönü de bu momentleri elde etmek için sistemi tanımlayan kısmi diferansiyel denklemi (veya denklemleri) çözmeye gerek olmayışıdır. Moment ifadeleri aşağıdaki genel denklemden bulunabilmektedir.

$$\mu_k = (-1)^k \lim_{s\to 0} \frac{\partial^k \bar{c}}{\partial s^k} \tag{5.3}$$

Burada μ_k, dağılımın k mertebeli momentini; $\overline{c}$, çıkış konsantrasyonunun Laplace-transformunu; s, transformasyonun kompleks değişkenini ifade eder.

Bu analiz yönteminin çok ciddi sakıncaları vardır. Momentler, dağılım eğrisinin şekline ve maksimum noktasının bulunduğu noktaya yeterli ağırlığı vermemektedir. Ayrıca dağılım eğrisi deneysel olarak ölçülürken, deneyi, ölçme cihazının hassasiyetinin altına düşen konsantrasyonlarda kesmek gerekir. Araştırmacılar bu işlemi genellikle, maksimum konsantrasyon değerinin % 1'i civarında yapmaktadırlar{14,53}.

Oysa ki özellikle asimetrik dağılımlarda, eğrinin uzayan kenarı, momentleri ve sıvı tutma oranı ölçümlerini{29} çok kritik ölçülerde etkiliyebilmektedir. Deneysel ve teorik momentlerin karşılaştırılması ile elde edilen Peclet sayısı, sonradan aynı data ve aynı (PD) modeli ile başka bir sayısal metodla (iki eğri arasında her noktadaki farkın karelerinin toplamının asgariye indirilmesi metoduyla) incelendiğinde öncekinin üç katı büyüklüğünde Pe değerleri bulunabileceği literatürde belirtilmiştir{8}

Bu çalışmada, ölçülen ve hesaplanan eğriler karşılaştırılarak model parametrelerinin değerleri bulunmuştur. Bu karşılaştırmada maksimum noktalarının birbirlerine mümkün olduğu kadar yaklaştırılmaları objektif ölçü olarak kullanılmıştır. Yukarıda bahsedilen, fark karelerinin toplamının minimum olması kıstası, daha hassas olmakla beraber, önerilen modelin bu aşamasında, büyük bilgisayar zamanı gerektiren bu metoda başvurma gereği hissedilmemiştir. Karşılaştırmalarda "en iyi" eğrinin bulunması beş ila otuz denemeyi gerektirmiştir.

Hesaplanan reaktörde kalma süresi dağılım eğrileri ile karşılaştırmada kullanılabilecek durumda olan data şaşılacak kadar azdır. Basılmış araştırmalar arasında, konsantrasyona karşı zaman eğrilerini tablo halinde verenlerine rastlanmamıştır. Pek çok araştırmada deney sonuçlarının niteliğini göstermek amacıyla kullanılan grafikler oldukça küçük ve pek az hassas bulunmuştur{29,53,72,74}. Bu konuda yurdumuzda yapılmış olan iki deneysel araştırmada, Eroğlu{14} gözenekli bir dolgu kullandığı için, Cansever de{79} ölçüm sisteminin hassas olmayışı yüzünden, burada kullanılabilir nitelikte data üretememişlerdir. Bu çalışmada hesaplanan eğriler, van Swaaij'in çalışmasında{71} verdiği deneysel eğrilerle karşılaştırılmıştır. Bu çalışmada Raschig halkaları ile doldurulmuş kulelerden su geçirilmiş, sodyum klorür çözeltileri izleyici vazifesi görmüş ve izleyici konsantrasyonları özel elektrodlardan faydalanılarak iletkenlik köprüsü ile sürekli olarak ölçülmüştür. Kullanılan deneylerin şartları Tablo V.1'de gösterilmiştir.

Tablo V.1. Karşılaştırmada Kullanılan Deneyler;

DENEY NO.	KULE DOLGU YÜKSEKLİĞİ (m)	NOMİNAL DOLGU BOYU (cm)	KULE BOŞLUK ORANI ε	$\frac{S}{1-\varepsilon}$ m^{-1}	SIVI AKIŞ MİKTARI, L kg/m^2-s
I	1.567	1.0	.69	1360	2.3
II	"	"	"	"	7.9
III	"	"	"	"	17.5
IV	1.63	0.64	.70	2818	2
V	"	"	"	"	5
VI	"	"	"	"	11.1

KULE ÇAPI = 10 cm, ÇALIŞMA TEMPERATÜRÜ = 20°C.

Reaktörde kalma süresi dağılımlarının hesaplanmasında veri olarak kullanılan sıvı akış hızları "Onda" modelininden hesaplanmıştır. Buna gerekli ek bilgiler şöyledir:

20^oC'da suyun viskozitesi = 1.0019×10^{-3} kg/m-san{3}

20^oC'da suyun yüzey gerilimi = 72.75 din/cm{39}

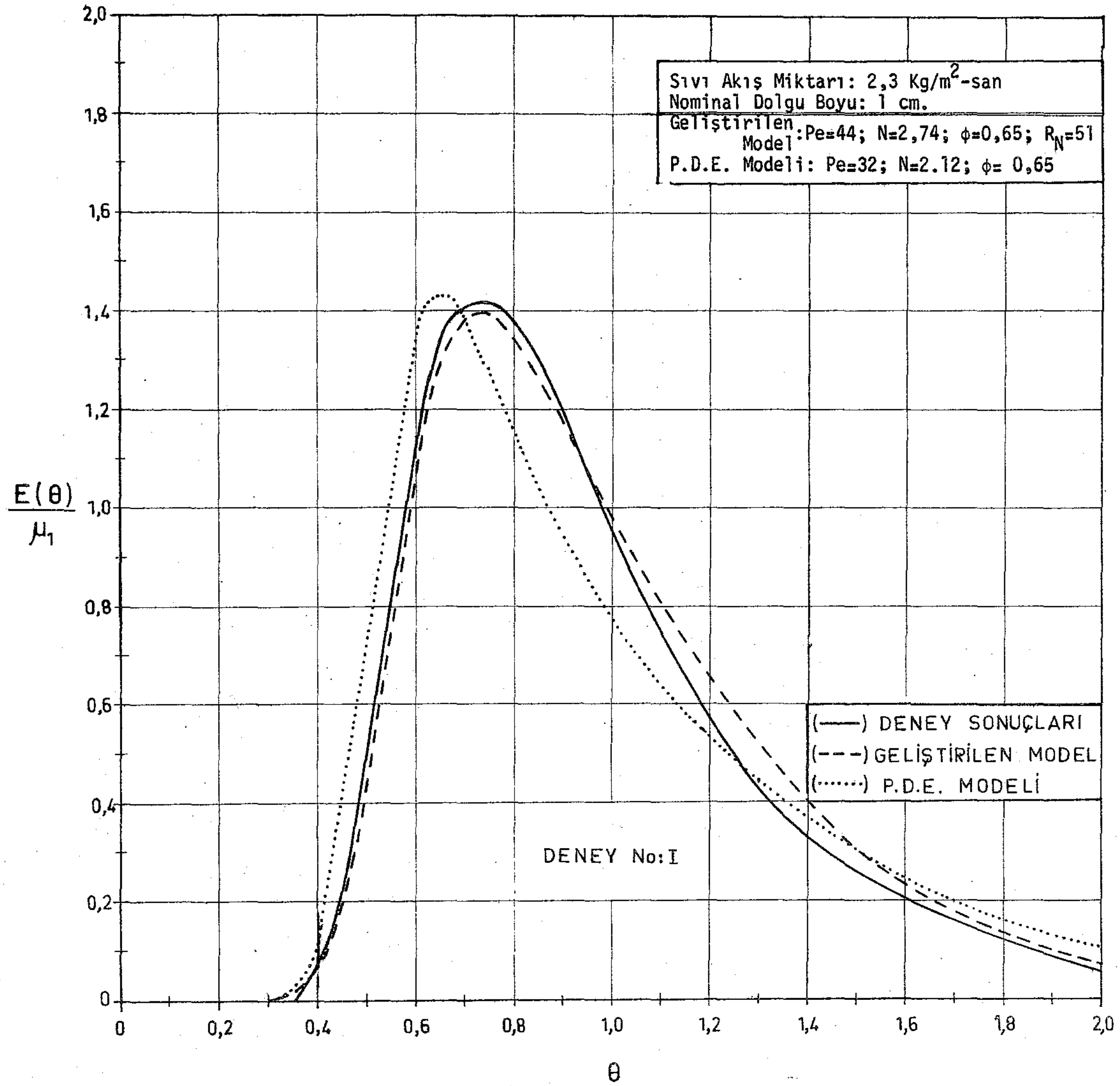
20^oC da suyun özgül ağırlığı = 998.0345 kg/m^3{26}

Raschig halkalarının şekil katsayısı = 0.3{78}

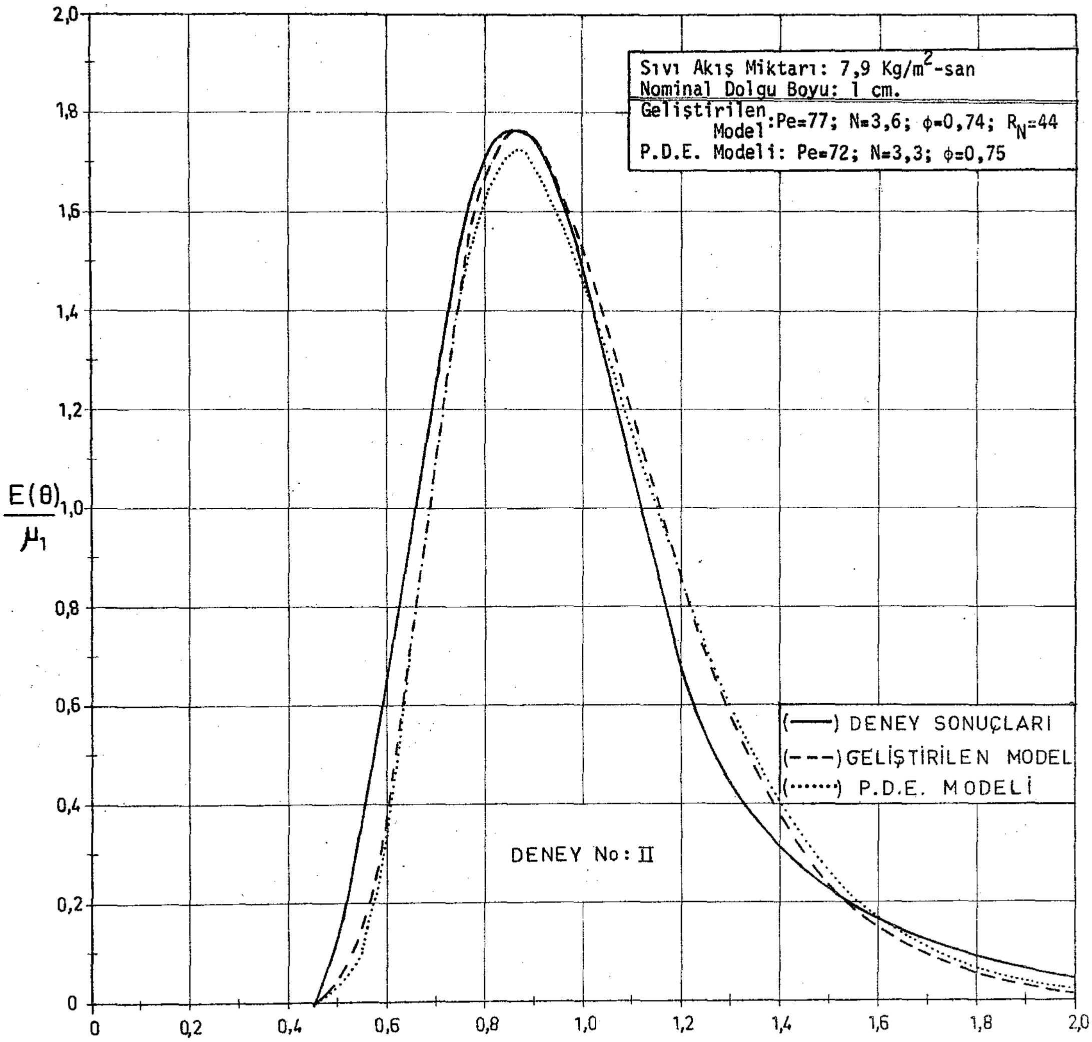
Şekil V.1.'den V.6.'ya kadar olan grafiklerde, Tablo I ile tanımlanan deneylerin sonuçları, PDE modeli ve bu çalışmada geliştirilen model ile karşılaştırılmıştır. van Swaaij{71} deney sonuçlarını $E(\Theta)$'nın Θ ile değişmesi şekli yerine $\{E(\Theta)/\mu_1\}$ ifadesinin Θ ile değişmesi şeklinde vermiştir. Burada deney ile karşılaştırma grafikleri de aynı şekilde sunulmuştur. Grafiklerden görüldüğü gibi bu çalışmada önerilen model, deneysel olarak gözlenen maksimum noktalarına erişmekte PDE modeline göre daha tatminkârdır. En düşük akış hızlarında deneysel maksimuma erişmekte güçlük çekilmiştir. Deneysel eğrilerin etekleri ile önerilen modelin etekleri daima üst üste binmemiştir; bu olay düşük akış hızlarında daha iyi gözlenebilmektedir. PDE modelinin deneysel maksimum noktasına erişebilmesi daha güç olmuştur. PDE modelini geliştiren çalışmanın devamı olarak yayınlanan bir makalede{74}

$$F(N,\phi) = \Sigma \left[E(\Theta_i, N, \phi) - E^*(\Theta_i) \right]^2$$

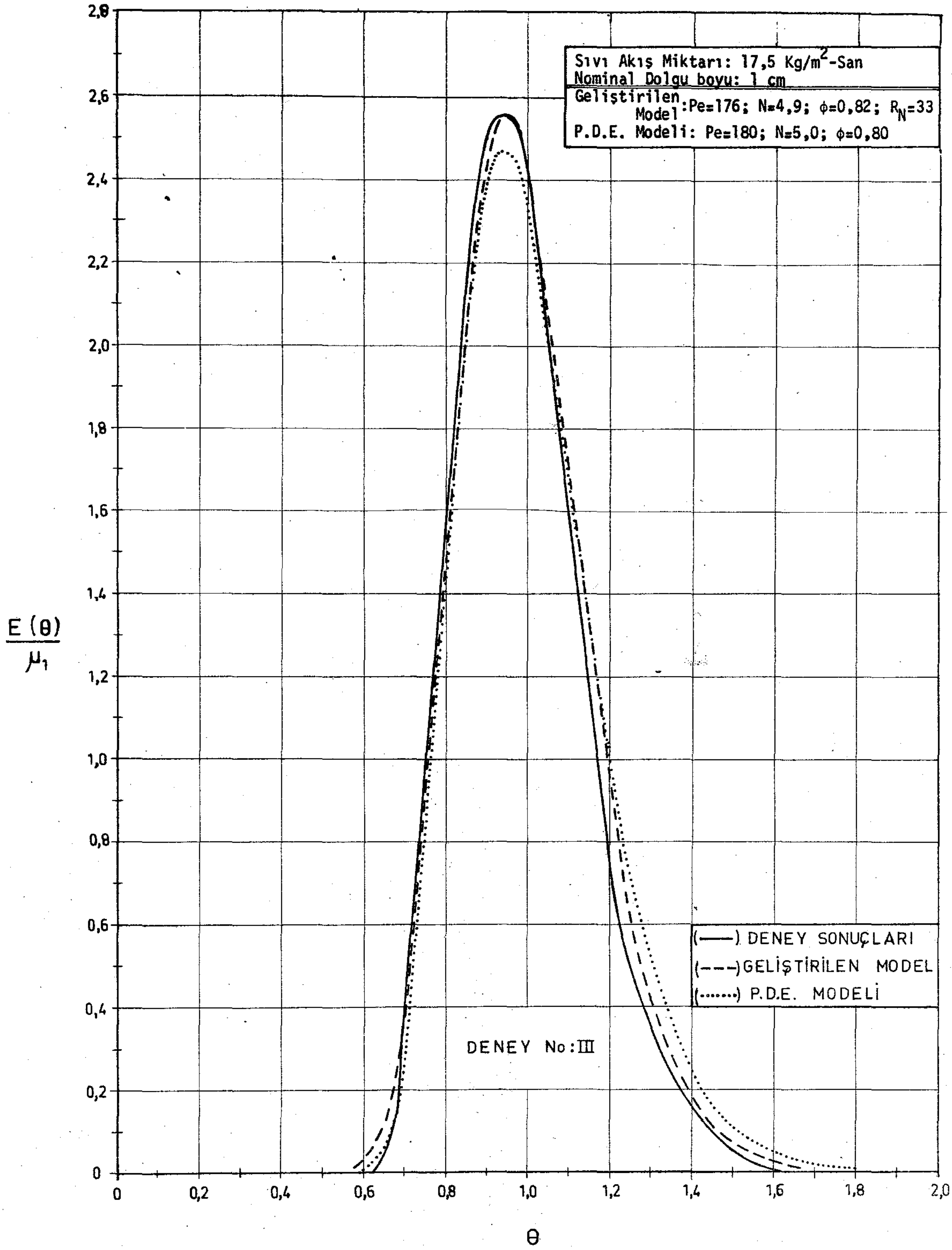
amaç fonksiyonunun en küçük değeri alacağı $E(\Theta_i, N, \phi)$



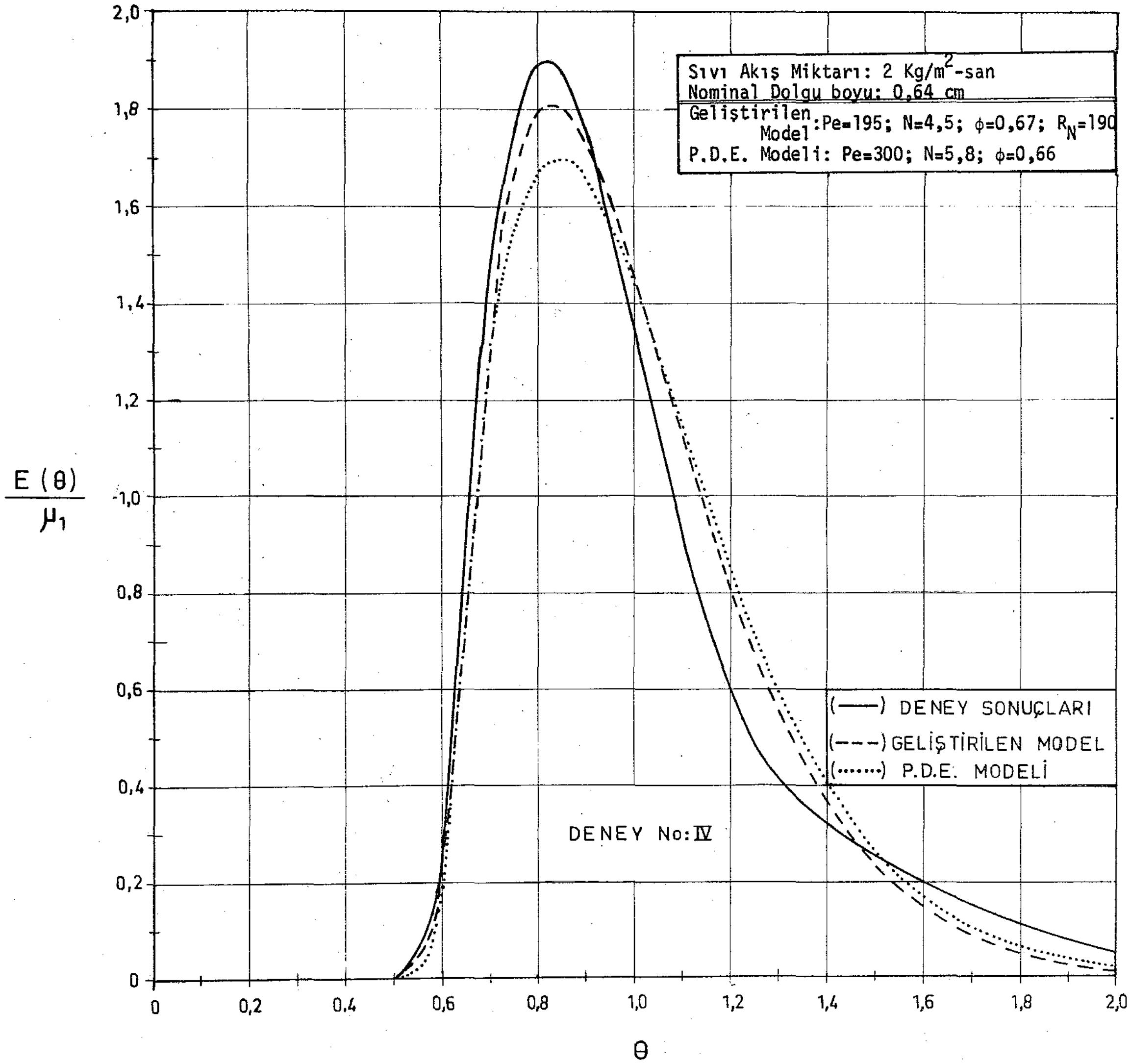
Şekil V.1- Ölçülen ve hesaplanan kalma süresi dağılımlarının karşılaştırılması



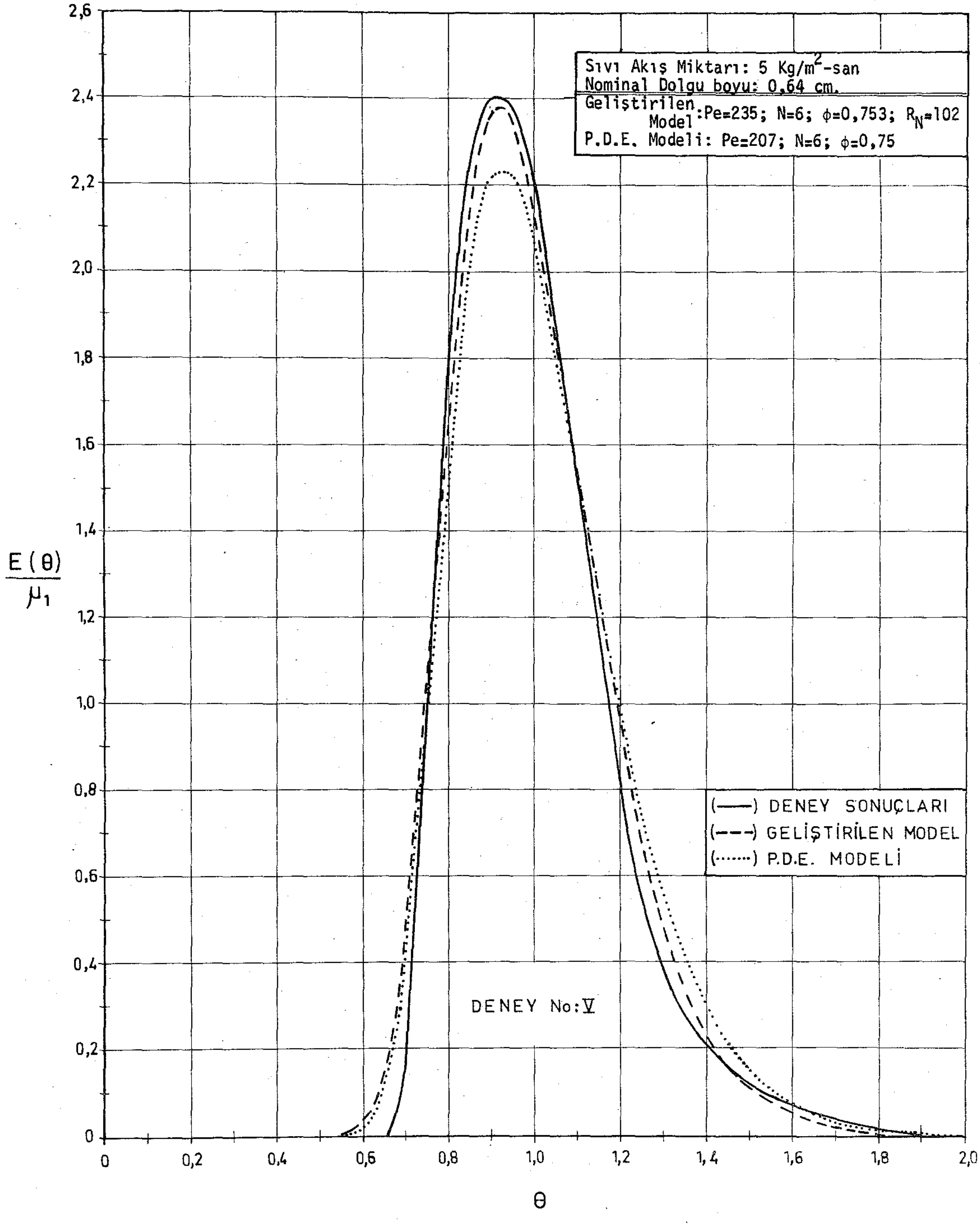
Şekil V.2 - Ölçülen ve hesaplanan kalma süresi dağılımlarının karşılaştırılması



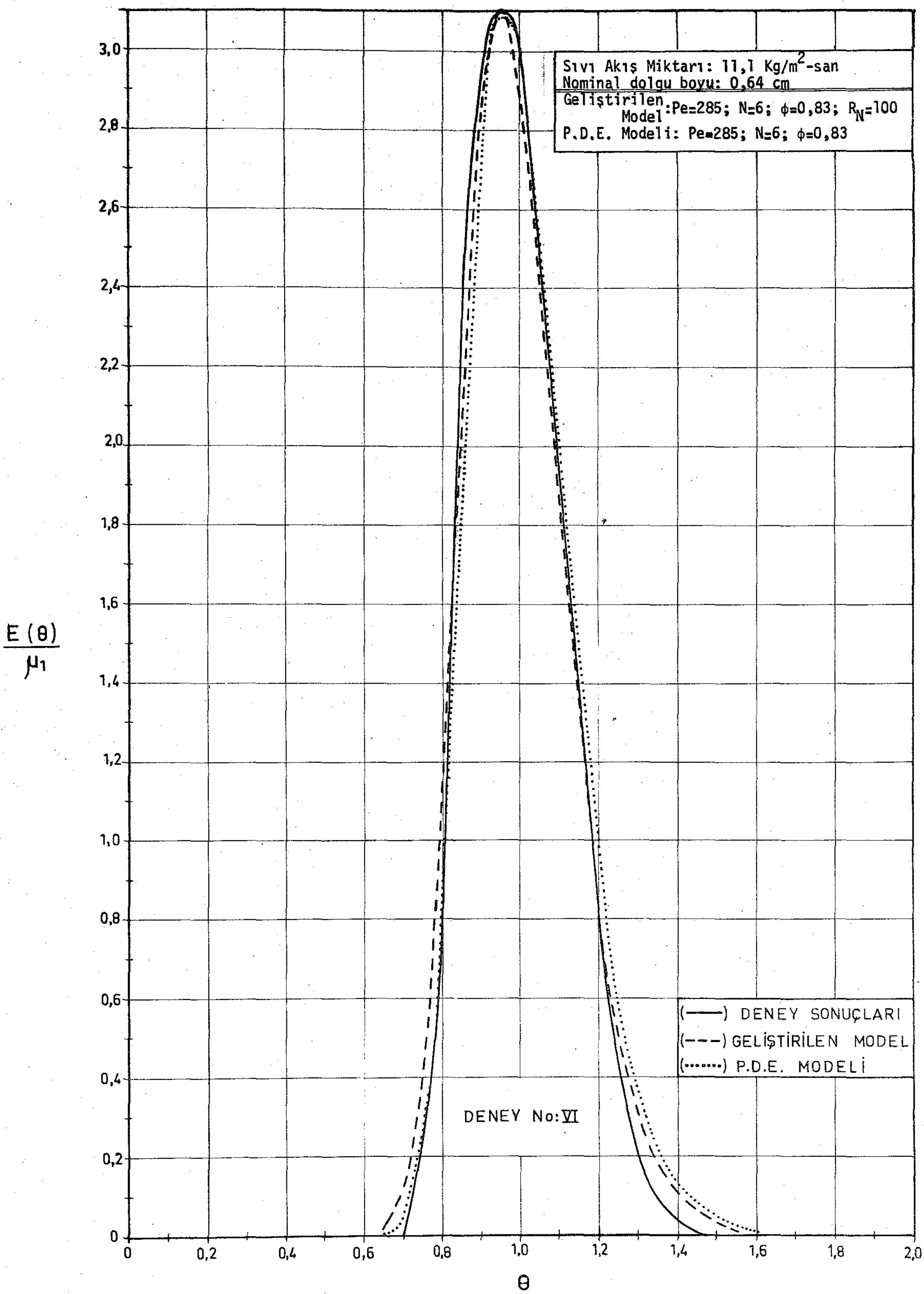
Şekil V.3 - Ölçülen ve hesaplanan kalma süresi dağılımlarının karşılaştırılması



Şekil V.4 - Ölçülen ve hesaplanan kalma süresi dağılımlarının karşılaştırılması



Şekil V.5 - Ölçülen ve hesaplanan kalma süresi dağılımlarının karşılaştırılması



Şekil V.6 - Ölçülen ve hesaplanan kalma süresi dağılımlarının karşılaştırılması

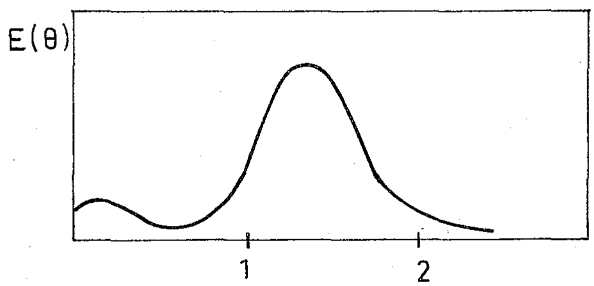
fonksiyonun aranmasına dayanan parametre optimizasyonuna başvurulmuştur. Dörtköşe bir kulede 22x22 mm boylu dolgular için oldukça elverişli sonuçlar elde edilmiştir. Bu çalışmada ele alınan yuvarlak kule deneylerinden sadece biri, (Deney I) için verilen parametre değerleri ise (Pe=72; N=2.12; ϕ=.65) bu çalışma içinde hazırlanan PDE modeli programı ile hesaplandığında kötü sonuç vermiştir. Bu çalışma çerçevesinde hazırlanan PDE programı van Swaaij'in doktora tezindeki{71} şekil V.2. ile uyuştuğu için hatanın makalenin basımında ortaya çıkmış olabileceğini tahmin etmekten öteye gidilemez. Peclet sayısının 22, 32, 42, 52, 62 ve 72 değerleri denenerek deneysel eğriye en yakın olanı Şekil V.1. de gösterilmiştir. Ortadaki hatayı vurgulamak için bu çalışma içinde kullanılan yöntemlerle daha uyumlu bir eğri elde etme cihetine bu deney için gidilmemiştir.

Sonuç olarak, düşük akış hızlarında bu çalışmada önerilen modelin PDE modeline kıyasla deneysel dağılım eğrilerini daha iyi takibettiği, yüksek akış hızlarında ise her iki modelin deney sonuçlarına çok yaklaştığı görülmektedir. Gene yüksek akış hızlarında PD modelinin de deney sonuçlarına yaklaştığı, tüm araştırmacılar tarafından kabul edilmektedir. Bu gözlemlerin fiziksel açıklamasına girmeden önce üstünde durulması gereken bir konu daha vardır.

Çalışmamızda önerilen model, PDE modelinin üç, PD modelinin de bir parametresine karşın, dört parametrelidir. Fiziksel anlamı olsun olmasın, parametre sayısı arttırıldıkça, eldeki modelin sayısal esnekliğinin de artacağı açıktır. Bu durumda çalışmamızın ve içerdiği R_N parametresinin gerçekten bir katkı niteliğinde olup olmadığının araştırılması gerekir. Şöyle ki, R_N parametresi, kule içinde yer aldığı gözlenen olayların bir veya birkaçını açıklıyabilecek ve bunlara göreli veya mutlak bir değer bulmaya yarar nitelikte değil ise, çalışmamızın tamamı soyut bir problem çözümü aşamasında takılır. Eğer yukarıda bahsi geçen niteliklere sahip görülebilirse, modelin kule içinde yer aldığı gözlenen olayların incelenmesi yolunda ileriye doğru atılmış bir adım olduğu ileri sürülebilir.

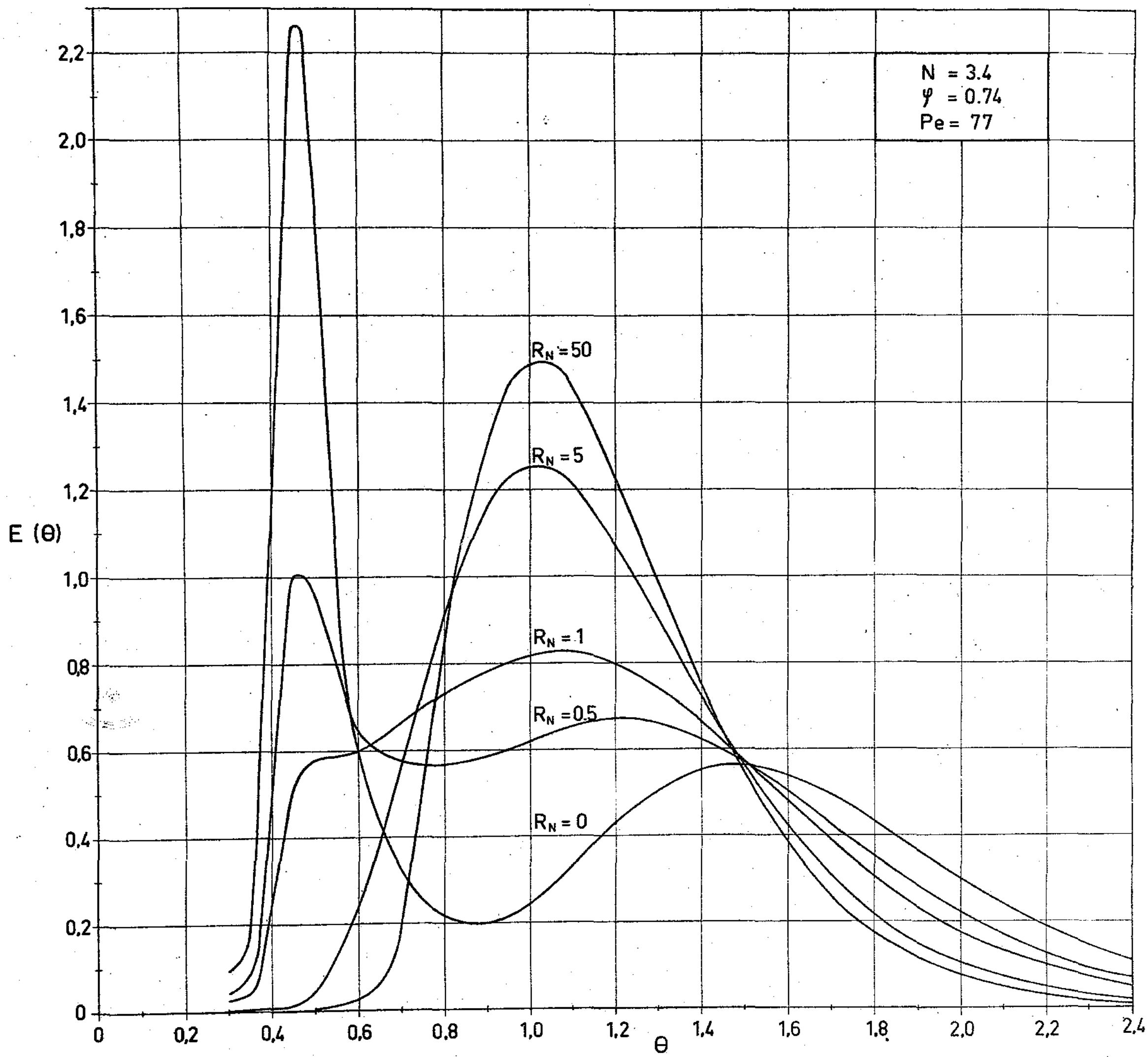
V.2. Önerilen Modelin Yapısal Özellikleri

Denklem (3.46) da $\left[\frac{u}{\phi}\frac{d\Omega}{dz}\right]$ terimi duvar akışı bölgesine konveksiyon ile $\left[\frac{R_N}{\phi}(u-v)\right]$ terimi de difüzyon mekanizması ile iki bölge arasındaki izleyici kütle transferini tayin eden terimler olarak tanımlanmıştır. Kule içinde izleyici moleküllerinin geçirdiği aşamaları incelerken, şöyle bir ikilemle karşılaşırız. Duvardan aşağıya süzülen sıvı miktarı toplamın yarısını bulabilmekte, hatta aşabilmektedir. Buna karşılık duvar akışı bölgesini hiç hesaba katmayan bir reaktörde kalma süresi dağılım modeli, örneğin PDE modeli kullanılarak, deney sonuçlarına çok yakın dağılımlar hesaplanabilmektedir. Bu ikilemin çözümüne ancak iki bölge arasında oldukça yüksek kütle transferi hızları bulunması durumunda varılabilir. Diğer taraftan iki bölge arasındaki kütle transferi, kulenin matematik modelinde sıfıra indirgenirse ($R_N = 0$) duvar akış bölgesinden izleyicinin (veya reaksiyon varsa reaksiyon maddelerinin) yan geçiş (by-pass) yaparak dolgu maddesiyle (veya katalizörle) temas etmeden kuleyi terketmeleri beklenir. Şöyle ki izleyicinin (veya reaksiyon maddesinin) bir kısmı, kuleye girdikten bir süre sonra duvar akış bölgesine konveksiyon ile taşınır; tekrar ana dolgu akış bölgesine geçememesi halinde duvar akışı bölgesinden aşağıya süzülür ve ana dolgu ile pek az temas etmiş olarak kuleyi terkeder. Himmelblau ve Bischoff{20} bu gibi hallerde Şekil V.7. de gösterilen kalitatif eğri şeklinde reaktörde kalma süresi dağılımları beklenebileceğini ileri sürmüşlerdir. Bu hal R_N parametresinin sıfır veya küçük



Şekil V.7. Proses Kabında Yan-Geçmenin Teşhisi (20)

değerlere sahip olması halinde ortaya çıkar ise R_N parametresinin kulenin yapısal bir özelliğini yansıttığı ileri sürülebilir. Şekil V.8. R_N parametresinin reaktörde kalma süresi dağılımlarını bu doğrultuda etkilediğini göstermektedir. Diğer bütün parametrelerin değerleri sabit tutulup, R_N'nin değeri sıfırdan deney II' de bulunan değerine doğru ilerletildiğinde küçük değerlerde geniş çapta yan geçiş izlenmekte, R_N gerçekçi değerine yaklaştığında ise eğrinin bu özelliği ortadan kaybolmaktadır.



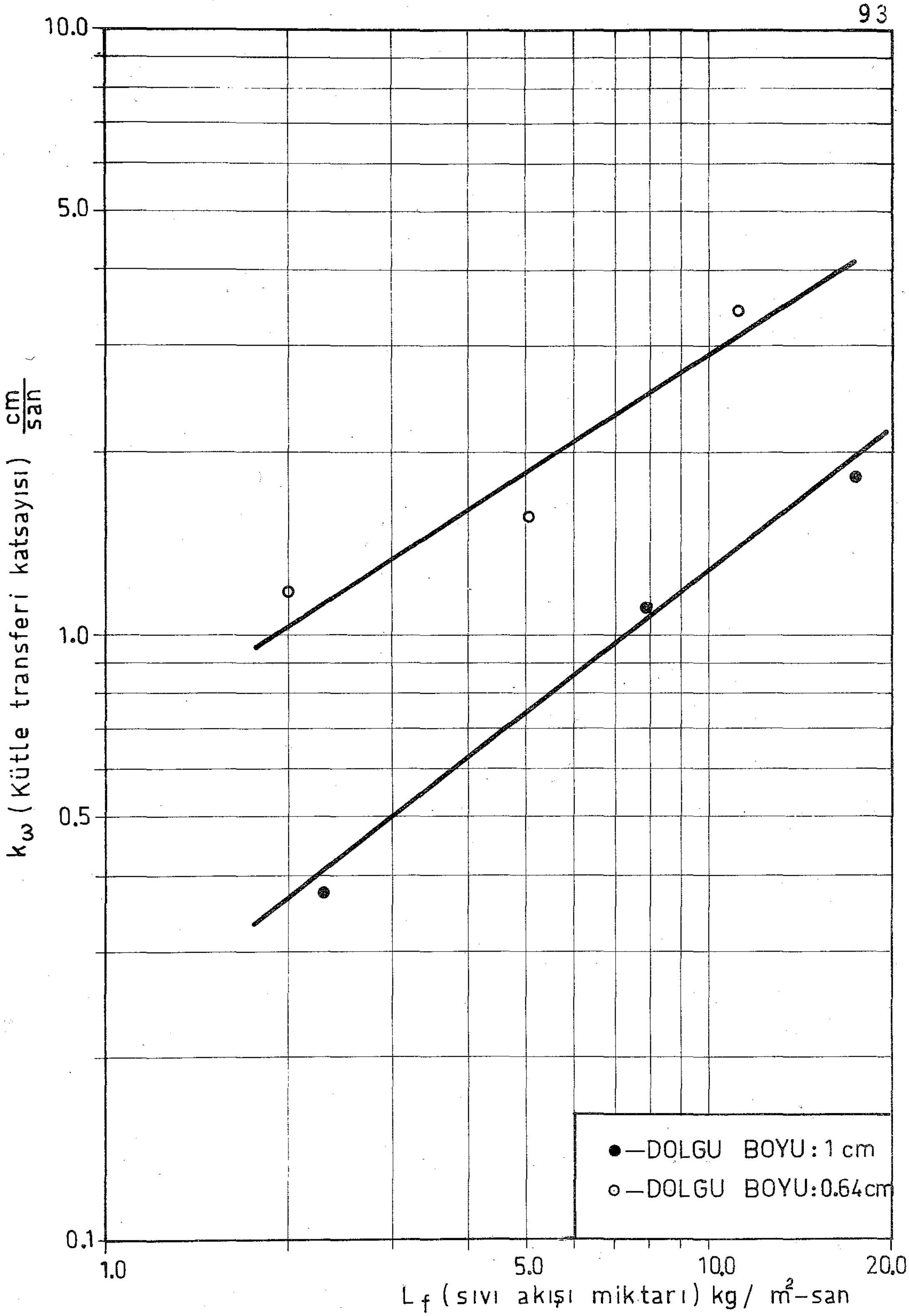
Şekil V.8 – Reaktörde Kalma Süresi Dağılımlarının R_N Parametresine Bağlı Olarak Değişmesi

Esasında, $\frac{1}{\phi}\frac{d\Omega}{dz}$ terimi duvar akışı bölgesine net konveksiyonu veren terimdir. Yani dolgu (veya katalizör) üzerinden bir miktar sıvı yuvarlanarak ana dolgu akışı bölgesine geçerken bir miktar sıvı duvar akışı bölgesine geçmektedir. Giden ve gelen sıvı elemanlarının da içlerindeki izleyiciyi geçtikleri akış bölgesine taşıyacakları açıktır. Bu itibarla $(R_N/\phi)(u-v)$ terimine moleküler difüzyonla geçişten ziyade, $D_e\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$ teriminde olduğu gibi net konveksiyonun ötesinde sıvı elemanlarının hacım olarak eşit ve karşıt istikametlerdeki hareketlerinde taşıdıkları izleyici miktarlarını tayin eden terim gözü ile bakmak gerekir. Bu sav doğru ise iki akış bölgesi arasındaki kütle transferi katsayısının;

a) Toplam akış hızı arttıkça, artan konvektif cereyanlar ve sıvının daha süratli hareketi yüzünden artması

b) Dolgu maddesi boyu ufaldıkça sıvı elemanlarının daha dolambaçlı yollar seçmek zorunda kalması nedeniyle, duvar akışı bölgesi ile ana dolgu akışı bölgesi arasında daha sık ve kolay temasın mümkün olması gerekir. Bu ikinci halde de dolgu maddesi boyu ufaldıkça iki bölge arasındaki kütle transferi katsayısının yükselmesi beklenir.

R_N'den geriye doğru giderek hesaplanan kütle transferi katsayısı, k_ω, değerleri Tablo V.2. ve Şekil V.9. da görülmüştür. Deney sayısının sınırlı olması korelasyon hazırlanmasına veya doğruların hassasiyetle



Şekil V.9 - Duvar akışı ile ana dolgu akışı bölgeleri arasındaki kütle transferi katsayısının sıvı akış hızına göre değişmesi.

TABLO V.2. k_ω'nın akış hızına göre değişmesi

DENEY NO.	Sıvı Akış Miktarı L_f Kg/m^2-san	R_N	k_ω cm/san
I	2.3	51	.375
II	7.9	44	1.11
III	17.5	33	1.85
IV	2	190	1.17
V	5	102	1.57
VI	11.1	100	3.41

çizilmesine olanak vermemektedir. Bununla beraber hesaplanan k_ω değerlerinin iki akış bölgesi arasındaki kütle transferinin karakterini doğru yönde yansıttığı görülmektedir.

Bulunan k_ω değerlerini damlama yatak reaktörlerinde ölçülen diğer kütle transferi katsayıları ile kıyaslamak mümkündür. Örneğin sıvı ile katalizör arasındaki kütle transferi katsayıları 1/8" katalizör dolgulu bir kulede $3.x10^{-4}$ cm/sn'yi aşmamaktadır{66}. Gaz-sıvı fazları arasındaki kütle transferi katsayısı daha da küçüktür. 1977'de yayınlanan bir korelasyon ise{12} sıvı-katalizör arası kütle transferi katsayısının yukarıda verilen değerin en çok on katı kadar büyüyebileceğini göstermektedir. Şekil V.9. da görüldüğü gibi k_ω bundan çok daha büyük değerler almaktadır. Bu nedenle

k_ω'nin sadece difüzyon mekanizmaları ile açıklanabilecek bir kütle transferi olayını yansıtmadığı görülmektedir. Böylece, k_ω'nin iki bölge arasındaki karşılıklı konveksiyon akımlarının ortaya çıkardığı net kütle aktarımının karakteristik katsayısı olduğu savı doğruluk kazanmaktadır.

k_ω ve dolayısıyla boyutsuz kütle aktarımı katsayısı R_N'nin damlama yatak reaktörlerinde görülen diğer kütle transferi katsayılarından çok daha büyük değerler alması pratikte şu anlamı taşır. Kuleye giren reaksiyon maddelerinin duvar akışı bölgesine geçen kısmı bu bölgede kaldığı sürece katalizör ile temas olanağını bulamaz. Eğer duvar akış bölgesine giren reaksiyon maddelerinin buradan çıkması için herhangi bir mekanizma mevcut değil ise (örneğin $R_N = 0$), reaksiyon maddesi kule dolgusunu yan geçme (by-pass) ile geride bırakıp reaksiyona girmeden kuleyi terkedebilir. Elimizdeki kule dinamiği modeli R_N parametresinin küçük değerler alması halinde yan geçme olayını izleme olanağını vermektedir. Deney sonuçları model ile karşılaştırıldığında ise R_N'nin oldukça yüksek değerler aldığını, ve kule yapısının duvar akış bölgesine geçen reaksiyon maddelerinin tekrar dolguya dönmesi için uygun olduğunu göstermektedir. Bu durumda duvar akışı bölgesinin varlığının, reaktör içindeki dönüşmeleri çalışmanın başlangıcında beklenebilecekten çok daha az etkilemesi gerekir.

Yapılan hesaplar ikinci beklentiyi doğrular niteliktedir. Hatırlanacağı gibi denklem (3.46) bir reaksiyon terimini içermektedir. Reaktörde kalma süresi dağılımı hesaplarında reaksiyon olmadığı için bu terim (R_x=0) kabul edilmişti. Deney II ve deney V'in koşulları ve bulunan Pe, N, ϕ ve R_N değerleri kullanılarak R_X'in değişik değerlerinde PDE modeli ile bu çalışmada önerilen model kullanılarak zerkedilen darbedeki izleyicinin, reaksiyona girişi halinde, elde edilecek olan dönüşmeleri hesaplanmıştır. Sonuçlar Tablo V.3 te gösterilmiştir. İki model arasında dönüşme farkları % 1'i geçmemektedir. PDE modelinde duvar akışının hiç hesaba alınmadığı göz önünde tutulursa, aradaki farkın küçük olması ancak duvar akışı bölgesi ile ana dolgu bölgesi arasında kütle transferinin çok yüksek olması ile açıklanabilir. Hatırlanması gereken diğer bir husus, mikro seviyede karışmanın birinci mertebeden reaksiyonlarda dönüşmeyi etkilemediğidir. Birden düşük reaksiyon mertebelerinde dönüşme mikro-karışma ile hızla artar; birden yüksek reaksiyon mertebelerinde hızla düşer{11}. Bu itibarla ikinci mertebeden reaksiyonlar olduğu ileri sürülen kükürt ve azot giderme reaksiyonlarında{41} duvar akışı teşekkül etmesinin dönüşmeleri Tablo V.3 'de görülen farklardan daha fazla etkilemesi beklenir.

TABLO V.3. İki modelden elde edilen birinci mertebeden reaksiyon dönüşmelerinin karşılaştırması.

R_X	PDE MODELİ % DÖNÜŞME	BU ÇALIŞMA % DÖNÜŞME		PDE MODELİ % DÖNÜŞME	BU ÇALIŞMA % DÖNÜŞME
.05	.037	.031		.037	.031
.10	.072	.066		.072	.067
.25	.171	.164		.171	.167
.50	.312	.303		.313	.309
1.00	.525	.515		.527	.525
3.00	.889	.881		.893	.892
5.00	.973	.969		.975	.975
10.00	.999	.998		.999	.999

V.3. Sonuçların Toplu Değerlendirmesi

Geliştirilen modelden hesaplanan reaktörde kalma süresi dağılımları genel hatları ile deney sonuçlarıyla uyuşmaktadır. Düşük akış hızlarında bu çalışmada geliştirilen modelin PDE modelinden daha iyi sonuçlar verdiği, yüksek akış hızlarında da her iki modelin de deney sonuçlarına çok yaklaştığı Şekil V.1-Şekil V.6. da görülmektedir. R_N parametresinin değerlerinin artan kütle transferi hızları doğrultusunda büyüdüğü de tesbit edilmiştir. Akış hızları yükseldikçe ana dolgu bölgesinin duvar akışı bölgesi ve statik sıvı gözleri ile arasındaki kütle transferi hızlarının artması nedeniyle bu iki bölgenin varlığının dağılmaya katkısı azalmaktadır. Sıvı akış hızlarının yüksek olması halinde bu çalışmada geliştirilen model ile PD ve PDE modelleri arasındaki farklar böylece küçülmektedir. Sıvı akış hızlarının artmasıyla R_N ve N parametrelerinin değerlerinin yükselmesi bu açıklamayı doğrular niteliktedir. Her iki parametrenin değerlerindeki artış, akış şartlarına ve dolgu maddesinin boyutlarına bağlı olan bir noktadan sonra dağılım eğrisinin şeklini etkilememektedir. R_N parametresinin yüksek değerleri için Şekil II.8'de görülen bu özellik N parametresi için Villermaux ve van Swaaij{74} tarafından gösterilmiştir. Tablo V.1'de görüldüğü gibi 0.64 cm boyutlu dolgu maddesi için her iki parametre, R_N ve N, 5 kg/m^2-san akış hızı civarında doyma noktasına gelmektedir. Böylece, yüksek akış hızlarında R_N ve N parametrelerinin doygunluk noktalarına yaklaşmalarıyla, PD ve PDE modeli ile bu çalışmada geliştirilen modelin birbirine yakın sonuçlar vermesi aynı deneysel koşullarda ortaya çıkmaktadır.

Tablo V.4'de bu çalışmada geliştirilen modelin deney sonuçları ile karşılaştırılmasından elde edilen parametre değerleri özetlenmiştir.

TABLO V.4. Elde Edilen Parametre Değerleri

DENEY NO.	DOLGU MADDESİ NOMİNAL BOYU, cm	AKIŞ MİKTARI kg / m²-sn	Pe	N	ϕ	R_N
I	1.	2.3	44	2.74	.65	51
II	"	7.9	77	3.6	.74	44
III	"	17.5	176	4.9	.82	33
IV	0.64	2	195	4.5	.67	190
V	"	5	235	6	.753	102
VI	"	11.1	285	6	.83	100

Dolgu maddesi boyu küçüldükçe veya akış hızı büyüdükçe R_N ve N parametrelerinde izlenen değişmeler burada topluca görülmektedir. Gene dolgu maddesi boyu küçüldükçe ve sıvı akış hızları arttıkça eksenel dağılmanın, konveksiyona nazaran öneminin azaldığı Peclet sayısındaki artmalardan izlenebilmektedir. Hesaplamalarda ϕ parametresinin değerini tayin ederken van Swaaij'nin{71} verdiği deneysel değerlere sadık kalınmıştır.

Geliştirilen modelin parametrelerinin kendilerine atfedilen fiziksel olayların doğrultusunda değerler aldıkları görülmektedir. Bunun ötesinde hem denklemlerin indirgenmesiyle hem de deneyle karşılaştırmalarda görüldüğü gibi, evvelce geliştirilmiş olan PD ve PDE modelleri, geliştirilen modelin özel ve basitleştirilmiş halleri olarak ortaya çıkmaktadır. R_N parametresinin doymamış olduğu akış hızlarında, Şekil V.4. gibi, bu çalışmada geliştirilen model diğer modellere göre deneysel eğrilere daha yakın sonuçlar verebilmektedir. R_N parametresinin sıfıra yaklaştığı teorik limitte de yan-geçiş olayının meydana gelebileceği bu modelde izlenebilmektedir.

BÖLÜM VI

DÜŞÜNCELER VE TAVSİYELER

Dolgulu kulelerde gözlenen duvar akışı olayını da içine alan bir damlama yatak reaktörü modeli geliştirilmiştir. Bu modeli kullanarak gözeneksiz dolgulu, isotermal bir reaktör için hesaplanan kalma süresi dağılımları, düşük akış hızlarında şimdiye kadar geliştirilmiş modellere göre deneysel eğrilere daha yakın sonuçlar elde edilmesini sağlamıştır. Yüksek akış hızlarında, geliştirilen model daha sade modellerle birlikte deney sonuçlarına çok yaklaşan eğriler vermiştir. Model ve deney sonuçlarının karşılaştırılmasından elde edilen parametrelerin, fiziksel tanımlarından beklenen yönde büyüdüğü görülmüştür.

Geliştirilen modelin denklemlerinden duvar akışı bölgesinin kaldırılması halinde, PDE modeline; statik sıvı gözlerinin de kaldırılması halinde PD modeline indirgenebileceği gösterilmiştir. Ayrıca duvar akışı bölgesi ile ana dolgu akış bölgesi arasında ve konsantrasyon itici gücü doğrultusunda kütle transferinin azalması halinde ortaya çıkması gereken yan-geçiş olayının da geliştirilen model aracılığıyla izlenebileceği görülmüştür.

Zerkedilen izleyicinin birinci mertebeden bir reaksiyonla kaybolmasında meydana gelecek dönüşmeler, geliştirilen model de PDE modeli kullanılarak hesaplanmıştır. İki model ile bulunan değerler arasındaki fark Tablo V.2. de görülebileceği gibi küçüktür. İki model arasındaki farkın küçüklüğünün nedeni, birinci mertebeden reaksiyonlarda dönüşmenin mikro-karışma olayından etkilenmeyişidir. Geliştirilen model yolu ile hesaplanan dönüşmelerin birden daha yüksek mertebeli reaksiyonlarda PDE modeline göre daha küçük, birden küçük reaksiyon mertebelerinde daha büyük olması beklenir{11}.

Damlama yatak reaktörlerinde gaz fazın ters-akım olarak geçmesi hallerinde dahi, taşma noktasına yaklaşılana kadar, sıvı akış profillerinin gaz akımından etkilenmesinin ihmal edilebilir seviyede olduğu görülmektedir. {Onda (1973); Eroğlu (1973)}. Bu çalışmada geliştirilen modelin, gaz ve sıvının geniş bir akış hızı alanında da kullanılabilmesi gerekmektedir.

İleride yapılacak çalışmalarda, aşağıda belirtilen hususların incelenmesinde yarar olacaktır:

1. Modeli tanımlayan denklem takımı, kararlı-hal ve sabit reaksiyon maddesi konsantrasyonu sınır şartı,

$$c_o = c(0) - \frac{1}{Pe}\,\frac{\partial c(0)}{\partial x},$$

ile ve değişken reaksiyon mertebesi ile çözülmelidir. Bu denklem takımı lineer olmıyan bir reaksiyon terimi taşıyacaktır. Gene sonlu farklar metodu ve Gauss-Siedel iterasyon yöntemi ile sonuca gitmek mümkün olacaktır.

Bu çözüm özellikle değişik araştırmacıların birinci veya ikinci mertebeden olduğunu ileri sürdükleri azot ve kükürt giderme reaksiyonlarında{36,41,76} reaksiyon hızını diğer etkenlerden ayırmakta kullanılabilecektir.

2. Geliştirilen modele dolgu maddesinin, yani katalizörün gözenekli olması halini de katmak gerekir. Daha evvel de değinildiği gibi, aynı koşullar altında çalıştırılan kulede gözenekli ve gözeneksiz dolgu maddeleri kullanarak ölçülen dağılım eğrilerinden yararlanarak, dönüşmeyi doğrudan doğruya hesaplıyabilmek için gerekli matematik metodlar kısmen geliştirilmiştir{58,16}. Haynes{19} sadece gazların geçtiği sabit yatak reaktöründe mikro ve makro gözenekli bir katalizör için kalma sürelerini bazı asemtotik haller için analitik olarak elde edebilmiştir. Ancak lineerleştirilmiş bu denklem takımının ve dolayısiyle damlama yatak reaktörünün gözenekli dolgu maddesi ile doldurulmuş modeli için kurulacak denklem takımının klasik sonlu farklar metodlarıyla çözülebileceği görülmektedir.

3. Geliştirilen modelin kullanım alanını genişletmek amacı ile sıvı akış profillerinin hesaplanmasında kullanılan parametrelerin değişik viskozite, yüzey gerilimi, dolgu maddesi boyu ve cinsi ile değişik kule çapları için deneysel olarak ölçülerek genelleştirilmiş korelasyonlar haline dönüştürülmesi gerekmektedir.

4. Ölçülen reaktörde kalma süresi dağılımları, literatürde genellikle hesaplanan parametreler yolu ile açıklanmaktadır. Geliştirilen modelin daha geniş bir deney dizisi ile karşılaştırılabilmesi için, hem gözenekli hem de gözeneksiz dolgu maddesi ile doldurulmuş kulelerde ve değişik viskozitesi olan sıvılarla reaktörde kalma süresi dağılımlarının ölçülmesi gereklidir.

5. Hesaplanan reaktör dönüşmelerini ölçülen değerlerle karşılaştırarak, dizayn denklemlerinin reaksiyon terimi ile reaktör içinde gözlenen diğer etkenler arasındaki ilişkiyi doğru olarak yansıtabilirliği araştırılmalıdır. Yayınlanmış araştırmaların birçoğunda{41} bu noktada belirsizlik olduğu, ölçülen reaksiyon hızı sabitinin sıvı akış hızı ile değişmesinden görülmektedir. Deneysel dönüşmeleri ölçmek üzere yüksek basınçlarda da çalışabilecek bir hidrojenle kükürt giderme reaktörü hazırlanmaktadır.

6. Damlama yatak reaktörünün isotermal koşullar altında çalışması hakkında toplanan bu bilgilerin adiyabatik reaktörün modellenmesinde kullanılması yararlı olacaktır. Hesaba katılması gereken radiyal temperatür farklarının sıvı viskozitesine etkisi nedeniyle lineer olmıyan bir denklem takımı elde edilecektir. Denklemlerin çözümü için "ortogonal kollokasiyon" metodları kullanılması gerekmektedir{64,73,15}.

BÖLÜM VII

ÖZET VE SONUÇLAR

VII.1. Özet

Damlama yatak reaktörlerinde elde edilen dönüşmeler, reaksiyon maddelerinin kule içinde geçirdiği aşamalardan ve sıvı akış profillerinden önemli ölçüde etkilenmektedir. Bu çalışmada, reaksiyon maddelerinin kule içindeki hareket ve dağılmalarını etkileyen hususları incelemek amacı ile matematiksel bir damlama yatak reaktörü modeli geliştirilmiştir. Reaksiyon maddelerinin hareket ve dağılmalarını etkileyen ana etkenler aşağıda belirtilmiştir.

a) Reaktör ana ekseni doğrultusundaki dağılma,

b) Dolgu içindeki statik sıvı gözleri ile ana dolgu akış bölgesi arasındaki kütle transferi,

c) Kulenin statik ve dinamik sıvı tutma oranları ve bu iki değerin birbirine oranı,

d) Sıvı fazın önemli bir kısmının reaktör cidarından aşağıya süzülmesi,

e) Cidara bitişik olarak akan sıvı ile ana dolgu akış bölgesi arasında konsantrasyon itici gücü doğrultusunda kütle transferi.

Geliştirilen modelin değerlendirilmesi için reaktörde kalma süresi dağılımları hesaplanmış ve bunlar hem deney sonuçlarından, ve, hem de diğer modellerden elde edilen eğrilerle karşılaştırılmıştır. Sıvı akış hızları evvelce yayınlanmış{40} bir denklem takımının çözümü ile elde edilmiş ve bunlar geliştirilen modelde veri olarak kullanılmıştır. Geliştirilen modelin, duvar akışı ihmal edildiği takdirde evvelce önerilen modellere indirgenebileceği görülmüş ve duvar akışının ihmal edilmesi halinde de denklemler çözülerek karşılaştırma yoluna gidilmiştir.

Denklem takımları sonlu farklar metodları kullanılarak çözülmüştür. Hesaplamalarda Boğaziçi Üniversitesi Elektronik Hesap Merkezindeki UNIVAC 1106 bilgisayarından yararlanılmıştır.

VII.2. Sonuçlar

Bu çalışmada elde edilen sonuçlar aşağıdaki şekilde özetlenebilir:

1. Düşük sıvı akış hızlarında bu çalışmada geliştirilen damlama yatak reaktörü modeli evvelce önerilmiş modellere göre, deney sonucu elde edilen reaktörde kalma süresi dağılımı eğrilerine daha yakın sonuçlara varılmasını sağlamıştır. Sıvı akış hızları yükseldikçe bütün modellerin deney sonuçlarına çok yaklaştığı görülmektedir.

2. Geliştirilen model, evvelce önerilmiş modellerde ihmal edilmiş olan kule cidarına bitişik sıvı akışı bölgesinin özelliklerinin incelenmesini sağlamaktadır. Duvar akışı bölgesi ile ana dolgu akış bölgesi arasında kütle transferinin;

a) Ana dolgu bölgesinden duvar bölgesine akış net konveksiyon yoluyla izleyici (yahut reaksiyon maddesi) iletimi, ve,

b) İki bölge arasındaki konsantrasyon itici gücü doğrultusundaki kütle iletimi,

mekanizmalarından ileri geldiği görülmektedir. Açıklanan ikinci mekanizma ile kütle transferi hızının, reaktördeki difüzyon kökenli kütle transferi hızlarından 10^3 mertebesinde daha büyük olduğu tesbit edilmiştir. Bu husus k_ω katsayısı ile tanımlanan ikinci kütle transferi mekanizmasının, karşılıklı konveksiyon akımlarının ortaya çıkardığı net kütle transferi olduğunu göstermektedir. k_ω katsayısının akış hızının yükselmesi ve dolgu boyunun küçülmesi ile artması bu bulguyu doğrular niteliktedir.

3. Duvar akışı bölgesine giren izleyicinin (veya reaksiyon maddelerinin) buradan tekrar çıkabilmesi için herhangi bir mekanizmanın mevcut olmaması halinde, izleyicinin (veya reaksiyon maddelerinin) kule dolgusunu yan-geçme ile geride bırakarak reaktörü terkedebilmesi gerekir. Bu çalışmada geliştirilen damlama yatak reaktörü modeli, R_N parametresinin küçük değerler alması halinde bu yan geçme olayını izleme olanağını vermektedir. Şekil V.8 de görüldüğü gibi R_N, deneyle karşılaştırarak bulunan değerlere doğru büyüdüğünde yan-geçme olayının teşhisine yarıyan ikinci maksimum ortadan kalkmaktadır. Yan geçme olayını takibedebilmek olanağı, evvelce önerilmiş damlama yatak reaktörü modellerinde bulunmamaktadır.

4. İki bölge arasında kütle transferi hızlarının yüksek olması nedeniyle birinci mertebeden reaksiyonlarda, dönüşme hesaplarında duvar akışının ihmalinin sadece % 1 civarında bir hataya yol açtığı hesaplanmıştır. Mikro-karışma olayının dönüşmeyi sadece birinci mertebeden reaksiyonlarda etkilemediği bilinmektedir. Bu itibarla duvar akışının ihmal edilmesinin başka mertebeden reaksiyonların incelenmesinde daha büyük hatalara yol açması beklenir.

EK. 1

```
ΔRUN,C/RN RIFAT1,111-14-005,TRACEY,7,100
ΔDATA,IL TPF$.
DATA T7 RL70-5 09/26-17:01:36
      ΔASG,AX TRB1.
      ΔASG,AX TRACE.
      ΔUSE 19,TRB1.
      ΔFOR,IN .MAIN
C
C
C        BU PROGRAM BU CALISMADA GELISTIRILEN MODEL VASITASIYLA DAMLAMA YATAK
C        REAKTORLERINDE KALMA SURESI DAGILIMLARINI HESAPLAMAKTADIR.  EK-3 TE
C        GOSTERILEN PROGRAM YOLU ILE URETILEN SIVI AKIS PROFILLERI DISK UNITESINE
C        YUKLENMEKTE VE BU PROGRAMDA VERI OLARAK KULLANILMAK UZERE HESAPLAMALAR
C        ESNASINDA DISKTEN OKUNMAKTADIR.
C
C        INTEGRASYONLAR CUBINT ALT PROGRAMI ILE YAPILMISTIR. BU ALT PROGRAM DA
C        DISK UNITESINDE MUHAFAZA EDILIP HESAPLAMA IHTIYACLARINA GORE
C        CAGIRILMAKTADIR. ALT PROGRAMIN METNI EK-3 TE GOSTERILMISTIR.
C        MATRIS COZUMLERI DE LFQT1B ALT PROGRAMI (IMSL : UNIVAC PAKET PROGRAMI)
C        KULANILARAK GERCEKLESTIRILMISTIR.
C
C
         INTEGER HH
         DIMENSION VV(201),TIMF(201),W(3),FI(3),DELTA(3)
         DIMENSION DMOM1(201),DMOM2(201),DMOM3(20),SAAT(700),CONC(700)
         DIMENSION A(1000,5),AA(1000,5),XL(1000,3),B(1000,1)
         DIMENSION U(500),UNS(500),UW(500),DWALL(500),D(500),Y(500)
         DOUBLE PRECISION W,DELTA,FI
         EQUIVALENCE (B,Y)
         DATA PYE,NN,MB,KA,NP,NNI,M6,IJOB,NFIN,NLC,NUC/3.14159265358980,3*1,
        15*0,2,2/,HERROR,HOLDUP,RM1,RM2,RM3,EM1,EM2,EM3/8*0./
C
C        SECENEKLER KISMI
C
         RN=50.
         RXN=5.
         PE=235.
         BDYN=.16
         BST=.0525
         RST=6.
         VOID=.7
         UFIN=1.D-04
```

```
      H=32.6
      DZ=.0025D 00
      DT=.01D 00
      NDP=1
      NZINT2=0
C
C     ON DEGERLERIN VERILMESI
C
      IF(NDP .EQ. 1)NP=1
      IA=1000
      IB=1000
      IU=1000
      NDPP=NDP
      IF(NDPP .LT. 20)NDPP=5*NDP
      NX=NDPP
C
C     SAYFA BASLIKLARININ YAZILMASI
C
      BETA=BDYN+BST
      PHI=BDYN/BETA
      R=DT/(DZ**2)
      WRITE(6,220)
  220 FORMAT(1H1,20X,59HRTD FOR CLOSED END REACTOR WITH STATIC HOLDUP AN
     1D WALL FLOW)
      WRITE(6,221)H,R,DZ,DT
  221 FORMAT(//20X,16HREACTOR LENGTH= ,F9.6,7H**  R= ,E15.8,8H**  ΔZ= ,E
     115.8,8H**  ΔT= ,E15.8)
      WRITE(6,222)PE,VOID,BETA,PHI
  222 FORMAT(25X,4HPE= ,E15.8,8H  VOID= ,E15.8,8H  BETA= ,E15.8,8H   PHI
     1= ,E15.8/)
      WRITE(6,223)BST,BDYN,RST
  223 FORMAT(44X,8H BSTAT= ,E15.8,8H  BDYN= ,E15.8,8H   RST= ,E15.8)
      WRITE(6,224)RN,RXN
  224 FORMAT(46X,6H  RN= ,E15.8,8H   RXN= ,E15.8)
C
C     SONLU FARKLAR DENKLEMLERINDEKI SABITLERIN HESAPLANMASI
C
      VOID=H/BETA
      HH=1./DZ
      JM=HH+1
    1 JMMM=JM-1
      IJOB=0
      D(1)=0.D 00
      DO 306 JI=2,JM
  306 D(JI)=D(JI-1)+DZ
      JF=2*JM-2
      JFM=JF-1
      RO=R/(2.D 00*PE)
      BZZ=-R*DZ/(PHI*DT)
      S2=RST*DT*PHI/(1.D 00-PHI)
      S1=1.D 00/(1.D 00+S2)
      S3=RST*DT/2.D 00
      S5=RN*DT/(2.D 00*PHI)
      S6=DT/(4.D 00*PHI*DZ)
      S7=-S3*(1.D 00+S1)
      S8=S1*S2*S3-2.D 00
      S9=RXN*DT/2.D 00
      RL=(R/PE)-1.D 00+S3+S5+S9
      RS=-((R/PE)-S1*S2*S3+S3+1.D 00+S5+S9)
      Q1=RN*DT/(4.D 00*VOID)
      Q2=-DT/(8.D 00*VOID*DZ)
      QM=-Q2
```

```
      Q5=-Q2/S6
      HSB=(H**2)/BETA
      PHIM=1.-PHI
C
C     BASLANGIC SARTININ VERILMESI : N=0 :
C
 1301 DO 301 M=2,JF
  301 B(M,1)=0.D 00
      B(1,1)=BZZ
C
C     KATSAYILAR MATRISININ HESAPLANMASI
C
 1800 DO 800 I=1,3
      READ(19,100)W(I),FI(I),DELTA(I)
  100 FORMAT(3(2X,D23.18))
      DWALL(I)=DELTA(I)
      WRITE(6,226)W(I),FI(I),DELTA(I),I
  226 FORMAT(3(2X,D23.16),10X,I4)
  800 CONTINUE
      A(1,3)=RS-(R*DZ/PHI )+2.D 00*S6*FI(1)+S5
      A(1,4)=(R/PE)-2.D 00*S6*FI(2)
      A(2,2)=RO+S6*FI(1)
      A(2,3)=RS-S6*(W(3)-W(1))+S5
      A(2,4)=RO-S6*FI(3)
      A(3,2)=RO+S6*FI(2)
      JP=4
 1799 DO 799 I=1,2
      FI(I)=FI(I+1)
      W(I)=W(I+1)
  799 DELTA(I)=DELTA(I+1)
      READ(19,100)W(3),FI(3),DELTA(3)
      DWALL(JP)=DELTA(3)
      WRITE(6,226)W(3),FI(3),DELTA(3),JP
      A(3,3)=RS-S6*(W(3)-W(1))
      A(3,4)=S5
      A(3,5)=RO-S6*FI(3)
      FD=(DELTA(3)-DELTA(1))/DELTA(2)
      A(4,1)=RO-(FD*RO/4.D 00)-Q2*W(1)/DELTA(2)
      A(4,2)=(Q1/DELTA(2))+Q5*(RS-A(3,3))/DELTA(2)
      A(4,3)=-((R/PE)+1.D 00+(Q1/DELTA(2)))
      A(4,5)=RO+(RO*FD/4.D 00)+Q2*W(3)/DELTA(2)
 1302 DO 302 J=4,JMMM
 1801 DO 801 I=1,2
      FI(I)=FI(I+1)
      W(I)=W(I+1)
  801 DELTA(I)=DELTA(I+1)
      READ(19,100)W(3),FI(3),DELTA(3)
      JP=J+1
      WRITE(6,226)W(3),FI(3),DELTA(3),JP
      DWALL(JP)=DELTA(3)
      JI=2*J-2
      JJ=JI-1
      A(JJ,1)=RO+S6*FI(1)
      A(JJ,3)=RS-S6*(W(3)-W(1))
      A(JJ,4)=S5
      A(JJ,5)=RO-S6*FI(3)
      FD=(DELTA(3)-DELTA(1))/DELTA(2)
      FQ1=Q1/DELTA(2)
      FQ2=Q2/DELTA(2)
      A(JI,1)=RO*(1.D 00-(FD/4.D 00))-FQ2*W(1)
      A(JI,2)=FQ1+Q5*(RS-A(JJ,3))/DELTA(2)
      A(JI,3)=-((R/PE)+1.D 00+FQ1)
```

```
      A(JI,5)=RO*(1.D 00+(FD/4.D 00))+FQ2*W(3)
  302 CONTINUE
      WFLOW=W(3)*PYE
      PFLOW=FI(3)*PYE
      TFLOW=PFLOW+WFLOW
      WRITE(6,24)TFLOW,PFLOW,WFLOW
   24 FORMAT(///1X,12H*****TFLOW= ,E15.8,5X,6HPFLOW=,E15.8,5X,6HWFLOW=,E
     115.8)
      A(JFM,1)=R/PE
      A(JFM,3)=RS-2.D 00*S6*(FI(3)-FI(2)+W(3)-W(2))
      A(JFM,4)=S5
      FD=2.D 00*QM*(W(3)-W(2))/DELTA(3)
      FQ1=Q1/DELTA(3)
      A(JF,1)=R/PE
      A(JF,2)=FD+FQ1
      A(JF,3)=-((R/PE)+1.D 00+FQ1+FD)
      S10=RL+2.D 00*S6*(FI(3)-FI(2)+W(3)-W(2))
      Q10=A(JF,2)+(R/PE)-1.D 00
 1802 DO 802 I=1,JF
 1803 DO 803 K=1,5
  803 AA(I,K)=A(I,K)
  802 CONTINUE
  401 IF(NN-2)404,402,403
  402 CONTINUE
C
C     IKINCI ZAMAN ADIMI :N=1 :
C
      FD=A(1,3)+2.D 00-S1*S2*S3
      B(1,1)=BZZ+S7*UNS(1)-FD*U(1)-A(1,4)*U(2)
      GO TO 500
  403 CONTINUE
C
C     UCUNCU VE SONRAKI ZAMAN ADIMLARI  : N≥2 :
C
      B(1,1)=S7*UNS(1)-FD*U(1)-A(1,4)*U(2)
  500 B(JFM,1)=-A(JFM,1)*U(JM-1)+S10*U(JM)-S5*UW(JM)+S7*UNS(JM)
      B(JF,1)=-A(JF,1)*UW(JM-1)+Q10*UW(JM)-A(JF,2)*U(JM)
      B(2,1)=-A(2,2)*U(1)+(S8-A(2,3))*U(2)-A(2,4)*U(3)+S7*UNS(2)
      B(3,1)=-A(3,2)*U(2)+(S8-A(3,3))*U(3)-A(3,5)*U(4)+S7*UNS(3)-S5*UW(3
     1)
      B(4,1)=-A(4,2)*U(3)-A(4,1)*UW(2)-(A(4,3)+2.D 00)*UW(3)-A(4,5)*UW(4
     1)
 1304 DO 304 J=4,JMMM
      JI=2*J-2
      JJ=JI-1
      B(JJ,1)=-A(JJ,1)*U(J-1)+(S8-A(JJ,3))*U(J)-A(JJ,5)*U(J+1)+S7*UNS(J)
     1-S5*UW(J)
  304 B(JI,1)=-A(JI,1)*UW(J-1)-(A(JI,3)+2.D 00)*UW(J)-A(JI,5)*UW(J+1)-A(
     1JI,2)*U(J)
  404 CALL LEQT1B(AA,JF,NLC,NUC,IA,B,MB,IB,IJOB,XL,IER)
      U(1)=B(1,1)
      U(2)=B(2,1)
      UW(1)=0.D 00
      UW(2)=U(2)
      UNS(1)=S1*(S2*U(1)+UNS(1))
      UNS(2)=S1*(S2*U(2)+UNS(2))
 1305 DO 305 J=3,JM
      JI=2*J-2
      JJ=JI-1
      U(J)=B(JJ,1)
      UW(J)=B(JI,1)
  305 UNS(J)=S1*(S2*U(J)+UNS(J))
```

```
C
C      KULEYI TERKEDEN IZLEYICI MIKTARININ VE ILK UC MOMENTIN HESAPLANMASI
C
  999 CONTINUE
      NNI=NNI+1
      CLOCK=NN*DT
      VV(NNI)=(PFLOW*U(JM)+WFLOW*UW(JM))/TFLOW
      SAAT(NN)=CLOCK
      CONC(NN)=VV(NNI)
      TIME(NNI)=CLOCK
      DMOM1(NNI)=VV(NNI)*TIME(NNI)
      DMOM2(NNI)=DMOM1(NNI)*TIME(NNI)
      DMOM3(NNI)=DMOM2(NNI)*TIME(NNI)
      IF(NNI .LT. NDPP)GO TO 998
      KB=NDPP
      CALL CUBINT(TIME,VV,KB,KA,KB,RESULT,ERROR,IND)
      CALL CUBINT(TIME,DMOM1,KB,KA,KB,RRM1,EEM1,IND)
      CALL CUBINT(TIME,DMOM2,KB,KA,KB,RRM2,EEM2,IND)
      CALL CUBINT(TIME,DMOM3,KB,KA,KB,RRM3,EEM3,IND)
  700 NNI=1
      NDPP=NX+1
      VV(1)=VV(NDPP)
      TIME(1)=TIME(NDPP)
      DMOM1(1)=DMOM1(NDPP)
      DMOM2(1)=DMOM2(NDPP)
      DMOM3(1)=DMOM3(NDPP)
      RM1=RM1+RRM1
      RM2=RM2+RRM2
      RM3=RM3+RRM3
      EM1=EM1+EEM1
      EM2=EM2+EEM2
      EM3=EM3+EEM3
      HOLDUP=HOLDUP+RESULT
      HERROR=HERROR+ERROR
  998 IF(NN .NE. 1 .AND.  NN .NE. NP)GO TO 406
      Y(1)=PHI*U(1)+PHIM*UNS(1)
 1310 DO 310 J=2,JM
  310 Y(J)=PHI*U(J)+PHIM*UNS(J)+HSB*((2.*DWALL(J)/H)-(DWALL(J)**2))*UW(J
     1)
C
C      KULE ICINDEKI IZLEYICI MIKTARININ HESAPLANMASI
C
      IF(NNI .NE. 1)GO TO 502
  499 CALL CUBINT(D,Y,JM,KA,JM,RES1,ERRO2,IND)
      TTT=HOLDUP+RES1
      WRITE(6,201)TTT,HOLDUP,HERROR,RES1,ERRO2
  201 FORMAT(10X,10H***TOT TR=,E15.8,9HEXIT TOT=,E15.8,10HWITH ERR =,E15
     1.8,7H**CONT=,E15.8,6H**ERR=,E15.8)
  520 IF(NZINT2 .EQ. 0)GO TO 502
 1311 DO 311 J=1,JM
  311 Y(J)=PHI*U(J)
      CALL CUBINT(D,Y,JM,KA,JM,RES2,ERRO2,IND)
  503 WRITE(6,205)RES2,ERRO2
  205 FORMAT(1X,17HMAIN PACKING RES=,E15.8,3X,3HER=,E15.8)
 1312 DO 312 J=1,JM
  312 Y(J)=PHIM*UNS(J)
      CALL CUBINT(D,Y,JM,KA,JM,RES2,ERRO2,IND)
  508 WRITE(6,206)RES2,ERRO2
  206 FORMAT(1X,18HSTATIC HOLDUP RES=,E15.8,3HER=,E15.8)
      Y(1)=0.D 00
 1313 DO 313 J=2,JM
  313 Y(J)=HSB*((2.*DWALL(J)/H)-DWALL(J)**2)*UW(J)
```

```
      CALL CUBINT(D,Y,JM,KA,JM,RES2,ERRO2,IND)
  510 WRITE(6,207)RES2,ERRO2
  207 FORMAT(1X,14HWALL FLOW RES=,E15.8,3X,3HER=,E15.8)
  502 NP=NP+NDP
  406 IF(NNI .EQ. 1 .AND. RES1 .LT. UFIN)GO TO 407
      NN=NN+1
      IJOB=2
      GO TO 401
  407 CONTINUE
C
C
      WRITE(6,193)RM1,EM1,RM2,EM2,RM3,EM3,NN
  193 FORMAT(///// )
      WRITE(6,210)HOLDUP,HERROR
  210 FORMAT(1X,7HHOLDUP=,E15.8,5X,6HERROR=,E15.8)
      DO 375 I=1,NN
      SAATP=SAAT(I)/RM1
      CONCP=CONC(I)*RM1
      WRITE(6,200)I,SAAT(I),CONC(I),SAATP,CONCP
  200 FORMAT(5X,3HNN=,I6,2X,4(E15.8,5X))
  375 CONTINUE
      STOP
      END
ΔFOR,IS LEQT1B.
      SUBROUTINE LEQT1B(A,N,NLC,NUC,IA,B,M,IB,IJOB,XL,IER)             LE1B0660
C
C
C                                                                      LE1B0670
C     BU ALT PROGRAM MATRIS COZUMLERINDE KULLANILMAKTADIR (IMSL : UNIVAC PAKET
C     PROGRAMI)
C
C
C
      DIMENSION          A(IA,1),XL(N,1),B(IB,1)                       LE1B0680
      DATA               ZERO/0./,ONE/1.0/                             LE1B0690
      IER = 0                                                          LE1B0700
      JBEG = NLC+1                                                     LE1B0710
      NLC1 = JBEG                                                      LE1B0720
      IF (IJOB .EQ. 2) GO TO 80                                        LE1B0730
      RN = N                                                           LE1B0740
      I = 1                                                            LE1B0780
      NC = JBEG+NUC                                                    LE1B0790
      NN = NC                                                          LE1B0800
      JEND = NC                                                        LE1B0810
      IF (N .EQ. 1 .OR. NLC .EQ. 0) GO TO 25                           LE1B0820
    5 K = 1                                                            LE1B0830
      P = ZERO                                                         LE1B0840
      DO 10 J = JBEG,JEND                                              LE1B0850
         A(I,K) = A(I,J)                                               LE1B0860
         Q =  ABS(A(I,K))                                              LE1B0870
         IF (Q .GT. P) P = Q                                           LE1B0880
         K = K+1                                                       LE1B0890
   10 CONTINUE                                                         LE1B0900
      IF (P .EQ. ZERO) GO TO 135                                       LE1B0910
      XL(I,NLC1) = ONE/P                                               LE1B0920
      IF (K .GT. NC) GO TO 20                                          LE1B0930
      DO 15 J = K,NC                                                   LE1B0940
         A(I,J) = ZERO                                                 LE1B0950
   15 CONTINUE                                                         LE1B0960
   20 I = I+1                                                          LE1B0970
      JBEG = JBEG-1                                                    LE1B0980
      IF (JEND-JBEG .EQ. N) JEND = JEND-1                              LE1B0990
```

```
      IF (I .LE. NLC) GO TO 5                                           LE1B1000
      JBEG = I                                                          LE1B1010
      NN = JEND                                                         LE1B1020
   25 JEND = N-NUC                                                      LE1B1030
      DO 40 I = JBEG,N                                                  LE1B1040
         P = ZERO                                                       LE1B1050
         DO 30 J = 1,NN                                                 LE1B1060
            Q =  ABS(A(I,J))                                            LE1B1070
            IF (Q .GT. P) P = Q                                         LE1B1080
   30    CONTINUE                                                       LE1B1090
         IF (P .EQ. ZERO) GO TO 135                                     LE1B1100
         XL(I,NLC1) = ONE/P                                             LE1B1110
         IF (I .EQ. JEND) GO TO 37                                      LE1B1120
         IF (I .LT. JEND) GO TO 40                                      LE1B1130
         K = NN+1                                                       LE1B1140
         DO 35 J = K,NC                                                 LE1B1150
            A(I,J) = ZERO                                               LE1B1160
   35    CONTINUE                                                       LE1B1170
   37    NN = NN-1                                                      LE1B1180
   40 CONTINUE                                                          LE1B1190
      L = NLC                                                           LE1B1200
      DO 75 K = 1,N                                                     LE1B1220
         P =  ABS(A(K,1))*XL(K,NLC1)                                    LE1B1230
         I = K                                                          LE1B1240
         IF (L .LT. N) L = L+1                                          LE1B1250
         K1 = K+1                                                       LE1B1260
         IF (K1 .GT. L) GO TO 50                                        LE1B1270
         DO 45 J = K1,L                                                 LE1B1280
            Q = ABS(A(J,1))*XL(J,NLC1)                                  LE1B1290
            IF (Q .LE. P) GO TO 45                                      LE1B1300
            P = Q                                                       LE1B1310
            I = J                                                       LE1B1320
   45    CONTINUE                                                       LE1B1330
   50    XL(I,NLC1) = XL(K,NLC1)                                        LE1B1340
         XL(K,NLC1) = I                                                 LE1B1350
         IF (RN+P .EQ. RN) GO TO 135                                    LE1B1370
         IF (K .EQ. I) GO TO 60                                         LE1B1390
         DO 55 J = 1,NC                                                 LE1B1400
            P = A(K,J)                                                  LE1B1410
            A(K,J) = A(I,J)                                             LE1B1420
            A(I,J) = P                                                  LE1B1430
   55    CONTINUE                                                       LE1B1440
   60    IF (K1 .GT. L) GO TO 75                                        LE1B1450
         DO 70 I = K1,L                                                 LE1B1460
            P = A(I,1)/A(K,1)                                           LE1B1470
            IK = I-K                                                    LE1B1480
            XL(K1,IK) = P                                               LE1B1490
            DO 65 J = 2,NC
               A(I,J-1) = A(I,J)-P*A(K,J)                               LE1B1510
   65       CONTINUE                                                    LE1B1520
            A(I,NC) = ZERO                                              LE1B1530
   70    CONTINUE                                                       LE1B1540
   75 CONTINUE                                                          LE1B1550
      IF (IJOB .EQ. 1) GO TO 9005                                       LE1B1560
   80 L = NLC                                                           LE1B1580
      DO 105 K = 1,N                                                    LE1B1590
         I = XL(K,NLC1)                                                 LE1B1600
         IF (I .EQ. K) GO TO 90                                         LE1B1610
         DO 85 J = 1,M                                                  LE1B1620
            P = B(K,J)                                                  LE1B1630
            B(K,J) = B(I,J)                                             LE1B1640
            B(I,J) = P                                                  LE1B1650
```

```
  85    CONTINUE                                     LE1B1660
  90    IF (L .LT. N) L = L+1                        LE1B1670
        K1 = K+1                                     LE1B1680
        IF (K1 .GT. L) GO TO 105                     LE1B1690
        DO 100 I = K1,L                              LE1B1700
           IK = I-K                                  LE1B1710
           P = XL(K1,IK)                             LE1B1720
           DO 95 J = 1,M                             LE1B1730
              B(I,J) = B(I,J)-P*B(K,J)               LE1B1740
  95       CONTINUE                                  LE1B1750
 100    CONTINUE                                     LE1B1760
 105 CONTINUE                                        LE1B1770
     JBEG = NUC+NLC                                  LE1B1790
     DO 125 J = 1,M                                  LE1B1800
        L = 1                                        LE1B1810
        K1 = N+1                                     LE1B1820
        DO 120 I = 1,N                               LE1B1830
           K = K1-I                                  LE1B1840
           P = B(K,J)                                LE1B1850
           IF (L .EQ. 1) GO TO 115                   LE1B1860
           DO 110 KK = 2,L                           LE1B1870
              IK = KK+K                              LE1B1880
              P = P-A(K,KK)*B(IK-1,J)                LE1B1890
 110       CONTINUE                                  LE1B1900
 115       B(K,J) = P/A(K,1)                         LE1B1910
           IF (L .LE. JBEG) L = L+1                  LE1B1920
 120    CONTINUE                                     LE1B1930
 125 CONTINUE                                        LE1B1940
     GO TO 9005                                      LE1B1950
 135 IER = 129                                       LE1B1960
9000 CONTINUE                                        LE1B1970
9005 RETURN                                          LE1B1990
     END                                             LE1B2000
ΔPREP TRACE
ΔMAP,I ,TPF$.MAIN
IN TPF$.MAIN
LIB TRACE.
ΔXQT
END DATA.
ΔFIN
```

EK. 2

```
ΔRUN,C/RN RIFAT2,111-14-005,TRACEY,5,100
ΔDATA,IL TPF$.
DATA T7 RL70-5 09/26-17:02:10
        ΔASG,AX TRACER
        ΔFOR,IN .MAIN
        C
        C      BU PROGRAM  PDE  VE  PD  MODELLERINI KULLANARAK DAMLAMA YATAK
        C      REAKTORLERIDE KALMA SURESI DAGILIMLARINI HESAPLAMAKTADIR.
        C      PD  MODELINI KULLANMAK ICIN PHI=1.  VE  RST=0.  DEGERLERI KULLANILMALIDIR.
        C      MATRISLERIN COZUMUNDE  TRIDAG  ALT PROGRAMI(CARNAHAN,LUTHER, VE WILKES :
        C      1969)  VE INTEGRALLERIN HESAPLANMASINDA CUBINT ALT PROGRAMI (DAVIS  VE
        C      RABINOWITZ : 1975) KULLANILMISTIR.
        C      CUBINT ALT PROGRAMI DISK UNITESINDE MUHAFAZA EDILDIGI ICIN BURADA
        C      GOSTERILMEMISTIR.   BU ALT PROGRAMIN METNI EK-3 TE GORULEBILIR.
        C
               INTEGER HH
               DIMENSION VV(201),TIME(201)   ,DMOM1(201),DMOM2(201),DMOM3(201)
               DIMENSION A(500),B(500),C(500),D(500)
               DIMENSION UN(500),U(500),UNS(500),Y(500),Q(500)
               DOUBLE PRECISION HOLDUP,RESULT,ERROR,HERROR
               DOUBLE PRECISION UN,A,B,C,D,Y,U,Q
               DOUBLE PRECISION VV,TIME,BETA,PE,VOID,ALFA,CG,H
               DOUBLE PRECISION DMOM1,DMOM2,DMOM3
               DOUBLE PRECISION DT,DZ,R,BST,RST,RXN,PHI,UFIN
               DOUBLE PRECISION BDYN,RES2,ERRO2,UNS
               DOUBLE PRECISION C1,C2,C3,C4,C5,G1,G2,G3,G4,G5,G6,G7,G8
               DOUBLE PRECISION RM1,RM2,RM3,EM1,EM2,EM3,RRM1,RRM2,RRM3,EEM1,EEM2,
              1EEM3,CLOCK,TTT
               EQUIVALENCE (U,UN)
               DATA HERROR,HOLDUP,RM1,RM2,RM3,EM1,EM2,EM3,NP,NNI,NFIN,KA,NN/8*0.D
              1 00,3*0,2*1/
        C
        C      SECENEKLER KISMI
        C
               PE=300.
               RXN=0.D 00
               RST=0.
               BST=.0525
               BDYN=.1575
               VOID=.7D 00
               H=32.6D 00
               UFIN=1.D-04
```

```
      DZ=.0025D 00
      DT=.01D 00
      NDP=1
C
C     ON DEGERLERIN VERILMESI
C
      IF(NDP .EQ. 1)NP=1
      BETA=BST+BDYN
      NDPP=NDP
      IF(NDP .LT. 20)NDPP=5*NDP
      NX=NDPP
      CLOCK=0.D 00
      Q(1)=0.D 00
 1300 DO 300 M=1,JM
      UNS(M)=0.D 00
  300 UN(M)=0.D 00
C
C     SONLU FARKLAR DENKLEMLERINDEKI SABITLERIN HESAPLANMASI
C
      CG=1
      ALFA=VOID*BDYN
      HH=1.D 00/DZ
      JM=HH+1
      JMMM=JM-1
 1315 DO 315 M=2,JM
  315 Q(M)=Q(M-1)+DZ
      DJM=Q(JM)
      R=DT/(DZ**2)
      PHI=BDYN/BETA
      PHI=1.
      IF(RST .GT. 1.D-03)GO TO 750
      PHI=1.D 00
      G1=0.D 00
      G2=0.D 00
      GO TO 751
  750 G1=RST*DT*(PHI/(1.D 00-PHI))
      G2=1.D 00/(1.D 00+G1)
  751 G3=RST*DT/2.D 00
      G4=RXN*DT/2.D 00
      C1=(R/(2.D 00*PE))+DT/(4.D 00*PHI*DZ)
      C2=-((R/PE)+1.D 00+G3-G1*G2*G3+G4)
      C3=(R/(2.D 00*PE))-DT/(4.D 00*PHI*DZ)
      C4=(R/PE)-1.D 00+G3+G4
      C5=-G3*(G2+1.D 00)
      G5=C2-(2.D 00*PE*C1*DZ/PHI)
      G6=C1+C3
      G7=(2.D 00*PE*C1*DZ/PHI)+C4
      G8=-(2.D 00*PE*CG*C1*DZ)/(PHI*DT)
C
C     SAYFA BASLIKLARININ YAZILMASI
C
      IF(RST .GT. 1.D-03)GO TO 702
      WRITE(6,215)
  215 FORMAT(1H1,20X,33HRTD FOR SIMPLE CLOSED END REACTOR)
      GO TO 703
  702 WRITE(6,220)
  220 FORMAT(1H1,20X,45HRTD FOR CLOSED END REACTOR WITH STATIC HOLDUP)
  703 WRITE(6,221)H,R,DZ,DT
  221 FORMAT(//20X,16HREACTOR LENGTH= ,F9.6,7H**  R= ,D15.8,8H**  ΔZ= ,D
     115.8,8H**  ΔT= ,D15.8)
      WRITE(6,222)PE,VOID,BETA,PHI
  222 FORMAT(25X,4HPE= ,D15.8,8H  VOID= ,D15.8,8H  BETA= ,D15.8,8H   PHI
```

```
        1= ,D15.8)
        WRITE(6,223)BST,BDYN,RST
    223 FORMAT(44X,8H BSTAT= ,D15.8,8H  BDYN= ,D15.8,8H   RST= ,D15.8)
        WRITE(6,23)RXN
     23 FORMAT(44X,8H   RXN= ,D15.8//)
C
C       BASLANGIC SARTININ VERILMESI : N=0 :
C
   1301 DO 301 M=2,JM
    301 D(M)=0.D 00
        D(1)=G8
        A(1)=0.D 00
        B(1)=G5
        C(1)=G6
   1302 DO 302 J=2,JM
        A(J)=C1
        B(J)=C2
    302 C(J)=C3
        C(JM )=0.D 00
        A(JM)=G6
    401 IF(NN-2)404,402,403
    402 CONTINUE
C
C       IKINCI ZAMAN ADIMI :N=1 :
C
        D(1)=G8+G7*UN(1)-G6*UN(2)+C5*UNS(1)
        GO TO 500
    403 CONTINUE
C
C       UCUNCU VE SONRAKI ZAMAN ADIMLARI : 2≤N :
C
        D(1)=G7*UN(1)-G6*UN(2)+C5*UNS(1)
    500 D(JM)=-G6*UN(JM-1)+C4*UN(JM)+C5*UNS(JM)
   1304 DO 304 M=2,JMMM
    304 D(M)=-C1*UN(M-1)+C4*UN(M)-C3*UN(M+1)+C5*UNS(M)
    404 CALL TRIDAG(U,JM,A,B,C,D)
   1305 DO 305 J=1,JM
    305 UNS(J)=G2*(G1*U(J)+UNS(J))
C
C       KULEYI TERKEDEN IZLEYICI MIKTARININ VE ILK UC MOMENTIN HESAPLANMASI
C
    999 CONTINUE
        NNI=NNI+1
        CLOCK=CLOCK+DT
        VV(NNI)=U(JM)
        TIME(NNI)=CLOCK
        DMOM1(NNI)=VV(NNI)*TIME(NNI)
        DMOM2(NNI)=DMOM1(NNI)*TIME(NNI)
        DMOM3(NNI)=DMOM2(NNI)*TIME(NNI)
        IF(NNI .LT. NDPP)GO TO 998
        KB=NDPP
        CALL CUBINT(TIME,VV,KB,KA,KB,RESULT,ERROR,IND)
        CALL CUBINT(TIME,DMOM1,KB,KA,KB,RRM1,EEM1,IND)
        CALL CUBINT(TIME,DMOM2,KB,KA,KB,RRM2,EEM2,IND)
        CALL CUBINT(TIME,DMOM3,KB,KA,KB,RRM3,EEM3,IND)
    700 NNI=1
        NDPP=NX+1
        VV(1)=VV(NDPP)
        TIME(1)=TIME(NDPP)
        DMOM1(1)=DMOM1(NDPP)
        DMOM2(1)=DMOM2(NDPP)
        DMOM3(1)=DMOM3(NDPP)
```

```
      RM1=RM1+(RRM1/CG)
      RM2=RM2+(RRM2/CG)
      RM3=RM3+(RRM3/CG)
      EM1=EM1+EEM1
      EM2=EM2+EEM2
      EM3=EM3+EEM3
      HOLDUP=HOLDUP+(RESULT/CG)
      HERROR=HERROR+ERROR
  998 IF(NN .NE. 1 .AND.  NN .NE. NP)GO TO 406
      TIMER=TIME(NNI)
 1310 DO 310 J=1,JM
  310 Y(J)=(PHI*U(J)+(1.D 00-PHI)*UNS(J))/CG
C
C     KULE ICINDEKI IZLEYICI MIKTARININ HESAPLANMASI
C
      CALL CUBINT(Q,Y,JM,KA,JM,RES2,ERRO2,IND)
      WRITE(6,200)NN,TIMER,VV(NNI),RES2,ERRO2
  200 FORMAT(4H N =,I4,4H T =,F9.6,10H     CONC=,D15.8,9HCOL CONT=,D15.8
     1,9HWITH ERR=,D15.8)
      IF(NNI .NE. 1)GO TO 502
      TTT=HOLDUP+RES2
      WRITE(6,201)TTT,HOLDUP,HERROR
  201 FORMAT(21X,10H***TOT TR=,D15.8,9HEXIT TOT=,D15.8,10HWITH ERR =,D15
     1.8/)
  502 NP=NP+NDP
  406 IF(NNI .EQ. 1 .AND. RES2 .LT. UFIN)GO TO 407
      NN=NN+1
      GO TO 401
  407 CONTINUE
C
C
      WRITE(6,193)RM1,EM1,RM2,EM2,RM3,EM3,NN
  193 FORMAT(///// )
      WRITE(6,210)HOLDUP,HERROR
  210 FORMAT(1X,7HHOLDUP=,D15.8,5X,6HERROR=,D15.8)
      STOP
      END
      SUBROUTINE TRIDAG(VEC,NO,A,B,C,D)
C
C     UCLU DIYAGONAL MATRIS COZUMUNDE KULLANILAN ALT PROGRAM (CARNAHAN, LUTHER,
C     VE WILKES : 1969)
C
      DIMENSION A(NO),B(NO),C(NO),D(NO),VEC(NO),GAMA(1650),BETA(1650)
      DOUBLE PRECISION VEC,A,B,C,D,BETA,GAMA
      BETA(1)=B(1)
      GAMA(1)=D(1)/B(1)
 1300 DO 300 I=2,NO
      BETA(I)=B(I)-A(I)*C(I-1)/BETA(I-1)
  300 GAMA(I)=(D(I)-A(I)*GAMA(I-1))/BETA(I)
      VEC(NO)=GAMA(NO)
      L=NO-1
 1301 DO 301 I=1,L
      IR=NO-I
  301 VEC(IR)=GAMA(IR)-C(IR)*VEC(IR+1)/BETA(IR)
      RETURN
      END
ΔPREP TRACER
ΔMAP,I ,TPF$.MAIN
IN TPF$.MAIN
LIB TRACER.
ΔXQT
END DATA.
```

EK. 3

```
ΔRUN,C/RN RIFAT3,111-14-005,TRACEY,5,40
ΔDATA,IL TPF$.
DATA T7 RL70-5 09/26-17:03:19
          ΔASG,C TRC3.,F///1000
          ΔUSE 20,TRC3.
          ΔFOR,IS .MAIN
          C
          C       BU PROGRAMDA SIVI AKIS PROFILLERI VE DUVAR AKISI SIVI TABAKASI
          C       KALINLIGI HESAPLANMAKTADIR
          C
                  DIMENSIONFI(2010)
                  DIMENSION FR(10),E(10),Y(10),JINT(30)
                  COMMON/PROW/DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID,A,G,AA,H,FO,X
                  COMMON/FL2/PYE,DR,DZ,RIJ,NFTC,NR
                  COMMON/FL3/FIM,FIP
                  COMMON/CONST/SR,SR2,OPSR,B,OMSR,SRO4,OPSR2,OMSR2,SR2F,GRAOS,GROS
                  COMMON/FL1/FB(2010),W(2010),DEL(2010),F(30),FN(30)
                  COMMON/BLAST/CONFI,CONS,RH
                  DOUBLE PRECISION SR,SR2,OPSR,B,OMSR,SRO4,OPSR2,OMSR2,SR2F,GRAOS,
                 1GROS,FN,FI,CONFI,CONS
                  DOUBLE PRECISION DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID,PYE,A,DR,DZ,F,
                 1FB,RIJ,G,SPACK,TEMP,      W,DEL,RH,       FIM,FIP,AA,H,FO
                  DOUBLE PRECISION FR,E,SUMF,RES1,RES2,TINTF,FLORAT,AA2
          C
          C       SECENEKLER  KISMI
          C       NFTC = 1 TEK  BORUDAN KULEYE SIVI GIRISI SINIR SARTINI KULLANDIRIR
          C       NFTC = 2 KULE KESITINDE UNIFORM SIVI GIRIS HIZI SINIR SARTINI
          C       KULLANDIRIR
          C
                  NFTC=2
                  NR=20
                  NRP=NR+1
          C
          C       KULE KESITINDE AKIS HIZLARI INTEGRALININ HESAPLANMASI
          C       EN COK ALTI INTEGRAL HESAPLANABILIR
          C
                  JINT(1)=41
                  JINT(2)=101
                  JINT(3)=201
                  JINT(4)=301
                  JINT(5)=401
                  NCYL=4
```

```
      C
      C     NR/NCYL DORDE  ESIT VEYA DORTTEN FAZLA OLMALIDIR
      C
      C     BASKI KONTROL KISMI
      C
            NOINT=1
            NRD=5
            JMMD=10
      C
      C     AKIS SARTLARININ VERILMESI
      C
            RH=1.63D 00
            DEN=998.0345D 00
            FLORAT=39960.D 00
            VISC=1.0019D 00
            SPACK=.64D 00
            TEMP=20.D 00
            AA=.05D 00
            VOID=.7D 00
            SURFT=72.75D 00
            CONFI=.3D 00
            CONS=845.4D 00
            DZ=.0815D 00
            JM=420
      C
      C     SABITLER
      C
            PYE=3.1415926535898
            G=32.18D 00
            FO=FLORAT/DEN
            KP=11
      C
      C     SONLU FARKLAR DENKLEMLERININ SABITLERININ HESAPLANMASI
      C
      C
            DR=1.D 00/FLOAT(NR)
            RIJ=DZ/(DR**2)
            JMM=JM-1
            CALL PROP(TEMP,SPACK)
            SR=RIJ*SLAMDA
            SR2=2.D 00*SR
            OPSR=1.D 00+SR
            B=SR/((4.D 00)*OPSR)
            OMSR=1.D 00-SR
            SR04=SR/4.D 00
            OPSR2=1.D 00+SR2
            OMSR2=1.D 00-SR2
            SR2F=SR2/OPSR2
            GRAOS=GAMA*DR*A/SLAMDA
            GROS=GAMA*DR/SLAMDA
      C
      C     SAYFA BASLIKLARININ YAZILMASI
      C
            R1=0.
            R2=FLOAT(NRD)/FLOAT(NR)
            R3=2.*R2
            R4=3.*R2
            WRITE(6,200)
        200 FORMAT(1H1,///30X,36HLIQUID DISTRIBUTION IN PACKED COLUMN)
            WRITE(6,201)
        201 FORMAT(//30X,38HLATERAL BOUNDARY CHOSEN AT COLUMN WALL)
            GO TO 501
```

```
      501 IF(NFTC .GT. 1)GO TO 502
          WRITE(6,203)
      203 FORMAT(30X,17HPOINT SOURCE FEED)
          GO TO 503
      502 WRITE(6,204)
      204 FORMAT(30X,23HEVENLY DISTRIBUTED FEED)
C
C         HESAP SONUCLARININ BASKI KONTROLU
C
      503 H=FLOAT(JMM)*DZ*AA
          WRITE(6,1201)TEMP,H
     1201 FORMAT(///////1X,18HTEMPERATURE       = ,D15.8,7H  DEG C,30X,22HCOLU
         1MN LENGTH         = ,D15.8,7H METERS)
          AA2=2.D+00*AA
          WRITE(6,1202)DEN,AA2
     1202 FORMAT(1X,18HLIQUID DENSITY   = ,D15.8,9H  KG/M**3,28X,22HCOLUMN  D
         1IAMETER     = ,D15.8,7H METERS)
          WRITE(6,1203)VISC,VOID
     1203 FORMAT(1X,18HLIQUID VISCOSITY= ,D15.8,10H  KG/M-SEC,27X,22HVOID  F
         1RACTION         = ,D15.8)
          WRITE(6,1204)SURFT,SPACK
     1204 FORMAT(1X,18HSURFACE TENSION = ,D15.8,10H  DYNES/CM,27X,22HNOMINAL
         1 PACKING SIZE= ,D15.8,3H CM)
          WRITE(6,1205)DR,FLORAT
     1205 FORMAT(14X,5HDR = ,D15.8,37X,9HFLOW RATE,11X,2H= ,D15.8,12H KG/SQ-
         1M*HR )
          WRITE(6,1206)DZ,GAMA
     1206 FORMAT(14X,5HDZ = ,D15.8,37X,4HGAMA,16X,2H= ,D15.8)
          WRITE(6,1207)RIJ,SLAMDA
     1207 FORMAT(6X,13HDZ/(DR**2) = ,D15.8,37X,5HLAMDA,15X,2H= ,D15.8)
C
C         SONUCLARIN SUTUN BASLIKLARI
C
          WRITE(6,205)R2,R3,R4
      205 FORMAT(5X,1HZ,6X,1HJ,7X,4HR=0.,7X,3(2HR=,F7.4,5X),6HR=  RB,9X,6HDE
         1LTA ,5X,11HWALL   FLOW,9X,2HFI)
          WRITE(6,206)
      206 FORMAT(86X,23H                W/AREA*FO)
          IF(NFTC .EQ. 2)GO TO 40
     1030 DO 30 II=2,NRP
       30 FN(II)=0.D 00
          FN(1)=(2.D 00/DR)**2
          FB(1)=0.D 00
          GO TO 41
       40 CONTINUE
     1031 DO 31 II=1,NRP
       31 FN(II)=1.D 00
          FB(1)=1.D 00
          FI(1)=1.D 00
          DEL(1)=0.D 00
       41 W(1)=0.D 00
          WRITE(20,20)W(1),FI(1),DEL(1)
       20 FORMAT(3(2X,D23.18))
C
C         ILK SATIR
C
          D1=0.
          J=1
          WRITE(6,207)D1,J,(FN(I),I=1,NR,NRD),FB(1),DEL(1),W(1),FI(1)
      207 FORMAT(1X,F7.3,1X,I4,8D14.8)
       43 IF(J .EQ. JM)GO TO 600
          CALL CALC(J,ICALC)
```

```
      IF(ICALC .EQ. 1)GO TO 60
      WRITE(6,250)J
  250 FORMAT(1X,11HSTUCK AFTER,I5,10H   IN CALC)
      GO TO 600
   60 MJ=J
      J=J+1
 1032 DO 32 II=1,NRP
   32 FN(II)=F(II)
      DIST=DZ*FLOAT(MJ)
C
C     ANA DOLGU BOLGESI ORTALAMA SIVI AKIS HIZLARININ HESAPLANMASI
C
      FI(J)=(1.D 00-W(J))
      WRITE(20,20)W(J),FI(J),DEL(J)
      IF(J .NE. KP)GO TO 43
      KP=KP+JMMD
      WRITE(6,208)DIST,J,(F(I),I=1,NR,NRD),FB(J),DEL(J),W(J),FI(J)
  208 FORMAT(1X,F7.3,1X,I4,8D14.7)
C
C     AKIS HIZLARI INTEGRASYON KISMI
C
      IF(NOINT .EQ. 0)GO TO 43
      IF(J .EQ. JINT(1) .OR. J .EQ. JINT(2) .OR.J .EQ. JINT(3)) GO TO 44
      IF(J .NE. JINT(4) .AND. J .NE. JINT(5) .AND. J .NE. JINT(6))GO TO
     143
   44 CONTINUE
      WRITE(6,209)
  209 FORMAT(///30X,55HFLOW DISTRIBUTIONS IN CONCENTRIC SECTIONS OF THE
     1COLUMN)
      JJ=J
      CALL FLINT(FR,E,Y,JJ,NCYL,IND,TINTF)
      IF(IND .NE. 1)GO TO 400
      NCYLM=NCYL-1
      SUMF=FR(NCYL)
 1302 DO 302 L=1,NCYLM
      SUMF=SUMF+FR(L)
  302 E(L)=(E(L)/FR(L))*1.D 02
      E(NCYL)=(E(NCYL)/(FR(NCYL)-W(J)*PYE))*1.D 02
      ZZ=DZ*FLOAT(JJ-1)
      WRITE(6,210)ZZ,FR(1),Y(1),Y(2),E(1)
  210 FORMAT(/1X,7HDEPTH   ,F9.5,3X,10HFLOW RATE=,D15.8,1X,10HSECTN FROM,
     1F9.6,2HTO,F9.6,29HESTIMATED INTG ERR (PERCENT)=,D15.8////)
 1303 DO 303 L=2,NCYL
      LL=L+1
      WRITE(6,211)FR(L),Y(L),Y(LL),E(L)
  211 FORMAT(30X,D15.8,11X,F9.6,2X,F9.6,29X,D15.8)
  303 CONTINUE
      RES1=(DABS((SUMF-PYE)/PYE))*1.D 02
      RES2=(DABS((TINTF-PYE)/PYE))*1.D 02
      WRITE(6,212)SUMF,PYE,RES1
  212 FORMAT(/1X,25HSUM OF INTEGRATED FLOWS =,D15.8,2X,6HINPUT=,D15.8,2X
     1,14HPERCENT ERROR=,D15.8)
      WRITE(6,213)TINTF,PYE,RES2
  213 FORMAT(1X,25HINTEG OVER CROSS-SECTION=,D15.8,2X,6HINPUT=,D15.8,2X,
     114HPERCENT ERROR=,D15.8)
  400 CONTINUE
      GO TO 43
  600 CONTINUE
      STOP
      END
ΔFOR,IS .CALC
      SUBROUTINE CALC(J,ICALC)
```

```
C
C     HESAP KONTROL ALT PROGRAMI
C
      DIMENSION T(30)
      COMMON/B1/IBPP
      COMMON/CONST/SR,SR2,OPSR,B,OMSR,SR04,OPSR2,OMSR2,SR2F,GRAOS,GROS
      COMMON/FL2/PYE,DR,DZ,RIJ,NFTC,NR
      COMMON/FL3/FIM,FIP
      COMMON/PROW/DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID,A,G,AA,H,FO,X
      COMMON/FDB/JF
      COMMON/FL1/FB(2010),W(2010),DEL(2010),TP(30),TN(30)
      DOUBLE PRECISION SR,SR2,OPSR,B,OMSR,SR04,OPSR2,OMSR2,SR2F,GRAOS,
     1GROS,G,AA,H,FO
      DOUBLE PRECISION DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID,A,     FB,W,DEL
      DOUBLE PRECISION PYE,DR,DZ,RIJ,T,TP,Q,      ZERO,    C1,C2,C3,OM,OMP
      DOUBLE PRECISION TN,                   GJ,QDEL,FF,TF,FIP,FIM,DD
      NGJ=0
      IB=NR
      QDEL=1.D-05
      ZERO=1.D-08
      NTRY=0
      IBOUND=IB
      JF=J
      IBPP=IB+1
 1300 DO 300 I=1,IBPP
  300 T(I)=TN(I)
      OM=W(J)
  400 NTR=1
      L=1
      TP(1)=SR2F*T(2)+((SR2*TN(2) +OMSR2*TN(1) )/OPSR2)
      Q=DABS((TP(1)-T(1))/TP(1))
      IF(Q .GT. ZERO)NTR=2
 1301 DO 301 I=2,IBOUND
      FIM=(2.D 00*FLOAT(I-1)-1.D 00)/FLOAT(I-1)
      FIP=(2.D 00*FLOAT(I-1)+1.D 00)/FLOAT(I-1)
      TP(I)=B*(FIP*T(I+1)+FIM*TP(I-1))+(GJ(L,I,J)/OPSR)
      Q=DABS((TP(I)-T(I))/TP(I))
      IF(Q .GT. ZERO)NTR=2
  301 CONTINUE
      NB=IB+1
      FIM=(2.D 00*FLOAT(NB-1)-1.D 00)/FLOAT(NB-1)
      FIP=(2.D 00*FLOAT(NB-1)+1.D 00)/FLOAT(NB-1)
      C1=1.D 00
      C2=B*FIP*GRAOS*2.D 00
      C3=4.D 00*B*TP(IB)+B*FIP*GROS*2.D 00*OM+(GJ(NGJ,NB,J)/OPSR)
      TF=TP(IB)
  399 CALL FBOUND(C1,C2,C3,X,FF,TF,IFBOUN)
      IF(IFBOUN .EQ.1)GO TO 600
      WRITE(6,200)
  200 FORMAT(1X,17HAFTER 301 IN CALC)
      ICALC=0
      RETURN
  600 TP(NB)=FF
      OMP=(W(J)+(2.D 00*GAMA*DZ*A*(FF**X)))/(1.D 00+2.D 00*GAMA*DZ)
      Q=DABS((OMP-OM)/OMP)
      IF(Q .GT. ZERO)NTR=2
  500 IF(NTR .EQ. 1)GO TO 501
      OM=OMP
      IBPP=IB+1
      NTRY=NTRY+1
      IF(NTRY .LT. 100)GO TO 1304
      WRITE(6,202)NTRY,J,NGJ
```

```
  202 FORMAT(1X,13HNTRY EXCEEDED,I6,12H IN CALC**J=,I6,4HNGJ=,I2)
      ICALC=0
      RETURN
 1304 DO 304 I=1,IBPP
  304 T(I)=TP(I)
      GO TO 400
  501 CONTINUE
      W(J+1)=OMP
      CALL DELTA(OMP,J,DZ,DD)
      DEL(J+1)=DD
      FB(J+1)=TP(NB)
      ICALC=1
      RETURN
      END
ΔFOR,IS ,DELTA
      SUBROUTINE DELTA(WF,J,DZ,DEL)
C
C     DUVAR AKISI SIVI TABAKASI KALINLIGINI HESAPLAYAN ALT PROGRAM
C
      COMMON/B1/IBPP
      COMMON/PROW/DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID,A,G,AA,H,FO,X
      COMMON/BLAST/FI,S,RH
      DOUBLE PRECISION DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID,A,AA,G,H,FO,X
      DOUBLE PRECISION FI,S,PYE,AREA,WB,DTR1,DTR2,REY,DP,RAT,F,D1,D2,DEL
     1,DDT,DEA,WF,GG,VISA,RH,SF
      N=0
      SF=S*.3048D 00
      GG=DSQRT(G)
      DEA=DEN/16.0185D 00
      DTR1=1.D-03
      PYE=3.1415926535898
      VISA=VISC*.671969
  400 AREA=PYE*(2.D 00*(AA/.3048)*DTR1-(DTR1**2))
      WB=WF*PYE*(AA**2)*FO*DEN/(.454D 00*3.6D 03*AREA)
      DP=6.D 00*(1.D 00-VOID)/(FI*SF)
      REY=DP*WB/(VISA)
      RAT=2./3.
      F=7.9D-02/(REY**.25)
      D1=REY*DSQRT(F)
      D2=3.15D-01*((VISC*.671969*D1/(GG*DEA))**RAT)
      DTR2=D2
      DDT=DABS((DTR1-DTR2)/DTR1)
      N=N+1
      IF(DDT .LE. 1.D-06)GO TO 401
      DTR1=DTR2
      IF(J .NE. 1401) GO TO 400
      WRITE(6,101)N,DTR2,DDT,WB,REY,F,D1,D2,DTR1,AREA
      GO TO 400
  401 DEL=DTR2*3.048D-01/RH
      IF(J .NE. 1401)GO TO 402
      WRITE(6,100)
  100 FORMAT(//////11H FROM DELTA)
      WRITE(6,101)G,GG,DEA,DEN,VISA,WF,AA,FO,VISC,VOID,DP,PYE,DEL
  101 FORMAT( )
  402 CONTINUE
      RETURN
      END
ΔFOR,IN ,GJ
      DOUBLE PRECISION FUNCTION GJ(L,I,J)
C
C     DJ FONKSIYONUNU HESAPLAYAN ALT PROGRAM
C
```

```
            COMMON/FL3/FIM,FIP
            COMMON/PROW/DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID,A,G,AA,H,FO,X
            COMMON/CONST/SR,SR2,OPSR,B,OMSR,SR04,OPSR2,OMSR2,SR2F,GRAOS,GROS
            COMMON/FL1/FB(2010),W(2010),DEL(2010),F(30),FN(30)
            DOUBLE PRECISION F,FB,DEL,W,G,AA,H ,FO
            DOUBLE PRECISION SR,SR2,OPSR,B,OMSR,SR04,OPSR2,OMSR2,SR2F,GRAOS,
           1GROS,A
            DOUBLE PRECISION FN,      FIM,FIP,DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID
            IF(L-1)400,401,401
      C     EQUATION 123
        400 GJ=OMSR*FN(I) -SR04*FIP*2.D 00*GRAOS*(FN(I) **X)+SR*FN(I-1) +SR04*
           1FIP*2.D 00*GROS*W(J)
        399 RETURN
      C     EQUATION  79
        401 GJ=SR04*FIP*FN(I+1) +OMSR*FN(I) +SR04*FIM*FN(I-1)
            RETURN
            END
      ΔFOR,IN .FBOUND
            SUBROUTINE FBOUND(C1,C2,C3,X,F,TF,IFBOUN)
      C
      C     SINIRDAKI  F  DEGERINI HESAPLAYAN ALT PROGRAM
      C
            COMMON/FDB/J
            DOUBLE PRECISION C1,C2,C3,  F,F1,F2,E1,E2,TF,EE,ZERO
        399 ZERO=1.D-08
            NTRY=0
        405 F1=TF
            E1=C3-C1*F1-C2*(F1**X)
            F2=TF*1.05D 00
        400 E2=C3-C1*F2-C2*(F2**X)
            EE=DABS((F2-F1)/F2)
            IF(EE .LT. ZERO)GO TO 401
            F=F1-(F2-F1)*(E1/(E2-E1))
            E1=E2
            F1=F2
            F2=F
            NTRY=NTRY+1
            IF(F2 .GE. 0.D+00)GO TO 403
            RECX=1./X
            TF=(C3/C2)**RECX
            GO TO 405
        403 IF(NTRY .LT. 200)GO TO 400
            WRITE(6,200)NTRY,EE,F2,F1
        200 FORMAT(1X,23HNTRY IN FBOUND EXCEEDED,I6,3(2X,D15.8))
            IFBOUN=0
            RETURN
        401 F=F2
            IFBOUN=1
            RETURN
            END
      ΔFOR,IN .PROP
            SUBROUTINE PROP(TEMP,SPACK)
      C
      C     MODELE GORE SIVI AKIS PARAMETRELERINI HESAPLAYAN ALT PROGRAM
      C
            COMMON/PROW/DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID,A,G,AA,H,FO,X
            DOUBLE PRECISION TEMP,SPACK,DEN,VISC,SURFT,GAMA,SLAMDA,VOID,A
            DOUBLE PRECISION G,AA,H,FO,FD
            SLAMDA=2.31D-03*DSQRT(SPACK)*SURFT/(AA*1.D 02)
            FD =FO*DEN
            IF(SURFT .GT. 5.0D 01)GO TO 400
            GAMA=(3.D 00*AA/2.D 00)
```

```
      X=1.73
      XX=1.-X
      A=2.D 00*5.41D-05/(AA*(FD**XX))
      GO TO 401
  400 GAMA=(4.2D 00*AA/2.D 00)
      X=7.64E-01
      XX=1.-X
      A=2.D 00*2.02D-01/(AA*(FD**XX))
  401 RETURN
      END
ΔFOR,IN .FLINT
      SUBROUTINE FLINT(FR,E,R,J,NCYL,IND,TOTAL)
C
C     AKIS HIZI INTEGRALLERININ KONTROL ALT PROGRAMI
C
      DIMENSION FR(10),E(10),R(10),X(40),FF(40)
      COMMON/FL2/PYE,DR,DZ,RIJ,NFTC,NR
      COMMON/FL1/FB(2010),W(2010),DEL(2010),F(30),FN(30)
      DOUBLE PRECISION F,FB,W,DEL,FR,E,PYE,DR,DZ,RIJ,        X,FF,RESULT
      DOUBLE PRECISION ERROR,TOTAL,FN
      IOUT=1
      IND=0
      IB=NR
  400 NPOINT=(NR/NCYL)+1
      NP1=IB+1-(NPOINT-1)*(NCYL-1)
      IF(NP1 .GE. 4 .AND.NPOINT .GE. 4)GO TO 399
      WRITE(6,200)J,NP1,NPOINT
  200 FORMAT(1X,37HINTEGRATION CANNOT BE PERFORMED FORJ=,I4,22HPOINTS ON
     1 OUTER SHELL=,I2,23HPOINTS ON INNER SHELLS=,I2)
      IND=0
      RETURN
C     GENERATING  RADII TO DELIMIT SECTIONS
  399 R(1)=0.
      NCYLP=NCYL+1
 1300 DO 300 I=2,NCYLP
  300 R(I)=R(I-1)+DR*FLOAT(NPOINT-1)
      IA=1
      NBEFOR=1
 1302 DO 302 M=1,NCYL
      NP=NPOINT
 1303 DO 303 N=1,NP
      NN=NBEFOR-1+N
      X(N)=DR*FLOAT(NN-1)
  303 FF(N)=FN(NN) *X(N)*2.D 00*PYE
      NBEFOR=NBEFOR+NP-1
      CALL CUBINT(X,FF,NP,IA,NP,RESULT,ERROR,IND)
      IF(IND .EQ. 1)GO TO 402
  401 WRITE(6,201)J
  201 FORMAT(1X,42HCUBINT RETURNED WITHOUT INTEGRATION FOR J=,I4)
      RETURN
  402 FR(M)=RESULT
  302 E(M)=ERROR
      FR(NCYL)=FR(NCYL)+W(J)*PYE
      IBP=IB+1
 1304 DO 304 N=1,IBP
      X(N)=DR*FLOAT(N-1)
  304 FF(N)=FN(N) *X(N)*2.D 00*PYE
  404 CALL CUBINT(X,FF,IBP,IA,IBP,RESULT,ERROR,IND)
      IF(IND .EQ. 1)GO TO 403
      WRITE(6,202)J
  202 FORMAT(1X,42HCUBINT RETURNED WITHOUT INTEGRATION FOR J=,I4,5HTOTAL
     1)
```

```
      RETURN
  403 TOTAL=RESULT+W(J)*PYE
      IND=1
      RETURN
      END
ΔFOR,IN .CUBINT
      SUBROUTINE CUBINT(X,F,N,IA,IB,RESULT,ERROR,IND)
C
C     INTEGRASYON ALT PROGRAMI (DAVIS VE RABINOWITZ: 1975)
C
      DIMENSION X(N),F(N)
      DOUBLE PRECISION X,F,RESULT,ERROR,S,C,R1,R2,R3,R4,D1,D2,D3
      DOUBLE PRECISION H1,H2,H3,H4,ZH,Z6,Z12,Z3,Z5,Z10,Z60,Z2,Z120
      IND=0
      IF(N.LT.4 .OR. IA.LT.1.OR. IB.GT.N)RETURN
      IND=1
      ZH=.5D 00
      Z6=6.D 00
      Z12=1.2D 01
      Z3=3.D 00
      Z5=5.D 00
      Z10=1.D 01
      Z60=6.D 01
      Z2=2.D 00
      Z120=1.2D 02
      IF(IA .EQ. IB)RETURN
      ERROR=0.D 00
      RESULT=0.D 00
      IF(IA .LT. IB) GO TO 2
      IND=-1
      IT=IB
      IB=IA
      IA=IT
    2 S=0.D 00
      C=0.D 00
      R4=0.D 00
      J=N-2
      IF(IA .LT. N-1 .OR. N .EQ. 4)J=MAX0(3,IA)
      K=4
      IF( IB .GT. 2 .OR. N .EQ. 4)K=MIN0(N,IB+2)-1
      DO 1 I=J,K
      IF(I .GT. J)GO TO 5
      H2=X(J-1)-X(J-2)
      D3=(F(J-1)-F(J-2))/H2
      H3=X(J)-X(J-1)
      D1=(F(J)-F(J-1))/H3
      H1=H2+H3
      D2=(D1-D3)/H1
      H4=X(J+1)-X(J)
      R1=(F(J+1)-F(J))/H4
      R2=(R1-D1)/(H4+H3)
      H1=H1+H4
      R3=(R2-D2)/H1
      IF(IA .GT. 1) GO TO 8
      RESULT=H2*(F(1)+H2*(ZH*D3-H2*(D2/Z6-(H2+H3+H3)*R3/Z12)))
      S=-H2**3*(H2*(Z3*H2+Z5*H4)+Z10*H3*H1)/Z60
      GO TO 8
    5 H4=X(I+1)-X(I)
      R1=(F(I+1)-F(I))/H4
      R4=H4+H3
      R2=(R1-D1)/R4
      R4=R4+H2
```

```
      R3=(R2-D2)/R4
      R4=(R3-D3)/(R4+H1)
    8 IF(I.GT.IB .OR. I.LE.IA)GO TO 11
      RESULT=RESULT+H3*((F(I)+F(I-1))*ZH-H3*H3*(D2+R2+(H2-H4)*R3)/Z12)
      C=H3**3*(Z2*H3*H3+Z5*(H3*(H4+H2)+Z2*H2*H4))/Z120
      ERROR=ERROR+(C+S)*R4
      IF(I .EQ. J)GO TO 14
      S=C
      GO TO 15
   14 S=S+C+C
      GO TO 15
   11 ERROR=ERROR+R4*S
   15 IF(I .LT. K)GO TO 20
      IF(IB .LT. N)GO TO 22
      RESULT=RESULT+H4*(F(N)-H4*(ZH*R1+H4*(R2/Z6+(H3+H3+H4)*R3/Z12)))
      ERROR=ERROR-H4**3*R4*(H4*(Z3*H4+Z5*H2)+Z10*H3*(H2+H3+H4))/Z60
   22 IF(IB .GE. N-1)ERROR=ERROR+S*R4
      GO TO 1
   20 H1=H2
      H2=H3
      H3=H4
      D1=R1
      D2=R2
      D3=R3
    1 CONTINUE
      IF(IND .EQ. 1)RETURN
      IT=IB
      IB=IA
      IA=IT
      RESULT=-RESULT
      ERROR=-ERROR
      IND=1
      RETURN
      END
 ΔFOR,IN .MAXO
      FUNCTION MAXO(L,M)
      IF(L .GT. M)MAXO=L
      IF(L .LT. M)MAXO=M
      RETURN
      END
 ΔFOR,IN .MINO
      FUNCTION MINO(L,M)
      IF(L .GT. M)MINO=M
      IF(L .LT. M)MINO=L
      RETURN
      END
 ΔXQT
END DATA.
ΔFIN
```

{1} Ateşmen,K.M., "The Dispersion of Matter in Turbulent Shear Flow", Int. J. Heat Mass Transfer, 14, 2146, (1971).

{2} Ateşmen,K.M., Baldwin,L.V., ve Haberstroh,R.D., "The Dispersion of Matter in Turbulent Pipe Flows", J. Basic Engineering (Trans. A.S.M.E.), 461, (Dec. 1971).

{3} Bird,R.B., Stewart,W.E., ve Lightfoot,E.N., "Transport Phenomena", John Wiley and Sons, New York, (1960).

{4} Boyadziev,L., Beschkov,V., ve Kyuchoukov,G., "On the PDE-Model of a Closed End Chemical Reactor", Chem.Eng.Sci., 30, 437, (1975).

{5} Carnahan,B., Luther,M.A., ve Wilkes,J.O., "Applied Numerical Methods", John Wiley & Sons, Inc., New York, (1969), Sayfa 446.

{6} Choi,C.Y., ve Perlmutter,D.D., "A Unified Treatment of the Inlet Boundary Condition for Dispersive Flow Models", Chem.Eng.Sci., 31, 250, (1976).

{7} Cihla,Z., ve Schmidt,O., Collection of Czech. Chemical Comm., 23, 569, (1958).

{8} Clements,W.C., ve Blalock,K.E., "Comparison of Method of Moments and Method of Least-Squares in Analyzing Tracer Injection-Response Data from Fluid Systems", Chem.Eng.Sci., 27, 2311, (1972).

{9} Danckwerts,P.V., "Continuous Flow Systems; Distribution of Residence Times", Chem.Eng.Sci., 2, 1, (1953).

{10} Davis,P.J., ve Rabinowitz,P., "Methods of Numerical Integration", Academic Press, New York, (1975).

{11} Denbigh,K.G., ve Turner,J.C.R., "Chemical Reactor Theory", 2nd Ed., Cambridge University Press, Cambridge, (1971), sayfa 90.

{12} Dharwadkar,A., ve Sylvester,N.D., "Liquid-Solid Mass Transfer in Trickle Beds", A.I. Ch.E. Jour., 23, 376, (1977).

{13} Dutkai,E., ve Ruckenstein,E., "Liquid Distribution in Packed Columns", Chem, Eng. Sci., 23, 1365, (1968).

{14} Eroğlu,İ., "Residence Time Distribution in the Liquid Phase for Trickle Flow in a Packed Column", Y.Lisans Tezi. O.D.T.Ü., (1973).

{15} Finlayson,B.A., "The Method of Weighted Residuals and Variational Principles", Academic Press, New York, (1972).

{16} Glasser,D., Katz,S., ve Shinnar,R., "The Measurement and Interpretation of Contact Time Distributions for Catalytic Reactor Characterization", Ind.Eng.Chem.Fundam., 12, 165, (1973).

{17} Hald,A., "Statistical Theory with Engineering Applications", John Wiley and Sons, New York, (1952).

{18} Hartman,M., ve Coughlin,R.W., "Oxidation of SO_2 in a Trickle-Bed Reactor Packed with Carbon", Chem. Eng.Sci., 27, 867, (1972).

{19} Haynes,H.W., "The Determination of Effective Diffusivity by Gas Chromatography", Chem.Eng.Sci., 30, 955, (1975).

{20} Himmelblau,D.M., ve Bischoff,K.B., "Process Analysis and Simulation", John Wiley and Sons, New York, (1968).

{21} Hoftyzer,P.J., "Liquid Distribution in a Column with Dumped Packing", Trans. Instn. Chem. Engrs., 42, T109, (1964).

{22} Hoogendoorn,C.J., ve Lips,J., "Axial Mixing of Liquid in Gas-Liquid Flow Through Packed Beds", Canad. J. Ch.E., 43, 125, (1965).

{23} INTERNATIONAL MATHEMATICAL AND STATISTICAL LIBRARIES, INC., UNIVAC VERSION.

{24} Jameson,G.J., "A Model for Liquid Distribution in Packed Columns and Trickle Bed Reactors", Trans. Instn. Chem. Engrs., 44, T190, (1966).

{25} Kayıhan,F., ve Sandall,O.L., "Gas Absorption with First Order Reaction in Turbulent Liquid Films", A.I.Ch.E. Jour., 20, 402, (1974).

{26} Keenan,J.M., ve Keyes,F.G., "Thermodynamic Properties of Steam", John Wiley and Sons, New York, (1962).

{27} Klinkenberg,A., "Moments of Residence Time Distributions for Cascades of Mixed Vessels with Backmixing", Chem. Eng. Sci., 23, 1975, (1968).

{28} Kramers,H., ve Alberda,G., "Frequency Response Analysis of Continuous Flow Systems", Chem.Eng.Sci., 2, 173, (1953).

{29} Lapidus,L., "Flow Distribution and Diffusion in Fixed-Bed Two-Phase Flow Reactors", Ind.Eng.Chem., 49, 1000,(1957).

{30} Le Nobel,J.W., ve Choufoer,J.M., "Development in Treating Processes for the Petroleum Industry", Fifth World Petroleum Congress Proc., Section III, Paper 18, Fifth World Petroleum Congress Inc., New York (1959).

{31} Levec,J., ve Smith,J.M., "Oxidation of Acetic Acid Solutions in a Trickle Bed Reactor", A.I.Ch.E. Jour., 22, 159, (1976).

{32} Levenspiel,O., "Comparison of the Tank-in-Series and the Dispersion Models for Non-Ideal Flow of Fluid", Chem.Eng.Sci., 17, 576, (1962).

{33} Levenspiel,O., "Chemical Reaction Engineering", J.Wiley and Sons,Inc., New York, (1962).

{34} Levenspiel,O., ve Smith,W.K., "Notes on the Diffusion Type Model for the Longitudinal Mixing of Fluids in Flow", Chem.Eng. Sci., 6, 227, (1957).

{35} Lister,A., "Engineering Design and Development of Desulfurizer Reactors", 3rd European Symposium on Chem.Reaction Engineering, 225 (1964).

{36} Mears,D.E., "The Role of Axial Dispersion in Trickle Flow Laboratory Reactors", Chem. Eng. Sci., 26, 1361, 1971.

{37} Mitchell,A.R., "Computational Methods in Partial Differential Equations", John Wiley and Sons, New York, (1969).

{38} Miyauchi,T., ve Kikuchi,T., "Axial Dispersion in Packed Beds", Chem. Eng. Sci., 30, 343, (1975).

{39} Moore,W.J., "Physical Chemistry", p.732, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, (1962).

{40} Onda,K., Takeuchi,H., Maeda,Y., Takeuchi,N., "Liquid Distribution in a Packed Column", Chem. Eng.Sci., 28, 1677, (1973).

{41} Paraskos,J.A., Frayer,J.A., ve Shah,Y.T., "Effect of Incomplete Catalyst Wetting and Backmixing During Hydroprocessing in Trickle Bed Reactors", Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev., 14, 315, (1975).

{42} Perry,R.H., ve Chilton,C.H., "Chemical Engineers' Handbook ", 5th Ed., Mc Graw Hill, New York, (1973), sayfa 5-57.

{43} Porter,K.E., "Liquid Flow in Packed Columns", Trans, Instn. Chem. Engrs., 46, 169, (1968).

{44} Porter,K.E., ve Jones,M.C., "A Theoretical Prediction of Liquid Distribution in a Packed Column with Wall Effect", Trans. Instn. Chem. Engrs., 41, 240, (1963).

{45} Rao,V.G., ve Varma,Y.B.G., "A Model for the Residence Time Distribution of Liquid Phase in Trickle Beds", A.I.Ch.E. Jour., 22, 612, (1976).

{46} Rothfeld,L.B., ve Ralph,J.L., "Equivalence of Pulse and Step Residence Time Measurements in a Trickle-Phase Bed", A.I.Ch.E. Jour., 9, 852, (1963).

{47} Salvadori,M.G., ve Baron,M.L., "Numerical Methods in Engineering", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, (1961).

{48} Satterfield,C.N., "Mass Transfer in Heterogeneous Catalysis", M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts, (1970).

{49} Satterfield,C.N., "Trickle Bed Reactors", A.I.Ch.E. Jour., 21, 209, (1975)

{50} Satterfield,C.N., ve Özel,A., "Direct Solid Catalyzed Reaction of a Vapor in an Apparently Completely Wetted Trickle Bed Reactor", A.I.Ch.E. Jour., 19, 1259, (1973).

{51} Satterfield,C.N., Pelossof,A.A., ve Sherwood,T.K., "Mass Transfer Limitations in a Trickle Bed Reactor", A.I.Ch.E. Jour., 15, 226, (1969).

{52} Satterfield,C.N., ve Way,P.F., "The Role of the Liquid Phase in the Performance of a Trickle Bed Reactor", A.I.Ch.E. Jour., 18, 305, (1972).

{53} Schiesser,W.E., ve Lapidus,L., "Further Studies of Fluid Flow and Mass Transfer in Trickle Beds", A.I.Ch.E. Jour., 7, 163, (1961)

{54} Schuit,G.C.A., ve Gates,B.C., "Chemistry and Engineering of Catalytic Hydrodesulfurization", A.I. Ch.E. Jour., 19, 417, (1973).

{55} Schwartz,J.G., Weger,E., ve Dudukovic,M.P., "Liquid Holdup and Dispersion in Trickle Bed Reactors", A.I.Ch.E. Jour., 22, 953, (1976).

{56} Shah,Y.T., ve Paraskos,J.A., "Intraparticle Diffusion Effects in Residue Hydrodesulfurization", Ind. Eng. Chem., Process Des.Dev., 14, 368, (1975).

{57} Sherwood,T.K., Pigford,R.L., ve Wilke,C.R., "Mass Transfer", (2nd Edn.), Mc Graw-Hill Book Co., New York, (1975).

{58} Shinnar,R., Naor,P., ve Katz,S., "Interpretation and Evaluation of Multiple Tracer Experiments", Chem. Eng. Sci., 27, 1627, (1972)

{59} Shulman,H.L., Ullrich,C.F., and Wells,N., "Performance of Packed Columns", A.I.Ch.E. Jour., 1, 247, (1955).

{60} Smith,G.D., "Numerical Solutions of Partial Differential Equations", Oxford University Press, London, (1965).

{61} Smith,J.M., "Chemical Engineering Kinetics", 2nd Edition, Mc Graw-Hill Book Company, New York, 1970; bak: Bölüm 6.

{62} Spalding,D.B., "A Note on Mean Residence-Times in Steady Flows of Arbitrary Complexity", Chem.Eng. Sci., 9, 74, (1958).

{63} Standart,G., "The Thermodynamic Significance of the Danckwerts' Boundary Condition", Chem.Eng. Sci., 23, 645, (1968)

{64} Stewart,W.E., ve Sorensen,J.P., "Transient Reactor Analysis by Orthogonal Collocation", Proceedings Chem. Rxn. Engr. Symposium, Preprint B8-75, Amsterdam, (1972).

{65} Sylvester,N.D., Kulkarni,A.A., ve Carberry,J.J., "Slurry and Trickle-Bed Reactor Effectiveness", Canad. J.Ch.E., 53, 313, (1975).

{66} Sylvester,N.D., ve Pitayagulsarn,P., "Mass Transfer for Two-Phase Cocurrent Downflow in a Packed Bed", Ind.Eng.Chem., Process Des. Dev., 14, 421, (1975).

{67} Uchida,S., ve Fujita,S., "Packed Towers with Liquor Circulation", Jour.Soc.Chem. Ind., Japan, 41, 275B, (1938).

{68} van Deemter,J.J., "Trickle Hydrodesulfurization-A Case History", 3rd European Symposium on Chemical Reaction Engineering, 215, (1964).

{69} van der Laan,E.Th., "Notes on the Diffusion-Type Model for the Longitudinal Mixing in Flow", Chem. Eng. Sci, 7, 187, (1958).

{70} van de Vusse,J.G., "Residence Times and Distribution of Residence Times in Dispersed Flow Systems", Chem.Eng.Sci., 10, 229, (1958).

{71} van Swaaij,W.P.M., "Residence Time Distributions in Raschig Ring Columns at Trickle Flow", Ph.D. Thesis, Eindhoven, (1967).

{72} van Swaaij,W.P.M., Charpentier,J.C., ve Villermaux, J., "Residence Time Distribution in the Liquid Phase of Trickle Flow in Packed Columns", Chem.Eng. Sci., 24, 1083, (1969) {73} Villadsen,J., "Selected Approximation Methods for Chemical Engineering Problems", Inst. for Kemiteknik, Numerikal Inst., Danmarks Tekniske Hojskole, (1970).

{74} Villermaux,J., ve van Swaaij,W.P.M., "Modêle Représentatif de la Distribution des Temps de Séjour dans un Réacteur Semi-infini à Dispersion Axiale Avec Zones Stagnantes", Chem.Eng.Sci., 24, 1097, (1969).

{75} Wehner,J.F., ve Wilhelm,R.H., "Boundary Conditions of Flow Reactor", Chem.Eng.Sci., 6, 89, (1956).

{76} YITZHAKI,D., ve AMARONI,C., "Hydrodesulfurization of Gas Oil, Reaction Rates in Narrow Boiling Fractions", A.I.Ch.E. Jour., 23, 342, (1977).

{77} Referans 42, sayfa 5-52.

{78} Referans 42, sayfa 5-53,

{79} Cansever,A., Master Tezi, Boğaziçi Üniversitesi, 1976.