

**T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**AĞIR HİDROKARBONLARDAN DİZEL YAKIT ELDE ETMEK İÇİN
KATALİZÖRLÜ ORTAMDA TÜBÜLER VE CSTR REAKTÖR
TASARIMININ YAPILMASI VE PROSES OPTİMİZASYONU**

DOKTORA TEZİ

Tamer ÇINAR

Yangın Ve Yangın Güvenliği Anabilim Dalı

Şubat 2025

**T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**AĞIR HİDROKARBONLARDAN DİZEL YAKIT ELDE ETMEK İÇİN
KATALİZÖRLÜ ORTAMDA TÜBÜLER VE CSTR REAKTÖR
TASARIMININ YAPILMASI VE PROSES OPTİMİZASYONU**

DOKTORA TEZİ

Tamer ÇINAR

Yangın Ve Yangın Güvenliği Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Hakan Serhad SOYHAN

Şubat 2025

Tamer ÇINAR tarafından hazırlanan “AĞIR HİDROKARBONLARDAN DİZEL YAKIT ELDE ETMEK İÇİN KATALİZÖRLÜ ORTAMDA TÜBÜLER VE CSTR REAKTÖR TASARIMININ YAPILMASI VE PROSES OPTİMİZASYONU” adlı tez çalışması 03.02.2025 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yangın ve Yangın Güvenliği Anabilim Dalı’nda Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi

Jüri Başkanı :	Prof. Dr. Hakan Serhad SOYHAN Sakarya Üniversitesi	
Jüri Üyesi :	Prof. Dr. Salih Zeki YILDIZ Sakarya Üniversitesi	
Jüri Üyesi :	Prof. Dr. Cenk ÇELİK Kocaeli Üniversitesi	
Jüri Üyesi :	Prof. Dr. İhsan KARAMANGİL Uludağ Üniversitesi	
Jüri Üyesi :	Doç. Dr. Gökhan ÇOŞKUN Sakarya Üniversitesi	



ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Eğitim-Öğretim Yönetmeliğine ve Yükseköğretim Kurumları Bilimsel Araştırma ve Yayın Etiği Yönergesine uygun olarak hazırlamış olduğum “AĞIR HİDROKARBONLARDAN DİZEL YAKIT ELDE ETMEK İÇİN KATALİZÖRLÜ ORTAMDA TÜBÜLER VE CSTR REAKTÖR TASARIMININ YAPILMASI VE PROSES OPTİMİZASYONU” başlıklı tezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın tüm aşamalarında yukarıda belirtilen yönetmelik ve yönergeye uygun davrandığımı, tezin içerdiği yenilik ve sonuçları başka bir yerden almadığımı, tezde kullandığım eserleri usulüne göre kaynak olarak gösterdiğimi, bu tezi başka bir bilim kuruluna akademik amaç ve unvan almak amacıyla vermediğimi ve 20.04.2016 tarihli Resmi Gazete’de yayımlanan Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin 9/2 ve 22/2 maddeleri gereğince Sakarya Üniversitesi’nin abonesi olduğu intihal yazılım programı kullanılarak Enstitü tarafından belirlenmiş ölçütlere uygun rapor alındığını, çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun ortaya çıkması halinde doğabilecek her türlü hukuki sorumluluğu kabul ettiğimi beyan ederim.

(03/02/2025).

Tamer ÇINAR



TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın yürütülmesi boyunca her türlü desteklerini esirgmeyen tez danışmanın Prof. Dr. Hakan Serhad SOYHAN'a , Tez eş danışmanım Doc. Dr. Murat TUNA'ya , gerek derslerin gerekse tez çalışmalarım boyunca bana her türlü bilimsel eğitim, Ar-Ge ve deneysel çalışmalarda yanımda duran ve desek olan tez jüri üyelerim Prof. Dr. Salih Zeki YILDIZ'a, Prof. Dr. Cenk ÇELİK'e, Dr. Öğretim Üyesi Cemil KOYUNOĞLU'na en içten teşekkürlerimi sunarım.

Hayatları boyunca iki cihan bizlere kendilerini adayan sevgili babam ve annem Hikmet ve Hüsniye ÇINAR'a en kalbi sevgi, saygı ve hürmetlerimi sunarım.

Eğitim ve sosyal hayatımın kırılma dönemlerine en etkili duruşları ile yön veren yanımda olan eğitmen annem sevgili Sabire BAYRAKTAROĞLU'na , Eşimin annesi yuvamın sebeplerinden sevgili Annem Yurdanur KILIÇ ve eşi saygıdeğer babam Fahri KILIÇ'a hürmet , saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Yoğun iş hayatım ve eğitimimiz boyunca her türlü hal ve ortamda yanımda duran, bana sabır ve metanetle destek veren sevgili eşim Mukaddes ÇINAR'a ve çocuklarımız Tarık ÇINAR, Rabiya Adile EKİCİ ÇINAR'a , Tuğba ÇINAR'a ve Almila ÇINAR'a en kalbi duygularıyla teşekkür ederim.

Tüm çalışmalarım boyunca 7/24 her türlü imkan ve kabiliyetlerini bizlere sunan Sakarya Üniversitesinin tüm kıymetli yöneticilerine, birim ve görevlileri ile tüm dost ve arkadaşlarıma en kalbi saygı, sevgi ve teşekkürlerimi borç bilirim.

Tamer ÇINAR
(Kimya Yük. Mühendisi)



*Bu kıymetli çalışmayı sevgili Babam Hikmet ÇINAR ve Annem Hüsniye ÇINAR’a
atf ediyorum.....*



İÇİNDEKİLER

Sayfa

TEŞEKKÜR	vii
İÇİNDEKİLER	xi
KISALTMALAR.....	xiii
SİMGELER	xv
TABLO LİSTESİ	xvii
ŞEKİL LİSTESİ	xix
ÖZET.....	xxi
SUMMARY.....	xxv
1. GİRİŞ	1
1.1 Katalitik Parçalamanın Tarihsel Gelişimi.....	1
1.2 Katalitik Parçalanma Mekanizması	3
1.2.1 Katalizör kullanımı	3
1.2.2 Parçalanma türleri	4
1.2.3 Parçalanma sürecinin avantajları	6
1.2.4 Katalitik parçalanma	7
1.2.5 Fluid catalytic cracking (FCC) mekanizması	7
1.2.6 Katalitik parçalanma ürünleri	8
1.2.6.1 İzomerizasyon	8
1.2.6.2 Hidrojen transferi ve sikloaromatizasyon	13
1.2.6.3 Trans-alkilasyon / alkil grup transferi.....	16
1.2.6.4 Olefinlerin naftenlere siklizasyonu	17
1.2.6.5 Dealkilasyon	19
1.2.6.6 Kondensasyon	21
1.2.6.7 Dehidrojenasyon	22
1.2.6.8 Fcc de katalizörlerin etkinliği	24
2. LİTERATÜR ÖZETİ.....	29
2.1 Katalizörlerin Rolü	29
2.2 Reaktör Tasarımı ve Optimizasyonu	29
2.3 Enerji Verimliliği ve Çevresel Sürdürülebilirlik.....	30
2.4 HAD (Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği) Modelleme	30
3. DENEYSEL ÇALIŞMALAR	33
3.1 Kullanılan Madde ve Katkılar	33
3.1.1. Hammadde	33
3.1.1.1 Hammadde ürününün özellikleri.....	33
3.1.2 Katalizör	33
3.2 Malzeme seçimi.....	34
3.2.1 Tübler reaktör malzemesi:	34
3.2.2 Disitilasyon ünitesi	35
3.2.3 CSTR reaktör ünitesi	39
3.3 Test Cihazları.....	41
3.3.1 FTIR testi	41

3.3.2 Vizkozite	41
3.3.3 Yoğunluk	43
3.3.4 Parlama noktası	43
3.3.5 Donma noktası	44
3.4 Yöntem ve Tasarım Hesaplamaları	44
3.4.1 Yöntem	44
3.4.2 Tasarım hesaplamaları	46
3.4.2.1 Eşanjör hesaplamaları	46
3.4.2.2 Tübüler reaktör boyu hesaplanması	49
3.4.2.3 Tubuler reaktör tasarımı	51
4. DENEYSEL BULGULAR VE SONUÇLAR	53
4.1 Laboratuvar Ölçeğinde 1 Kg lık Reaktörde Yapılan Çalışmalar	53
4.1.1 Laboratuvar ölçekli deneysel tasarım çıktıları	58
4.2 Prototip Reaktörde Yapılan Deneysel Çalışmalar	58
4.3 Hammadde ve Ürünlere Ait Analiz Sonuçları	59
4.3.1 Hammadde	59
4.3.2 Destilat ürün	63
4.3.2.1 Destilat ürününün fiziksel ölçülen parametreleri	64
4.3.3 Kalıntı	67
4.3.3.1 Kalıntı ürününün fiziksel ölçülen parametreleri	67
4.4 Tasarım çıktıları	70
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	73
5.1 Reaktör Tasarımı ve Deneysel Analiz Sonuçların İncelenmesi	74
5.1.1 Reaktör tasarımı	74
5.1.1.1 Yeniden rafinasyonun ekonomisi	75
5.1.1.2 Toplu reaktörler	78
5.1.1.3 Katı benzeri süspansiyonlar	80
5.1.2 HAD modelleme hedefleri	80
5.1.2.1 Bir türbülans modeli seçme	80
5.1.3 Malzemeler ve yöntemler	81
5.1.3.1 Geometri oluşturma	81
5.1.3.2 Geometriyi meshleme	82
5.1.3.3 Özellikleri ayarlama	84
5.1.4 Sonuçlar ve tartışmalar	85
5.1.5 Modelleme sonuçlarının ekonomik analizi	89
5.1.6 Modelleme sonuçlarının üretim hızı analizi	89
5.1.7 Modelin doğrulanması	92
5.1.8 Karıştırıcı hızının optimizasyonu	92
5.1.9 Kanat hızının optimizasyonu ve doğrulama	94
5.1.10 HAD ve deneysel sonuçlar arasındaki uyumsuzluk	94
5.1.11 Yüksek R^2 değeri çıkarımları	94
5.1.12 Gelecek çalışmalar için düşünceler	95
6. SONUÇ VE ÖNERİLER	97
KAYNAKLAR	99
ÖZGEÇMİŞ	113

KISALTMALAR

CFD	: Computational Fluid Dynamics
Cm³	: Santimetre küp, hacim ölçü birimi
FCC	: Fluid Catalytic Cracking
g/mol	: Gram/mole, molar kütleyi belirten birim
GC-MS	: Gaz Kromatografisi-Kütle Spektrometrisi
HAD	: Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği
HPLC	: Yüksek Performanslı Sıvı Kromatografisi
IR	: Kızılötesi Spektroskopisi
Kd	: Dağılım Katsayısı
Mol	: Maddenin miktarını belirten birim
NMR	: Nükleer Manyetik Rezonans
PH	: Hidrojen iyonu konsantrasyonunu ölçen birim
ppm	: Milyonda bir konsantrasyon birimi
Rf	: Göreceli Cephe Değeri (TLC'de kullanılır)
TCC	: Thermal Catalytic Cracking
TLC	: İnce Tabaka Kromatografisi
UV/Vis	: Ultraviyole/Görünür Spektroskopisi
ΔH	: Entalpi Değişimi
ΔT	: Sıcaklık Değişimi



SİMGELER

% (m/m)	: K�tlece y�zde
Kg/m³	: Kilogram/metrek�p, yoęunluk birimi
�C	: Derece Celsius, sıcaklık �l�� birimi
cm-1	: Santimetre bařına dalga sayısı, genellikle spektroskopide kullanılır
%T	: Y�zde transmisyon, spektroskopide kullanılır
C-O-C	: Karbon-oksijen-karbon baęı, kimyasal yapıyı g�sterir
mg/Kg	: Miligram/kilogram, konsantrasyon birimi
Cst	: Sentistokes, kinematik viskozite birimi
MJ/Kg	: MegaJoule/kilogram, enerji i�erięi birimi



TABLO LİSTESİ

Sayfa

Tablo 3.1 : Hammaddenin (DEAY) sıcaklığa göre vizkozite değişimi.	33
Tablo 3.2 : Reaktör boy hesabı.	50
Tablo 4.1 : Deney numunesi analiz sonuçları.....	59
Tablo 4.2 : Deney numunesi kaynama noktası değişimi.	60
Tablo 4.3 : Motorin ve elde edilen ürünün kalite değerleri.	63
Tablo 4.4 : Destilat ürününün fiziksel olarak ölçülen parametrelerini ve iki ayrı çevrimde elde edilen verimliliği.	64
Tablo 4.5 : Çevrim bazlı verim hesaplaması.	65
Tablo 4.6 : Tubuler reaktör tasarımına ait parametreler.	69
Tablo 4.7 : Sabit debi değişken çapta ve sabit çap değişken debideki reaktör boyları.	70
Tablo 5.1 : Deneysel çalışmanın işletme maliyeti.	77
Tablo 5.2 : Meshleme özellikleri.	82
Tablo 5.3 : Ansys-Fluent koşulları.	84
Tablo 5.4 : Modelleme çalışması için deneysel koşullar (kararlı durum, $t=0$ s).	85
Tablo 5.5 : Simülasyon sonuçları.	86
Tablo 5.6 : Optimizasyon sonuçları.	87
Tablo 5.7 : Ticari ağır yoğunluklu yağların model girdileri ve hesaplanan güç değerleri.	88
Tablo 5.8 : Birim ürün için gereken enerji değerleri.	89
Tablo 5.9 : Ayırma oranlarına göre elde edilen koşulların sonuçları.	90
Tablo 5.10 : Ham madde (DEAY) viskozitesinin sıcaklığa göre değişimi.....	92
Tablo 5.11 : Ayırma oranlarına göre elde edilen koşulların sonuçları.....	93



ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1 : FCC Mekanizma yapısı	25
Şekil 1.2 : ($\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 4.7\text{SiO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$). partikül yapısı	25
Şekil 1.3 : Yüksek dizel verimine sahip $\text{MgO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$ -magnezyum-alümina- alüminyum fosfat (MgAAP) matrix yapısı	27
Şekil 3.1 : Tübüler reaktör parçaları	34
Şekil 3.2 : Solidde çizilen model.	34
Şekil 3.3 : Solidde çizilen model-1.....	36
Şekil 3.4 : Solidde çizilen model.	37
Şekil 3.5 : Tasarımı yapılan reaktör.....	38
Şekil 3.6 : Solidde çizilen model.	39
Şekil 3.7 : Solidde çizilen model.	40
Şekil 3.8 : FTIR test cihazı.	41
Şekil 3.9 : Brookfield vizkometre cihazı.	42
Şekil 3.10 : Bomemetre cihazı.....	43
Şekil 3.11 : Cleveland açık kap test cihazı.	43
Şekil 3.12 : Donma ölçüm cihazı.....	44
Şekil 3.13 : Ters akış akışkanlı ısı değiştirici.	46
Şekil 3.14 : Boru yerleştirme modeli.....	48
Şekil 4.1 : Katilizör ortamında zamana göre sıcaklık değişimi.	54
Şekil 4.2 : Prototip reaktör ve vakum distilasyon ünitesi.	59
Şekil 4.3 : Kaynama noktası değişim.	62
Şekil 4.4 : Hammadde FTIR test sonucu.	62
Şekil 4.5 : Destilat FTIR analiz sonucu.	66
Şekil 4.6 : Kalıntı FTIR analiz sonucu.	67
Şekil 4.7 : Hammadde, destilt ve kalıntı FTIR analiz sonucu.	68
Şekil 5.1 : Batch reaktör üzerindeki HTL reaksiyonları.....	79
Şekil 5.2 : Geometri alanı.	81
Şekil 5.3 : Alanları ağıladıktan sonra.	83
Şekil 5.4 : Maksimum static pressure is 3746,469 pascal.	90
Şekil 5.5 : Hammadde vizkozitesinin sıcaklığa göre değişimi.	92
Şekil 5.6 : Tepkime süresi ile karıştırma hızı arasındaki değişen ilişki.	93
Şekil 5.7 : Hammadde vizkozitesinin sıcaklığa göre değişimi.	93



AĞIR HİDROKARBONLARDAN DİZEL YAKIT ELDE ETMEK İÇİN KATALİZÖRLÜ ORTAMDA TÜBÜLER VE CSTR REAKTÖR TASARIMININ YAPILMASI VE PROSES OPTİMİZASYONU

ÖZET

Tezin başlangıç bölümünde, ağır petrol fraksiyonlarından dizel yakıt üretimi için karıştırma hızının önemi ve bu süreçte kullanılacak en uygun ham maddenin seçimi üzerinde durulmuştur. Araştırmanın temel hedefi, karıştırma hızının 20 devir/dakika olduğu durumlarda, spesifik bir geometri altında hangi ham maddenin en etkin sonuçları vereceğini belirlemektir. Bu hız, ham maddenin ve ağır petrol fraksiyonunun 370°C'ye kadar ısıtılması sırasında homojen bir karışımın elde edilmesi için kritik bir faktördür. Çalışmada, karıştırma mekanizmasının etkinliğinin, katalizörün çatlatma sürecini başlatmak için gerekli ideal fiziksel koşulların oluşturulmasında nasıl bir rol oynadığı incelenmiştir. Bu süreç, dizel yakıt üretimindeki verimliliği artırmanın yanı sıra, işletme maliyetlerini optimize etme potansiyeline de sahiptir. Bu bölümde ayrıca, seçilen ham maddenin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin, genel süreç verimliliği üzerindeki etkileri detaylı bir şekilde analiz edilmiştir. Sürecin başarısı için karıştırma hızı ve ham madde seçiminin kritik önemi vurgulanarak, bu iki faktör arasındaki ilişkinin ve etkileşimin derinlemesine anlaşılması hedeflenmiştir.

Tezde gerçekleştirilen detaylı analizler, RME 180'in süreç için en ideal ham madde olduğunu belirlemiştir. Bu seçim, karıştırma mekanizmasındaki torkun etkisi ve buna bağlı olarak tüketilen güç dikkate alınarak yapılmıştır. RME 180, belirlenen süreç koşullarında hem fiziksel hem de kimyasal açıdan en uygun performansı sunan madde olarak öne çıkmıştır. Ancak, süreçteki ideal koşulları tam anlamıyla sağlamak adına RME 180'in diğer bileşenlerle dengeli bir şekilde uyarlanması gerektiği sonucuna varılmıştır. Bu uyarlama, sürecin genel verimliliğini ve stabilitesini artırmak için kritik bir adımdır. Ayrıca, tezde, karıştırılan malzemelerin yoğunluğu ve viskozitesinin, reaktörün tasarımı ve işletme maliyetleri üzerinde önemli etkileri olduğu analiz edilmiştir. Yoğunluk ve viskozite, karışımın homojenliği, ısı transferi verimliliği ve katalizör etkinliği gibi süreç parametreleri üzerinde doğrudan etkilidir. Bu bağlamda, RME 180 ve diğer bileşenlerin karışım oranları, sürecin genel performansını etkileyen kritik değişkenler olarak tanımlanmıştır. Tezde ayrıca, RME 180'in karıştırma sırasında meydana gelen fiziksel ve kimyasal değişimlere adaptasyonu, yan ürün oluşumu, enerji tüketimi ve son ürün kalitesi gibi çeşitli yönlerden incelenmiştir. Bu analizler, süreç optimizasyonu ve maliyet etkinliği açısından RME 180'in kullanımının avantajlarını ve potansiyel sınırlamalarını ortaya koymaktadır. Son olarak, tezde, karıştırma hızı ve ham madde seçiminin süreç verimliliği üzerindeki etkileşiminin derinlemesine incelenmesi, süreç tasarımında önemli iyileştirmeler yapılmasına olanak tanımış ve dizel yakıt üretiminde verimliliği artırma potansiyeli sunmuştur.

İncelenen hammadde, 370°C'ye kadar 600 mmbar vakum basınç altında destile edilmiş endüstriyel atık yağ kalıntılarıdır. Bu ham maddenin yoğunluğu, parlama noktası ve sıcaklıkla azalan viskozitesi, sürecin verimliliği ve güvenliği için önemli parametreler

olarak dikkate alınmıştır. FTIR analizi ile hammadde ve ürünlerin kimyasal bileşenleri incelenmiş, bu sayede süreç sırasında meydana gelen kimyasal dönüşümler anlaşılmıştır. Bu analizler, hammadde ve ürünlerin kimyasal ve fiziksel özelliklerindeki değişimleri detaylandırmakta, süreç verimliliği ve ürün kalitesi değerlendirmesi için kritik bilgiler sağlamaktadır. Bu bölüm, sürecin temel bileşenlerini ve analiz yöntemlerini kapsamlı bir şekilde değerlendirerek, sürecin anlaşılmasına ve iyileştirilmesine katkıda bulunmaktadır.

Yapılan hesaplamalar, sürecin iki aşamasında hammadde kullanımı ve elde edilen destilat miktarları üzerinde yoğunlaşmıştır. İlk çevrimde, hammadde olarak kullanılan 10 kilogram atık yağdan, sürecin sonunda 5 kilogram destilat elde edilmiştir. Bu, sürecin ilk aşamasında %50'lik bir verimlilik oranına işaret etmektedir. Bu verimlilik, hammadde kullanımının etkinliği ve sürecin başlangıç aşamasında elde edilen ürün kalitesi açısından önemlidir. İkinci çevrimde, kalan ham maddenin işlenmesi sonucunda %47.4'lük bir verimlilik oranı elde edilmiştir. Bu oran, sürecin devamlılığı ve stabilitesi açısından değerlendirilmiştir. İlk çevrimle karşılaştırıldığında, ikinci çevrimde bir miktar verimlilik düşüşü gözlemlenmiş olup, bu durum sürecin sürekliliği ve optimize edilmesi gereken alanlar hakkında önemli bilgiler sunmaktadır. Toplamda, başlangıçta kullanılan hammadde miktarının %72.5'i, iki çevrim sonucunda destilat olarak geri kazanılmıştır. Bu oran, sürecin genel verimliliğini ve hammadde kullanımının etkinliğini göstermektedir. Bu verimlilik değerlendirmesi, sürecin maliyet etkinliği ve çevresel sürdürülebilirliği açısından da önem taşımaktadır. Süreçteki bu verimlilik oranları, hammadde kullanımının optimize edilmesi, enerji tüketiminin azaltılması ve yan ürünlerin en aza indirilmesi gibi konular üzerinde daha fazla çalışma yapılması gerektiğini göstermektedir. Ayrıca, bu verimlilik analizi, sürecin geliştirilmesi için potansiyel alanları ortaya koymakta ve süreç optimizasyonu için yol gösterici bilgiler sunmaktadır.

Tezde yer alan grafik analizler, sürecin başlangıcından sonuna kadar ham maddenin ve işleminden geçirilen ürünlerin kimyasal yapılarını derinlemesine incelemekte ve karşılaştırmaktadır. Bu grafiksel değerlendirmeler, süreç içindeki kimyasal dönüşümleri gözlemlenebilir ve ölçülebilir hale getirerek, sürecin anlaşılmasında ve iyileştirilmesinde kritik bir rol oynamaktadır. Grafikler, özellikle FTIR spektrumları ve kromatografik analiz sonuçları gibi çeşitli analitik tekniklerle elde edilen verileri içermektedir. Bu grafiksel veriler, ham maddenin ve son ürünlerin moleküler seviyede nasıl değiştiğini göstermektedir. Örneğin, FTIR spektrumları, ham maddenin işleme girmeden önceki ve sonrasındaki kimyasal bağların ve grupların varlığını ve değişimini görselleştirmektedir. Bu, sürecin kimyasal dönüşümlerini ve potansiyel yan ürünleri belirlemek için hayati öneme sahiptir. Analizler, ayrıca süreç sırasında meydana gelen alifatik ve aromatik bileşiklerin, hidrokarbon zincirlerinin ve diğer kimyasal yapıların dönüşümlerini de içermektedir. Grafiklerdeki bu değişiklikler, sürecin verimliliği, ürün kalitesi ve çevresel etkileri açısından değerlendirilmiştir. Ham maddenin işlenmesi sırasında meydana gelen bu kimyasal değişiklikler, sürecin kimyasal mekanizmalarını ve reaksiyon yollarını daha iyi anlamak için kritik bilgiler sunmaktadır. Sonuç olarak, grafik analizleri, sürecin her aşamasında ham maddenin ve elde edilen ürünlerin kimyasal yapısındaki değişikliklerin kapsamlı bir değerlendirmesini sağlamaktadır. Bu analizler, sürecin optimizasyonu ve kontrolü için önemli bilgiler sağlarken, aynı zamanda süreç mühendisliği ve kimyasal reaktör tasarımındaki yenilikler için temel oluşturmakta ve gelecekteki iyileştirmeler için yön göstermektedir.

HAD (Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği) modellemesi, sürecin teorik ve simülasyon temelli bir analizini sunarken, gerçek laboratuvar deneyleri bu simülasyon sonuçlarını pratikte test etmek için kullanılmıştır. HAD modellemesi, sürecin akışkan hareketi, ısı transferi ve kimyasal reaksiyonlar gibi çeşitli dinamiklerini detaylı bir şekilde analiz etmekte ve dönüşüm oranları gibi kritik performans göstergelerini hesaplamaktadır. Ancak, HAD çalışmalarında elde edilen dönüşüm oranları, gerçek laboratuvar deneylerinde elde edilen sonuçlara göre daha düşük bulunmuştur. Bu farklılık, HAD modelinin gerçek dünya koşullarını tam olarak yansıtamayabileceği anlamına gelmektedir ve modelin bazı kısıtlamalarını veya varsayımlarını ortaya koymaktadır. Bu farkın analizi, HAD modelinin belirli parametrelerinin, reaksiyon mekanizmalarının veya fiziksel koşulların gerçek dünya senaryolarına tam olarak uyum sağlayamadığını göstermektedir. Örneğin, modelde kullanılan reaksiyon hızları, sıcaklık dağılımları veya karıştırma verimliliği gibi faktörler, gerçek deney koşullarında farklılık gösterebilir. Bu durum, süreç mühendisliği ve modelleme alanında önemli bir bulgudur ve gelecekteki HAD modellemelerinin geliştirilmesi için önemli yönler sunmaktadır. Ayrıca, HAD modelleme sonuçlarının ve gerçek deney verilerinin karşılaştırılması, süreç tasarımı ve işletmesi için kritik olan süreç parametrelerinin daha iyi anlaşılmasını sağlamaktadır. Bu karşılaştırma, modelin güçlü yönlerini ve sınırlamalarını belirlemek, ayrıca sürecin daha verimli ve etkin hale getirilmesi için gereken iyileştirmeleri tanımlamak için kullanılmıştır. HAD modellemesi ve gerçek deneyler arasındaki bu etkileşim, sürecin daha iyi anlaşılması ve optimizasyonu için değerli bilgiler sağlamakta, aynı zamanda süreç mühendisliği uygulamalarında teorik ve pratik bilgilerin entegrasyonunu teşvik etmektedir.

Eşanjör hesaplamaları, enerjinin korunumu yasasına dayanarak yapılmış ve ısı değiştiricilerin süreçteki etkinliği ve rolleri incelenmiştir. Gövde tipi ısı eşanjörleri analizi, giren yağ ve su akışlarının ters yönde hareket ettiğini ve bu durumun ısı transferini nasıl optimize ettiğini göstermiştir. Eşanjörlerin tasarımı, sürecin ısı ihtiyaçlarını karşılamak ve enerji verimliliğini artırmak için önemlidir. Giren ve çıkan akışların sıcaklıkları, debi hızları ve ısı kapasiteleri gibi parametreler, ısı eşanjörlerinin boyutlandırılması ve malzeme seçiminde dikkate alınmıştır. Bu hesaplamalar, sürecin çeşitli aşamalarında gerekli ısı değişim miktarlarını ve bu değişimin en etkin şekilde nasıl sağlanacağını belirlemekte, enerji geri kazanım potansiyellerini ve ısı eşanjörlerinin süreç içindeki yerleşimini ele almıştır. Isı eşanjörlerinin tasarımı ve yerleşimi, sürecin genel verimliliğini ve ekonomik performansını etkileyen kritik faktörlerdir ve bu hesaplamalar, enerji verimliliği ve sürdürülebilirlik açısından süreç mühendisliği uygulamalarına önemli katkılar sağlamaktadır.

Reaktör boyu hesaplamaları, sürecin etkinliği ve güvenliği açısından hayati öneme sahip olan akışkanların hızı ve debisi gibi çeşitli parametreler üzerinde yoğunlaşmıştır. Bu hesaplamalar, reaktörün tasarımı ve işletmesini optimize etmek için kritik bilgiler sunar. Reaktörün boyutlandırılması, kimyasal reaksiyonların verimliliği, ısı transferi, basınç düşüşleri ve akış dinamikleri gibi birçok faktörü dikkate alarak gerçekleştirilmiştir. Reaktör boyutunun belirlenmesi, hammadde ve katalizör arasındaki temas süresini, reaksiyon hızını ve son ürün kalitesini doğrudan etkileyen bir faktördür. Bu hesaplamalar, sürecin ölçeklenmesi ve endüstriyel uygulamalara adapte edilmesi için temel oluşturur ve süreç verimliliği ile ekonomik performansı arasında optimal bir denge sağlamaya yardımcı olur.

Bu tez, ağır hidrokarbonlardan dizel yakıt üretimi sürecinde karıştırma hızının ve ham maddenin seçiminin kritik önemini ortaya koymuştur. Araştırma, reaktör tasarımı, işletme maliyetleri ve süreç verimliliği gibi çeşitli yönlerde kapsamlı bilgiler sunarak,

sürecin etkin bir şekilde gerçekleştirilmesi için gerekli koşulları ve tasarım parametrelerini belirlemiştir. Teorik analizler ve deneysel bulguların entegrasyonu, süreç tasarımı ve işletmesine dair değerli bilgiler sağlamıştır. Bu çalışma, süreç mühendisliği ve kimyasal reaktör tasarımı alanlarına önemli katkılar sunarak, bu alanlardaki ileriye dönük çalışmalar için güçlü bir temel oluşturmuştur. Sonuç olarak, tez, süreç mühendisliği uygulamaları için önemli öneriler ve gelecekteki araştırmalar için yön gösterici bilgiler sağlamaktadır. Özellikle, süreç optimizasyonu, enerji verimliliği, çevresel etkiler ve maliyet-etkinlik açısından yapılacak iyileştirmeler, bu çalışmanın odak noktasını oluşturmaktadır. Tezin bulguları, endüstriyel uygulamalara ve gerçek dünya senaryolarına uygulanabilir niteliktedir ve bu alandaki gelecek çalışmalar için yol gösterici olacaktır.



DESIGN AND PROCESS OPTIMIZATION OF TUBULAR AND CSTR REACTOR IN CATALYTIC ENVIRONMENT FOR PRODUCING DIESEL FUEL FROM HEAVY HYDROCARBONS

SUMMARY

This thesis comprehensively covers the process conditions and reactor design for the production of diesel fuel from heavy hydrocarbons in the presence of a specific catalyst. The study analyzes the impact of mixing speed and feedstock selection on the overall efficiency of the process, with a special emphasis on the optimization of reactor design and operating costs. In this context, the primary objective of the thesis is to determine the necessary conditions and methods for processing heavy hydrocarbon-based fuels more efficiently and economically.

The introductory section of the thesis focuses on the importance of mixing speed and the selection of the most suitable feedstock for the production of diesel fuel from heavy petroleum fractions. The main aim of the research is to identify which feedstock will yield the most effective results under specific geometry when the mixing speed is 20 revolutions per minute. This speed is a critical factor for obtaining a homogeneous mixture when heating the feedstock and heavy petroleum fractions to 350°C. The study examines how the effectiveness of the mixing mechanism plays a role in creating the ideal physical conditions required to initiate the catalytic cracking process. This process has the potential to increase the efficiency of diesel fuel production and optimize operating costs. This section also provides a detailed analysis of the physical and chemical properties of the selected feedstock, emphasizing the critical importance of mixing speed and feedstock selection for the success of the process and aims to deepen the understanding of the relationship and interaction between these two factors.

The detailed analysis conducted in the thesis identifies RME 180 as the ideal feedstock for the process. This selection takes into account the effect of torque in the mixing mechanism and the power consumed. RME 180 stands out as the material that offers the most optimal performance both physically and chemically under the defined process conditions. However, it is concluded that for the process to fully achieve ideal conditions, RME 180 needs to be balanced with other components. This adaptation is a critical step in improving the overall efficiency and stability of the process. Furthermore, the thesis analyzes the effects of the density and viscosity of the mixed materials on reactor design and operating costs. Density and viscosity directly affect process parameters such as mixture homogeneity, heat transfer efficiency, and catalyst effectiveness. In this context, the mixing ratios of RME 180 and other components are identified as critical variables affecting the overall performance of the process. The thesis also examines the adaptation of RME 180 to physical and chemical changes occurring during mixing, such as byproduct formation, energy consumption, and final product quality from various perspectives. These analyses highlight the advantages and potential limitations of using RME 180 in terms of process optimization and cost-effectiveness. Finally, an in-depth examination of the interaction between mixing

speed and feedstock selection on process efficiency has allowed for significant improvements in process design and the potential to enhance efficiency in diesel fuel production.

This section provides a detailed overview of the raw materials used in the process and the analysis methods employed. The studied raw material consists of industrial waste oil residues distilled under a vacuum pressure of up to 600 mmbar at temperatures of up to 370°C. This raw material has been identified as a fundamental input for the process, and it is noted that its physical and chemical properties have significant effects on the overall efficiency of the process. In particular, the density and flash point of the raw material are considered for process safety and efficiency. Viscosity measurements and their reduction with increasing temperature are also studied, as this is an important parameter for energy requirements and heat transfer efficiency during the process. Fourier Transform Infrared (FTIR) analysis is used as a method for identifying the chemical components of the raw material and the obtained products. FTIR analysis is crucial for detecting various chemical groups, such as aliphatic and aromatic carbon chains, double bonds, and hydrogen bonds, which are essential for understanding the chemical transformations occurring during the process. These analyses have been used to understand the changes in the chemical structure of the raw material and products, evaluate process efficiency, and assess product quality. Additionally, this information plays a significant role in making strategic decisions for process optimization and cost-effectiveness. The changes in the chemical and physical properties of the raw material and products during the process have directly affected the overall performance and final product quality. This section provides fundamental information for understanding and improving the process by offering a comprehensive evaluation of its key components and analysis methods.

This section presents the efficiency rates obtained during the process and a detailed analysis of these rates, particularly in terms of conversion rates. The calculations focus on parameters such as the use of feedstock and the amounts of distillate obtained at different stages of the process. In the first cycle, 10 kilograms of waste oil were used as feedstock, resulting in 5 kilograms of distillate at the end of the process. This indicates a 50% efficiency rate in the initial stage of the process. This efficiency rate is significant in terms of the effectiveness of feedstock utilization and the quality of the product obtained at the beginning of the process. In the second cycle, a 47.4% efficiency rate was achieved when processing the remaining raw material. This rate has been evaluated for the continuity and stability of the process. Compared to the first cycle, a slight decrease in efficiency is observed in the second cycle, indicating areas that need optimization for the continuity and stability of the process. Overall, 72.5% of the initially used raw material was recovered as distillate after two cycles. This rate demonstrates the overall efficiency of the process and the effectiveness of raw material utilization. This efficiency assessment is also essential for cost-effectiveness and environmental sustainability. These efficiency rates in the process suggest that further work is needed on topics such as optimizing raw material utilization, reducing energy consumption, and minimizing byproducts. Moreover, this efficiency analysis provides valuable insights into potential areas for improvement in the process and guides future research on process optimization.

The graphical analyses presented in this section thoroughly examine and compare the chemical structures of the raw material and the products processed throughout the entire process. These graphical evaluations make chemical transformations observable and measurable, thereby playing a critical role in understanding and improving the

process. The graphics include various analytical techniques such as FTIR spectra and chromatographic analysis results. These graphical data illustrate how the chemical structure of the raw material and products changes during the process. For example, FTIR spectra visualize the presence and changes of chemical bonds and groups in the raw material before and after processing, including aliphatic and aromatic carbon chains, double bonds, and hydrogen bonds. This is crucial for identifying chemical transformations and potential byproducts during the process. The analyses also include transformations of aliphatic and aromatic compounds, hydrocarbon chains, and other chemical structures occurring during the process. These changes depicted in the graphics have been evaluated in terms of process efficiency, product quality, and environmental effects. The chemical changes that occur during the processing of the raw material provide critical information for understanding the chemical mechanisms and reaction pathways of the process. In conclusion, graphical analyses provide a comprehensive assessment of changes in the chemical structure of the raw material and products at every stage of the process. These analyses offer important insights for process optimization and control while serving as a foundation for innovations in process engineering and chemical reactor design, guiding future improvements.

This section examines the relationship between the process modeling and the experimental studies conducted, especially in terms of conversion rates. Computational Fluid Dynamics (CFD) modeling provides a theoretical and simulation-based analysis of the process, while real laboratory experiments are used to test these simulation results in practice. CFD modeling analyzes various dynamics of the process in detail, including fluid movement, heat transfer, and chemical reactions, and calculates critical performance indicators such as conversion rates. However, the conversion rates obtained in CFD studies were found to be lower than those obtained in real laboratory experiments. This discrepancy suggests that the CFD model may not fully reflect real-world conditions and highlights some limitations or assumptions of the model. The analysis of this difference demonstrates that certain parameters, reaction mechanisms, or physical conditions used in the model may not fully align with real-world scenarios. For example, factors such as reaction rates, temperature distributions, or mixing efficiency used in the model may vary in real experimental conditions. This finding is essential in the fields of process engineering and modeling and provides directions for the future development of CFD modeling. Additionally, the comparison between CFD modeling results and real experimental data helps to better understand critical process parameters required for process design and operation. This comparison identifies the strengths and limitations of the model and reveals areas that require further investigation for process optimization. The interaction between CFD modeling and real experiments provides valuable insights into understanding and optimizing the process while encouraging the integration of theoretical and practical knowledge in process engineering applications.

In this section, calculations related to the design and operation of heat exchangers used in the process are discussed in detail. Heat exchanger calculations are based on the law of conservation of energy and focus on the efficiency and role of heat exchangers within the process. The analysis of shell-and-tube heat exchangers shows that the oil and water flows enter the exchangers in opposite directions, and the optimization of these flows for heat transfer is demonstrated. Heat exchanger design is a critical factor in meeting the heat requirements of the process and maximizing energy efficiency. The analysis of heat exchangers takes into account parameters such as temperature, flow rate, and heat capacity of the entering and exiting fluids. These parameters affect

critical design decisions such as sizing the heat exchanger, material selection, and heat transfer efficiency. Heat exchanger calculations determine the amount of heat exchange required at different stages of the process and how this exchange can be most effectively achieved. Furthermore, these calculations consider the placement and integration of heat exchangers within the process, as well as their potential for energy recovery. The counterflow design of heat exchangers enhances heat transfer efficiency and plays a significant role in reducing energy consumption in the process. These analyses guide process engineers in the design and operation of heat exchangers. Proper design and placement of heat exchangers can directly impact the overall efficiency and economic performance of the process. These calculations, based on the law of energy conservation, help determine the design parameters and operational strategies required to meet the energy requirements of the process, contributing to energy efficiency and sustainability in process engineering applications.

Reactor sizing calculations focus on various parameters, such as the velocity and flow rate of the fluids, which are crucial for the efficiency and safety of the process. These calculations provide critical information to optimize the design and operation of the reactor. The determination of reactor size takes into account various factors, including chemical reaction efficiency, heat transfer, pressure drops, and flow dynamics. The sizing of the reactor directly affects the contact time between feedstock and catalyst, reaction rate, and final product quality. These calculations provide the foundation for scaling up the process and adapting it to industrial applications, balancing process efficiency with economic performance.

This thesis has highlighted the critical importance of mixing speed and feedstock selection in the production of diesel fuel from heavy hydrocarbons. The research has provided comprehensive information on various aspects, including reactor design, operating costs, and process efficiency, to identify the necessary conditions and design parameters for the effective execution of the process. The integration of theoretical analysis and experimental findings has provided valuable insights into process design and operation. This study has made significant contributions to the fields of process engineering and chemical reactor design, providing a strong foundation for future research. In conclusion, the thesis offers essential recommendations for process engineering applications and provides guiding information for future research. Specifically, the focus is on process optimization, energy efficiency, environmental impacts, and cost-effectiveness. The findings of the thesis apply to industrial applications and real-world scenarios, making it a guiding resource for future studies in this field.

1. GİRİŞ

1.1. Katalitik Parçalamanın Tarihsel Gelişimi

İlk ticari katalitik hidrokarbon parçalanma yöntemi, 1915 yılında Gulf Refining şirketinden M. McAfee'nin geliştirdiği bir kesikli prosesle ortaya çıkmıştır. Alüminyum klorürün katalizör olarak kullanılması ise Friedel-Crafts katalizörü olarak 1877 yılından beri bilinmekteydi ("Chapter 5 - FCC catalysts," 2020; McFarlane, Reineman, Bartee, & Georgakis, 1993).

1922 yılında, Fransız makine mühendisi Eugene Jules Houdry ve Fransız farmakolog E.A. Prudhomme'un Paris yakınlarında geliştirdikleri bir katalitik proses, linyit kömürlerinin sıvı yakıtıya dönüştürülmesi amacıyla kullanılmıştı. Bu proje, Fransız hükümeti tarafından desteklenmiş ve 1929 yılında günlük 60 tonluk bir linyit kömürü işleme kapasitesine sahip bir yatırıma dönüşmüştür. Ancak, ekonomik olarak fizibil olmaması nedeniyle proje kapatılmıştır (Speight, 2011a, 2020b; Suganuma & Katada, 2020).

Alüminyum silikat içerikli Fuller's toprağının linyitten elde edilen yağı yakıtıya çevirdiği konusunda ilk buluşlar, Fransız makine mühendisi Houdry tarafından gerçekleştirilmiştir. Houdry daha sonra, 1930'lu yıllarda petrol yağlarının yakıtıya dönüştürülmesi konusunda çalışmalar yapmıştır. (Stöcker, 2005).

1933 yılında Houdry, günlük 200 varil petrol yağını işleme kapasitesine sahip bir proses geliştirmiştir. Ancak 1930'ların ekonomik krizi nedeniyle, Socony-Vacuum şirketinin Houdry'ye olan desteği kesilmek zorunda kalmıştır. (Haensel, 1951).

1933 yılında Houdry ve Socony-Vacuum şirketi, Sun Oil şirketi ile birleşerek Houdry prosesini geliştirmeye devam etmiştir. 1936 yılında Socony-Vacuum şirketi, New Jersey'deki bir termal parçalama ünitesini günlük 2.000 varillik Houdry'nin katalitik parçalama prosesine dönüştürmüştür. (Speight, 2016).

1937 yılında Sun Oil şirketi, günlük 12.000 varillik yeni bir Houdry yatırımını, kendi Pensilvanya'daki Marcus Hook rafinerisinde kurmuştur. Bu dönemdeki Houdry prosesi, birkaç reaktörden oluşan sabit yatak yapılı yarı yarıya toplu bir süreçti. Proses,

termal parçalamadaki %25 verime kıyasla %50 verimle daha başarılı sonuçlar vermişti. ("Calendar of forthcoming events," 1992).

1938'de Houdry prosesi tanındığında, Socony-Vacuum şirketi 8 ayrı üniteye daha yatırım yapmıştır.. 1940'larda 14 Houdry ünitesi faal olarak çalışıyordu ve günlük kapasite 140.000 varile ulaşmıştı. ("Calendar of forthcoming events," 1992; Sadeek, Mohammed, Shaban, Abou Kana, & Negm, 2020).

Bundan sonraki en etkili adım, batch ve semi-batch proseslerden continuous proseslere geçme hareketleri olmuştur. Bu amaçla en etkili ilk adım, fixed-bed'den moving-bed proses mantığına dayanan ve Termal Katalitik Kreaking (TCC) olarak adlandırılan Thermoform katalitik parçalama olmuştur. İkinci Dünya Savaşı sonlarında TCC prosesi ile yaklaşık 300.000 varillik bir üretim gerçekleştirilmiştir. (Sadeghbeigi, 2012a; Wong et al., 2023).

Yüksek oktan içerikli yakıtların Houdry ve TCC prosesleri ile elde edilmiş olması, İngiltere ve ABD'nin İkinci Dünya Savaşı'nı kazanmasında en önemli faktörlerden biri olarak değerlendirilebilir. Bu sayede Spitfire ve Mustang motorlarının ihtiyaç duyduğu yüksek basınç oranı elde edilmiş oldu (Ancillotti & Fattore, 1998; Speight, 2019).

1950'lerde ise moving-bed fikri altında ilk air-lift TCC reaktörleri geliştirilmiştir. Bu reaktörlerde katalizör, reaktörlerle geri kazanım ünitesi arasında sürekli olarak hareket halinde tutulmuştur ("Chapter 1 - Fluid catalytic cracking process description—converter section," 2020; Speight, 2016).

İlk Fluid Catalytic Cracking prosesi 1920'lerde Standart Oil Of New Jersey tarafından geliştirilmiştir. Fakat bu araştırmalar, 1929-1939 yılları arasında ki ekonomik sıkıntılar nedeniyle kesintiye uğramıştır. Houdry prosesi kendini kanıtladıktan sonra Standart Oil of New Jersey, yanında aldığı beş ayrı petrol şirketi ile birlikte bir konsorsiyum oluşturarak Catalytic Research Associates (CRA) kurmuştur. Buradaki amaç, Houdry'nin oluşmuş patent haklarının da korunması ve karşı karşıya gelmeden araştırmaların devam etmesini sağlamak olmuştur ("Calendar of forthcoming events," 1992).

Massachusetts Institute of Technology (MIT) kimya mühendisliği profesörleri Warren K. Lewis ve Edwin R. Gilliland, CRA araştırmacılarına ilk Fluidized katalizör mantığını ortaya koydular. Araştırmacılardan Donald Campbell, Homer Nartin, Eger Murpher ve Charles Tyson, Standart Oil of New Jersey (şu anki Exxon-Mobil

Company) bünyesinde ilk fluidized catalytic cracking ünitesini geliřtirdiler. A method of and apparatus for contacting Solids and gases. (U.S Patent No.2,451,804) (Tan, Hullfish, Zheng, Koel, & Sarazen, 2023; F. Wu, Argyle, Dellenback, & Fan, 2018).

Pilot ünitelerin başarılarından sonra ilk ticari FCC yatırımı 1942 yılında günlük 13.000 varil kapasiteli olarak Baton Rouge rafineri tarafından yapılmıřtır (Chester, 2007; Van Landeghem, 1980).

Geçen onlarca yıl boyunca, Houdry'nin temelini attığı onlarca Fixed-Bed katalitik parçalanma ünitesi kapanmıř ve hatta daha sonraki moving bed (TCC units) üniteleri de kapanarak yerini modern Fluid Catalytic Cracking (FCC) sistemlerine bırakmıřtır ("Calendar of forthcoming events," 1992; "Houdry Cracking Process,").

1.2. Katalitik Parçalanma Mekanizması

1.2.1. Katalizör kullanımı

Katalizörler genel olarak kendileri değıřmeden kimyasal bir tepkimeyi sağılayan veya tepkimenin hızını ve proses verimini değıřtiren maddeler olarak tanımlanır (Ghafarnejad & Rahimpour, 2024; Schuurman, Fogassy, & Mirodatos, 2013).

Parçalanma mekanizmasında kullanılan katalizörler, uzun moleküler zincirli hidrokarbonların yakıtıa dönüřtürölmesi sürecinde merkezi bir rol oynar. Bu katalizörler, uzun hidrokarbon zincirlerini daha küçük moleküllere ayırarak, yakıt üretiminin verimliliğini ve kalitesini artırır. Parçalanma sürecinde kullanılan örnek katalizörler arasında alüminosilikatlar, kristalin zeolitler, alüminyum klorür, Fuller's Earth katalizörleri, $NiAl_{10}O_{16}$, $MgO-Al_2O_3$ (magnezya-alümina), alumina-alüminyum fosfat ve Ziegler-Natta katalizörleri bulunmaktadır (Bozkurt, Okonsky, Alexopoulos, & Toraman, 2022).

Alüminosilikatlar ve kristalin zeolitler, petrol rafinerilerinde yaygın olarak kullanılan ve yüksek seçicilik ile yüksek dönüřüm oranları sağılayan katalizörlerdir. Alüminyum klorür, özellikle Friedel-Crafts alkilasyon reaksiyonlarında katalizör olarak kullanılmaktadır ve petrokimya sanayisinde önemli bir yere sahiptir. Fuller's Earth, özellikle yağı arıtma işlemlerinde kullanılan doğal bir alüminosilikat malzemesidir. $NiAl_{10}O_{16}$ ve $MgO-Al_2O_3$ gibi bileşikler, özellikle hidrodesülfürizasyon ve hidrodenitrojenasyon gibi süreçlerde katalizör olarak kullanılmaktadır. Alümina-alüminyum fosfat katalizörler, asitlikleri ve termal stabilite özellikleri sayesinde çeřitli

kimyasal süreçlerde kullanılır. Ziegler-Natta katalizörleri ise, özellikle polimerizasyon reaksiyonlarında, polietilen ve polipropilen gibi plastik malzemelerin üretiminde önemli bir role sahiptir (Schobert, 1990).

Bu katalizörlerin her biri, spesifik kimyasal reaksiyonların katalizlenmesinde benzersiz avantajlar sunar ve bu sayede ağır hidrokarbonlardan yakıt elde edilmesi sürecinin optimizasyonuna katkıda bulunur. Katalitik parçalanma sürecinde katalizör seçimi, hedeflenen yakıt türüne ve üretim prosesinin özelliklerine bağlı olarak büyük önem taşır. Bu katalizörler, ağır hidrokarbonların daha değerli yakıtlara dönüştürülmesinde kritik bir faktördür ve sürecin çevresel ve ekonomik sürdürülebilirliğine katkı sağlar (Schobert, 1990).

1.2.2. Parçalanma türleri

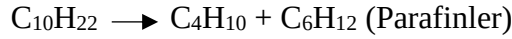
Uzun zincir yapılı ağır hidrokarbonların daha küçük moleküllere ayrıştırılması işlemi parçalanma-kraking süreci olarak adlandırılır. . Bu süreç, ham petrolün kökenli ağır hidrokarbonların , benzin, dizel ve diğer değerli petrol ürünlerine dönüştürülmesi için temel bir yöntemdir. Parçalanma işlemi, kimyasal reaksiyonlar yoluyla büyük moleküllü hidrokarbonların termal ve katalitik olarak daha küçük ve kullanışlı hidrokarbonlara ayrıştırılmasını içerir. Bu süreç, petrokimya sanayisinin ve modern dünyanın enerji ihtiyaçlarını karşılamada önemli bir role sahiptir (Y. Fan et al., 2024; Farobie et al., 2024; J. Zhang et al., 2024).

Parçalanma süreci, özellikle yüksek oktanlı yakıt üretimi için kritik öneme sahiptir ve petrol rafinerilerinin ana işlemlerinden birini oluşturur. İki ana parçalanma yöntemi bulunmaktadır: termal parçalanma ve katalitik parçalanma. Termal parçalanma, yüksek sıcaklık ve basınç altında hidrokarbon zincirlerinin kırılmasını içerirken, katalitik parçalanma, belirli katalizörlerin varlığında daha düşük sıcaklıklarda ve daha seçici bir şekilde hidrokarbonların ayrıştırılmasını sağlar. Her iki süreç de, ham petrolü daha değerli ürünlere dönüştürmede etkili yöntemler sunar (Y. Fan et al., 2024; Farobie et al., 2024; J. Zhang et al., 2024).

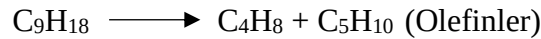
"Parçalanma" sürecinin başarısı, kullanılan hammadde, işlem koşulları ve katalizör seçimi gibi bir dizi faktöre bağlıdır. Bu süreç, petrol endüstrisindeki inovasyon ve teknolojik gelişmelerle sürekli olarak gelişmektedir. Kraking, dünya çapında enerji talebini karşılamada ve petrolün verimli bir şekilde değerlendirilmesinde önemli bir yöntem olarak öne çıkmaktadır. Ayrıca, parçalanma süreci, petrol ürünlerinin çevresel

etkisini azaltma ve daha temiz yanma özelliklerine sahip yakıtlar üretme potansiyeline de sahiptir. (Y. Fan et al., 2024; Farobie et al., 2024; J. Zhang et al., 2024).

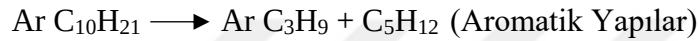
Parafinler, olefinlere ve daha küçük molekül yapılarına parçalanır (Jimmy, Rastini, & Santoso, 2024; Seo et al., 2024; Song et al., 2024).



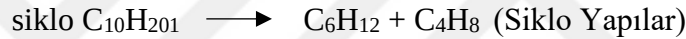
Olefinler, daha küçük olefinlere parçalanır (Natesakhawat et al.; Soltani, Zamaniyan, Towfighi Darian, & Soltanali, 2024).



Aromatik yan zincirler kesilir.



Naftenler (sikloparafinler) olefinlere ve daha küçük halkalı bileşiklere parçalanır (C. Jin et al., 2024; K. Wang, Ding, Deng, Zhai, & Zhang, 2024).



Bu formüller, organik kimya alanında, özellikle de petrol kimyasında önemli bir yer tutan parçalanma (Cracking) işlemlerini tanımlar. Parçalanma süreci, büyük hidrokarbon zincirlerinin daha küçük moleküllere ayrıştırılması işlemidir ve sıklıkla petrol rafinerilerinde yakıt elde etmek amacıyla uygulanır (Beşergil, 2007; Koyunoğlu, 2019).

- Parafin parçalanması: İlk reaksiyonda, uzun zincirli bir parafin ($C_{10}H_{22}$, bir alkan), daha küçük bir parafine (C_4H_{10} , bütan) ve bir olefine (C_6H_{12} , bir siklooksanhidrid) ayrışır. Bu tür reaksiyonlar, daha uçucu ve işlenmiş petrol ürünleri elde etmek amacıyla gerçekleştirilir (Allen, 1991; Shih, 1993; Sousa-Aguiar, 2016).
- Olefin Parçalanması: İkinci reaksiyon, büyük bir olefinin (C_9H_{18}) iki daha küçük olefine bölünmesini gösterir. Olefinler, alkenler olarak da bilinir ve çift bağ içeren hidrokarbonlardır. Bu reaksiyonlar, polimerizasyon ve alkillenme gibi işlemler için temel maddeler üretmek üzere kullanılabilir (Bricker, Rekoske, & Glover, 2007; Lyons, Bernardi, Shah, & Chachuat, 2023; Poslovina et al., 1997; G. L. Zhao et al., 2007).

- Aromatik Yan Zincir Parçalanması: Üçüncü reaksiyon, bir aromatik bileşiğin (Ar C₁₀H₂₁) yan zincirinin bir parafine (C₅H₁₂, pentan) ve daha küçük bir aromatik bileşiğe (Ar C₃H₉) ayrıştığı süreci tanımlar. "Ar" simgesi, moleküldeki aromatik halkayı (genellikle bir benzen halkası) temsil eder (Corma, Mocholi, Orchilles, Koermer, & Madon, 1990; Jiao et al., 2024; Lin, Wu, Su, Xiao, & Wang, 2023; F. Wang et al., 2024; Yang et al., 2024).
- Naften Parçalanması: Dördüncü reaksiyonda, bir naften (sikloparafin, C₁₀H₂₀) bir olefine (C₆H₁₂) ve daha küçük bir halkalı bileşiğe (C₄H₈) bölünür. Naftenler, tek halkalı doymuş hidrokarbonlardır ve bu kırılma reaksiyonları, benzin gibi daha değerli ürünler elde etmek için kullanılır (Corma et al., 1990; Konno et al., 2013; S.-T. Tsai, Chao, Liu, & Tsai, 2008; S.-T. Tsai, Chao, Wang, & Tsai, 2010; T.-C. Tsai, Chao, & Zeng, 2007).

Bu kırılma işlemleri, petrol rafinerilerinde benzin, dizel ve diğer petrol ürünlerinin üretiminde temel yöntemler arasında yer alır. Aynı zamanda, bu kimyasal reaksiyonlar petrokimya endüstrisinde plastikler, çözücüler ve diğer kimyasal bileşiklerin üretiminde kullanılan monomerler ve ara ürünlerin elde edilmesinde kritik bir rol oynar (Beşergil, 2007; Koyunoğlu, 2019).

1.2.3. Parçalanma sürecinin avantajları

Parçalanma süreçleri boyunca hem ürünlerin verimi hem de kaliteleri açısından birçok yönlü avantajlar ele edilmektedir. Bunları sıralamak gerekirse:

a) Yüksek oktanlı Yakıt Üretimi: Kaking, benzin gibi yüksek oktanlı yakıtların üretiminde kritik bir role sahiptir (H. Wang, Wang, & Wang, 2022).

Yüksek oktanlı yakıtlar, motor performansını artırır ve çevreye zararlı emisyonları azaltır (C. Zhao & Lercher, 2013).

b) Değerli Petrokimyasalların Elde Edilmesi: Kaking süreciyle etilen, propilen, bütadien gibi petrokimyasal hammadde üretimi mümkündür. Bu hammaddeler plastik, sentetik kauçuk, çözücü ve diğer pek çok endüstriyel ürünün üretiminde kullanılır (Hassan, Sani, Abdul Aziz, Sulaiman, & Daud, 2015).

c) Kaynak Verimliliği: Kaking, ham petrolün daha verimli kullanılmasını sağlar. Bu süreçle, ham petrolün daha az işlenmiş bölümleri bile değerli ürünlere

dönüştürülebilir, böylece kaynakların verimli kullanımı artar (Rahimi & Karimzadeh, 2011).

d) Enerji Talebinin Karşılanması: Kraming süreci, artan enerji talebini karşılamada önemli bir yöntemdir. Daha fazla yakıt ve petrokimyasal ürünün üretilmesi, enerji ihtiyacının karşılanmasına katkıda bulunur (X. Fan, Yu, Deng, He, & Zhao, 2022).

e) Çevresel Etkilerin Azaltılması: Kraming, petrol ürünlerinin çevresel etkisini azaltma potansiyeline sahiptir. Daha temiz yanma özelliklerine sahip yakıtların üretilmesi, hava kirliliğinin ve sera gazı emisyonlarının azaltılmasına yardımcı olur (Rahimpour, Jahanmiri, Mohamadzadeh Shirazi, Hooshmand, & Taghvaei, 2013; X.-P. Zhang, Ji, Zhang, Liu, & Wu, 2021).

1.2.4. Katalitik parçalanma

Uzun zincirli ağır hidrokarbon moleküllerinin belirli sıcaklık ve basınç şartları altında katalizörler vasıtasıyla daha küçük moleküllere bölünmesi işlemi katalitik parçalanma olarak tanımlanır. Bu süreçte, büyük hidrokarbon yapılarından daha küçük moleküler yapıya geçiş, başlangıç ürünleri yerine yeni fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip hidrokarbon ürünlerinin elde edilmesini içerir. Örneğin, düz zincir yapıdaki parafinik alkan yapısındaki hidrokarbonları işlem sonucunda daha kısa karbon zincirli moleküler yapıdaki düz zincir veya dallanmış zincir yapıdaki yeni alkanlar, olefinler, siklo-alkanlara dönüşür (Beşergil, 2007; Deka & Misra, 2024; Y. Fan, Yang, Xu, Zhu, & Shi, 2024).

1.2.5. Fluid catalytic cracking (FCC) mekanizması

FCC katalizörleri, reaksiyon aktivasyon enerjisini düşürerek reaksiyon hızını artıran ve belirli basınç ve sıcaklık şartları altında hem yeni küçük moleküler yapıda hafif hem de yeni yüksek moleküler yapıda ağır ürünler üreten maddeler olarak tanımlanabilir.

Modern FCC katalizörleri, yığın (bulk) yoğunlukları 0.80-0.96 g/cm³ arasında değişen ve tanecik büyüklükleri 10-150 µm arasında olan, ortalama olarak ise 60-100 µm büyüklüğünde mikronize malzemelerdir (Qu & Dan, 2024).

FCC katalizörlerde hedeflenen özellikler aşağıda maddeler halinde verilmiştir (Kimya Teknolojisi, 2014).

1. Yüksek stabilite ve ısı dayanımı
2. Yüksek proses verimi
3. Maksimum gözenek yapısı
4. Minimum koklaşma ve koklaştırma
5. Yıpranma ya karşı yüksek direnç

Bu katalizörler, reaksiyona girmeden toplamda %1'ler ölçeğinde kullanılır ve sistemden geri kazanılarak tekrar kullanılabilir özel maddelerdir (Beşergil, 2007; S. Wu et al., 2024; Zakariyaou, Ye, Oumarou, Abdoul Aziz, & Ke, 2023).

1.2.6. Katalitik parçalanma ürünleri

1.2.6.1. İzomerizasyon

İzomerizasyon reaksiyonları, bir molekül içindeki atomların veya atom gruplarının yer değiştirmesiyle yeni bir izomerin meydana geldiği süreçleri ifade eder. Bu tür reaksiyonlar, bir kimyasal bileşiğin yapısal izomerlerini üretmek veya var olanları birbirine dönüştürmek amacıyla kullanılır (Beşergil, 2007; Koyunoğlu, 2019).

Bu açıklama, kimya alanında yaygın bir fenomen olan izomerizasyon reaksiyonlarına odaklanır. İzomerizasyon, bir kimyasal bileşiğin moleküler yapısındaki atomların ya da atom gruplarının yer değiştirmesi sonucunda farklı izomerlerin oluştuğu bir süreçtir. Özellikle aşağıdaki örnekler bu sürecin çeşitliliğini gösterir:

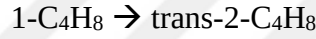
- Olefin Bağ Değişimi: Bu reaksiyon, bir standart olefin (C_4H_8) molekülünün trans-2- C_4H_8 olarak bilinen bir izomerine dönüşümünü sağlar. Bu dönüşüm, karbon atomlarının yer değişimi ile gerçekleşir ve sonuç olarak iki farklı izomer elde edilir (Beşergil, 2007; Koyunoğlu, 2019).
- Normal Olefinlerden İzooolefinlere: Bu süreç, standart bir penten molekülü olan n- C_5H_{10} 'un izopenten (izo- C_5H_{10}) adı verilen bir izomere dönüşmesini içerir. İzopenten, karbon zincirindeki bir çift bağın yer değişikliği ile oluşur (Beşergil, 2007; Koyunoğlu, 2019).
- Normal Parafinlerden İzoparafinlere: Bu reaksiyon, standart bir butan (n- C_4H_{10}) molekülünün izobutan (izo- C_4H_{10}) adlı bir izomere dönüşmesini sağlar.

İzobutan, karbon atomlarının yer değiştirmesiyle elde edilen bir sonuçtur (Beşergil, 2007; Koyunoğlu, 2019).

- Sikloheksandan Siklopentana: Bu süreç, bir sikloheksan molekülünden bir karbon atomunun çıkarılmasıyla siklopentan ve bir metil grubu içeren bir bileşik ($C_5H_9CH_3$) elde edilmesini içerir (Beşergil, 2007; Koyunoğlu, 2019).

Bu izomerizasyon reaksiyonları, moleküler yapılar ve özelliklerin modifiye edilmesi veya bir izomerin diğerine dönüştürülmesi gereken birçok kimyasal uygulamada kullanılır. Bu reaksiyonlar, endüstriyel kimya, organik sentez ve biyokimya gibi alanlarda büyük önem taşır (Beşergil, 2007; Koyunoğlu, 2019).

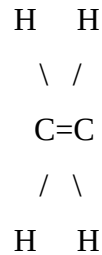
Olefin bağ değişimi (yer değiştirme)



Olefin bağ değişimi (yer değiştirme), bir alken molekülünün çift bağının konumunun veya yapısal düzenlemesinin kimyasal reaksiyonlar yoluyla değiştirilmesi sürecidir. Bu tür bir reaksiyon, özellikle polimerizasyon ve organik sentezlerde önemli bir rol oynar (Pizzano, 2021; Zaccaria, Sian, Zuccaccia, & Macchioni, 2020).

Örneğin, $1-C_4H_8$ (but-1-ene) molekülünden $trans-2-C_4H_8$ (trans-2-butene) molekülüne dönüşüm, but-1-enenin çift bağının molekül içerisindeki konumunun değiştiği bir reaksiyonu temsil eder. Bu değişim, çeşitli katalizörlerin varlığında veya belirli reaksiyon koşulları altında gerçekleşebilir (Beşergil, 2007; Ehm, Zaccaria, & Cipullo, 2019; Hassner & Namboothiri, 2012).

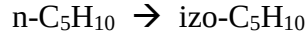
Belirtilen yapısal formül, trans-2-butene'nin moleküler düzenlemesini göstermektedir:



Bu yapıda, iki karbon atomu arasındaki çift bağ ($C=C$) ve her bir karbon atomuna bağlı olan hidrojen atomları bulunur. Hidrojen atomlarının çift bağın zıt taraflarında konumlanması, bu molekülün "trans" konfigürasyonunu ifade eder. Bu tür yapısal düzenlemeler, molekülün fiziksel ve kimyasal özelliklerini önemli ölçüde etkileyebilir (Davis, 1964; Grubbs, Trnka, & Sanford, 2003; Murugan, 2023).

Olefin bağ değişimi, moleküller arası etkileşimler ve reaksiyon mekanizmaları üzerine derinlemesine bilgi gerektiren karmaşık bir süreçtir. Bu tür reaksiyonlar, genellikle spesifik katalizörler ve reaktifler kullanılarak kontrollü laboratuvar koşulları altında gerçekleştirilir (Asinger, 1968b; Geoffroy & Wrighton, 1979).

a) Normal olefinlerden izoolefinlere



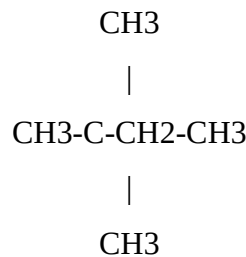
Normal olefinlerden izoolefinlere geçiş, kimyasal reaksiyonlar veya işlemler yoluyla molekül yapılarında yapısal değişiklikler yaparak gerçekleşir. Bu durumda, n-C₅H₁₀ (normal penten) molekülünden izo-C₅H₁₀ (izopentan) molekülüne geçişi inceliyoruz. Ancak, burada bir düzeltme yapmak gerekir: n-C₅H₁₀, bir alken (olefin) olarak beş karbonlu bir doymamış hidrokarbon iken, izo-C₅H₁₀ (2-metilbütan olarak da bilinir) bir alkan olarak beş karbonlu bir doymuş hidrokarbondur (Corma et al., 1990; Fazlyeva et al., 2023; Geoffroy & Wrighton, 1979; Hatanaka, Shimada, & Morita, 2007; Jain & Vinu, 2022; Li, Yan, Qiu, Tang, & Gu, 2001; Polotti, 2020).

b) Normal Penten'den İzo-Pentan'a Geçiş

Bu tür bir dönüşüm hidrojenleme ya da başka bir doyma reaksiyonu ile gerçekleştirilebilir. Hidrojenleme, bir alkenin (doymamış hidrokarbon) çift bağlarının hidrojen gazı (H₂) varlığında bir katalizör eşliğinde doymuş hidrokarbonlara dönüşmesidir. Ancak, doğrudan n-C₅H₁₀'dan izo-C₅H₁₀'a dönüşüm için spesifik bir katalitik yeniden düzenleme ya da bir dizi reaksiyon gereklidir çünkü bu işlem sadece hidrojen eklemeye sınırlı değildir; aynı zamanda karbon iskeletinde bir yeniden düzenleme de gerektirir (Ali, Khan, Qyyum, & Lee, 2018; Mohamed, Shehata, Abdel Halim, & Gad, 2017; Nakamura, Zhang, & Fujimoto, 1995; Sinnott & Aluru, 2006).

İzo-C₅H₁₀ (İzopentan) Yapısı

İzopentanın yapısal formülü



Bu yapıda, ana zincir boyunca dört karbon atomu bulunur ve ikinci karbon atomuna bir metil grubu (-CH₃) bağlıdır. Bu yapı izopentani bir izomer olarak tanımlar ve dallı bir iskelete sahip olduğu için "izo" ön eki kullanılır (Speight, 2011b, 2011c, 2017, 2020a).

n-C₅H₁₀'dan izo-C₅H₁₀'a dönüşüm genellikle daha karmaşık kimyasal işlemler gerektirir ve bu süreç, sadece hidrojen eklemeye değil, aynı zamanda karbon iskeletinin yeniden düzenlenmesiyle ilgilidir. Bu tür dönüşümler, petrokimya endüstrisinde önemli olan ve çeşitli katalizörler ve reaktifler kullanılarak gerçekleştirilen işlemlerdir (Pang, 2011; Sotoodeh, 2022; Speight, 2020c).

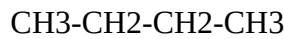
c) Normal parafinlerden izoparafinlere



Normal parafinlerden izoparafinlere geçiş, moleküllerin yapısal düzenlenmesini içerir. Bu tür bir dönüşüm, hidrokarbon zincirinin dallanmasını artırarak gerçekleşir. Örneğin, n-C₄H₁₀ (normal bütan) molekülünden izo-C₄H₁₀ (izobütan) molekülüne dönüşüm, normal bütanın karbon zincirinde bir yeniden düzenleme gerektirir. Normal bütan düz bir zincire sahipken, izobütan dallı bir yapıdadır (Kaiser, 2020; Sadeghbeigi, 2012b; Tien, 2019; Undavalli, Ling, & Khandelwal, 2021).

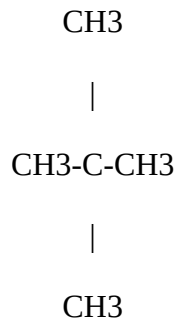
Normal Bütan (n-C₄H₁₀):

Normal bütan, dört karbon atomunun birbirine doğrusal olarak bağlandığı bir alkan (doymuş hidrokarbon) türüdür. Yapısı aşağıdaki gibidir:



İzobütan (izo-C₄H₁₀)

İzobütan, merkezi bir karbon atomuna üç metil grubunun bağlı olduğu dallı bir yapıya sahiptir. Yapısı şu şekildedir:



Dönüşüm Süreci

Normal parafinlerden izoparafinlere dönüşüm genellikle katalitik bir işlem gerektirir. Bu işlemde, hidrokarbon molekülleri belirli bir katalizör varlığında ısıtılarak moleküler yapılarının yeniden düzenlenmesi sağlanır. Bu tür bir işlem, özellikle petrokimya endüstrisinde, istenilen kimyasal özelliklere sahip ürünler elde etmek amacıyla yaygın olarak kullanılır (Bai & Bai, 2010, 2019; Beşergil, 2007).

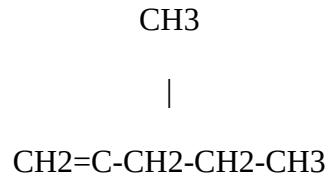
Bu dönüşüm, moleküldeki hidrojen atomlarının konumunun değişmesi ve karbon zincirinin dallanmasının artması ile karakterize edilir. Bu dallanma, izobütan gibi izoparafinlerin daha düşük kaynama noktalarına ve bazı durumlarda daha yüksek reaktiviteye sahip olmalarına yol açar. Bu özellikler, izoparafinlerin aerosol tahrik maddeleri, soğutucu gazlar ve çeşitli organik sentezlerde kullanılmasını sağlar (Bai & Bai, 2005; Tien, 1994).

d) Sikloheksandan siklopentana



"C₅H₉CH₃" formülü, toplamda altı karbon atomu içeren ve genel formülü C₆H₁₂ olan bir alken (doymamış hidrokarbon) türüne işaret eder. Bu formül, bir hekzen izomeri için uygun olup, spesifik olarak bir metil grubunun (CH₃) beş karbonlu bir alken zincirine (C₅H₉) eklenmesiyle oluşan bir yapıyı tanımlar. Ancak, "C₅H₉CH₃" formülü doğrudan belirli bir yapıyı tanımlamaz çünkü birkaç farklı izomeri mümkündür. En basit haliyle, bu formül 2-metilpenten izomerlerinden birini ifade edebilir (Beşergil, 2007; Smith, Inomata, & Peters, 2013; Solis Maldonado et al., 2018).

Örneğin, 2-metil-1-pentenin yapısal formülü aşağıdaki gibi olabilir



Bu yapı, ikinci karbona bağlı bir metil grubu içerir ve ilk karbon ile ikinci karbon arasında bir çift bağ bulunur, bu da molekülün alken (doymamış hidrokarbon) olduğunu gösterir. Ancak, C₆H₁₂ formülüne sahip bir molekülün birden fazla yapısal izomeri olabileceğini ve yukarıdaki yapı sadece bu izomerlerden birini temsil ettiğini unutmamak önemlidir. Molekülün tam yapısal özelliklerini belirtmek için IUPAC

adlandırma sistemi kullanılarak spesifik bir izomerin adının verilmesi gerekmektedir (Babu & Sarma, 2019; Chennappa et al., 2019).

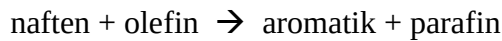
1.2.6.2. Hidrojen transferi ve sikloaromatizasyon

Kimya, moleküler düzeyde maddelerin özelliklerini, yapısını ve dönüşümlerini inceleyen bir bilim dalıdır. Bu alandaki araştırmalar, maddeler arası etkileşimleri ve bu etkileşimlerin sonuçlarını anlamamıza yardımcı olur. Özellikle, petrol kimyası ve organik kimya alanlarında, hidrokarbonların dönüşümü büyük bir öneme sahiptir. Bu dönüşümler arasında, hidrojen transferi ve sikloaromatizasyon gibi reaksiyonlar, hem endüstriyel uygulamalarda hem de akademik araştırmalarda temel süreçler olarak öne çıkar. Bu metin, bu iki önemli reaksiyon tipini ve bunların kimya alanındaki uygulamalarını detaylı bir şekilde açıklar ("Chapter 7 - Chemistry of FCC reactions," 2020).

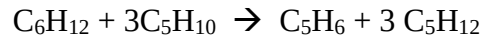
Hidrojen Transferi: Bu reaksiyonlar, bir molekülden diğerine hidrojen atomlarının transferini içerir. Örneğin, bir naften (sikloheksan türevleri gibi) ile bir olefin arasındaki hidrojen transferi sonucunda, bir aromatik bileşik (genellikle bir aromatik halka yapısına sahip) ve bir parafin oluşur. Bu süreç, naftenlerin daha kompleks aromatik bileşiklere dönüşümüne olanak tanır (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

Sikloaromatizasyon: Bu süreç, açık zincirli hidrokarbonların ya sikloalkenlere ya da aromatik halkalara dönüşümünü ifade eder. Verilen örnekte, sikloheksan (C_6H_{12}) ve üç adet izopenten (C_5H_{10}) molekülü arasında gerçekleşen sikloaromatizasyon, sikloheksanın aromatik bir bileşiğe (C_5H_6) ve izopentenlerin bir parafine (C_5H_{12}) dönüşmesiyle sonuçlanır. Bu reaksiyonlar, yeni halkalı yapılar oluşturmak ve hidrokarbon dönüşümlerini sağlamak için kullanılır, organik sentez ve petrol rafinerilerinde önemli bir yere sahiptir (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

Bu reaksiyonlar, karmaşık moleküler yapıların sentezi ve dönüşümü gibi birçok farklı kimyasal uygulamada kullanılır ve kimya alanında büyük öneme sahiptir (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).



Sikloaromatizasyon



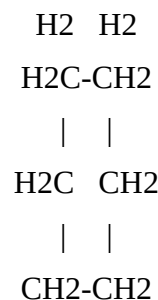
Bu metin, kimya alanında iki önemli reaksiyon tipini açıklar: hidrojen transferi ve sikloaromatizasyon.

- Hidrojen Transferi: Bu reaksiyonlar, bir molekülden diğerine hidrojen atomlarının transferini içerir. Örneğin, bir naften (sikloheksan türevleri gibi) ile bir olefin arasındaki hidrojen transferi sonucunda, bir aromatik bileşik (genellikle bir aromatik halka yapısına sahip) ve bir parafin oluşur. Bu süreç, naftenlerin daha kompleks aromatik bileşiklere dönüşümüne olanak tanır (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).
- Sikloaromatizasyon: Bu süreç, açık zincirli hidrokarbonların ya sikloalkenlere ya da aromatik halkalara dönüşümünü ifade eder. Verilen örnekte, sikloheksan (C_6H_{12}) ve üç adet izopenten (C_5H_{10}) molekülü arasında gerçekleşen sikloaromatizasyon, sikloheksanın aromatik bir bileşiğe (C_5H_6) ve izopentenlerin bir parafine (C_5H_{12}) dönüşmesiyle sonuçlanır. Bu reaksiyonlar, yeni halkalı yapılar oluşturmak ve hidrokarbon dönüşümlerini sağlamak için kullanılır, organik sentez ve petrol rafinerilerinde önemli bir yere sahiptir (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

Verilen reaksiyon, sikloheksan (C_6H_{12}) ve üç molekül izopenten (C_5H_{10}) arasında gerçekleşen bir sikloaromatizasyon reaksiyonunu temsil eder ve sonuç olarak bir molekül siklopentadien (C_5H_6) ve üç molekül izopentan (C_5H_{12}) oluşur (Shuikin et al., 1963). Bu reaksiyon, özellikle aromatik bileşiklerin ve parafinlerin oluşumu açısından dikkate değerdir. Reaksiyonun molekül yapıları aşağıda verilmiştir:

Reaktanlar

- Sikloheksan (C_6H_{12}): Altı karbon atomundan oluşan bir halkalı alkandır (Shuikin et al., 1963).

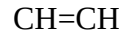


İzopenten (C_5H_{10}) x 3: Beş karbon atomundan oluşan bir alken olan izopenten, çift bağ içerir. İzopentenin birçok izomeri olabilir; burada genel bir yapı sunulmaktadır. Üç molekül izopenten kullanıldığını unutulmamalıdır (Asinger, 1968a).

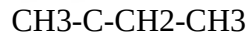
$CH_2=C(CH_3)-CH_2-CH_3$ (2-metil-1-buten olarak bir izopenten izomeri)

Ürünler

Siklopentadien (C_5H_6): Beş karbon atomundan oluşan bir halkalı alkendir ve iki çift bağ içerir.



İzopentan (C_5H_{12}) x 3: Beş karbon atomundan oluşan bir alkan olan izopentan, dallı bir yapıdadır. Üç molekül izopentan oluştuğunu göz önünde bulundurmak gerekir (Asinger, 1968a).



Reaksiyon Şeması

Bu reaksiyon, açık zincirli hidrokarbonların halkalı yapılara dönüşümünü ve aynı zamanda hidrojen atomlarının yeniden dağılımını içerir. Sikloaromatizasyon süreci, karmaşık organik reaksiyonlar ve hidrokarbon dönüşümleri için önemli bir örnektir. Ancak, bu reaksiyonun gerçekleşmesi için spesifik katalizörler, sıcaklık ve basınç koşulları gerekebilir. Yapısal formüller ve reaksiyon mekanizmaları, kimyasal reaksiyonların anlaşılmasında temel araçlardır (Asinger, 1968a; Venuto, 1994).

Bu reaksiyonlar, karmaşık moleküler yapıların sentezi ve dönüşümü gibi birçok farklı kimyasal uygulamada kullanılır ve kimya alanında büyük öneme sahiptir (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

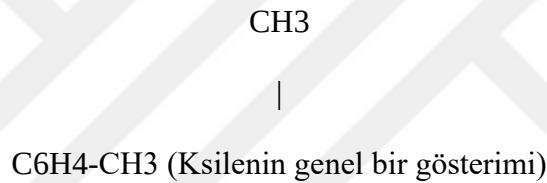
1.2.6.3. Trans-alkilasyon / alkil grup transferi



Verilen reaksiyon, bir trans-alkilasyon ya da alkil grup transferi sürecini temsil eder. Bu süreçte, bir dimetilbenzen (ksilen) molekülü ($\text{C}_6\text{H}_4(\text{CH}_3)_2$) ve bir benzen (C_6H_6) molekülü, iki molekül tolüene ($\text{C}_5\text{H}_5\text{CH}_3$, ancak bu formül yanlış bir gösterimdir; doğru formül C_7H_8 olmalıdır) dönüşmektedir. Bu süreçte, bir metil grubu bir molekülden diğerine transfer edilir (Sadeghbeigi, 2012b). Doğru formülle, reaksiyon şöyle gösterilmelidir:

Reaktanlar

Dimetilbenzen (Ksilen) ($\text{C}_6\text{H}_4(\text{CH}_3)_2$): Benzen halkasına iki metil grubunun bağlı olduğu aromatik bir hidrokarbondur. Ksilenin orto, meta ve para olmak üzere üç farklı izomeri bulunmaktadır; burada spesifik bir izomer belirtilmemiştir (Sadeghbeigi, 2012b).

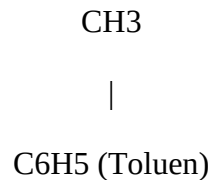


Benzen (C_6H_6): Altı karbon atomu ve altı hidrojen atomundan oluşan en basit aromatik hidrokarbondur (Sadeghbeigi, 2012b).

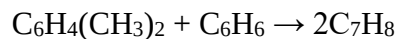
C_6H_6 (Benzen)

Ürün

Toluen (C_7H_8) x 2: Benzen halkasına bir metil grubunun bağlı olduğu aromatik bir hidrokarbondur. Bu reaksiyonda, iki molekül tolüen oluşur (Sadeghbeigi, 2012b).



Reaksiyon Şeması



Bu reaksiyon, bir dimetilbenzen molekülünden bir metil grubunun transfer edilerek benzen molekülünün tolüene dönüştürülmesini içerir. Bu süreç, aromatik bileşikler

arasında alkil gruplarının yeniden dağıtılmasına izin vererek, farklı aromatik hidrokarbonların sentezlenmesinde kullanılabilir. Trans-alkilasyon reaksiyonları, petrokimya sanayisinde, özellikle de yüksek değerli aromatik bileşiklerin üretiminde önemli bir yer tutar (Sadeghbeigi, 2012b).

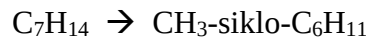
Trans-alkilasyon süreci, spesifik katalizörlerin varlığında gerçekleşebilir ve bu süreç, ham petrolün işlenmesi sırasında elde edilen aromatik karışımların bileşimini optimize etmek için kullanılır. Bu tür reaksiyonlar, petrokimya endüstrisinin verimliliğini ve ürün çeşitliliğini artırmada kritik öneme sahiptir (Sadeghbeigi, 2012b).

Organik kimyada yaygın bir dönüşüm süreci olan trans-alkilasyon veya alkil grup transferi reaksiyonunu tanımlar. Bu tür reaksiyonlar, bir molekülden diğerine bir alkil grubunun transfer edilmesini veya yer değiştirilmesini kapsar (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

Örneğin, dimetilbenzen ($C_6H_4(CH_3)_2$) ve benzen (C_6H_6) arasında gerçekleşen bir trans-alkilasyon reaksiyonu, sonuç olarak iki toluen molekülü ($C_6H_5CH_3$) üretir. Bu süreçte, bir metil grubu (CH_3), bir molekülden diğerine aktarılır. Bu tür reaksiyonlar, moleküler yapının modifiye edilmesi ve istenilen kimyasal ürünlerin elde edilmesi için organik kimyada sıkça başvurulan yöntemlerdendir. Özellikle, bu reaksiyon benzen halkasına metil grupları ekleyerek dimetilbenzen gibi bileşiklerin üretiminde kullanılabilir (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

Alkil grup transfer reaksiyonları, organik sentez ve petrokimya endüstrisinde kilit bir rol oynar ve çeşitli alkilasyon işlemlerinde temel bir mekanizma olarak işlev görür. Bu reaksiyonlar, benzen ve türevlerinin sentezinde özellikle önem taşır (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

1.2.6.4. Olefinlerin naftenlere siklizasyonu



Reaksiyon, bir olefinin (C_7H_{14}) naftene dönüşümünü temsil eden bir siklizasyon sürecini açıklar. Bu süreçte, C_7H_{14} formülüne sahip yedi karbon atomlu bir alken, metil grubuna bağlı bir sikloheksan ($CH_3\text{-siklo-}C_6H_{11}$) yapısına dönüşür. Bu tür bir reaksiyon, açık zincirli hidrokarbonların halkalı yapılar oluşturarak doymuş hale gelmesini içerir (Nazarova, Ivanchina, Ivashkina, Kiseleva, & Stebeneva, 2015).

Reaktan

Olefin (C₇H₁₄): Yedi karbonlu bir alken (olefin) yapısıdır. Örnek olarak, 1-hepten kullanılabilir, ancak burada spesifik bir izomer belirtilmemiştir (Nazarova et al., 2015).

C₇H₁₄ (1-heptenin genel bir gösterimi)

Ürün

Metil-sikloheksan (CH₃-siklo-C₆H₁₁): Altı karbonlu bir halka (sikloheksan) ve bir metil grubunun (CH₃) bu halkaya bağlı olduğu bir yapıdır (Pauline & Joseph, 2021).

CH₃

|

C₆H₁₁ (Metil-sikloheksanın genel bir gösterimi)

Reaksiyon Şeması:



Bu reaksiyon, bir alkenin (olefinin) doymuş bir halkalı yapıya dönüşümünü ve aynı zamanda bir metil grubunun bu yeni oluşan halkaya eklenmesini içerir. Siklizasyon süreci, hidrokarbonların kimyasal yapısını değiştirerek, daha karmaşık moleküler yapıların oluşumunu sağlar. Bu tür dönüşümler, petrol rafinerisi işlemleri ve organik sentezde önemli bir yere sahiptir ("Chapter 7 - Chemistry of FCC reactions," 2020).

Siklizasyon reaksiyonları, olefinlerin reaktivitelerini ve kimyasal özelliklerini değiştirerek, petrol endüstrisinde ve ince kimyasal üretiminde değerli ara ürünler elde etmek için kullanılır. Bu süreç, genellikle katalizörlerin varlığında ve belirli reaksiyon koşulları altında gerçekleşir. Metil-sikloheksan gibi ürünler, çözücüler ve çeşitli kimyasal süreçlerde başlangıç maddesi olarak kullanılabilir, böylece hidrokarbon kaynaklarının verimli bir şekilde değerlendirilmesine katkıda bulunurlar (Andreev, Bogomolov, Dobryanskii, & Kartsev, 1968; Chen, Xu, Fan, Shi, & Bao, 2015; Francis Prashanth, Shravani, Vinu, M, & Ramesh Prabu, 2021).

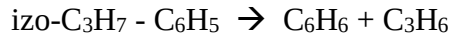
Olefinlerin naftenlere dönüşümünü sağlayan siklizasyon reaksiyonlarını açıklamaktadır. Siklizasyon, açık zincirli hidrokarbonların halkalı yapıya dönüşmesi sürecini tanımlar ("Chapter 7 - Chemistry of FCC reactions," 2020).

Örnekte, C₇H₁₄ formülüne sahip bir olefin molekülü, CH₃-siklo-C₆H₁₁ olarak adlandırılan halkalı bir bileşiğe dönüşür. Bu süreçte, olefinin karbon atomları bir halka

oluşturarak sikloalkan veya sikloalkil grubunu meydana getirir ("Chapter 7 - Chemistry of FCC reactions," 2020).

Siklizasyon reaksiyonları, organik kimyada çeşitli amaçlar için kullanılan önemli bir yöntemdir. Bu reaksiyonlar, moleküler yapının modifiye edilmesi, halkalı bileşiklerin sentezlenmesi ve doğal ürünler, ilaçlar veya polimerler gibi uygulamalarda kritik rol oynar. Bu özel reaksiyon, bir karbon zincirinin halkalı bir yapıya dönüştürülmesi gereken durumlarda kullanılabilir (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

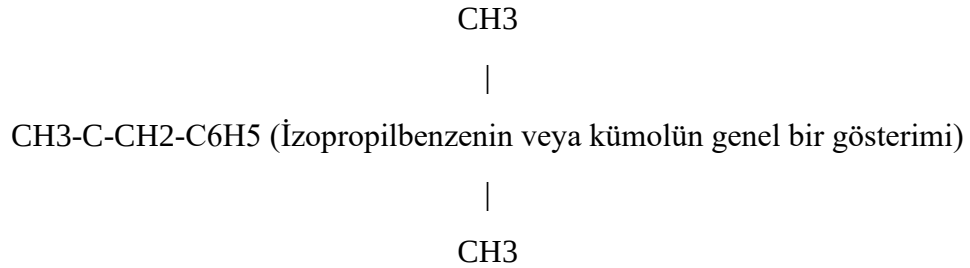
1.2.6.5. Dealkilasyon



Reaksiyon, bir dealkilasyon sürecini tanımlar. Bu süreçte, izopropilbenzen (iso-C₃H₇-C₆H₅, yaygın adıyla kümöl) molekülünden bir metil grubunun çıkarılması sonucu benzen (C₆H₆) ve propen (C₃H₆) oluşur. Dealkilasyon, bir alkil grubunun aromatik bir halkadan çıkarılması ve daha küçük alkil ve aromatik bileşiklerin elde edilmesi işlemidir (Dolz et al., 2023; Spence, Cogan, Calderon, Kaye, & Potthoff, 2023).

Reaktan

İzopropilbenzen (Kümöl) (C₉H₁₂) Benzen halkasına bağlı bir izopropil grubuna (iso-C₃H₇) sahip bir aromatik hidrokarbondur (Gupta, Pachisia, & Gupta, 2023).



Ürünler:

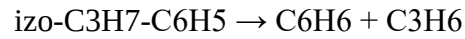
Benzen (C₆H₆): Altı karbon atomu ve altı hidrojen atomundan oluşan en basit aromatik hidrokarbondur (Manzoor et al., 2023).

C₆H₆ (Benzen)

Propen (C₃H₆) Üç karbon atomundan oluşan ve bir çift bağ içeren bir alken (olefin) yapısıdır.

CH₂=CH-CH₃ (Propen)

Reaksiyon Şeması



Bu reaksiyon, izopropilbenzenin (kümüol) bir dealkilasyon işlemi yoluyla benzen ve propene dönüştürülmesini içerir. Dealkilasyon süreci, aromatik bileşiklerin yapısından alkil gruplarının çıkarılması ve daha basit bileşiklerin oluşumunu sağlayarak, petrokimya sanayisinde kullanılan önemli bir dönüşüm mekanizmasıdır. Bu tür reaksiyonlar, özellikle benzen ve propen gibi değerli petrokimyasal hammaddelerin üretiminde kritik öneme sahiptir (Roy, Suresh, Sinha, Biswas, & Maiti, 2023; Uljon, 2023).

Dealkilasyon işlemleri, genellikle katalitik yöntemlerle ve belirli reaksiyon koşulları altında gerçekleştirilir. Bu süreç, petrokimya endüstrisinde ara ürünlerin ve monomerlerin elde edilmesinde kullanılır, aynı zamanda daha temiz yakıt ve kimyasal bileşiklerin üretimine olanak tanır (H. Jin et al., 2023; Lyons et al., 2023).

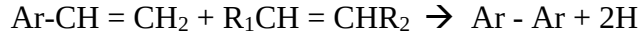
Bu çalışma, dealkilasyon olarak bilinen bir kimyasal süreci tanımlamaktadır. Dealkilasyon, bir molekülden alkil gruplarının çıkarılması veya koparılmasıyla daha basit bir yapıya dönüştürülmesi işlemidir (Abdelgalil & Alkahtani, 2023; Ganesh Kumar & Prakash, 2023).

Örneğin, izo-C₃H₇ grubu (propil grubu olarak da bilinir) ve bir fenil halkası (C₆H₅) arasındaki reaksiyonda, izo-C₃H₇ grubunun fenil halkasından ayrılması sonucunda C₆H₆ (benzen) ve C₃H₆ (propilen veya propilen) oluşur. Bu süreç, belirli bir molekülden alkil gruplarının çıkarılmasını ve sonuç olarak daha basit ürünlerin elde edilmesini sağlar (Dewangan & Bhatia, 2023; Yet, 2023).

Dealkilasyon reaksiyonları, organik kimyada moleküler yapıların modifiye edilmesi veya istenmeyen alkil gruplarının çıkarılması için kullanılır. Bu reaksiyonlar, kimyasal sentez, ilaç geliştirme ve petrokimya endüstrisinde, moleküllerin basitleştirilmesi veya istenen kimyasal yapıların elde edilmesi amacıyla önem taşır (Gerona, 2024; Sharma, Bhatt, Shrivastava, & Nadda, 2023).

Dealkilasyon, petrokimya endüstrisinde hidrokarbonların rafinasyonunda ve organik sentezde sıkça kullanılan bir reaksiyon türüdür (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

1.2.6.6. Kondensasyon



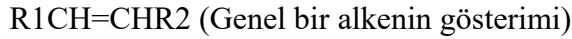
Reaksiyon, bir aromatik alken ($\text{Ar-CH}=\text{CH}_2$) ile bir alkenin ($\text{R}_1\text{CH}=\text{CHR}_2$) kondensasyonunu açıklar. Bu süreç, iki hidrojen atomunun açığa çıkmasıyla sonuçlanır ve iki aromatik halkanın birleşmesinden (Ar-Ar) oluşan bir diaril bileşiği meydana getirir. Kondensasyon reaksiyonları, iki veya daha fazla molekülün birleşerek daha büyük moleküller oluşturması ve genellikle su veya başka küçük moleküllerin ayrışmasıyla karakterize edilir. Ancak, bu özel durumda, kondensasyon sonucu olarak hidrojen molekülü (H_2) açığa çıkar (Jouhara, Reay, McGlen, Kew, & McDonough, 2024; Meenakshi Sundaram & Karimi, 2024).

Reaktanlar

Aromatik Alken ($\text{Ar-CH}=\text{CH}_2$): Bir aromatik halka (Ar) ile bir alken grubunun ($\text{CH}=\text{CH}_2$) birleşiminden oluşan bileşiktir. Örneğin, stiren (feniletan) bu kategoriye girer (Gulati, Kumar, Baul, & Lingam B, 2024; Saidi & Safaripour, 2024).

$\text{Ar-CH}=\text{CH}_2$ (Stiren gibi bir aromatik alkenin genel gösterimi)

Alken ($\text{R}_1\text{CH}=\text{CHR}_2$): Genel formülü $\text{R}_1\text{CH}=\text{CHR}_2$ olan, çift bağ içeren bir hidrokarbondur. Burada R_1 ve R_2 , hidrojen atomları veya karbon zincirleri olabilir.



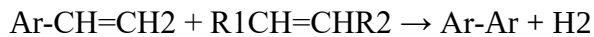
Ürünler

Diaril Bileşiği (Ar-Ar): İki aromatik halkanın birleşmesiyle oluşan bileşik. Bu süreç, aromatik halkalar arasında yeni bir kimyasal bağın oluşumunu ifade eder (Hopmann, Greif, & Wolters, 2024).

Ar-Ar (Diaril bileşiğinin genel gösterimi)

Hidrojen (H_2): Kondensasyon reaksiyonu sonucu açığa çıkan hidrojen molekülü.

Reaksiyon Şeması



Bu kondensasyon reaksiyonu, özellikle organik kimyada ve polimer kimyasında önemli bir süreçtir. Polimerizasyon reaksiyonlarının yanı sıra, aromatik bileşiklerin sentezi sırasında da bu tür kondensasyon mekanizmaları kullanılır. Reaksiyon, aromatik bileşikler arasında yeni bağlar oluşturarak, karmaşık moleküler yapıların ve

fonksiyonel malzemelerin üretilmesine olanak tanır. Bu süreç, katalizörlerin varlığında ve belirli reaksiyon koşulları altında daha verimli bir şekilde gerçekleşebilir (Aimikhe, Iloke, Okoro, & Ogali, 2024). Kondensasyon reaksiyonları, organik kimyanın temel taşlarından biridir ve yeni moleküler yapıların keşfi için geniş olanaklar sunar (Wypych, 2024).

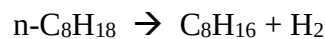
Kondensasyon reaksiyonlarını açıklar. Kondensasyon reaksiyonları, iki veya daha fazla molekülün birleşerek daha büyük bir molekül oluşturduğu kimyasal süreçlerdir.

Örnek reaksiyonda, $Ar-CH=CH_2$ ve $R_1CH=CHR_2$ gibi iki farklı molekül türü, birleşerek bir kondensasyon süreci gerçekleştirir. Bu işlem sonucunda, iki aromatik halka ($Ar-Ar$) ve iki hidrojen molekülü ($2H$) meydana gelir (Kadja, Culsum, Ledyastuti, & Rachmawati, 2024).

Kondensasyon reaksiyonları, organik kimyada moleküler yapının genişletilmesi veya daha karmaşık bileşiklerin üretilmesi için temel bir yöntemdir. Bu reaksiyonlar, iki veya daha fazla molekül arasında kimyasal bağların oluşturulmasını içerir ve genellikle yeni bağlar yaratmak amacıyla çeşitli fonksiyonel grupların bir araya getirilmesiyle gerçekleştirilir (Ng & Yahya, 2024).

Bu özel reaksiyon örneği, iki karbonil bileşiğin birleşmesiyle aromatik halkaların ve hidrojenlerin oluştuğu bir kondensasyon sürecini temsil eder. Bu tür reaksiyonlar, organik sentezde, özellikle de karmaşık moleküler yapıların oluşturulmasında kritik öneme sahiptir (Karaca & Koyunoğlu, 2022; Koyunoğlu, 2019).

1.2.6.7. Dehidrojenasyon



Ele alınan reaksiyon, bir alkan olan n-oktanın ($n-C_8H_{18}$) dehidrojenasyonu ile bir alken olan okten (C_8H_{16}) ve hidrojen (H_2) oluşumunu içerir. Bu bir kimyasal reaksiyon türüdür ve genellikle endüstriyel kimyada, özellikle petrokimya ve enerji üretimi alanlarında yer alır (Giudici et al., 2023). Bu dehidrojenasyon reaksiyonunun moleküler yapıları:

$n-C_8H_{18}$ (n-Oktan): Bu bileşik, sekiz karbon atomundan oluşan bir doymuş hidrokarbon (alkan) zinciridir. Her karbon atomu, tetrahedral geometriye (dört bağlı atom ile) sahip olacak şekilde diğer karbon atomları ve hidrojen atomları ile bağlanır.

Alkanlar, tekli bağlar (sigma bağları) içerirler ve bu yüzden kimyasal olarak daha az reaktiftirler (Z. Zhao, Zou, Huang, & Tong, 2023).

C_8H_{16} (Oktan): Bu bileşik, sekiz karbon atomundan oluşur ancak bir çift hidrojen atomu eksiktir. Bu eksiklik, molekül içerisinde bir çift karbon atomu arasında bir çift bağ (pi bağı) oluşumuna yol açar. Bu çift bağ, moleküle alken sınıfına ait özellikler kazandırır. Alkenler, çift bağları nedeniyle daha reaktif olabilirler ve çeşitli kimyasal reaksiyonlarda yer alabilirler (Vega-Ramon, Wang, Wu, & Zhang, 2023).

H_2 (Hidrojen): Bu, iki hidrojen atomundan oluşan bir moleküldür. n-Oktanın dehidrojenasyonu sırasında, iki hidrojen atomu n-oktandan ayrılır ve H_2 molekülünü oluşturur (Neto, Imtiaz, & Ahmed, 2023).

Dehidrojenasyon reaksiyonu genellikle yüksek sıcaklık, bir katalizör veya her ikisinin kombinasyonu altında gerçekleşir. Bu işlem, hidrokarbonların daha reaktif formlara dönüştürülmesi için bir yol sağlar ve çeşitli kimyasal süreçlerde ve endüstriyel uygulamalarda önemli bir adımdır. Bu tür bir reaksiyon, petrokimya endüstrisinde polimerler, yakıtlar ve diğer kimyasal ürünlerin üretiminde kullanılabilir (Niyogi, Micale, Cafaro, Bracconi, & Maestri, 2023).

Dehidrojenasyon olarak bilinen kimyasal bir süreci açıklamaktadır. Dehidrojenasyon, bir bileşikten hidrojen atomlarının çıkarılmasıyla gerçekleşen bir reaksiyondur (Tirumareddy, Borugadda, & Dalai, 2023).

Bu örnekte, n-oktan ($n-C_8H_{18}$) adlı bileşik, dehidrojenasyon sonucunda C_8H_{16} (oktalin olarak da bilinir) ve H_2 (hidrojen gazı) ürünlerine dönüşür. Bu süreçte, n-oktanın yapısından hidrojen atomları uzaklaştırılır (Ng & Yahya, 2024).

Dehidrojenasyon reaksiyonları, hidrokarbonların yapısını modifiye etmek veya farklı kimyasal ürünlerin sentezini gerçekleştirmek için organik kimyada kullanılır. Petrokimya endüstrisinde, bu tür reaksiyonlar hidrokarbon rafinasyonu ve çeşitli kimyasal ürünlerin üretiminde büyük önem taşır (Gallucci, 2023).

Bu spesifik reaksiyon, n-oktanın daha kısa bir karbon zinciri olan oktalin ve hidrojen gazına dönüşümünü sağlayan bir dehidrojenasyon işlemine örnek teşkil eder. Bu tür süreçler, enerji üretimi, kimya ve petrokimya endüstrisi gibi birçok alanda uygulanır ("Fluid catalytic cracking," 2023; Karaca & Koyunoğlu, 2022).

1.2.6.8. Fcc de katalizörlerin etkinliği

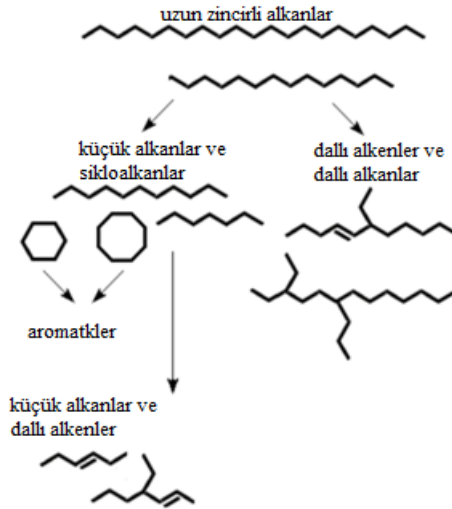
FCC'de kullanılan katalizörlerin etkinliği aşağıdaki önemli parametreler açısından değerlendirilir ve optimize edilir:

1. Reaksiyon sıcaklığında düşüş sağlama
2. Oluşan yeni hafif ürünlerin miktarı ve oranlarında artış (proses verimi)
3. Aktivasyon enerjisinde düşüş sağlama
4. Birim maliyetlerin düşüşü
5. Geri kazanım oranlarının artışı
6. Reaksiyon süresinde düşüş sağlama
7. Üretilen özellikle hafif ürünlerin kalite parametrelerinde artış
8. Gözenek yapıları
9. Tanecik büyüklükleri
10. Yığın yoğunlukları

Başlangıçta tamamen batch reaktörlerde kullanılan FCC katalizörleri, günümüzde hem küçük hem de büyük rafineri ölçeklerinde semi batch yöntemlerle ve continue tarzında kullanılabilmektedir (Cha, Kim, Son, Park, & Il, 2012; Khan, Asmatulu, Uddin, & Asmatulu, 2022; Zana, Frasch, Soulard, Lebeau, & Patarin, 2001).

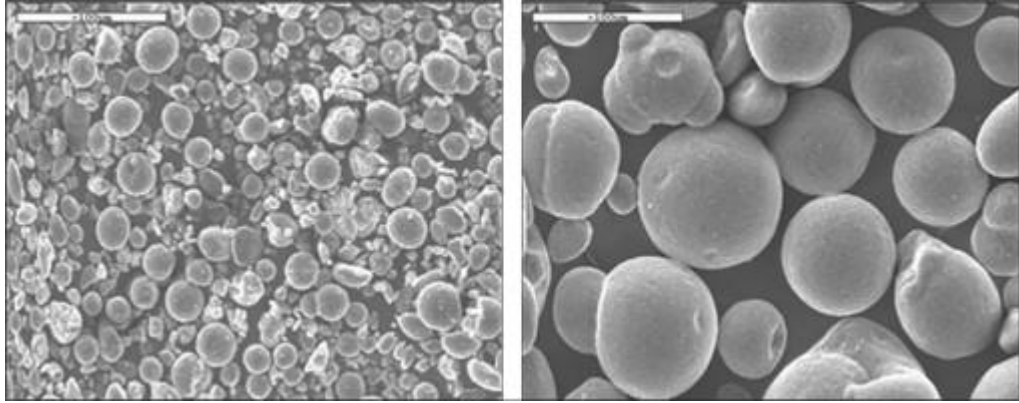
Şekil 1.1, uzun zincirli alkanların nasıl daha küçük alkanlara, sikloalkanlara ve aromatik bileşiklere, ardından daha küçük alkenlere ve dallanmış alkenlere dönüştüğünü göstermektedir. Bu diyagram, ham petroldeki karmaşık hidrokarbonların, çeşitli yakıtların ve kimyasalların üretiminde daha kullanışlı hale gelen basit moleküllere nasıl parçalandığını anlamayı kolaylaştırmak için tasarlanmıştır. Bu, petrol rafineri endüstrisindeki anahtar süreçlerden biridir ("Fluid catalytic cracking," 2023).

Güncel olarak kullanılan FCC katalizörleri, yoğunlukları $0.80-0.96 \text{ g/cm}^3$ arasında değişen ve tanecik büyüklükleri $10-150 \text{ }\mu\text{m}$ arasında olan, ortalama olarak ise $60-100 \text{ }\mu\text{m}$ büyüklüğünde mikronize malzemelerdir (Sánchez de Rojas Gómez & Frías Rojas, 2013).



Şekil 1.1 : FCC Mekanizma yapısı ("Fluid catalytic cracking," 2023).

Şekil 1.2, mikroskopik düzeyde bir zeolit türünün partikül yapısını detaylandırmaktadır. Bu özel zeolit, sdodyum oksit (Na_2O), alüminyum oksit (Al_2O_3) ve silikon dioksit (SiO_2) içerir. Zeolitler, alüminosilikat mineraller grubuna aittir ve kristal yapılarında bulunan gözenekler veya kanallar aracılığıyla değişken miktarda su ($x\text{H}_2\text{O}$ olarak ifade edilir) tutma kapasitesine sahiptirler. Bu yapısal özellikleri, zeolitleri su arıtma, katalizör olarak kullanım ve çeşitli endüstriyel süreçlerde nem giderici olarak değerli kılar (Sánchez de Rojas Gómez & Frías Rojas, 2013).



Şekil 1.2 : ($\text{Na}_2\text{O}.\text{Al}_2\text{O}_3.4.7\text{SiO}_2.x\text{H}_2\text{O}$). partikül yapısı (Sánchez de Rojas Gómez & Frías Rojas, 2013).

Görselde, taramalı elektron mikroskobu kullanılarak farklı büyütme oranlarında çekilmiş iki adet zeolit partikülü görüntüsü bulunmaktadır. Bu görüntüler, partiküllerin morfolojisi, boyut dağılımı ve yüzey özellikleri gibi detayları incelemek amacıyla yapılan yapısal analizleri temsil eder. Partiküllerin yuvarlak ve pürüzsüz yüzeyleri, onların belki de katalizör, adsorban veya iyon değişim malzemesi olarak kullanılmak üzere özel olarak tasarlanmış olabileceğini düşündürmektedir. Sağdaki resimdeki

partiküllerin birbirine benzer boyut ve şekilleri, üretim sürecinin tutarlılığını gösterirken; sol taraftaki resimdeki daha yakın ve düzensiz yapıdaki partiküller, farklı bir üretim aşamasını veya daha yoğun bir agregasyon durumunu yansıtır olabilir (Sánchez de Rojas Gómez & Frías Rojas, 2013).

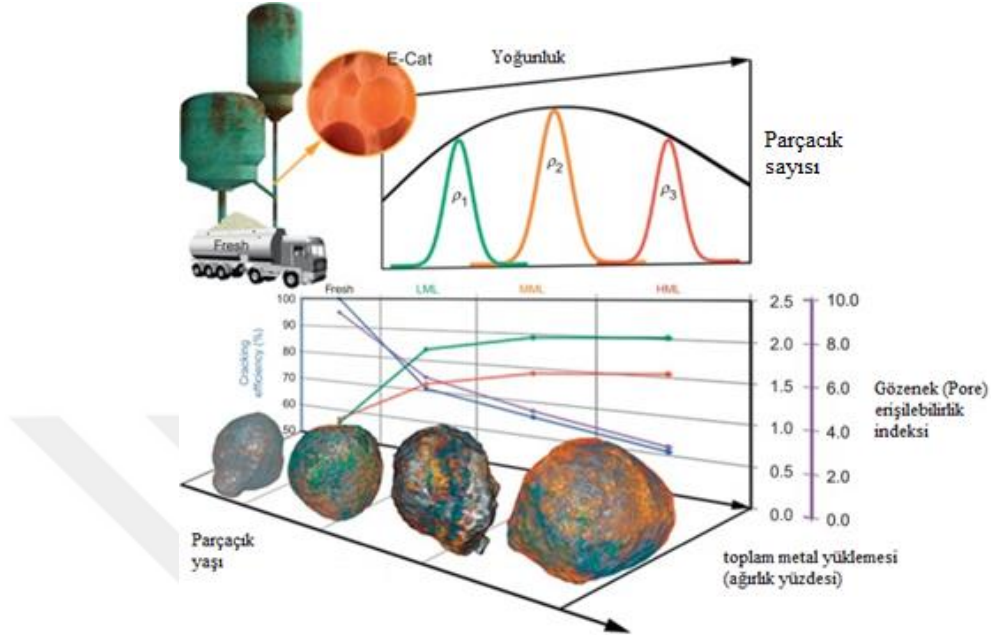
Önceki paragrafta, taramalı elektron mikroskobu kullanılarak elde edilen zeolit partiküllerinin morfolojisi ve özellikleri hakkında detaylı bir analiz sunulmaktadır. Bu analizler, partiküllerin belki de katalizör, adsorban veya iyon değişim malzemesi olarak kullanılmak üzere özel olarak tasarlanmış olabileceği fikrini ortaya koymaktadır. Diğer yandan, alttaki paragrafta ise bir katalizörün yaşlanma süreci ve farklı yoğunluklara sahip fraksiyonlarının incelendiği bir çizelge hakkında bilgi verilmektedir. "E-Cat" olarak işaretlenen bölüm, belirli evrelerdeki kullanılan katalizörün mikroskobik yapısını sergilemektedir. Bu çizelge, zeolit partiküllerinin üretim sürecinin önemli bir parçası olduğunu ve çeşitli yoğunluklara sahip fraksiyonların kontrol edilmesinin katalizörün performansını etkileyebileceğini vurgulamaktadır. Bu nedenle, taramalı elektron mikroskobu görüntülerinin analizi ile katalizörün yapısal özelliklerinin anlaşılması arasında güçlü bir bağlantı olduğu söylenebilir.

Şekil 1.3, bir katalizörün yaşlanma süreci ve farklı yoğunluklara sahip fraksiyonlarının incelendiği karmaşık bir çizelgeyi içermektedir. "E-Cat" olarak işaretlenen bölüm, belirli evrelerdeki kullanılan katalizörün (muhtemelen bir ekstrüzyon katalizörü) mikroskobik yapısını sergilemektedir. Üst kısımda, ρ_1 , ρ_2 ve ρ_3 olarak gösterilen üç farklı katalizör yoğunluğu, katalizör partiküllerinin boyut ve yoğunluk dağılımını temsil etmektedir (Meirer et al., 2015).

Alt kısımdaki üç boyutlu grafik, katalizör partiküllerinin yaşına göre kapasitesi, toplam metal yükü (ağırlık yüzdesi olarak) ve gözenek erişilebilirlik indeksinin ilişkisini göstermektedir. Bu, partiküllerin zaman içindeki değişimini, yüzeylerindeki birikinti ve aşınmayı ifade eder, katalizörlerin zamanla nasıl bozulduğunu ve etkinliklerinin nasıl değiştiğini anlamak için kritik bir analiz sunar (Meirer et al., 2015).

Yüksek dizel verimine sahip MgO-Al₂O₃-magnesia-alumina-aluminum phosphate (MgAAP) matrix yapısı" ifadesi, bu özel katalizör matrisinin magnezyum oksit (MgO), alüminyum oksit (Al₂O₃) ve alüminyum fosfat karışımından oluştuğunu

belirtir. MgAAP matrisi, yüksek dizel verimine katkıda bulunması beklenen bir katalitik malzemedir. Katalizörün yapısal özellikleri ve metal yükü, dizel üretim sürecindeki performansını önemli ölçüde etkileyebilir (Meirer et al., 2015).



Şekil 1.3 : Yüksek dizel verimine sahip MgO-Al₂O₃-magnezyum-alümina-alüminyum fosfat (MgAAP) matrix yapısı (Meirer et al., 2015).

Görseldeki tanker ve katalizör görüntüleri, katalizörün taze, düşük metal yüklü (LML), orta metal yüklü (MML) ve yüksek metal yüklü (HML) durumlarını sergiler. Katalizör partiküllerinin yaşlandıkça yüzeylerinde artan birikinti ve korozyon belirtileri gösterdiği ve bu değişikliklerin katalitik performans üzerindeki etkileri grafiklerle ifade edilmiştir. Bu tür bir analiz, katalizör geliştirme, ömrünü uzatma stratejileri ve katalizörün ekonomik ve teknik değerlendirmelerinde önemli bir yer tutar (Meirer et al., 2015).



2. LİTERATÜR ÖZETİ

Bu bölümde, ağır hidrokarbonların dizel yakıtıya dönüştürülmesi süreçlerinde kullanılan katalizörler, reaktör tasarımı, ve süreç optimizasyonuna dair kapsamlı bir literatür taraması yapılmıştır. Literatürde yer alan çalışmalar, katalizör etkinliği, reaktör geometrisi, işlem sıcaklığı ve basıncı gibi faktörlerin dizel yakıt üretim verimliliği üzerindeki kritik rollerini vurgulamaktadır. Bu özet, mevcut bilgi boşluklarını ve araştırma fırsatlarını belirlemeye yönelik olarak geniş bir bilimsel bağlam sunar.

2.1. Katalizörlerin Rolü

Katalizörlerin ağır hidrokarbonların dizel yakıtıya dönüşüm sürecindeki etkinliği, literatürde kapsamlı bir şekilde incelenmiştir. Zeolitler, alüminyum fosfatlar ve metal oksitler gibi çeşitli katalizörlerin, hidrokarbon çözünürlüğü, asitlik ve termal stabilite gibi özellikleri detaylı olarak araştırılmıştır. Bu katalizörlerin etkinlikleri, farklı işlem koşullarında karşılaştırılmış ve optimal kullanım koşulları belirlenmiştir. Literatürde, katalizörlerin uzun vadeli kullanımı sırasında karşılaşılan zehirlenme ve sönümlenme sorunları ele alınmış, bu sorunların üstesinden gelmek için çeşitli modifikasyon teknikleri tartışılmıştır.

Örneğin, Cu-Zn/Al₂O₃, Cu-ZnO-Al₂O₃/γ-Al₂O₃, H-ZSM-5, AlPO₄ ve Cu-ZnO-Al₂O₃/ZSM5 gibi ticari katalizörlerin etkinlikleri üzerine yapılan çalışmalar, bu katalizörlerin yüksek sıcaklık ve basınç koşullarında gösterdiği performansı değerlendirmiştir. Dört hibrit katalizörün (asenkrone CZ (F), CZ (cp), CZM (F) ve CZM (cp)) sentezi ve bu katalizörlerin fiziksel ve kimyasal özellikleri, proses verimliliği üzerinde önemli bir etkiye sahiptir.

2.2. Reaktör Tasarımı ve Optimizasyonu

Reaktör tasarımı ve optimizasyonu, ağır hidrokarbonların dizel yakıtıya dönüştürülmesi sürecinin verimliliği açısından hayati öneme sahiptir. Literatürde, farklı reaktör tasarımlarının, özellikle akışkan yataklı reaktörler ve mikroreaktör teknolojilerinin

süreç verimliliği üzerindeki etkileri incelenmiştir. Bu reaktör tasarımları, karışım homojenliğini artırarak ve ısı ile kütle transferini optimize ederek süreç verimliliğini nasıl iyileştirdikleri üzerine yoğunlaşmıştır.

Vakum destilasyon, FTIR testi, viskozite ve yoğunluk ölçümleri, ve diğer analiz yöntemleri, reaktör tasarımı ve proses optimizasyonu çalışmalarında sıkça kullanılmıştır. Bu çalışmalar, reaktör geometrisinin, işlem sıcaklığı ve basıncının ve diğer operasyonel parametrelerin optimize edilmesi ile enerji verimliliğinin ve ürün kalitesinin artırılabilceğini göstermektedir.

2.3. Enerji Verimliliği ve Çevresel Sürdürülebilirlik

Enerji verimliliğini artırmak ve çevresel etkileri azaltmak için geliştirilen yeni yaklaşımlar ve teknolojiler, literatürde geniş yer bulmaktadır. Gelişmiş katalizörler ve yenilikçi reaktör tasarımları, ağır hidrokarbonları daha temiz ve verimli bir şekilde işleyebilme potansiyeline sahiptir. Bu çalışmalar, enerji tüketimini optimize etmeyi ve çevresel sürdürülebilirliği artırmayı amaçlamaktadır.

Reaktörlerin enerji verimliliği, kullanılan hammadde ve elde edilen ürünlerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin detaylı analizi ile değerlendirilmiştir. Örneğin, RME 180'in süreç için ideal hammadde olarak belirlenmesi, karıştırma mekanizmasındaki torkun etkisi ve buna bağlı olarak tüketilen güç dikkate alınarak yapılmıştır. RME 180, belirlenen süreç koşullarında hem fiziksel hem de kimyasal açıdan en uygun performansı sunan madde olarak öne çıkmıştır.

2.4. HAD (Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği) Modelleme

HAD modelleme çalışmaları, reaktör içindeki akışkan hareketi, ısı transferi ve kimyasal reaksiyonlar gibi dinamikleri simüle ederek süreç performansını optimize etmeyi amaçlamaktadır. Literatürde, HAD modellemelerinin gerçek laboratuvar deneyleriyle karşılaştırılması, modelin doğruluğunu ve süreç optimizasyonu için kullanılabilirliğini değerlendirmektedir. HAD modellemeleri, akışkanlar dinamiği ve reaksiyon kinetiği arasındaki ilişkiyi anlamada kritik bir araç olarak kullanılmaktadır.

Örneğin, HAD modellemeleri ile elde edilen dönüşüm oranlarının, gerçek laboratuvar deneylerinde elde edilen sonuçlara göre daha düşük bulunması, modelin bazı kısıtlamalarını ortaya koymuştur. Bu farklılık, modelde kullanılan reaksiyon hızları,

sıcaklık dağılımları veya karıştırma verimliliği gibi faktörlerin gerçek deney koşullarında farklılık gösterebileceğini göstermektedir. Bu bulgular, HAD modellemelerinin geliştirilmesi için önemli yönler sunmaktadır.





3. DENEYSEL ÇALIŞMALAR

3.1. Kullanılan Madde ve Katkılar

3.1.1. Hammadde

Çalışmalarımızda hammadde olarak 370 °C'ye kadar ortalama 600 mmbar'da destile edilmiş endüstriyel atık yağların destile sonrası kalıntıları kullanılmıştır. Destile edilmiş atık yağ (DEAY).

3.1.1.1. Hammadde ürününün özellikleri

Yoğunluk: 920 kg/m³

Parlama Noktası: 220 °C

Vizkozite: Brookfield vizkozimetresinde 50 – 200 °C arasında vizkozite ölçümleri aşağıdaki tabloda verilmiştir. Tablo 3.1 deki değerlerine göre akışkan ve vizkozitesi üstsel bir fonksiyonla değişmekte olup bu verilere göre akışkanın ortalama çalışma sıcaklığı olan 370 C'deki 0,33 cps olarak bulunmuştur.

Tablo 3.1 : Hammaddenin (DEAY) sıcaklığa göre vizkozite değişimi.

Sıcaklık °C	Vizkozite (Cps)
50	215
100	45
125	25
175	15
200	12
370	0,33

3.1.2. Katalizör

Yapılan kriting deneysel tasarım çalışmalarında kullandığımız baz katalizör, bazik ortamda (pH=12) su bazlı süspansiyon halinde bir çözeltidir. Süsapansiyon heterojen bir formda çözünmüş olması durumu ile mikron ölçekten nano ölçeğe doğru geçen metal oksit (MnO₂ + ZrO₂ + B₂O₄) ve metal tuzları (NiCl₂, AlCl₃) etkin bir şekilde kullanılmaya çalışılmıştır.

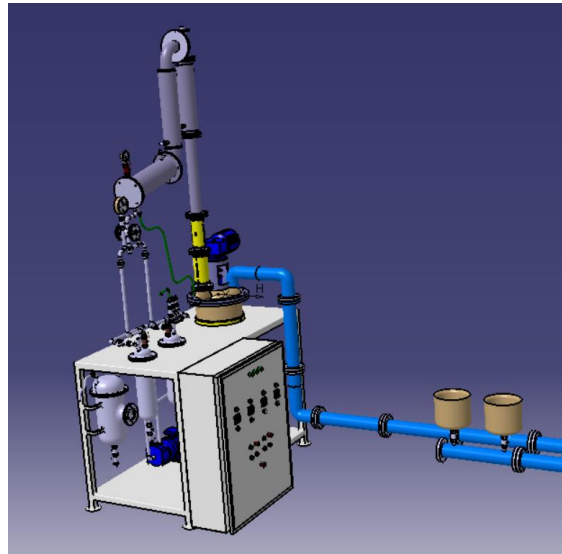
3.2. Malzeme seçimi

3.2.1. Tübüler reaktör malzemesi:

2" çapında çelik çekme borudan imal edilmiştir. İç kısmı sattik mikser özelliğine sahip helozonik yapıdadır (Şekil 3.1).



Şekil 3.1 : Tübüler reaktör parçaları.



Şekil 3.2 : Solidde çizilen model.

Şekil 3.2'deki model, bir distilasyon sisteminin tamamını gösteriyor. Sistem, karışımları bileşenlerine ayırmak için kullanılan kimyasal mühendisliği ekipmanıdır. Modelin çeşitli öğeleri şunlardır:

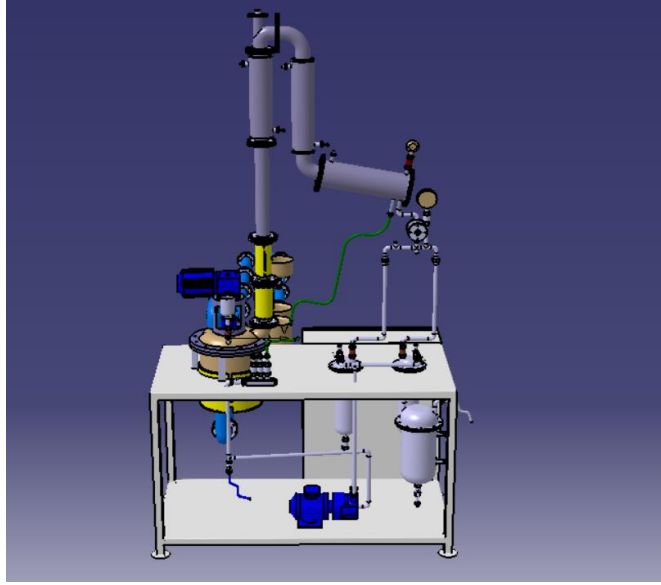
- Distilasyon Kolonu: Modelin merkezinde yüksek bir kolon bulunuyor; bu, distilasyon işleminin gerçekleştiği yerdir.
- Isıtıcı ve Pompa: Reaktörün gövdesine sarılı sarmal rezistanslı ısıtıcı, eşanjör çıkışının alt noktasında ise bir vakum pompası vardır.
- Kontrol Paneli: Sistemin önünde yer alan kontrol paneli, işlemi denetlemek için kullanılan düğme ve göstergeleri içerir.
- Basınç Göstergeleri: Sistemdeki basıncı izlemek için kullanılan göstergeler, kolonun yanında dikey olarak yerleştirilmiştir.
- Tübüler Reaktör Boruları: Sisteme giriş ve çıkış sağlayan katalizör dozajı sonrası parçalanma reaksiyonun olduğu mavi borulardır. Bu borular, distilasyon kolonuna giren ve kolondan çıkan akışkanları taşır.
- Bağlantı Noktaları: Sistemin tamamında, akışkan veya gazların kaçağı için kullanılan flanşlı bağlantı noktaları bulunur.
- Katalizör Tankları: Kahve rengi tanklar katalizör stok tanklarıdır. Yeterli miktarda katalizör çözeltisi bu tanklara konularak sistemin vakumu altında istenilen dozajda (vana ayarı ile) tübüler reaktöre beslenmektedir.

Bu model, kimyasal mühendisliği öğrencileri veya profesyonelleri için eğitim amaçlı kullanılabilir ya da gerçek bir sistem tasarımı ve montajı için ön hazırlık olarak kullanılabilir. Mühendislik tasarım sürecinin bir parçası olarak, bu modelleme, ekipman düzeni, proses akışları ve sistemin nasıl çalışacağı hakkında değerli bilgiler sağlar. Bu tür modeller, gerçek bir sistem inşa edilmeden önce, tasarımın işlevselliğini ve etkinliğini değerlendirmek için kullanılır.

3.2.2. Distilasyon ünitesi

Reaktör-Distilasyon ünitesi, çok fazla ısıya maruz kaldığından tamamen paslanmaz çelik 306 malzemeden imal edilmiştir.

Tübüler reaktörün ardından parçalanmış hidrokarbonlar, mevcut pilot distilasyon ünitesine aktarılmış ve fraksiyonel ayrıştırma işlemine tabi tutulmuştur.



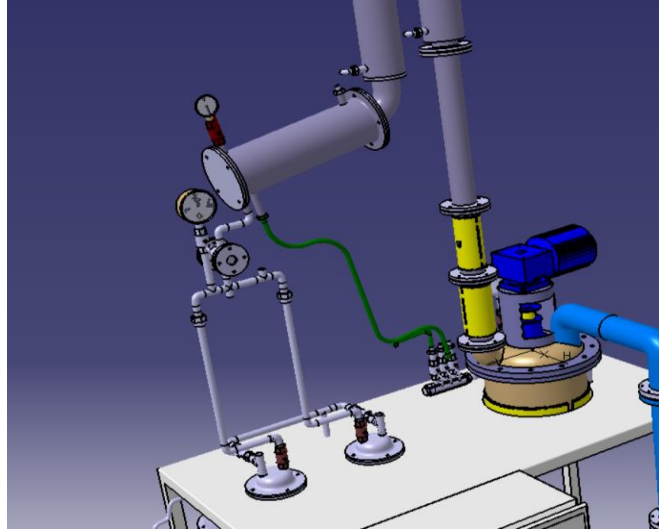
Şekil 3.3 : Solidde çizilen model-1.

Şekil 3.3. bir distilasyon sisteminin bilgisayar tarafından oluşturulan bir 3D modelini gösteriyor. Bu model, kimya ve süreç mühendisliği alanlarında kullanılan bir pilot ölçekli distilasyon kolonunun tasarımını temsil etmektedir.

- Distilasyon Kolonu: En üstte, sarı ve gri dikey hat distilasyon kolonudur. Bu, karışımların bileşenlerine ayrıldığı ana bölümdür.
- Soğutma Sistemleri: Resmin üstünde yatay gri renkli su soğutmalı boru tip eaşanjördür. Hidrokarbon buharlarının yoğunlaşarak likit fazda toplama tüplerine aktarılması için design edilmiştir.
- Pompa: Mavi renkteki nesne, 0-750 mmbar arası çalışan vakum pompasıdır.
- Kontrol Vanaları ve Ölçüm Cihazları: Çeşitli kontrol vanaları ve basınç göstergeleri sistemin kontrolü ve izlenmesi için önemlidir.
- Rezervuarlar: Altta, sıvının depolandığı rezervuarlar yer almaktadır.

3D model, gerçek bir sistem inşa etmeden önce, tasarım ve mühendislik ekiplerine sistemin nasıl çalışacağı, bileşenlerin nasıl yerleştirileceği ve sistem dinamiklerinin nasıl olacağı hakkında fikir verir. Bilgisayar modelleri aynı zamanda maliyet hesaplaması, malzeme seçimi ve proses optimizasyonu gibi önemli kararların alınmasında yardımcı olur.

Bu tip modeller, gerçek dünya uygulamalarına geçmeden önce hata ayıklama, eğitim ve sunum amaçları için de kullanılabilir. Mühendisler ve tasarımcılar, bu modeller aracılığıyla potansiyel problemleri önceden görebilir ve çözümler geliştirebilirler.



Şekil 3.4 : Solidde çizilen model.

Şekil 3.4 görseli, distilasyon sisteminin ölçüm ve kontrol bileşenlerini içeren bir bölümünü gösteriyor. Aşağıdaki bileşenler ve özellikler öne çıkıyor:

- Basınç Göstergeleri: İki boru arasında üst üste yerleştirilmiş ve sistem içindeki basıncı ölçen cihazlar.
- Vana ve Bağlantılar: Borular üzerindeki vanalar, akışın kontrol edilmesine olanak tanır. Boruların bağlantı noktaları, sistemin farklı bölümleri arasında uygun sızdırmazlığın ve akışkan geçişinin sağlanmasına yardımcı olur.
- Yeşil Boru: Bu, bir drenaj hattı veya kimyasalın aktarımını sağlayan bir boru olabilir. Renk kodlaması, sistem içindeki farklı medya veya akışkanlar için kullanılmıştır.
- Manifold: Birden fazla giriş veya çıkışı olan ve muhtemelen ölçüm veya dağıtım amaçlı kullanılan boru yapılarıdır.

Bu öğelerin her biri, distilasyon sisteminin verimli bir şekilde çalışması ve kontrol edilmesi için önemlidir. Basınç göstergeleri, sistemin güvenli çalışma parametrelerinde olup olmadığını anlamak için kritik öneme sahiptir. Boru bağlantıları ve vanalar, proses sırasında farklı akışkanların yönlendirilmesi ve izole edilmesi için kullanılır.

Bu model, mühendislerin ve tasarımcıların sistemi analiz etmeleri ve gerçek bir kurulum gerçekleştirmeden önce gerekli ayarlamaları yapmaları için kritik bir rol oynar. Modelleme ayrıca, eğitim, sunum ve proje planlama aşamalarında da kullanışlıdır.

Solid de tasarlanan modele bire bir uyarlı olan ve imal edilen prototip reaktör ve distilasyon ünitesine ait detaylı görüntüler de aşağıda sunulmuştur



Şekil 3.5 : Tasarımı yapılan reaktör.

Şekil 3.5’ de prototip pilot ölçekli olarak yapılmış olan sistem görülmektedir.

Resimdeki sistem aşağıdaki bileşenlerden oluşmaktadır:

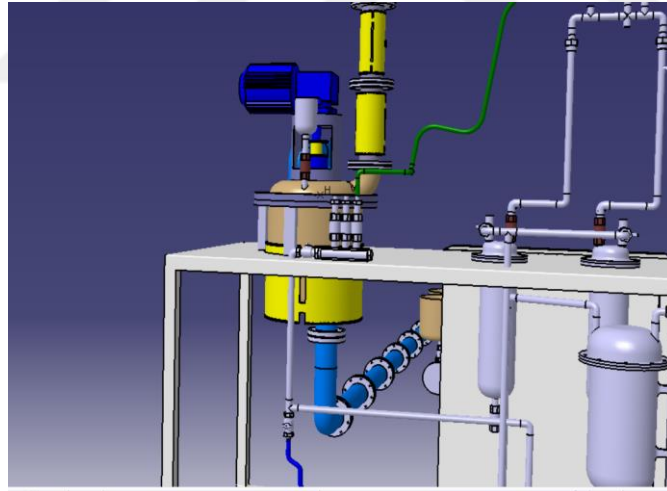
- Bir destilasyon kolonu: Karışımdan buharları ayırmak ve yoğunlaştırmak için kullanılır. Kolonun üst kısmındaki borular ve valfler, buhar akışını kontrol etmeye yarar.
- Sarmal resisitanslı ısıtıcı: CSTR reaktörün gövdesinde ve Tübüler reaktörün etrafına sarılı sıcaklık kontrollü 0-450 °C arasında çalışan sarmal elektrikli resistans ham maddeyi ısıtmak ve buharlaştırmak için kullanılan bir ısıtma elemanı.
- Çeşitli boru ve bağlantılar: Bu sistemde, buhar ve sıvı akışlarını yönlendirmek ve kontrol etmek için kullanılan borular ve bağlantılar.
- Kontrol paneli: Aygıtın sol alt köşesinde duran ve sıcaklık, basınç gibi parametreleri ayarlamak için kullanılan düğmeleri ve göstergeleri içeren bir kontrol paneli.

Bu tip bir distilasyon sistemi, kimyasal mühendisliği araştırmalarında, yeni süreçlerin geliştirilmesinde veya mevcut işlemlerin optimizasyonunda kullanılabilir. Pilot ölçekli sistemler, endüstriyel ölçekte uygulanmadan önce süreçlerin test edilmesi ve validasyonu için önemlidir. Yüksek ölçekli distilasyon sistemleri genellikle çok daha büyük ve karmaşık olup, rafinerilerde ve kimya tesislerinde bulunur.

3.2.3. CSTR reaktör ünitesi

Şekil 3.6'daki model görüntüsünde, üzerinde mavi renkle gösterilen hız kontrollü karıştırıcılı, alt sarı kısım sarmal rezistanslı ısı kontrollü ısıtma sistemini gösteren CSTR tipi 20 lt hacimli 306 paslanmaz krom dan vakum kontrollü reaktörü göstermektedir.

- Mavi Motor ve Sarı Ekipman: Mavi motor sürücü kontrollü motor redüktör sarı ekipmana sarmal rezistansı göstermektedir.
- Yeşil Boru: Eşanjör soğutma suyu hattıdır
- Mavi Boru ve Bağlantı Elemanları: Tübüler reaktör hattını göstermektedir..

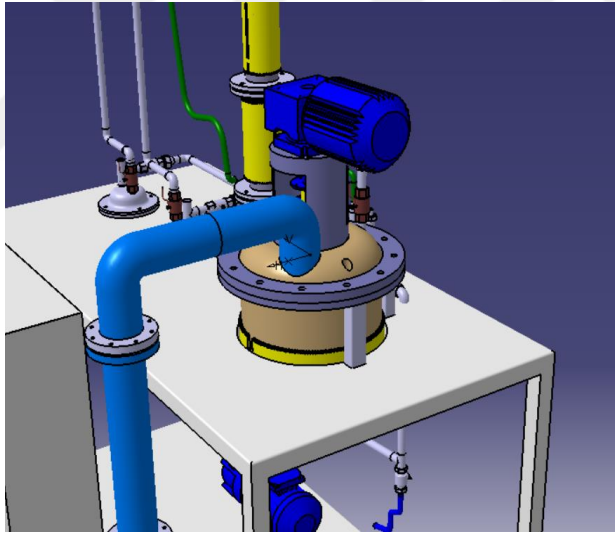


Şekil 3.6 : Solidde çizilen model.

Bu model, distilasyon işlemi için kritik olan sıcaklık ve basınç gibi parametreleri kontrol etme ve ayarlama yeteneğini gösterir. Modelin detayları, bir mühendislik ekibinin sistemi analiz etmesine, gerekli düzenlemeleri yapmasına ve ekipmanın gerçek dünyadaki uygulamalar için nasıl bir araya getirileceğini anlamasına yardımcı olur. Bu tür modeller aynı zamanda eğitim, gösteri ve işlem planlaması için de kullanışlıdır.

Şekil 3.6’ da bir distilasyon sisteminin parçası olan 3D modelin bir bölümünü gösteriyor. Bu çizimde mekanik bir karıştırıcı, CSTR reaktör ve pompa gibi mekanik bileşenler görülmektedir.

- Mavi Motor: Modelin üst kısmında görülen mavi motor, büyük ihtimalle bir pompa veya karıştırıcı motorudur. Bu tür motorlar, sıvıyı distilasyon kolonuna pompalamak veya karışımı homojen tutmak için kullanılır.
- Sarı ve Mavi Borular: Sistemdeki sıvı veya gaz akışını yönlendiren borulardır. Sarı boru, belki de gelen veya giden gazlar için bir hattı temsil etmektedir.
- Flanş ve Cıvatalar: Görüntünün orta kısmında, bir birleşme noktasını veya bakım ve temizlik için erişim sağlayan bir girişi gösteren bir flanş bulunmaktadır.
- Vanalar ve Bağlantı Noktaları: Sistemin çeşitli noktalarında yer alan vanalar ve bağlantı noktaları, akış kontrolü ve bakım için önemlidir.



Şekil 3.7 : Solidde çizilen model.

Bu tür 3D modeller, gerçek montaj öncesinde mühendislerin ve teknisyenlerin ekipmanın nasıl bir araya getirileceğini, montaj sırasında karşılaşılabilecek olası sorunları ve bakım gerekliliklerini anlamalarını sağlar. Modelleme, karmaşık endüstriyel sistemlerin planlanması ve tasarımı için kritik bir adımdır ve genellikle gerçek dünya uygulamalarına geçiş yapmadan önceki prototipleme ve test aşamalarında kullanılır.

3.3. Test Cihazları

3.3.1. FTIR testi

Fourier Dönüştümlü Kızılötesi Spektroskopisi (FTIR), bir tür titreşim spektroskopisidir. FTIR yöntemi ile ışığın infrared yoğunluğuna karşı dalga sayısını ölçen bir kimyasal analitik yöntemdir. Elektromanyetik ışık dizisinin kızıl ötesi bölgesi 14000 cm^{-1} ile 10 cm^{-1} arasındadır ve yakın dalga boylu kızıl ötesi (NIR; $4000\sim14000\text{ cm}^{-1}$), orta dalga boylu kızıl ötesi (MIR; $400\sim4000\text{ cm}^{-1}$) ve uzak dalga boylu kızıl ötesi (FIR; $4\sim400\text{ cm}^{-1}$) olmak üzere üç ana bölgeden oluşmaktadır. IR ışınları molekülün titreşim hareketleri tarafından soğurulmaktadır. FTIR spektroskopisinde ışıma şiddeti, zamanın bir fonksiyonu olarak alınır. Her boyunu ayrı ayrı tarama gerekmeksizin hızlı ve yüksek çözünürlükte spektrumlar elde edilebilir. Bu yöntem ile, moleküler bağ karakterizasyonu yapılarak; katı, sıvı, gaz veya çözelti halindeki organik bileşiklerin yapısındaki fonksiyonel gruplar, iki bileşiğin aynı olup olmadığı, yapıdaki bağların durumu, bağlanma yerleri ve yapının aromatik ya da alifatik olup olmadığı belirlenebilir.



Şekil 3.8 : FTIR test cihazı.

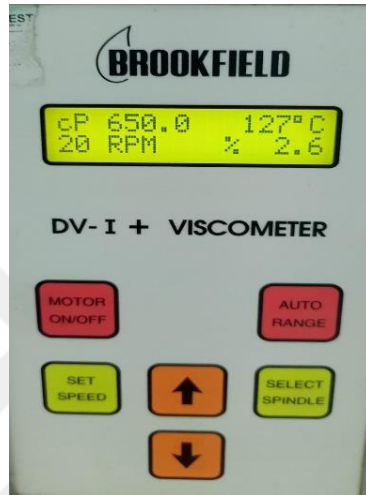
FTIR Malzeme Karakterizasyonu için en sık kullanılan yöntemlerden biridir. Analiz süresinin kısa olması, elde edilen detaylı bilgiler, analizleri gerçekleştirmek için herhangi bir sarf malzeme maliyetinin olmaması bu yöntemi oldukça avantajlı kılmaktadır.

3.3.2. Vizkozite

Vizkozite ölçümleri için kullanılan sıcaklık kontrollü DV-I + VISCOMETER cihazıyla, hammadde ve kalıntı gibi ürünlerin vizkozitesi çeşitli sıcaklıklarda ölçülmüştür. Bu cihaz özellikle siyah ve viskoz ürünlerde etkili ölçümler yapabilen bir yapıya sahiptir. Her bir ölçüm için cihazdan elde edilen veriler arasında sıcaklık,

vizkozite ve spindelin dönüş hızı (RPM) ile akışkana uygulanan tork yüzdesi bulunmaktadır. Şekil 3.9'da, bu cihazın bir görüntüsü sunulmaktadır.

Bu iki ürünün vizkozite ölçümleri için sıcaklık kontrollü DV-I +VISCOMETER kullanılmış olup, ürünlerin değişik sıcaklardaki ölçümü için özellikle siyah ve vizkoz ürünlerde etkili ölçümler yapabilen bir cihaz olup burada her bir ölçüm için cihazdan; sıcaklık, vizkozite ve spindelin dönüş hızı RPM ile akışkana uygulanan tork yüzdesinin okunması mümkündür.



Şekil 3.9 : Brookfield vizkometre cihazı.

Elde edilen destilatın vizkozite ölçümleri için Saybolt Vizkozimetre kullanılmıştır.

Saybolt Viskozimetre, petrol ürünleri viskozitelerinin tanımlı sıcaklıklarda ölçülmesinde kullanılan özel bir cihazdır. Deneyde, belirli bir sıcaklıktaki 60 ml numunenin, tanımlı çaptaki bir delikten (furol veya iniversal) akma süresi saniye cinsinden ölçülür.

Vizkozite ölçümleri için kullanılan sıcaklık kontrollü DV-I + VISCOMETER cihazıyla yapılan analizler, hammadde ve kalıntı gibi ürünlerin viskozitesini çeşitli sıcaklıklarda belirlemek için kullanılır. Bu cihaz özellikle siyah ve viskoz ürünlerde etkili ölçümler yapabilen bir yapıya sahiptir. Her bir ölçümde cihazdan elde edilen veriler arasında sıcaklık, vizkozite ve spindelin dönüş hızı (RPM) ile akışkanın uygulanan tork yüzdesi bulunmaktadır.

Öte yandan, destilatın vizkozite ölçümleri için Saybolt Vizkozimetre kullanılır. Saybolt Viskozimetre, petrol ürünlerinin viskozitelerini belirli sıcaklıklarda ölçmek için tasarlanmış bir cihazdır. Bu cihazda, belirli bir sıcaklıkta 60 ml numunenin tanımlı çaptaki bir delikten akma süresi saniye cinsinden ölçülür.

Her iki yöntem de farklı viskozite ölçüm tekniklerini kullanır ve farklı tipteki ürünlerin viskozitesini belirlemek için uygundur. DV-I + VISCOMETER daha geniş bir viskozite aralığında ve daha hassas ölçümler yapabilirken, Saybolt Vizkozimetre petrol ürünlerinin spesifik viskozitesini belirlemek için daha yaygın olarak kullanılır. Bu nedenle, analiz yapılacak malzemenin özelliklerine ve amaçlarına bağlı olarak uygun olan yöntemin seçilmesi önemlidir.

3.3.3. Yoğunluk

Yoğunluk ölçümlerinde bomemetre kullanılmıştır. Bomemetre, sıvıların kaldırma prensibine göre çalışan bir yoğunluk ölçme cihazıdır. Sabit sıcaklıkta akışkanın içerisine ilgili aralıktaki bomeler konularak yoğunluklar tespit edilir.



Şekil 3.10 : Bomemetre cihazı.

3.3.4. Parlama noktası

Gerek hammadde gerekse diğer ürünlerin parlama noktası tayinlerinde Cleveland Açık Kap Test cihazı kullanılmıştır. Maksimum parlama sıcaklığını belirlemek için, açık alev varlığında ani flaş tehlikesi olmadan malzemelerin güvenli ısıtılarak çıplak alevdeki tutuşma noktalarının tespiti yapılır.



Şekil 3.11 : Cleveland açık kap test cihazı.

3.3.5. Donma noktası

Akışkanın sıcaklık kontrollü bir hazneye belirli bir miktarda konularak kademeli olarak sıcaklığın düşürülmesi ve bu esnada akışkanın donma noktasına geçişi gözle izlenerek ilgili sıcaklığın test edilmesine dayanır. Cihaz $-50\text{ }^{\circ}\text{C}$ 'ye kadar ölçüm yapabilmektedir.



Şekil 3.12 : Donma ölçüm cihazı.

3.4. Yöntem ve Tasarım Hesaplamaları

3.4.1. Yöntem

Bu çalışma iki aşamalı bir yöntemle yürütülmüştür.

- 1: Laboratuvar ölçeğindeki 1 kg lık batch reaktörde öncelikle ham madde ve katalizörün sıcaklık değişimine paralel olarak kinetik davranışları tespit edilmiştir. Bu deneysel tasarım yolu ile katalizörün optimal kullanım oranı katalizör ile ham madde arasında meydana gelen reaksiyon sıcaklıkları tespit edilmiş ve böylece tasarımı ve sonrasında imalatı yapılmış olan prototip CSTR ve tübüler reaktörler için gereken aktivasyon sıcaklıkları (Enerjileri) tespit edilmiştir.

1 kg'lık lab ölçekli kesikli tip reaktörde ki çalışmalarda şunlar hedeflenmiş ve tespit edilmiştir.

1. Reaksiyon sıcaklığı ve aktivasyon enerjisinin belirlenmesi.
2. Proses veriminin tespit edilmesi.
3. Tübüler reaktör tasarım parametrelerinin belirlenmesi.
4. Yaklaşık katalizör oranının tespiti.

- 2: Lab ölçeğinde tespit edilmiş kinetik parameteler ve aşağıdaki algoritma doğrultusunda Prototip CSTR ve tübüler reaktör tasarımının ve imalatının yapılarak çalıştırılması ve aşağıda ki tasarım hedeflerinin elde edilmesi.

Burada ortaya konulan deneysel tasarım algoritması aşağıdaki gibidir:

A. Değişken ham madde debisi ve aşağıdaki sabitlerde

1. Verim
2. Üretim zamanı
3. Ürün kalitesi

tespit edilmiştir. Bu tespitlerde, sabit hacim ve sıcaklıktaki reaktörden geçen optimal debi belirlenmiştir.

1. Distilasyon ünitesi ve kolonu sabit hacim ve yükseklikte tutulmuştur.
2. Distilasyon kolonu içi boş bırakılmıştır.
3. Tübüler reaktör boyu sabitlenmiştir: 8 m
4. Tübüler reaktör çapı sabitlenmiştir: 2"
5. Besleme tankları sıcaklığı sabitlenmiştir: 200 °C
6. Tübüler reaktör sıcaklığı sabitlenmiştir: 370 °C
7. Katalizör oranı sabitlenmiştir. (%0,8)

B. Optimal debi geçişi tespit edildikten ve sabitlendikten sonra

1. Katalizör oranı (%0,8)
2. Katalizör besleme sıcaklığı (200 °C)

Tespit edilmiştir.

Tasarım hedeflerimiz şunla olmuştur:

1. Reaksiyon dönüşümünü verim olarak %40'tan %70'e çıkarmak.
2. Reaktör tipini, CSTR ve sürekli tübüler olarak en etkin şekilde modellemek.
3. Mikron boyutlu FCC katalizör partiküllerinin çeşitli ortamlarda çözelti haline getirilerek nano boyutta kullanımını sağlamak.
4. Katalizör geri kazanımını ortadan kaldırmak.

3.4.2. Tasarım hesaplamaları

3.4.2.1. Eşanjör hesaplamaları

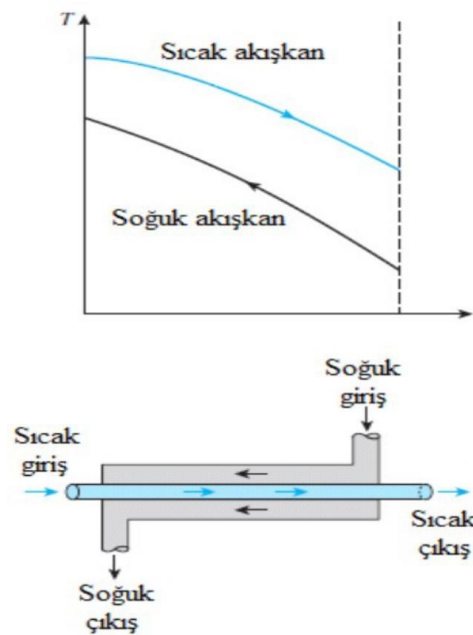
Şekil 3.13 'de bir ısı değiştirici ve akışkanların sıcaklık değişimlerini gösteren bir sıcaklık-entropi (T-s) diyagramını içeriyor. İki temel kısım var:

Üst Kısım: T-s Diyagramı

- "Sıcak akışkan" ve "Soğuk akışkan"ın sıcaklık değişimleri birbirine zıt yönde gösteriliyor. Sıcak akışkanın sıcaklığı azalırken, soğuk akışkanın sıcaklığı artıyor. Bu, ısı değiştiricinin sıcak akışkandan soğuk akışkana enerji aktardığını gösteriyor.
- Akışkanların eğrileri, sıcak akışkanın sıcaklığının her zaman soğuk akışkandan daha yüksek olduğu şekilde çizilmiştir, bu da karşı akışlı bir ısı değiştirici olduğunu gösterebilir.

Alt Kısım: Isı Değiştirici Şematik Gösterimi

- Isı değiştiricinin şematik gösterimi, sıcak ve soğuk akışkanların karşı yönlere akış yönlerini gösteriyor. Sıcak giriş ve çıkışın bir tarafında, soğuk giriş ve çıkışın ise karşı tarafında olduğu bir karşı akış düzeni tasviri mevcut.
- Bu tür bir düzen, ısı transferinin daha verimli olmasını sağlar çünkü akışkanlar boyunca sıcaklık farkı daha yüksek ve daha sabit kalır.



Şekil 3.13 : Ters akış akışkanlı ısı değiştirici.

Genel olarak, bu tür diyagramlar ve şematikler, mühendislikte ısı değiştirici tasarımı ve analizi için kullanılır. Enerji verimliliği ve transfer etkinliği açısından kritik olan bu bilgiler, ısı değiştiricinin boyutlandırılması ve işletme koşullarının belirlenmesinde önemlidir.

Eşanjör hesaplamalarında eşanjör tipi gövde tipi olduğu için hesaplamalar gövde tipine göre yapılmalıdır. Gövde tipi ısı değiştirici, ters ve düz akım şeklinde iki gruba ayrılmaktadır. Yapılan ısı değiştirici ters akışlı olduğu için giren yağ su akışına ters yönde hareket etmektedir. Bu nedenle yapılan işlemler aşağıda adım adım açıklanmıştır.

Verilenler:

$$T_{sg} = 25^{\circ}C \quad T_{sç} = 40^{\circ}C \quad T_{yg} = 50^{\circ}C \quad T_{sç} = 180^{\circ}C$$

$$Q_{yağ} = \dot{m}_{yağ} * C_{p_yağ} * \Delta T_{yağ} \quad (4.1)$$

$$Q_{yağ} = \dot{m}_{su} * C_{p_su} * \Delta T_{su} \quad (4.2)$$

$$Q_{yağ} = Q_{su} = Q \quad (4.3)$$

Enerjinin korunumu yasasına göre enerji kaybolmaz; var olan enerji başka bir enerji türüne dönüşebilir.

$$\Delta T_{yağ} = T_{yç} - T_{yg} \quad \Delta T_{su} = T_{sç} - T_{sg} \quad (4.4)$$

$$\Delta T_{yağ} = 130^{\circ}C$$

$$\Delta T_{su} = 15^{\circ}C$$

(4.2) numaralı denklemde verilenler yerine konulduğunda;

$$Q = Q_{su} = 100 * 4,19 * 15 = 6285 \text{ w} \quad (4.5)$$

$$\dot{m}_{yağ} = \frac{628,5}{2,2*130} = 21,96 \text{ kg/Saat} \quad (4.6)$$

4.6 ve 4.5 numaralı denklemde Q ve yağın kütleli debisinin bulunmasıyla; U ve A ve ΔT_{lm} 'nın hesaplanması gerekir.

Verilen değerler:

$$A=0,5\text{m} \quad (\text{bir borunun iç yüzey alanı})$$

$$r=0,00785\text{m} \quad (\text{yarıçap})$$

$$Q = U * A * \Delta T_{lm} \quad (4.7)$$

U=Toplam ısı katsayısı

U tablodan bakıldığında ortalama $150 \text{ W} / (\text{kg}^\circ\text{C})$

$$\Delta T_{lm} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2} \right)} \quad (4.8)$$

$$\Delta T_1 = T_{yg} - T_{sç} = 140^\circ\text{C} \quad \Delta T_2 = T_{yç} - T_{sg} = 25^\circ\text{C}$$

4.8 numaralı ortalama logaritmik sıcaklık formülünde değerler yerine konulduğunda;

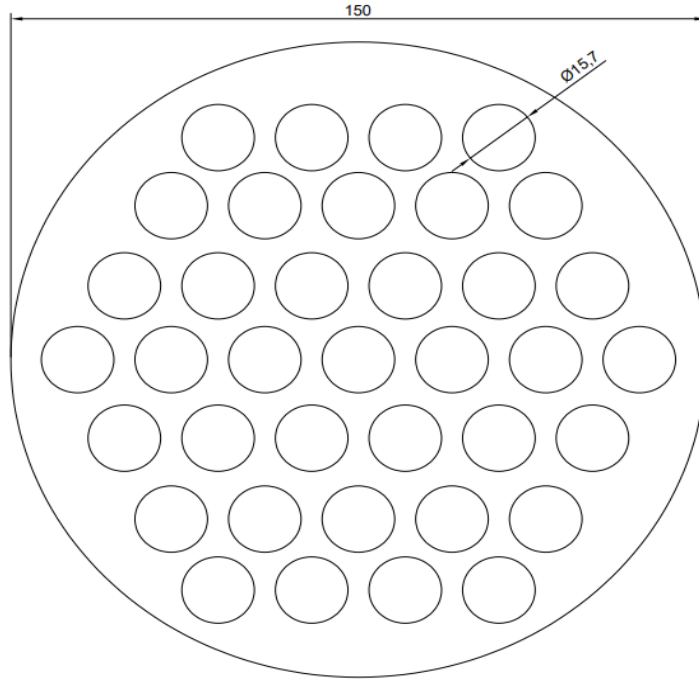
$\Delta T_{lm} = 66,75^\circ\text{C}$ çıkmaktadır.

n= boru adeti olmak üzere;

$$A = \frac{Q}{U * \Delta T_{lm}} = \frac{6285}{150 * 66.75} = 0.63 \text{ m}^2 \quad (4.9)$$

$$A = 2 * \pi * r * L * n \rightarrow n = \frac{A}{2 * \pi * r * L} = \frac{0.63}{2 * 3.14 * 0.00785 * 0.5} = 24 \text{ adet boru} \quad (4.10)$$

1.5 emniyet katsayısı ile çarpıldığında yaklaşık 37 adet boru bulunmaktadır.



Şekil 3.14 : Boru yerleştirme modeli.

37 borulu bir eşanjör, Şekil 3.14' de görüldüğü gibi çizim programı kullanılarak çizildi ve eşanjörün gereken dış çapı hesaplandı. Hesaplama sonucunda eşanjör gövdesinin dış çapının 15 cm olduğu belirlendi.

3.4.2.2. Tübüler reaktör boyu hesaplanması

$$Q_v = \frac{Q_m}{\rho} = \frac{m^3}{\text{saat}}$$

$$V = \frac{Q_v}{A} = m/\text{saat}$$

$$V = \frac{L}{t} m/\text{saniye}$$

$$A = \pi r^2 (m^2)$$

$$L = R$$

Bu denklemler akışkanların hızını ve debisini hesaplamak için kullanılır.

Bu denklemler, akışkanların hareketini ve ısı değiştiriciler, borular veya diğer süreç ekipmanlarındaki davranışını modellemek için kullanılır. Mühendislikte bu hesaplamalar, sistemin tasarımı ve analizi için temel taşları oluşturur.

$$\rho = \text{Akışkan yoğunluğu } (T^{on}/m^2)$$

$$Q_m = \text{Kütlesel debi } (T^{on}/\text{saat})$$

$$Q_v = \text{Hacimsel debi } (m^3/\text{saat})$$

$$V = \text{Akışkanın Reaktör içindeki hızı } (m/\text{saat})$$

$$L = \text{Reaktör boyu}$$

Hesaplamalar

$$Q_v = \frac{Q_m}{\rho} = m^3/\text{saat}$$

$$V = \frac{Q_v}{A} = \frac{m^3/\text{saat}}{m^2} = \frac{m}{\text{saat}}$$

$$L = \frac{Q_v}{A} \cdot t$$

- $t = 1$ saat (Reaksiyon Süresi)
- $R = 0.0762$ metre
- $r = 0.0381$ metre

- $A=\pi r^2=3,14*0,0381=0,004558$
- $\rho=0,94 \text{ gr/cm}^3$
- $Q_m = 10 \text{ kg/saat}$ Boru içine pompalanan akışkan miktarı, (saat)
- $Q_v = \frac{Q_m}{\rho} = \frac{10}{940}, Q_r = 0,0106 \text{ m}^3/\text{saat}$
- $Q_v = \frac{Q_v}{\rho} = \frac{0,0106}{0,004558} = 2,32 \text{ m/saniye}$
- $L=V.t$
- $L=2,32*1,20=2,754 \text{ m}$

Boru içine pompalanması gereken madde iki katına çıkarılması durumunda

$$Q_m = 20 \frac{\text{Ton}}{\text{saat}} \text{ durumunda;}$$

$$Q_v = \frac{20}{940} = 0,0212 \text{ m}^3/\text{saat}$$

$$V = \frac{Q_v}{A} = \frac{0,0212}{0,004558}$$

$$4,65 \text{ m/saniye}$$

$$L=V.t$$

$$L=4,65*1,2=5,58 \text{ m}$$

Tablo 3.2 : Reaktör boy hesabı.

REAKTÖR TASARIMI			
Reaksiyon Süresi	saat	1,20	
Isınma Süresi (360 °C)	saat	1,00	
Reaktör Çapı	m	0,0779	
Reaktör Yarı Çapı	m	0,0390	
Reaktör Kesit Alanı	m ²	0,0048	A
Yoğunluk Ton/M3		0,9400	
Debi	Ton/Saat	0,020	20 kg/saat
Debi	m ³ /Saat	0,0217	Q _v
Hız	m/saat	4,56	*
Reaktör Boyu	m	5,48	

3.4.2.3. Tubuler reaktör tasarımı

Yukarıda elde edilen deneysel tasarım sonuçlarına göre, ekte verilen resimlerle açıklanan tübüler reaktör tasarımı gerçekleştirilmiştir.. Katalizör, reaktöre belirlenen reaksiyon sıcaklığında (370°C) otomatik olarak debiye göre dozajlanmış ve en az dozajlama sonrasında bir saat boyunca reaktörde kalarak parçalanmayı yapmıştır. Süre sonunda parçalanmış hidrokarbonlar yine sürekli bir şekilde distilasyon ünitesine beslenerek hafif ürünlerin ayrışması sağlanmış ve gereken verim hesapları yapılmıştır.

Elde edilen deneysel tasarım sonuçlarına göre örnek vermek gerekirse, 10 Ton/Saat ham madde debisinde ve 0,3 m reaktör çapında tübüler reaktörün optimal boyu 154 m iken, aynı debide fakat 0,5 m reaktör çapında reaktörün optimal boyu 55 m olarak belirlenmiştir. Farklı çap ve debilere sahip olarak elde edilen etkin 1 saatlik reaksiyon süresi boyunca değişen reaktör boyları Tablo 4.6 'da verilmiştir.

Statik mikserli olarak tasarlanan tübüler reaktörün örnek resimleri aşağıda sunulmuştur.

Kraking reaktörleri, petrokimya ve rafineri sektörlerinde ağır hidrokarbonları daha hafif fraksiyonlara bölmek için kullanılır. Tasarımı genellikle sıkı malzeme bilimi, akış dinamikleri ve ısı transferi prensiplerini gerektirir.

Bu ekipmanların ölçeklendirilmesi ve tasarımı, prosesin gereksinimlerine ve verimliliğine göre değişir ve genellikle karmaşık mühendislik hesaplamalarını içerir. Herhangi bir reaktör tasarımında güvenlik, verimlilik ve ekonomiklik anahtar faktörlerdir. Tasarımın başarılı olabilmesi için bu faktörlerin tamamı dikkatlice analiz edilmiştir.



4. DENEYSEL BULGULAR VE SONUÇLAR

4.1. Laboratuvar Ölçeğinde 1 Kg lık Reaktröde Yapılan Çalışmalar

Katalizörlerin etkisini değerlendirmek için kullanılan deneyler arasında önemli farklar bulunmaktadır. Bu farklar, deneylerin yapıldığı koşullar, ölçüm noktaları ve kullanılan metotlar açısından ortaya çıkar.

Deney-1, tepkime sıcaklığındaki değişimleri belirli sıcaklık değerlerinde gözlemlemek için yapılmıştır. Özellikle belirli sıcaklık değerlerindeki notlar, tepkimenin dinamiklerini ve katalizörün etkisini vurgulamaktadır. Tahmin edilen sıcaklık değerleri, verilerin eksik olduğu noktalarda sonuçları tamamlamak için kullanılmıştır.

Deney-2, tepkime sürecindeki sıcaklık değişimini sürekli olarak izlemek için tasarlanmıştır. Sıcaklık verileri, belirli aralıklarla ölçülerek katalizörün etkisi zaman içinde gözlemlenmiştir. Bu deneyde, katalizör eklenmesinin sıcaklık değişimine olan etkisi açıkça görülmektedir.

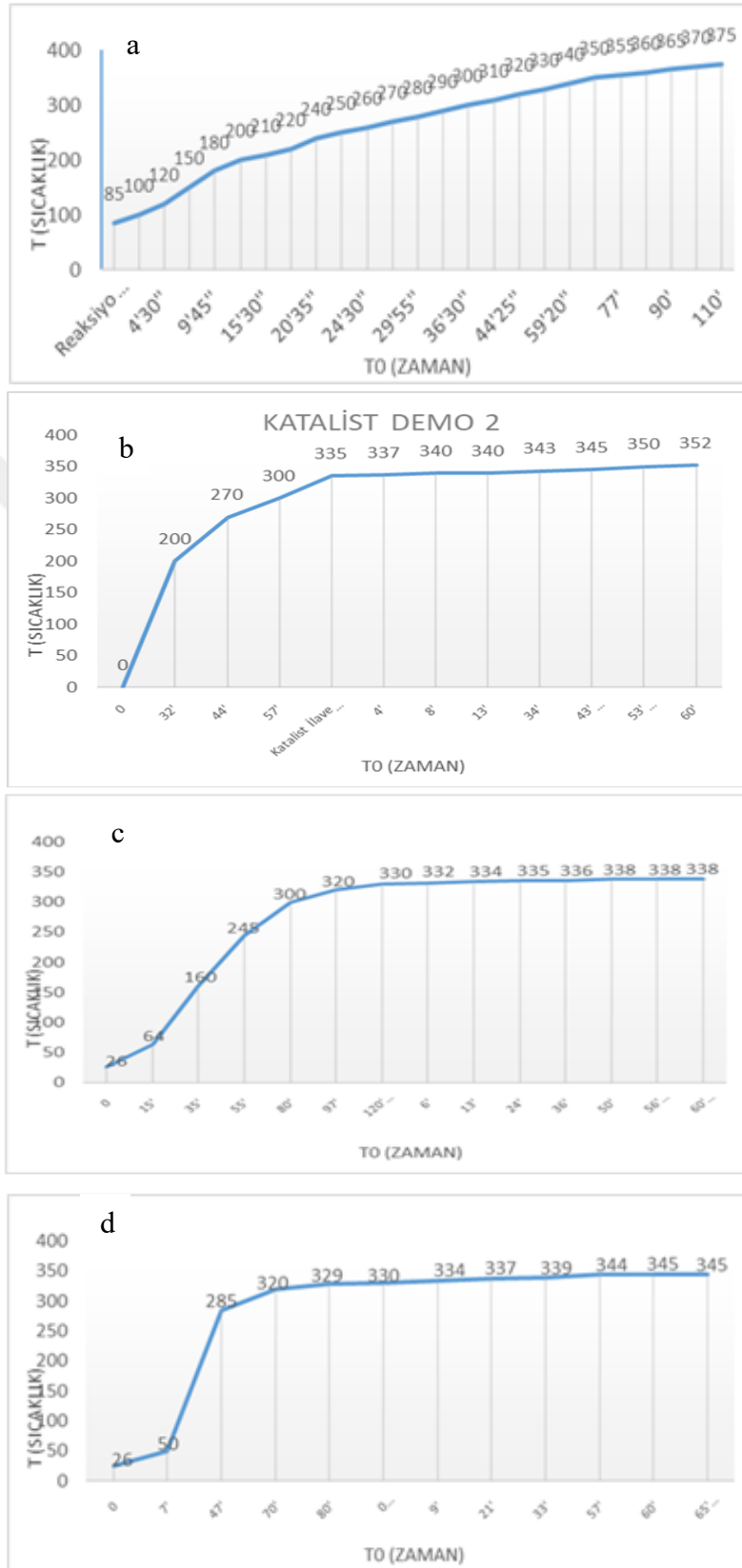
Deney-3, katalizör eklenmesinin tepkimenin ilerleyişine nasıl etki ettiğini anlamak için yapılmıştır. Ölçüm noktaları ve sıcaklık değerleri, tepkimenin farklı aşamalarındaki değişiklikleri belirlemek için kullanılmıştır. Katalizörün etkisi, sıcaklık verilerinin zamanla nasıl değiştiğine dayalı olarak değerlendirilmiştir.

Deney-4, katalizör eklenmesinin sıcaklık-zaman grafiğine olan etkisini belirlemek için yapılmıştır. Bu deneyde, katalizörün etkisi zaman içindeki sıcaklık değişimiyle doğrudan ilişkilendirilmiş ve tepkime sürecinin tamamlanmasına olan etkisi incelenmiştir.

Bu metotlar, katalizörlerin tepkime süreçlerine olan etkilerini anlamak için farklı açılardan yaklaşmaktadır. Ölçüm noktaları, sıcaklık değerleri ve kullanılan metotlar, her bir deneyin sonuçlarını yorumlamada önemli rol oynamaktadır.

Grafiklerde sunulan veriler, farklı ağırlıktaki katalizör deneylerinin zaman içindeki sıcaklık değişimlerini göstermektedir. Her grafik, tepkimenin farklı aşamalarını ve katalizör eklenmesinin etkilerini göstermektedir. Yorumlar, grafiklerdeki önemli

noktaları ve notları açıklamakta ve bu notlar, tepkimenin dinamikleri hakkında bilgi sağlamaktadır.



Şekil 4.1 : Katilizör ortamında zamana göre sıcaklık değişimi.

Örneğin, Şekil 4.1'deki notlar, belirli sıcaklık noktalarındaki değişimleri açıklar. 120 °C'de tepkime hızındaki artış, 220 °C'de kabarma azalması gibi. Bu notlar, tepkimenin farklı sıcaklık ve zaman noktalarında nasıl değiştiğini ve katalizör eklenmesinin bu değişimleri nasıl etkilediğini göstermektedir.

Benzer şekilde, diğer grafiklerde de katalizör eklenmesinin sıcaklık ve tepkime hızı üzerindeki etkileri gösterilmektedir. Katalizör eklenmesiyle sıcaklıkta hızlı bir artış gözlemlenirken, belirli bir noktadan sonra tepkime hızı yavaşlamış ve sonunda durmuştur.

Bu yorumlar, grafiklerin anlamını ve katalizör eklenmesinin tepkime üzerindeki etkilerini daha iyi anlamamıza yardımcı olur. Her bir grafik, farklı bir deneyin sonuçlarını gösterirken, yorumlar bu sonuçları anlamamıza yardımcı olur ve grafikler arasında bağlantı kurmamıza olanak tanır.

Deney-1 yorumları

Şekil 4.1a'deki verilere dayanarak yapılan yorumlar, deneyde gözlemlenen sıcaklık değişimlerine dayanmaktadır.

X ekseninde yazan " T_0 (Zaman)" tepkimenin başlangıcından itibaren geçen zamanı dakika ve saniye cinsinden zaman dilimlerini örneğin, 2'20", 4'30" vb. göstermektedir. Y ekseninde " T (Sıcaklık)" ifadesi değerler grafiğin altından üstüne doğru artan sıcaklıkları (°C cinsinden) göstermektedir.

Grafikteki noktalar, tepkimenin önemli anlarını ve tepkime özelliklerinde önemli değişimler gösteren notlar örneğin, 120 °C'de tepkime hızında artış veya çeşitli sıcaklıklarda "kabarma"da değişim, içermektedir.

Şekil 4.1a'da:

- 120°C de tepkime hızında bir artış.
- 220°C de kabarmada azalma.
- 330°C de kabarmada artış.
- 340°C de kabarmada azalma ve tepkimenin yavaşlamaya başlaması.
- Tepkime 110' sonra bitti ve sıcaklığın tahmini olarak 370°'dir.

Bu grafik, bir kimyasal tepkimenin zaman içindeki sıcaklık değişimlerini izler ve belirli sıcaklık noktalarındaki tepkime dinamikleri hakkında ek bağlam sağlar.

Deney-2 yorumları

Şekil 4.1b'deki verilere göre yapılan değerlendirme, tepkime sürecindeki sıcaklık değişimlerini açıklamaktadır.

Şekil 4.1b'de, " T_0 (Zaman)" ekseninde sıfır dakikadan başlayıp altmış dakikaya kadar giden ve zaman aralıklarını gösteren etiketler vardır. " T (Sıcaklık)" ekseninde ise sıcaklık sıfırdan başlayarak 352 °C'ye kadar artmaktadır.

Şekil 4.1b de belirtilen önemli noktalar:

- 32'da sıcaklık 200 °C.
- 44'da sıcaklık 270 °C.
- 57'da sıcaklık 300 °C'ye ulaşmış ve bu noktada katalist ilave edilmiştir.
- 4', 8' ve 13' dan sonra sıcaklık 337 ve 340 °C'dir.
- 34' ve 43' dan sonra sıcaklık 343 ve 345 °C' ye ulaşmış ve reaksiyon yavaşlamıştır.
- 53'da sıcaklık 350 °C'ye ulaşmış ve reaksiyon bitmiştir.
- 60'da sıcaklık 352 °C olmuştur.

Katalizör eklendiğinde sıcaklık hızla artmış, belirli bir süre sonra tepkime yavaşlamış ve sonunda tamamlanmış.

Deney-3 yorumları

Şekil 4.1c'deki verilere göre yapılan yorumlar, tepkime sürecindeki sıcaklık değişimlerinin analizini sağlamaktadır.

Bu grafik aynı zamanda, belirli zaman dilimlerinde ölçülen sıcaklık değerlerini ve bir kimyasal tepkimenin katalizör eklenmesi sonucunda nasıl değiştiğini gözlemlemek için kullanılmaktadır.

Şekil 4.1c'de yer alan veri noktaları ve notlar aşağıdaki gibi yorumlanabilir:

- Başlangıçta (0'), sıcaklık 26 °C.
- 15'da sıcaklık 64 °C'ye yükselmiştir.
- 35' da sıcaklık 160 °C'ye ulaşmıştır.
- 55' da sıcaklık 245 °C'dir.

- 80' da sıcaklık 300 °C'ye ulaşmıştır.
- 97' da sıcaklık 320 °C'dir.
- 120' da sıcaklık 330 °C ve bu noktada katalist ilave edilmiştir.
- Katalist eklendikten sonra, 6', 13', 24', 36' da sıcaklık sırasıyla 332, 334, 335, 336 °C olarak kaydedilmiştir.
- Tepkime 50' ve 56'da 338 °C'ye ulaşmış ve reaksiyon yavaşlamıştır.
- 60' da sıcaklık yine 338 °C'de sabit kalmış ve reaksiyon bitmiştir.

Grafikte görüldüğü üzere, katalist eklenmesiyle sıcaklıkta bir artış gözlemlenmiştir, ancak belli bir noktadan sonra tepkime hızı yavaşlamış ve sonunda durmuştur. Bu tür grafikler, katalizörlerin kimyasal tepkimeler üzerindeki etkisini anlamak için önemli araçlardır. Katalizör ekzotermik bir reaksiyon vermektedir.

Deney-4 yorumları

Şekil 4.1d'deki verilere dayanarak yapılan analiz, tepkime sürecinde sıcaklık değişiminin incelenmesini sağlamaktadır.

Şekil 4.1d'de, bir kimyasal tepkimenin zaman içinde sıcaklık değişimini ve katalizör ilavesinin etkisini göstermektedir. X ekseninde " T_0 (Zaman)" yer almaktadır ve dakikalarla zaman dilimleri gösterilmektedir. Y ekseninde ise " T (Sıcaklık)" °C cinsinden sıcaklığı temsil etmektedir.

Şekil 4.1d'de yer alan veri noktaları aşağıdaki gibi yorumlanabilir:

- Tepkime başlangıcında (0') sıcaklık 26 °C'dir.
- 7'da sıcaklık 50 °C'ye yükselmiştir.
- 47'da sıcaklık hızla artarak 285 °C'ye ulaşmıştır.
- 70'da sıcaklık 320 °C'dir.
- 80'da sıcaklık 329 °C ve bu noktada katalizör ilave edilmiştir.
- Katalist eklendikten sonra sıcaklık 9'da 334 °C'de, 21'da 337 °C'de yükselmiştir.
- 33'da sıcaklık 339 °C'dir.
- 57'da sıcaklık 344 °C'ye yükselmiştir.

- 60' ve 65' da sıcaklık sabit kalarak 345 °C'de kalmış ve reaksiyon bitmiştir.

Bu grafik, katalizörün tepkimeye eklenmesiyle sıcaklığın nasıl etkilendiğini ve tepkimenin nasıl ilerlediğini göstermektedir. Katalist eklendikten sonra sıcaklıkta hızlı bir artış gözlemlenmiş ve belirli bir süre sonra sabitlenerek tepkimenin tamamlandığı anlaşılmıştır. Bu tür grafikler, katalizörlerin tepkime hızı üzerindeki etkisini ve tepkimenin kontrolünü sağlamak için önemli araçlardır.

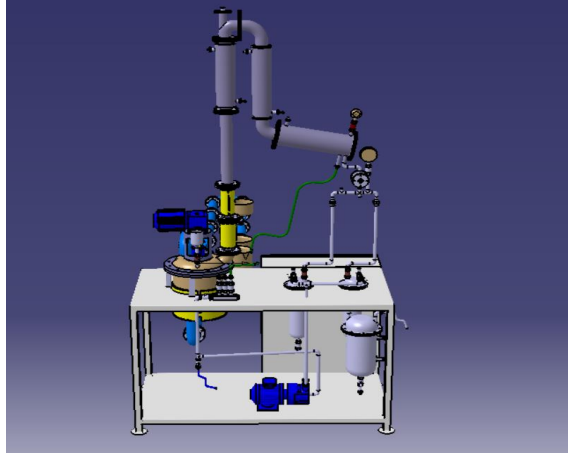
4.1.1. Laboratuvar ölçekli deneysel tasarım çıktıları

1. Reaksiyon süresi yaklaşık olarak 60 dakikadır.
2. Katalizör oranı, verim optimizasyonuna kadar %1 karışım olarak kullanılmalıdır, (optimum değer %0.8).
3. Reaksiyon tetikleme sıcaklıkları 120 °C, 240 °C, 340 °C ve olası 370 °C'de görünmektedir. Katalizör, dört ayrı sıcaklıkta ayrı olarak reaksiyon göstermektedir. 370 °C maksimum verimin elde edildiği reaksiyon sıcaklığı olarak tespit edilmiştir.

4.2. Prototip Rektörde Yapılan Deneysel Çalışmalar

Tasarımı yapılan ve laboratuvara monte edilen 20 L hacimli reaktör ve bağlantılı destilasyon sistemi kullanılarak her bir çevrimde 10 kg hammadde numunesi çalışılmıştır. Çalışmaları yapmış olduğumuz prototip reaktör ve bağlantılı distilasyon sistemi, sulu vakumlu bir vakum pompasıyla ve vakum basınç ayarları ayarlanarak çalıştırılabilmektedir. Sistem 25 – 550 °C sıcaklık ayarlarında elektrikli sarmal rezistanlar kullanılarak sıcaklık kontrollü şekilde çalışmaktadır. Distilasyon herhangi bir maddenin veya karışımın içerisindeki farklı maddelerin kaynama sıcaklıklarına göre ısıtılarak, buharlaştırılması ve daha sonra farklı kaynama noktasındaki maddelerin buharlaşmadan sonra buharlarının eşanjörden geçirilerek yoğunlaştırılması esasına dayanır. Bu bağlamda prototip reaktörün üzerindeki dolgu kolonun hemen çıkışında bir eşanjör bulunmaktadır.

Çalışmalarımızda kullanmış olduğumuz hammaddenin, kullanılan katalizör ile etkileşmesi 350 °C'den başlamakta olup 370 °C'de tam aktifleşerek 430 °C lere kadarlık bir sıcaklık aralığında hedeflenen ürünlerin toplanması sağlanmıştır.



Şekil 4.2 : Prototip reaktör ve vakum distilasyon ünitesi.

4.3. Hammadde ve Ürünlere Ait Analiz Sonuçları

4.3.1. Hammadde

Verilen deney numunesi analiz sonuçları, bir madde veya ürünün fiziksel ve kimyasal özelliklerini belirlemek için yapılan testlerin sonuçlarını içeriyor. Bu sonuçlar aşağıdaki gibidir:

Tablo 4.1 : Deney numunesi analiz sonuçları.

Parametre	Test Metodu	Birim	Sonuç
Yoğunluk (15 °C)	ISO 12185	Kg/m ³	866
Parlama Noktası	ISO2719	°C	40
Su içeriği	ISO3733	% m/m	0,45
Kükürt	ISO8754	% m/m	0,8
Akma Noktası	ISO3016	°C	6
Kinematik Vizkozite (50 C)	ISO3104	Cst	10,82
Aluminum	IP 501	mg/Kg	93
Kalsyum	IP 501'	mg/Kg	373
Demir	IP 501'	mg/Kg	389
Sodyum	IP 501	mg/Kg	40
Nikel	IP 501	mg/Kg	121
Fosfor	IP 501'	mg/Kg	23
Silikon-Silisyum	IP 501	mg/Kg	136
Vanadyum	IP 501	mg/Kg	20
Çinko	IP 501'	mg/Kg	26
Magnezyum	ASTMD 5185-Mg'	mg/Kg	15
Kül	ISO 6245	% m/m	0,272
Kalorifik değer	ISO8217-Eke'	MJ/Kg	42,33

Yoğunluk (15°C): Yoğunluk, ISO 12185 standardına göre ölçülmüş ve sonuç 866 kg/m³ olarak belirtilmiş. Bu, maddenin belirli bir sıcaklıkta sahip olduğu yoğunluğu gösterir.

Parlama Noktası: ISO 2719 standardına göre ölçülen parlama noktası 40°C olarak belirtilmiş. Bu, maddenin belirli bir sıcaklıkta yanmaya başlama eğilimini gösterir.

Su İçeriği: Su içeriği, ISO 3733 standardına göre ölçülmüş ve sonuç %0,45 olarak verilmiş. Bu, numunenin içindeki su miktarını ifade eder.

Kükürt İçeriği: Kükürt içeriği, ISO 8754 standardına göre ölçülmüş ve sonuç %0,8 olarak belirtilmiş. Bu, numunenin içindeki kükürt miktarını ifade eder.

Akma Noktası: ISO 3016 standardına göre ölçülen akma noktası 6°C olarak verilmiş. Bu, numunenin belirli bir sıcaklıkta akışkanlık özelliğini kaybettiği noktayı gösterir.

Kinematik Vizkozite (50 °C): ISO 3104 standardına göre ölçülen kinematik vizkozite 10,82 Cst (centistokes) olarak belirtilmiş. Bu, numunenin belirli bir sıcaklıkta viskozite özelliğini gösterir.

Metal ve Element İçeriği: Numunenin içindeki metal ve element içeriği, IP 501 ve ASTM D 5185 gibi standartlara göre ölçülmüş. Bu sonuçlar, numunenin kimyasal bileşimini belirtir.

Kül İçeriği: ISO 6245 standardına göre ölçülen kül içeriği %0,272 olarak verilmiş. Bu, numunenin içindeki yanmış veya yanabilir olmayan katı maddelerin miktarını gösterir.

Kalorifik Değer: ISO 8217-EkE standardına göre ölçülen kalorifik değer 42,33 MJ/kg olarak belirtilmiş. Bu, numunenin belirli bir miktarının yakıldığında açığa çıkan enerjiyi gösterir.

Tablo 4.2 : Deney numunesi kaynama noktası değişimi.

Verim	Birim	Metod	Sonuç
5%	°C	ASTMD7169	135
10%	°C	ASTMD7169	172
20%	°C	ASTMD7169	227
30%	°C	ASTMD7169	281
40%	°C	ASTMD7169	331
50%	°C	ASTMD7169	386
60%	°C	ASTMD7169	438
70%	°C	ASTMD7169	495
80%	°C	ASTMD7169	558
90%	°C	ASTMD7169	636
95%	°C	ASTMD7169	690
96%	°C	ASTMD7169	702
97%	°C	ASTMD7169	714
98%	°C	ASTMD7169	750
99%	°C	ASTMD7169	750

Bu analiz sonuçları, numunenin özelliklerini ve bileşimini belirlemek için kullanılabilir. Bu bilgiler, numunenin belirli bir endüstriyel veya kimyasal uygulama için uygun olup olmadığını değerlendirmek için önemlidir.

Verilen veriler, belirli bir test yöntemi (ASTM D7169) kullanılarak belirli yüzde noktalarında sıcaklık değerlerini göstermektedir. Bu tür sıcaklık profilleri, bir madde veya malzemenin belirli sıcaklık aralıklarında ne kadar enerji veya reaksiyon verdiğini veya aldığını anlamak için kullanılır. İşte bu verilere dayalı yorumlar:

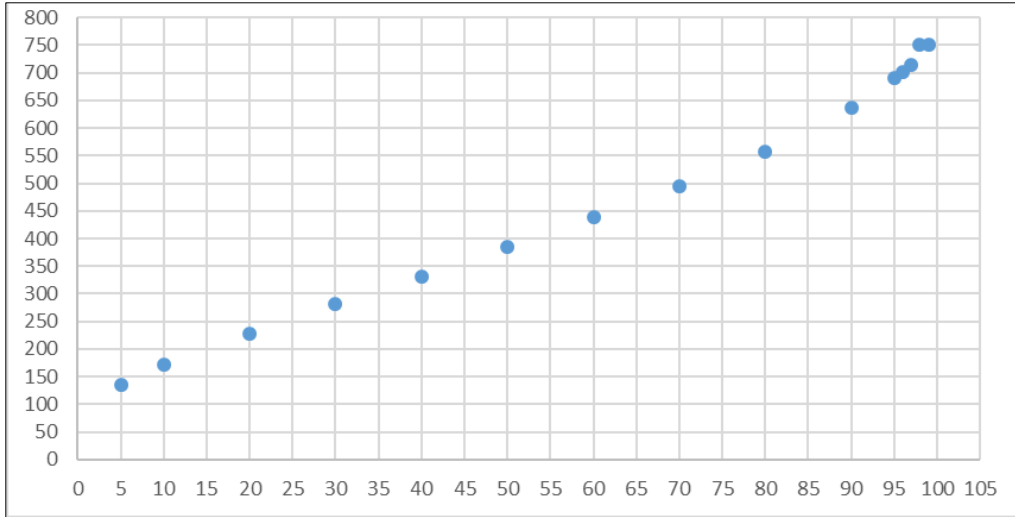
5% - 99% Arası Sıcaklık Değerleri: Bu veriler, numunenin belirli yüzde noktalarında sıcaklık değerlerini gösterir. Örneğin, numunenin %5'lik noktasında 135°C'ye ulaşması gerekiyor, %10'luk noktasında ise 172°C'ye ulaşması gerekiyor. Bu sıcaklık değerleri, numunenin belirli bir sıcaklık aralığında belirli bir yüzde noktasına ulaşma hızını ve performansını gösterir.

Test Metodu: Bu sıcaklık verileri ASTM D7169 standardına göre elde edilmiştir. Bu standart, belirli koşullar altında numunenin sıcaklık profiline dair bilgi sağlar ve birçok endüstriyel uygulama için önemlidir.

99% Sıcaklık: Verilere göre, numunenin %99'luk noktasında 750°C'ye ulaşması gerekiyor. Bu, numunenin yüksek sıcaklıklarda kararlı kalabilen bir malzeme olduğunu veya belirli bir uygulamada belirli bir sıcaklığa ulaşması gerektiğini gösterebilir.

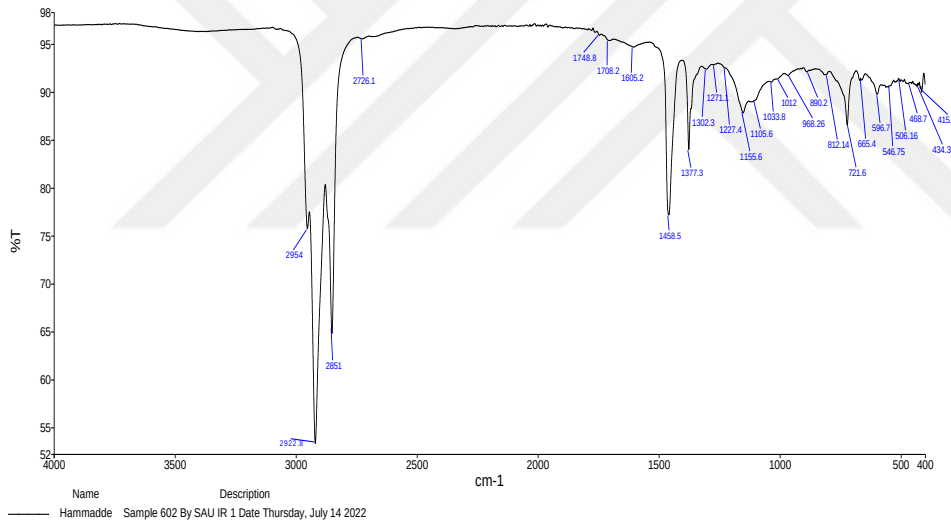
Bu tür sıcaklık verileri, çeşitli endüstriyel ve bilimsel uygulamalarda malzeme ve ürün performansını değerlendirmek için kullanılır. Ayrıca, malzemenin sıcaklıkla ilgili özelliklerini anlamak ve belirli sıcaklık gereksinimlerini karşılayıp karşılamadığını değerlendirmek için önemlidir.

Şekil 4.3'e göre genel eğilim, değerlerin arttıkça yükseldiğini gösteriyor, bu da kaynama noktasının artan bu değişkenle birlikte arttığını düşündürebilir. Veri noktalarının dağılımı, özellikle yüksek değerlerde daha yoğun bir artış sergiliyor gibi görünüyor.



Şekil 4.3 : Kaynama noktası değişim.

Yapılan tasarımın limit çalışma koşullarının bilinmesi için sistemin hesaplamalı akışkanlar dinamiği ile modellenmesi yapılacaktır.



Şekil 4.4 : Hammadde FTIR test sonucu.

Hammadde FTIR Test spektrumunda çıkan sonuçlarda piklerin icelenmesinde başlangıç aralığında 2954 – 2922 cm⁻¹ aralığında alifatik C-C ve C-C-H bağlarının olduğu görülmektedir. 1500 cm⁻¹ piklerinde ise aromatik ve alifatik kaynaklı C=C çift bağlarının olduğu görülmektedir. Son olarak parmak izi bölgesine bakıldığında 1250 – 600 cm⁻¹ C-H bağlarının olduğu görülmektedir.

Şekil 4.4 bir kromatogramı andıran bir grafik görülmektedir. Kromatografi, kimyasal bileşenlerin ayırt edilmesi ve analizi için kullanılan bir yöntemdir ve bu grafikte de muhtemelen çeşitli bileşenlerin ayrımını gösteren zirveler bulunmaktadır.

Grafikteki büyük zirveler ve bunların üzerinde yer alan sayılar, belirli bileşenlerin tutulma zamanlarını ve belki de miktarlarını ifade etmektedir. Tutulma zamanı, bileşenin kromatografik kolondan geçiş süresini temsil eder ve her bir bileşenin ayırt edici bir özelliğidir.

Grafikteki yatay eksen muhtemelen zamanı (saniye, dakika vb.) temsil ederken, dikey eksen sinyal şiddetini veya miktarını ifade eder. Böyle bir grafik, örneğin çevre analizleri, ilaç testleri veya gıda güvenliği kontrolleri gibi birçok farklı alanda kullanılır.

Analiz edilen örneğin çok sayıda bileşen içerdiği ve bunların her birinin belirli bir tutulma zamanında tepe oluşturduğu görülmektedir. Her zirvenin yanındaki sayısal değerler, muhtemelen zirvenin yüksekliğini veya altında kalan alanı, yani bileşenin konsantrasyonunu belirtmektedir.

4.3.2. Destilat ürün

Katalitik kraking neticesinde oluşan ince ürünlerin distilasyon yöntemiyle toplanarak elde edilen hedefteki düşük molekül ağırlıklı motorin karakterlerine uygun tasarlanan üründür. Elde edilen ürünün hedeflenen motorin kriterlerine göre deneysel sonuçları aşağıdaki tabloda verilmiştir.

Tablo 4.3 : Motorin ve elde edilen ürünün kalite değerleri.

ÖZELLİK	BİRİM	DEĞER MOTORİN	ÜRÜN	SINIR	DENEY YÖNTEMİ
Yoğunluk (15C)					
Tip E (Kış)	Kg/m ³	815-845	830	815-845	TS 1013 EN ISO 3675-TS
Tip B (Yaz)		820-845		820-845	EN ISO 12185
Polisilik aromatik Hidrokarbonlar	%(min)	8		En Çok	TS EN 12918
Parlama Noktası	C	55,0'den yüksek	65	55'den yüksek	TS EN ISO 2719
Donma Noktası C					
Tip E (Kış)	C	-15	-20	En Çok	TS EN 116-TS EN 16329
Tip B (Yaz)		5			
Damıtma					
250°C de elde edilen	%(V/V)	65'ten küçük	60	65'ten küçük	TS EN ISO 3405
350°C de elde edilen	%(V/V)	85	92	En az	TS EN ISO 3924
%95'in(hacim/hacim)elde edildiği sıcaklık	C	360	360	En çok	TS EN 17306
Vizkozite (40C)	mm ^{2/s}	2.000-4,500	3,5		TS EN ISO 10370-ISO 23581
Kül içeriği	%(m/m)	0,01	0,015	En çok	TS EN ISO 6245

Bu tablo, motorin yakıtının teknik özelliklerini ve bu özelliklerin hangi standartlara uygun olması gerektiğini belirtmektedir. Ayrıca, her özellik için deney yöntemlerinin standart numaraları da verilmiştir.

4.3.2.1. Destilat ürününün fiziksel ölçülen parametreleri

Tablo 4.4 : Destilat ürününün fiziksel olarak ölçülen parametrelerini ve iki ayrı çevrimde elde edilen verimliliği.

Özellik	Değer
Yoğunluk	830 kg/m ³
Parlama Noktası	65 °C
Donma Noktası	-20 °C
Vizkozite	40 °C' de 3,5 mm ² /s
Ph	5.5
<u>Verim</u>	
1. Çevrim İçin:	
Hammadde	10 kg
Destilat	5 kg
Kalıntı	4.75 kg
Gaz	0.25 kg
Verim	$\text{Destilat} / \text{Hammadde} \times 100 = 5 / 10 \times 100 = \%50$
2. Çevrim İçin:	
Hammadde	4.75 kg
Destilat	2.25 kg
Kalıntı	2.25 kg
Gaz:	0.25 kg
Verim	$\text{Destilat} / \text{Hammadde} \times 100 = 4.75 / 10 \times 100 = \%47.4$
Toplam Verim	$\text{Toplam Destilat} / \text{Hammadde} \times 100 = (5 + 2.25) / 10 \times 100 = \%72.5$

Bu tablo, bir distilasyon işlemine ait fiziksel ölçümler ve verim hesaplamalarını içermektedir.

- Yoğunluk: 830 kg/m³ olan bu değer, sıvının kütlesinin birim hacmine düşen miktarını ifade eder.
- Parlama Noktası: 65 °C olan bu değer, sıvının buharlarının belirli bir sıcaklıkta alev alabileceğini gösterir.
- Donma Noktası: -20 °C olan bu değer, ürünün donmaya başlayacağı sıcaklığı belirtir.

- Vizkozite: 40 °C’de 3,5 mm²/s olan bu değer, sıvının akış direncinin ölçüsüdür.
- pH: 5.5 olan bu değer, sıvının ne kadar asidik veya bazik olduğunu gösterir.

Verim hesaplamaları şu şekilde yapılmıştır:

1. Çevrim için

- Hammadde olarak kullanılan 10 kg maddenin, 5 kg destilat, 4.75 kg kalıntı ve 0.25 kg gaz verdiği belirtilmiştir.
- Verim, hammaddeye göre hesaplanmış ve %50 olarak bulunmuş. Bu, hammadde ağırlığının yarısının destilat olarak elde edildiği anlamına gelir.

2. Çevrim için

- İkinci çevrimde, kalan 4.75 kg hammaddenin, 2.25 kg destilat, 2.25 kg kalıntı ve 0.25 kg gaz verdiği belirtilmiştir.
- Verim bu sefer %47.4 olarak hesaplanmış. Bu, ikinci çevrimdeki hammadde miktarının yaklaşık yarısının daha destilat olarak elde edildiğini gösterir.

Toplam Verim:

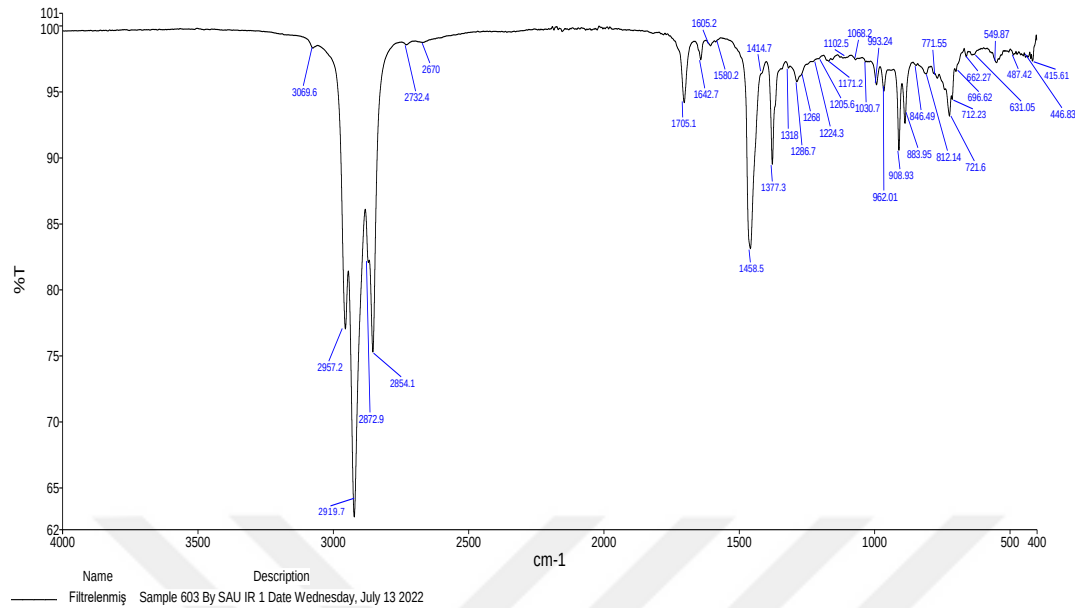
- İki çevrim sonucu elde edilen toplam destilat miktarının (5 + 2.25 kg), başlangıçtaki ham madde miktarına (10 kg) oranı %72.5 olarak hesaplanmış. Bu da, toplam işlem sonunda hammadde ağırlığının %72.5’inin destilat olarak kazanıldığını ifade eder Tablo 4.5.

Tablo 4.5’te görüldüğü üzere, ilk çevrimde hammadde miktarının %50’si doğrudan destilat ürüne dönüştürülmüştür. Geriye kalan %47.4’lük kısmı ikinci çevrimde tekrar işlenerek toplamda %72.5 verim elde edilmiştir.

Tablo 4.5 : Çevrim bazlı verim hesaplaması.

Çevrim	Hammadde (kg)	Destilat Ürün (kg)	Kalıntı (kg)	Gaz (kg)	Verim (%)
1. Çevrim	10.00	5.00	4.75	0.25	%50
2. Çevrim	4.75	2.25	2.25	0.25	%47.4
Toplam	10.00	7.25	7.00	0.50	%72.5

FTIR Testi



Şekil 4.5 : Destilat FTIR analiz sonucu.

Destilat ürünün FTIR Test grafiğinde çıkan sonuçlarda piklerin icelenmesinde başlangıç aralığında $2954 - 2922 \text{ cm}^{-1}$ aralığında alifatik C-C ve C-C-H bağlarının olduğu görülmektedir. 1500 cm^{-1} piklerinde ise aromatik ve alifatik kaynaklı C=C çift bağlarının olduğu görülmektedir. Son olarak parmak izi bölgesine bakıldığında $1250 - 600 \text{ cm}^{-1}$ C-H bağlarının olduğu görülmektedir.

Tablo 4.2 ' de belirli bir ürün için teknik özelliklerin ve standart sınırların bir tablosu görülmektedir. "MOTORİN" başlığı altında, bu ürünün özellikleri, birimleri, mevcut değerleri, ürün standartları ve ilgili deney yöntemleri ile birlikte listelenmiştir.

Bir Fourier Dönüşümlü Kızılötesi (FTIR) Spektroskopisi analizinin tipik bir spektrumunu gösteriyor. FTIR spektroskopisi, bir maddenin kimyasal yapısını karakterize etmek için kullanılır. Spektrumda çeşitli zirveler farklı moleküler bağların karakteristik titreşim frekanslarını yansıtır.

Spektrumun x-ekseni, dalga sayısını (cm ("Chapter 17 - Explosion,") (santimetre başına dalgaların sayısı) biriminde gösteriyor. Bu, FTIR spektrumunda bağların titreşim enerjilerinin bir ölçüsüdür. Y-ekseni genellikle transmisyon yüzdesini veya absorbandsı gösterir, yani maddenin ne kadar IR radyasyonunu emdiğini veya geçirdiğini belirtir.

Görülen zirveler ve bunların üzerindeki sayılar, örnek maddenin emdiği IR ışığının belirli dalga sayılarındaki yoğunluklarını gösterir. Bu piklerin yoğunluğu ve konumu, örnekte bulunan farklı kimyasal grupların tanımlanmasını sağlar. Örneğin, geniş ve yoğun bir zirve genellikle O-H veya N-H gruplarının hidrojen bağlarından kaynaklanırken, keskin ve dar zirveler genellikle C-H bağlarını gösterir.

Ürünün kapalı formülasyonu için FTIR ve fiziksel özellikler incelendiğinde, C₁₀ - C₁₆ aralığında hidrokarbonlardan oluşan bir motorin fraksiyonu olduğu görülmektedir.

4.3.3. Kalıntı

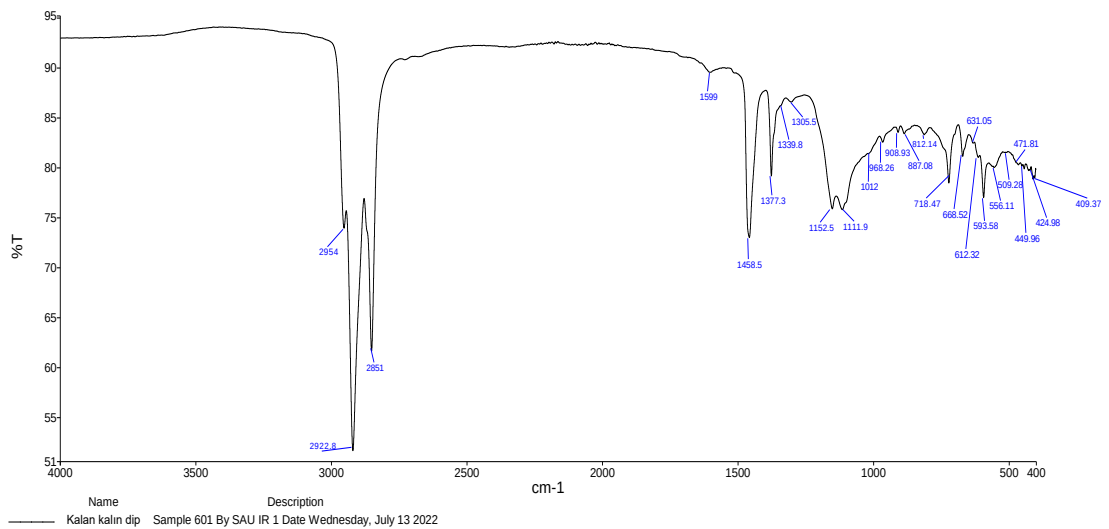
4.3.3.1. Kalıntı ürününün fiziksel ölçülen parametreleri

Yoğunluk: 940 kg/m³

Parlama Noktası: 240 °C

Kalıntı ürününün FTIR Test grafiğinde çıkan sonuçlarda piklerin icelenmesinde başlangıç aralığında 2954 – 2922 cm⁻¹ aralığında alifatik C-C ve C-C-H bağlarının olduğu görülmektedir. 1500 cm⁻¹ piklerinde ise aromatik ve alifatik kaynaklı C=C çift bağlarının olduğu görülmektedir. Son olarak parmak izi bölgesine bakıldığında 1250 – 600 cm⁻¹ C-H bağlarının olduğu görülmektedir.

FTIR Testi:



Şekil 4.6 : Kalıntı FTIR analiz sonucu.

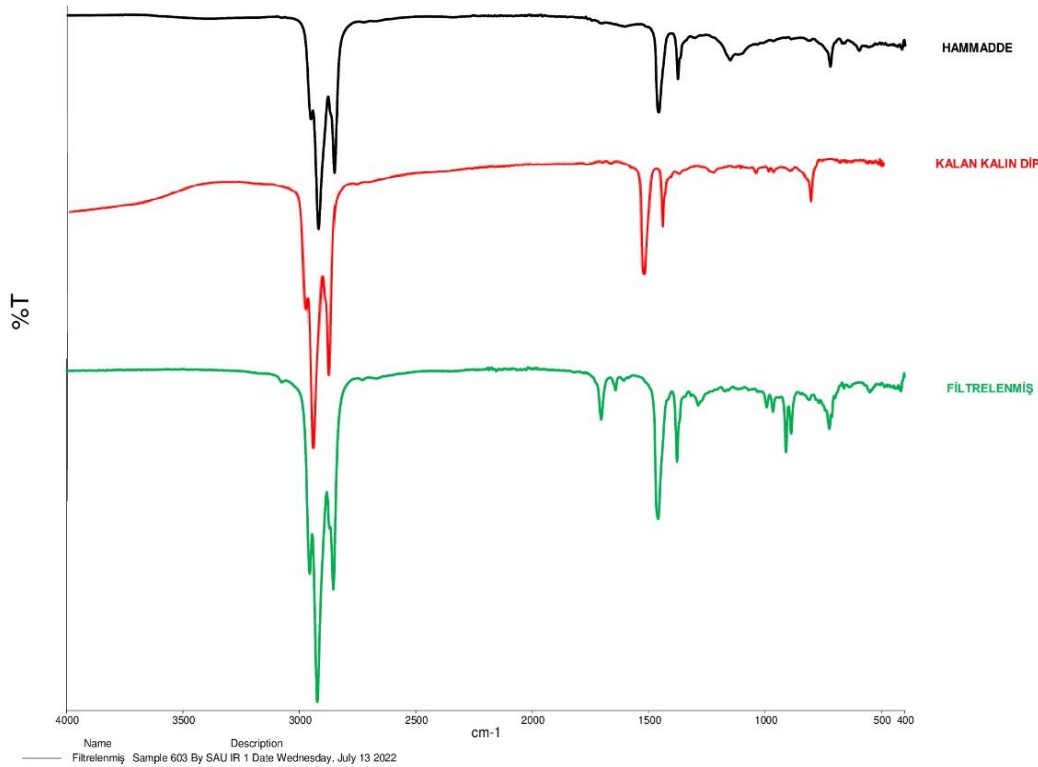
Şekil 4.6’da görülen, bir Fourier Dönüşümlü Kızılötesi (FTIR) spektroskopisi spektrumudur. FTIR spektroskopisi, bir maddenin kimyasal yapısını analiz etmek için

kullanılır. Spektrumda her bir zirve, maddenin farklı kimyasal gruplarından kaynaklanan belirli bir frekanstaki enerji emilimini temsil eder.

- X-ekseni dalga sayısını (cm^{-1}) gösterir, yani ölçülen IR ışığının frekansını ifade eder.
- Y-ekseni genellikle ışığın ne kadarının emildiğini (absorbans) veya ne kadarının geçtiğini (transmitans) gösterir.

Grafikteki zirvelerin yüksekliği ve konumu, örnek maddenin moleküler yapısını gösterir. Örneğin, 3000 cm^{-1} civarında bulunan geniş zirveler genelde O-H veya N-H bağlarına, $1500\text{-}1600 \text{ cm}^{-1}$ aralığında bulunan zirveler çeşitli C=C bağlarının vibrasyonlarına işaret eder.

Bu tür spektrumlar, maddelerin içerdiği kimyasal bileşenlerin kalitatif ve kantitatif analizinde yaygın olarak kullanılır. Örneğin, bu analiz nane bitkisinin yağlarındaki bileşenlerin tespiti gibi uygulamalarda kullanılabilir.



Şekil 4.7 : Hammade, destilt ve kalıntı FTIR analiz sonucu.

Şekil 4.7’ de üç farklı FTIR (Fourier Dönüştümlü Kızılötesi) spektrumu görülmektedir. Her spektrum farklı bir renkle gösterilmiştir: siyah (HAMMADDE), kırmızı (KALAN KALIN DİP), ve yeşil (FİLTRELENMİŞ). Bu spektrumlar, bir maddenin veya

karışımın farklı evrelerindeki kimyasal bileşenleri ve yapılarını karşılaştırmak için kullanılmıştır.

- X-ekseni dalga sayısını (cm^{-1}) gösterir ve kimyasal bağların enerji emilim seviyelerini belirtir.
- Y-ekseni, genellikle ışığın ne kadarının geçtiğini gösteren transmittans yüzdesi (%T) olarak ifade edilir.

Siyah spektrum (HAMMADDE), işlenmemiş veya ham malzemenin kimyasal yapısını gösterir. Kırmızı spektrum (KALAN KALIN DİP), işlemde sonra kalan artık maddenin yapısını yansıtır. Yeşil spektrum (FİLTRELENMİŞ), bir filtreleme veya arıtma işleminden geçmiş maddenin yapısını gösterir.

Spektrumların karşılaştırılması, işlem sırasında maddenin kimyasal yapısında meydana gelen değişiklikleri anlamak için yapılır. Örneğin, bazı zirveler filtreleme sonrasında azalmış veya kaybolmuş olabilir, bu da bazı bileşenlerin çıkarıldığını gösterir. Öte yandan, yeni zirveler ortaya çıkıyorsa, bu da yeni kimyasal bileşenlerin oluştuğunu veya var olanların değiştiğini gösterir.

Tablo 4.6 : Tubuler reaktör tasarımına ait parametreler.

REAKTÖR TASARIMI			
Reaksiyon Süresi	saat	1,20	
Isınma Süresi (360 °C)	saat	1,00	
Reaktör Çapı	m	0,0508	
Reaktör Yarı Çapı	m	0,03	
Reaktör Kesit Alanı	m^2	0,0020	A
Yoğunluk ton/m^3		0,9400	
Debi	Ton/Saat	0,010	10 kg/saat
Debi	m^3/Saat	0,01	Q_v
Hız	m/saat	5,37	
Reaktör Boyu	m	6,44	

Tablo 4.7 : Sabit debi deęişken apta ve sabit ap deęişken debideki reaktör boyları.

SABİT DEBİDE Kİ R/L DEĞİŞİMİ		SABİT R DAKİ Q/L DEĞİŞİMİ	
50 Ton/Saat		R=0,3	
R	L	m ³ /Saat	L
0,1	6923	10	153
0,2	1730	20	307
0,3	769	30	461
0,4	432	40	615
0,5	276	50	769
0,6	192	60	923
0,7	141	70	1076
0,8	108	80	1230
0,9	85	90	1384
1	70	100	1538

4.4. Tasarım çıktıları

Reaksiyon Süresi: 1 saat 20'. Bu, reaktörün belirli bir reaksiyonu tamamlaması için gereken süreyi ifade eder.

Isınma Süresi (360°C): 1 saat. Reaktörün 360 °C sıcaklığa ısınması için gereken süre.

Reaktör apı: 0.0508 m. Reaktörün iç apı.

Reaktör Yarı apı: 0.03 m. Reaktör apının yarısı.

Reaktör Kesit Alanı: 0.0020 metrekare (m²). Bu deęer, reaktör yarıapının karesinin π (pi) ile arpılmasıyla hesaplanır ve reaktörün iç kesit alanını gösterir.

Yoęunluk: 0.9400 Ton/m³. Reaktörde işlenen malzemenin yoęunluğu.

Debi (Q): 0.010 Ton/Saat veya 10 kg/saat. Reaktörden saatte geen malzeme miktarı.

Debi (Qv): 0.01 m³/Saat. Reaktörden saatte geen hacim debisi.

Hız: 5.37 m/saat. Bu, reaktör kesit alanından saatte geen akış hızını ifade eder.

Reaktör Boyu: 6.44 m. Reaktörün toplam uzunluğu.

Tablo 4.4, iki farklı durum için debi ve boyutlar arasındaki ilişkiyi göstermektedir:

Sabit Debiyle R/L Değişimi: Burada, debi (Q) sabitken, reaktör yarıçapının (R) reaktör uzunluğuna (L) oranının değişimi gösterilmiştir. R değeri arttıkça, L değeri azalır, bu da reaktör hacminin sabit kaldığını gösterir.

Sabit R'de Q/L Değişimi: Burada, reaktör yarıçapı (R) sabitken, debinin (Q) reaktör uzunluğuna (L) oranındaki değişimi gösterilmiştir. Q değeri arttıkça, L değeri de artar, bu da daha büyük debi miktarlarını idare edebilmek için reaktörün daha uzun olması gerektiğini gösterir.

Bu tür tablolar ve hesaplamalar, reaktör tasarımında ve işletme parametrelerinin belirlenmesinde önemli bir rol oynar. Mühendisler, bu bilgileri kullanarak reaktörün boyutunu, şeklini ve işletme koşullarını optimize ederler.

Reaksiyon Süresi: Reaksiyon süresi 1,20 saat olarak belirtilmiş. Bu, belirli bir kimyasal reaksiyonun tamamlanması için gereken süreyi gösterir. Reaksiyon süresi, tasarım parametrelerini ve reaktörün ne amaçla kullanıldığını belirlemek için önemlidir.

Isınma Süresi (360°C): Reaktörün 360°C'ye ısınması için 1,00 saat gerektiği belirtiliyor. Bu, reaksiyonun başlamadan önce reaktörün belirli bir sıcaklığa ulaşması gerektiğini gösterir. Isınma süresi, reaksiyonun başlamadan önce ısıtma gereksinimini göz önünde bulundurmak için önemlidir.

Reaktör Çapı ve Yarı Çapı: Reaktörün çapı 0,0779 m ve yarı çapı 0,0390 m olarak belirtilmiştir. Bu ölçümler, reaktörün fiziksel boyutunu tanımlar. Reaktör tasarımında çap ve yarı çap, reaktörün kapasitesini ve içindeki malzemelerin hareketini etkileyebilir.

Reaktör Kesit Alanı: Reaktörün kesit alanı 0,0048 metrekare olarak belirtilmiş. Bu, reaktörün içindeki malzemelerin hareketini ve karışımını etkileyen bir parametredir. Kesit alanı, reaktör tasarımının önemli bir bileşeni olarak kabul edilir.

Yoğunluk: Reaktör içindeki malzemenin yoğunluğu 0,9400 ton/metreküp olarak verilmiş. Bu, reaktörün içindeki malzemenin ağırlığını ve hacmini etkileyen bir faktördür.

Debi: Reaktördeki akış hızı 0,020 ton/saat veya 0,0217 metreküp/saat olarak belirtilmiş. Bu, reaktör içindeki malzemenin ne kadar hızlı hareket ettiğini gösterir ve reaksiyonun kontrolünü sağlamak için önemlidir.

Reaktör Boyu: Reaktörün boyu 5,48 m olarak verilmiş. Reaktör boyu, reaksiyon süresi, debi ve diğer tasarım faktörleriyle birlikte reaktörün genel hacmini etkileyen bir parametredir.



5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Daha önce termal ayrıştırmaya maruz bırakılmış başlangıç maddesi (destillenmiş endüstriyel atık yağ, DEAY) 370 – 400 °C arası yapılan katalizörsüz deneysel çalışmada hiçbir termal ayrışmanın oluşmaması nedeni ile ürün alınamamıştır. Bir sonraki aşamada % 0,8 (binde sekiz) katalizör katkılı termal kraking işlemi gerçekleştirilmiş ve katalizör etkisiyle 370 °C’ den itibaren ürün toplanmaya başlamıştır. 1 saatlik sürecin sonunda her bir kesikli uygulamada yaklaşık %50 dönüşüm elde edilmiş olup, 2 sürecin sonunda katalizörlü çalışmaların toplam verimi %70’ tir. Alınan destilat ürününün fiziksel özellikleri açısından dizel yakıt karakterinde olduğu belirlenmiştir. Kalıntı ürün toplam ürünün %30 u olup, ağır akar yatık (HFO-heavy fuel oil) özellikleri taşımaktadır. Kaydedilen FTIR Spektrumlarına bakıldığında binde sekiz oranda ilave edilen katalizörün, DEAY içerisindeki moleküler arası kimyasal etkileşimleri zayıflatarak veya gevşeterek tekrar destillene bilmesine ve ileri destilatların kazanılmasına sebep olduğu anlaşılmıştır.

Destilasyon uygulamaları sonunda elde edilen destilat, kalıntı ve DEAY için FT-IR analizleri gerçekleştirilmiştir. FTIR grafikleri bakıldığı zaman, her üç malzeme için 3000 cm^{-1} altındaki C-C-H bağlarına ait alifatik hidrojenlere ait olduğu ve yine yaklaşık 1715 cm^{-1} de gözlenen piklerin C=O çift bağlarının olduğu tespit edilmiştir. aynı zamanda 1500 cm^{-1} altında görünen piklerin alifatik C-H bağlarının varlığını göstermektedir. Her üç malzeme de 3000 cm^{-1} den yukarı bantlarda hidroksil ve O-H ve N-H bağlarının olmadığı görülmektedir. Her üç malzemenin FTIR spektrumlarında parmak izi bölgelerinde farklılık görülmektedir. Parmak izi bölgesinde meydana gelen bu farklılaşmanın malzeme meydana gelen değişimden kaynaklandığını düşünülmektedir.

Genel olarak bakıldığında FTIR spektrumlarına göre; söz konusu materyallerin hepsinin içerik olarak hidrokarbon ağırlıklı bir yapıya sahip olduğu görülmektedir. Ancak transmutans değerlerindeki değişimin uygulanan proses sonucu hammadde üzerinde meydana gelen yapısal değişiklikten kaynaklandığı kanaatinin oluşmasına neden olmuştur. Gerek fiziksel testlerinden gerekse fır testlerinden anlaşıldığına göre

giren hammaddeye göre çıkan üst ürün daha kısa moleküler uzunluğa ve düşük yoğunluğa sahip olup çıkan kalıntı ürün ise daha yüksek konsantrasyonlu ve daha yoğun olup benzer moleküller içermektedir. Tüm bu verilere göre 370 – 420 °C aralığında, binde sekizik katalist çift çevrimde %70 üst ürün, %30 dip ürün vermekte olup iki farklı mekanizmayla sistemde rol aldığı ön görülmektedir.

Sonuç olarak; yapılan FTIR analizi ve diğer fiziksel test sonuçlarına göre yapılan termal katalitik kraking uygulaması sonrasında hammadde üzerinde yapısal değişimlerin olduğu oluşan bu yapısal değişiklikler nedeniyle malzeme kompozisyonunda değişim olduğunu göstermektedir. Elde edilen ürünlerin kromatografik analizler uygulanarak söz konusu ayrışmanın boyutlarının tespiti mümkün olacaktır.

Destilatın 3069 cm⁻¹ bandı asitlik göstergesi olup bunun karboksilik asit kaynaklı oluştuğunu gösterir. Çıkan destilatın Ph'ı bu bandı doğrulamaktadır. Kalıntının 2954 – 2851 cm⁻¹'deki bantları C-C-H alifatik hidrokarbonlarının varlığını göstermekte olup yine kalıntıdaki 1485 – 1377 cm⁻¹ bantları ise C-H deformasyon bantlarıdır. 1152 – 1112 cm⁻¹ bantlar ise C-O-C gerilimlerine ait olup kalıntıda epoksit köprülerin oluştuğunu gösterir. Bu verilerden hareketle termal katalitik kraking sonucundaki destilasyon neticesinde başlangıç maddesi olan DEAY'ın mevcut kimyasal yapısında değişiklik oluştuğu ve oksidasyon vasıtasıyla oluşan karboksilik asitlerin destillenerek ayrıştığı, kalıntı olarak ise bu esnada oluşan epoksitlerin polimerleşerek katı vizkoz epoksit polimer türlerine dönüştüğü görülmektedir.

5.1. Reaktör Tasarımı ve Deneysel Analiz Sonuçların İncelenmesi

5.1.1. Reaktör tasarımı

Karıştırma tankları, kimyasal işlemlerden biyofarma/ilaç üretimine kadar birçok endüstride yaygın olarak kullanılır. Karıştırma tankları tasarlarken karşılaşılan iki yaygın zorluk şunlardır: Yüksek verimli karışımın sağlanması - bu, karışım süresi analizi, yüksek ajitasyon ve mikroorganizmaların korunması arasında optimal dengeyi belirleme gerektirir. Diğer bir zorluk ise maruz kalma süresi analizidir.

En iyi modellemeyi yapabilmek için, karışma analizi, karışım analizi ve maruz kalma analizi gibi yöntemler kullanılabilir. Örneğin, kraking reaksiyonları için en uygun hammadde %40 RME180, %59 HFO No.1 ve %1 Mikrosferik katalizörün karışımı olarak belirlenmiştir. Bu karışımın ekonomik değeri, en iyi durumda işletme

maliyetine göre yaklaşık 10 kat azalmıştır. Yukarıdaki karışım kullanıldığında, ideal ürün dönüşüm yüzdesi önemli ölçüde artacaktır.

Bir rafineri, ham petrolün saflaştırılarak çeşitli petrol ürünlerine dönüştürüldüğü ve yılın 365 günü 24 saat boyunca faaliyet gösteren büyük bir fabrikadır. Bu tesislerde ham petrol işlenir ve enerji üretiminde kullanılan benzin, fuel oil (mazot), dizel yakıt gibi yakıtlara ve plastik, poliüretan, solventler gibi birçok ürüne dönüştürülür. Petrol arıtma işlemleri tarih olarak 19. yüzyıla kadar uzanmaktadır. İlk rafineri tesisleri ABD ve Rusya'da kurulmuş ve ham petrol, benzin, gazyağı, fuel oil ve madeni yağ gibi ürünlere ayrıştırılabiliyordu. 1. ve 2. Dünya Savaşları sonrasında arıtma süreçlerinde büyük gelişmeler kaydedildi. Ham petrol, çeşitli hidrokarbon bileşiklerinin karışımından oluşur ve nispeten düşük düzeylerde nitrojen, kükürt ve oksijen içerir. Kükürt, ham petrolde bulunan elementler arasında üçüncü sırada yer alır (%0,05 ila %5 arasında). Oksijen içeriği yaklaşık olarak %2, nitrojen içeriği ise yaklaşık olarak %0,1'dir. Ham petrol, denizlerde bulunan metal elementlerin yanı sıra bitki ve hayvan fosillerinin izlerini içerebilir. Farklı kaynaklardan gelen ham petrol, kimyasal bileşimlerinin yanı sıra renk, özgül ağırlık ve viskozite gibi farklı fiziksel özelliklere sahiptir. Ham petrol, çok çeşitli kaynama ve donma noktalarına sahip bileşiklerin karışımı olduğu için tek bir kaynama veya donma noktası yoktur. Ancak, ham petrolün işlenmesi genellikle damıtma ile başlar. Ham petrol önce ısıtılır ve ardından oluşan buharlar ve sıvılar bir damıtma kolonuna yönlendirilir. Bu damıtma kolonu, farklı moleküllerin ağırlıklarına göre farklı yüksekliklerde soğumaya başladığı bir kuledir. En hafif ürünler, sıvılaştırılmış petrol gazı (LPG) gibi en üstte toplanır. Daha sonra jet yakıtı, kerosen gibi orta ağırlıklı ürünler gelir. En ağır ürünler ise bitüm gibi en altta yer alır.

Bazı rafinerilerde, değersiz bileşikler kimyasal yöntemlerle moleküler yapıları değiştirilerek değerli ürünlere dönüştürülür. Saflaştırma işlemi sonrası elde edilen bileşikler, absorpsiyon, sıyırma, solvent ekstraksiyonu ve kristalizasyon gibi yöntemlerle ayrılır. Tüketicilere sunulacak ürünlerin hazırlanması için gelişmiş ekipman ve yöntemler kullanılarak oldukça karmaşık işlemler uygulanır.

5.1.1.1. Yeniden rafinasyonun ekonomisi

Ticaretin miktarı (hacmi), değeri veya taşıma kapasitesi ile ölçülse de, petrol dünyada en çok ticareti yapılan emtiadır. Dünya genelinde petrol üretiminin yoğun olduğu

bölgeler ile petrol tüketiminin yüksek olduğu bölgeler arasında uyumsuzluk vardır. Bu nedenle, petrol arzı talepten fazla olduğu bölgelerden (ihracatçılar) talebin arzdan fazla olduğu bölgelere (ithalatçılar) nakledilmelidir. Dünyanın en fazla petrol tüketen bölgeleri (Kuzey Amerika, Avrupa ve Asya-Pasifik) ithalat yaparken, Ortadoğu hala en büyük petrol ihracatçısı olarak önemini sürdürmektedir. Genellikle ham petrol ve petrol ürünleri, sunum yapan kişiye en fazla değeri sağlayan pazarlara yönlendirilir. Diğer tüm faktörler eşit olduğunda, petrol en yakın pazara ilk ulaşan ürün olur. Eğer bu pazar tüm petrolü tüketemezse, fazla olan petrol başka bir pazara yönlendirilir ve bu döngü, yağ tamamen değiştirilene kadar devam eder.

Dünya petrol ticaretinde ham petrol hakimdir. Bu, rafinerilerin çeşitli riskleri göz önünde bulundurarak üreticiler yerine tüketicilere daha yakın bir konumda olmasından kaynaklanmaktadır. Bu sayede petrol ürünleri, kısa vadeli değişikliklerden daha az etkilenir ve her bölgenin talebini karşılayacak şekilde üretilir. Ancak, Singapur, Karayipler ve Orta Doğu gibi bazı bölgelerde, belirli ithalat pazarlarına hizmet etmek amacıyla bu kuralı ihlal eden rafineri merkezleri bulunmaktadır.

Aslında, gerçek dünyada ticaret akışı her zaman "en yakın" sırasını takip etmeyebilir. Rafinerilerin konumu, farklı ürün talepleri, ürünlerin kalite özellikleri ve politikalar, bu sıralamaları değiştirebilir. Petrolün belirli bir pazara ulaştırılması ayrıca hükümet politikalarından etkilenebilir. Ayrıca, hem alıcılar hem de satıcılar bazı kısıtlamalar getirebilir. Örneğin, ABD İran ve Libya'dan petrol alımını yasaklarken, Birleşmiş Milletler Irak petrolünün satışını sınırlamaktadır.

Bölgesel ve ürün bazlı arz ve talep eğilimleri, ham petrol ve petrol ürünlerinin fiyatlarını etkiler. Genellikle fiyat dalgalanmaları küçük olup, sadece alıcılar ve satıcılar arasında önemlidir. Ancak bu dengelerin çeşitli nedenlerle bozulduğu ve petrol fiyatlarının haberlerde yer aldığı dönemler de yaşanmaktadır.

Petrol stokları, petrolün üreticiden tüketiciye ulaştırılması ve hem küresel hem de bölgesel petrol piyasalarının dengelemesi açısından önem taşır. Dünya genelinde petrol stokları oldukça yüksektir, bu da küresel sipariş karşılama sistemini işlevsel tutmak için envanterlerin gerekliliğini gösterir. Petrol stokları, kuyulardan tüketicilere kadar uzanan, tankerleri, boru hatlarını ve taşıtları dolduran, pazarları ve endüstrinin her kesimini birbirine bağlayan dev bir boru hattı gibi düşünülebilir. Bu nedenle doğru ürünün doğru zamanda doğru yere ulaştırılmasında petrol sektörünün temel bir rolü

vardır. Bu stokların sadece %10'u herhangi bir zamanda endüstrinin kullanımına açıktır. Bu küçük gibi görünebilir, ancak endüstriyi çeşitli yollarla etkileyebilir çünkü piyasada petrolün durumunu yansıtır. Belirli bir pazarda stoklar düşükse, fiyatlar yükselir ve bu da arzın artmasını veya talebin azalmasını teşvik edebilir. Tersine, yüksek stoklar o pazarda fiyatların daha düşük olmasına neden olabilir. Hisse senetleri, fiyatların öncü göstergesi olarak kabul edildiği için piyasanın en yakından takip edilen özelliğidir. Küresel petrol stoklarını izlemek, bu sektörün özelliklerinden biridir. Ancak bu stokların yakından takip edilmesi zordur çünkü dünya depolama kapasitesinin büyük bir kısmı, petrol üreten, rafine eden veya pazarlayan şirketler tarafından kontrol edilir. Küçük ancak önemli bir kısmı, petrolü üçüncü taraflara kiralayan bağımsız şirketlere aittir. Bu şirketler, Rotterdam, Singapur, New York limanı ve Karayipler gibi ticaret merkezlerinde bulunur ve bu merkezlerin canlı kalmasında önemli bir rol oynarlar. Bireysel stok sayısı, isteğe bağlı stokların ne kadarının kullanıldığının bir göstergesi olabilir.

Deneysel çalışmanın işletme maliyeti Tablo 5.1.'de verilmiştir.

Tablo 5.1 : Deneysel çalışmanın işletme maliyeti.

Gider Kalemi	Miktar/Birim	Toplam Maliyet TL/10 kg
Hammadde Maliyeti	10 kg × 10 TL/kg	100 TL
10kgX TL, Enerji tüketimi	10 kWh × 0.15 \$/kWh	55 TL
Katalizör Maliyeti	0.8% MgO-Al ₂ O ₃ -AlPO ₄	5 TL
İşçilik Maliyeti	Sabitlenmiş	5 TL
Bakım/Ekipman Gideri	Sabitlenmemiş	1 TL
Toplam Maliyet	-	166 TL

Birim Maliyet Hesaplaması

- Toplam kullanılan hammadde : 10 kg
- Birim maliyet

166/10= 16.6 TL/kg ya da 16.600 TL/Ton dur.

Satış Ciro (Şubat-2025 TL olarak \$=37 TL)

Üretilen dizelin satış fiyatı 30.000 TL/Ton, Üretim oranı %70

Üretilen dib bakiyenin satış fiyatı 10.000 TL/Ton, Üretim Oranı %28

Proses fire oranı %2 olduğu bilindiğine göre;

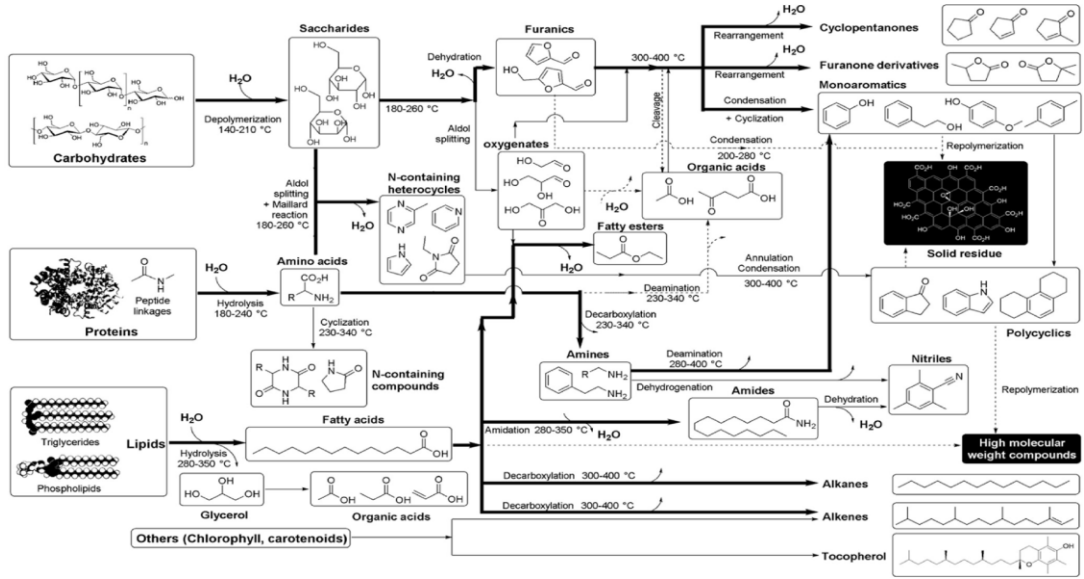
Toplam Ciro= $30.000 \times 0,7 + 10.000 \times 0,28 = 21.000 + 2800 = 23.800$ TL

İdari ve yasal şartlar öncesi brüt kar = $23.800 - 16.600 = 7.200$ TL/Ton olarak öngörülmektedir.

Projenin kar oranı = $7.200 / 16.600 = \%43,3$ dür.

5.1.1.2. Toplu reaktörler

HTL reaksiyonları üzerine yapılan önemli literatür çalışmalarında birçok farklı besleme stoğu kullanılmıştır, ancak bu deneylerin çoğu laboratuvar ölçeğinde kesikli reaktörlerde gerçekleştirilmiştir. Kesikli reaktörlerde, biyokütle besleme stoğu, katalizörle veya katalizörsüz olarak önceden belirlenmiş miktarlarda beslenir ve reaksiyon sıcaklığı ile kalma süresi tam olarak kontrol edilebilir. Bu reaktörler, çeşitli hammaddelerin hızlı bir şekilde taranmasına ve süreç parametrelerinin optimize edilmesine imkan tanır. Bununla birlikte, ticari ölçekte kullanılabilen HTL sistemleri için ayarlanabilir kalma süreleri ve hassas reaksiyon sıcaklığı kontrolüne sahip sürekli reaktör sistemleri gereklidir. Ayrıca, sürekli reaktörler, enerji geri kazanımına olanak tanıyarak genel süreç verimliliğini artırır ve teknolojiyi ekonomik hale getirir. Ticari ölçekte, tıkaç akışlı reaktörler, farklı biyokütle besleme stoğu özellikleri için kalma süresini değiştirmek, verimliliği artırmak ve ham biyo-yagın kalitesini yükseltmek için daha fazla esneklik sağlayacaktır. Bu, gerekli kalma süresini sağlamak için kullanılabilen veya atlanabilen eşdeğer boru şeklindeki bölümler kullanılarak gerçekleştirilebilir. Akış hızı sağlıklı bir şekilde korunabilir ve bükülmeler en aza indirilerek katı oturumu da azaltılabilir (Talavera-Prieto, Ferreira, Moreira, & Portugal, 2020).



Şekil 5.1 : Batch reaktör üzerindeki HTL reaksiyonları (Talavera-Prieto et al., 2020).

HTL süreci için sürekli bir reaktör tasarımı oluşturmak, ürün ayrımı için güvenilir bir yaklaşım geliştirmeyi gerektirir. Yüksek partikül ve kül konsantrasyonlarına sahip HTL reaktörlerinden gelen sıcak ve basınçlı karışık ürün akışlarının ayrılması, dünya genelinde sürekli HTL sistemleri ile ilgili en zor tasarım zorluklarından biridir. Karbonlu katılar, dönüştürülmemiş biyokütle, kül ve inorganik maddeler, reaktörün basınç düşürme ve ürün ayırma cihazını içeren aşağı akış sistemlerindeki ekipmanı tıkayabilir. İnce katı kömür ve tuz partikülleri borularda birikebilir ve reaksiyon aşağı akış geri basınç regülatörüne zarar verebileceğinden temizlenmelidir. Kömür ve katı maddeler daha sonra yüksek basınçlı bir filtre kullanılarak yakalanır ve filtreye yerleştirilen deneme ölçekli ekipman, genellikle yüksek derecede otomatik bir blöf işlemi kullanılarak çıkarılır. Blöf sırasında, sistem önemli basınç ve sıcaklık değişikliklerine maruz kalır ve reaksiyon sürecinin ortamının dengelenmesi biraz zaman alır. Ayrıca tekrarlanan blöfler sonucunda filtreler tıkanır, sistem kapatılmalıdır. Katı ayırma için endüstriyel ölçekte uygulanabilecek çözümler, iki veya daha fazla paralel yüksek basınçlı filtreleme sisteminden yararlanabilir. Bu tasarım, diğer filtreler devreye alınırken bir filtredeki katının çıkarılması ve blöflenmesi sırasında süreç sürekliliğini sağlamaya yardımcı olacaktır. Değiştirme ve temizleme prosedürü, açma-kapama valfleri kullanılarak tamamen otomatik hale getirilebilir. Tıkanma sorunlarını azaltmak için ek adımlar atılabilir, bu da hammaddede bulunan kül ve kirleticilerin azaltılmasını, partikül boyutunun azaltılmasını ve geçirgenliğin artırılmasını içerebilir ve HTL sistemlerinde boru çaplarının artırılmasını içerebilir (Talavera-Prieto et al., 2020).

5.1.1.3. Katı benzeri süspansiyonlar

Kesikli reaktör modellemesinde katı benzeri süspansiyon, süreç ve farmasötik endüstrisinde önemli bir birim operasyon olarak kabul edilebilir. Bu süreç, birçok heterojen reaksiyonu içerir, bu reaksiyonlar sıvılar ve katalizörleri içerebilir. Katı benzeri süspansiyon, bir ürün, bir reaktan (çözünme) veya bir katalizör olabilir. İstenen katı benzeri dağılımı elde etmek kritiktir.

5.1.2. HAD modelleme hedefleri

Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD), aşağıdaki gelişim adımlarını hızlandırabilir:

1. Ölçek büyütme sürecini iyileştirin.
2. Verimliliği artırın.
3. Test süreçlerini azaltın.

Tipik uygulamalar şunları içerebilir:

1. Kıvılcım oluşturma
2. Karıştırma
3. Kütle transferi
4. Filtrasyon
5. Ayırma

5.1.2.1. Bir türbülans modeli seçme

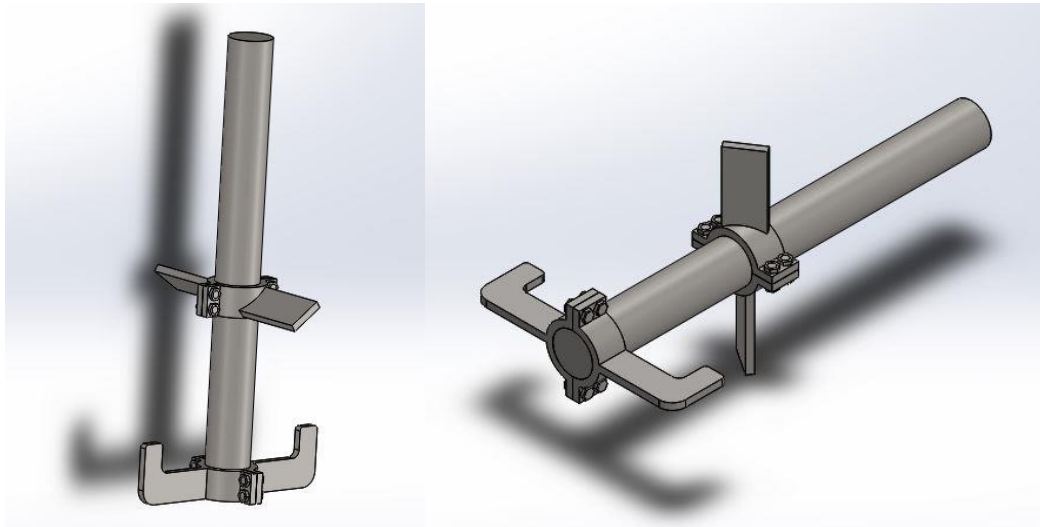
Jha ve Dash, Smagorinsky alt ızgara modeline ek olarak çeşitli k modellerini de analiz etti. Oliveira et al. (2006), Wilcox, Renormalization Group (RNG) ve geleneksel k-modellerinden gelen tahminleri de karşılaştırdı. Odenthal et al., Rastgele Tandislik Dağılımı (RSM) tahminleri yapmak için Gerçekleştirilebilir k-modeli, Menter Shear Stress Transport (SST) k-modeli ve Launder-Reece-Rodi (LRR) Reynolds stres modelini kullandı. Ayrıca, Jows ve Cwudziski'nin çalışmasında Ayrılmış Girdap Simülasyonu (DES) modeli, başlangıçta bir tandislik RTD eğrilerini tahmin etmek için kullanıldı. Siddiqui ve Jha (2014) tarafından yakın zamanda yapılan bir çalışmada RNG k-modeli kullanırken, hesaplanan F-kurvesi, KCl izleyici verileriyle iyi bir uyum gösterdi. Modellerin hiçbirisi izleyicinin yoğunluğunu doğrudan ele almadı, bunun

yerine izleyiciyi skaler taşıma denklemleri kullanarak ele aldı (en azından yoğunluğun birleştiğinden bahsetmediler) (Ren, Mu, Liu, Li, & Yu, 2009).

Türbülanslı akışın sayısal simülasyonu DNS, LES ve RANS simülasyon tekniklerini kullanır. DNS, türbülanslı akışın hesaplanmasının en doğru ancak en maliyetli yöntemidir. Endüstriyel HAD uygulamalarında, RANS simülasyon yöntemi hala türbülanslı akışlarla başa çıkmak için ana stratejilerden biridir ve seçilen türbülans modeli, incelenen senaryoya bağlı olarak belirlenmelidir. Geleneksel olarak, k-e modeli, biyoreaktörlerde karışımı modellemek için en sık kullanılan türbülans modeli olmuştur. Özel amaçlar için Reynolds stres modeli (RSM), gerçekleştirilebilir k-e, standart k-x ve benzeri diğer modeller de test edilmiştir. İki denklemlilik türbülans modelleri, genellikle yerel izotropik türbülansı varsayan Boussinesq hipotezine dayanır. Bu modeller, hesaplama maliyeti açısından daha ekonomiktir, ancak heterojen türbülanslı akışları tahmin etmek konusunda sınırlıdır. RSM, momentum denklemlerini çözmeden önce her Reynolds gerilimi için taşıma denklemlerini çözerek, izotropik girdap-viskozite hipotezini reddeder. Bu yaklaşım, yoğun girdaplı akışların yanı sıra gerilim tarafından yönlendirilen ikincil akışları çoğaltmak için kullanılabilir. Tüm türbülanslı akışlara tek bir türbülans modelinin uygulanamayacağı göz önüne alındığında, RANS simülasyon yaklaşımı kullanılırken uygun türbülans modelinin seçimi son derece önemlidir (Huang, 2001).

5.1.3. Malzemeler ve yöntemler

5.1.3.1. Geometri oluşturma



Şekil 5.2 : Geometri alanı.

Şekil 5.2 CSTR reaktörün değişken hızlarda ki karıştırıcı miline ait bire bir ölçekteki resmini göstermektedir. Üst kısımdan redüktöre alt kısımdan ise reaktörün orta kısmından yatağa monte edilmiştir. Alt çapa ve orta kısımdaki ters açılı kanatlar karışımın en optimal şekilde homojen olarak gerçekleşmesi için tasarlanmıştır.

5.1.3.2. Geometriyi meshleme

Tablo 5.2 : Meshleme özellikleri.

Özellikler Değeri	
Çarpık hücreler	> 0.90
Sabit etki alanı	503529
rotdom2	128123
Çark	46492
rotdom1	227040
Genel	905184
Minimum ortogonal kalite	0,2

"Çarpık hücreler > 0.90" ifadesi, ağız kalitesini ifade eder ve genellikle meshin ne kadar düzgün oluşturulduğunu gösterir. 0.90'dan büyük çarpık hücre oranı, mesh kalitesinin düşük olabileceğini gösterebilir ve bu da simülasyon sonuçlarını olumsuz etkileyebilir.

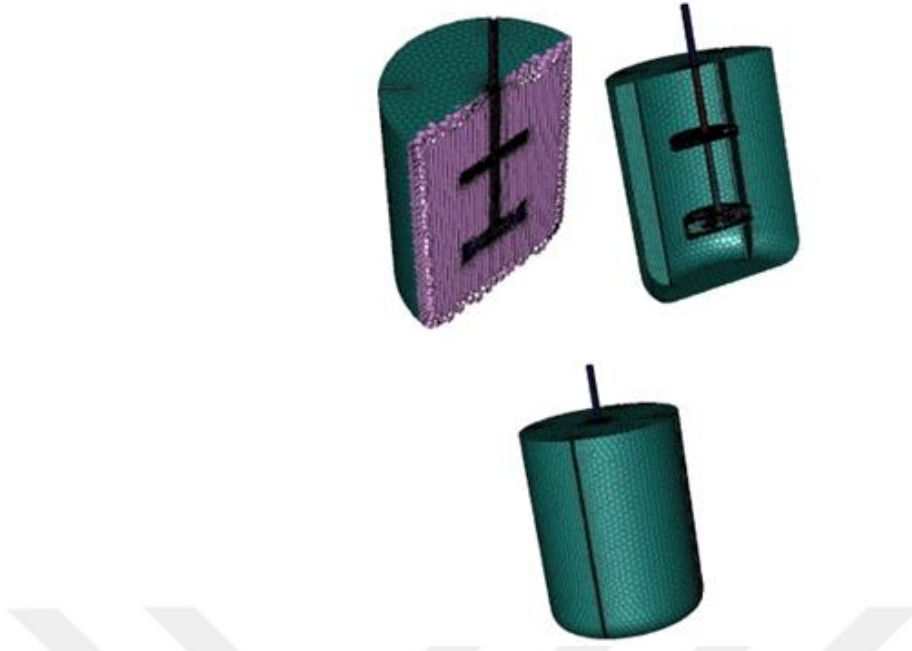
"Sabit etki alanı", sabit bir referans çerçevesinde hesaplanan hücre sayısını belirtir ve burada 503529 hücre olduğu belirtilmiştir.

"rotdom2" ve "rotdom1", dönen referans çerçevelerini temsil ediyor ve sırasıyla 128123 ve 227040 hücre içerdiği listelenmiştir.

"Çark" kelimesi, simülasyonun bir parçası olan türbin çarkı gibi dönen bir bileşeni ifade ediyor ve 46492 hücre içerdiği belirtilmiştir.

"Genel" ise, meshin toplam hücre sayısını ifade ediyor ve burada 905184 hücre sayısı verilmiştir.

"Minimum ortogonal kalite" mesh hücrelerinin geometrisinin kalitesini ifade eden bir metriktir. 0,2 değeri, meshin minimum kalitesinin kabul edilebilir bir sınırdan olduğunu gösteriyor , ancak genellikle daha yüksek bir değer tercih edilir.



Şekil 5.3 : Alanları ağıladıktan sonra.

Şekil 5.3’de, üç boyutlu bilgisayar modellemesi kullanılarak oluşturulmuş üç farklı nesnenin ağ yapısını (mesh structure) gösteren görüntüler bulunuyor. Ağ yapısı, nesnelerin sanal bir ortamda nasıl temsil edildiğini ve analiz için nasıl hazırlandığını gösterir.

- En üstteki resim, bir dikdörtgen prizma şeklindeki nesnenin iç ve dış yüzeylerini kaplayan ağ yapısını gösteriyor. İç yüzeyde mor renkli ağ yapısı dikkat çekmekte ve bu, farklı bir malzeme veya bölgeyi temsil ediyor olabilir.
- Ortadaki resimde, benzer bir prizma şeklindeki nesne ancak eğimli bir konumda görülmekte. Nesnenin üzerinde siyah çizgilerle belirtilmiş üç yatay kesit var ve bu kesitler, ağ yapısının farklı bölümlerini gösteriyor olabilir.
- En alttaki resimde ise, silindirik bir nesnenin ağ yapısı görülmekte ve yine üzerinde bir siyah çizgi ile belirtilmiş bir kesit bulunmaktadır.

Bu görüntüler, mühendislik ve tasarım süreçlerinde kullanılan nesnelerin sonlu elemanlar yöntemi (Finite Element Method - FEM) veya hesaplamalı akışkanlar dinamiği (Computational Fluid Dynamics - CFD) gibi yöntemlerle analiz edilmeden önce nasıl hazırlandığını gösterir. Ağ yapısı ne kadar düzgün ve detaylı olursa, simülasyon sonuçları o kadar doğru ve güvenilir olur.

5.1.3.3. Özellikleri ayarlama

Tablo 5.3 : Ansys-Fluent koşulları.

Kurulum Başlığı Özellikler
Modeli
Viskoz k-epsilon, Gerçekleştirilebilir
Malzemeler
Hvgo Yoğunluk, kinematik viskozite
Yöntemler
Şema Basit
Gevşeme faktörleri altında
Basınç* 0,5
Momentum* 0,5
Başlatma
Türbülanslı kinetik enerji (m2/s2) 0,01
Türbülans yayılım oranı (m2/s3) 0,1
Yineleme sayısı 1000

* akıcı kullanım kılavuzundan derlenmiştir.

Ansys Fluent adlı hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) yazılımında yapılan bir simülasyonun ayarlarını içeren bir tablo görünmektedir. Bu tür tablolar, simülasyonun nasıl yapılandırıldığını ve hangi koşullar altında çalıştırıldığını gösterir.

- "Modeli" başlığı altında, viskozite modeli olarak "k-epsilon" seçilmiş ve bu modelin "Gerçekleştirilebilir" bir versiyonu kullanılmış. K-epsilon modeli, türbülanslı akışları modellemek için yaygın olarak kullanılan bir yaklaşımdır ve "gerçekleştirilebilir" sürümü, bazı akış durumlarında daha stabil ve doğru sonuçlar vermek üzere optimize edilmiştir.
- "Malzemeler" başlığında, simülasyonda kullanılan materyalin "Hvgo" olduğu ve bu materyalin yoğunluğu ile kinematik viskozitesi gibi özellikleri tanımlanmış. "Hvgo" muhtemelen ağır vakum gaz yağı gibi bir petrol ürününü ifade ediyor.
- "Yöntemler" kısmında, çözüm algoritması olarak "Basit" şeması seçilmiş. "Basit" (SIMPLE), akışkanlar dinamiğinde basınç-akış alanı ilişkisini çözmek için kullanılan bir algoritmadır.
- "Gevşeme faktörleri" altında, basınç ve momentum için 0,5 değerleri belirlenmiş. Bu faktörler, sayısal çözümün kararlılığını arttırmak için kullanılır ve genellikle 0 ile 1 arasında bir değer alır.
- "Başlatma" bölümünde, türbülanslı kinetik enerji ve türbülans yayılım oranı için başlangıç değerleri tanımlanmış. Bu değerler, simülasyonun başlangıç koşullarını belirler.

- "Yineleme sayısı" olarak 1000 belirtilmiş, bu da çözümün yakınsaması için yapılacak toplam iterasyon sayısını ifade eder.

Bu tür detaylı bilgiler, HAD analizinin doğru ve etkili bir şekilde yapılandırılmasında önemlidir.

Tablo 5.4 : Modelleme çalışması için deneysel koşullar (kararlı durum, $t=0$ s).

Özellikler Değeri
HGVO
Yoğunluk 920 kg/m ³
Kinematik viskozite 0.01 cSt
Döner hız 20 rpm

Bu tablo, kararlı durum koşullarında (yani, zaman $t=0$ saniye olarak belirlendiğinde) bir simülasyon veya deneysel çalışma için belirli parametre değerlerini listelemektedir.

- "HGVO" (Ağır Vakum Gaz Yağı anlamına gelen Heavy Gas Oil veya benzeri bir petrol ürünü), çalışmada kullanılan malzemenin adı olarak belirtilmiştir.
- "Yoğunluk" değeri 920 kg/m³ olarak verilmiş, bu da HGVO'nun yoğunluğunun metre küp başına 920 kilogram olduğunu gösterir. Bu değer, maddenin kütleli yoğunluğunu ifade eder ve genellikle akışkanlar dinamiğinde önemli bir parametredir.
- "Kinematik viskozite" birimi olarak cSt (sentistok) kullanılmıştır. Ancak, kinematik viskozitenin kendisi verilmemiş, bu yüzden bu değer ne olduğunu bilmek için ek bilgiye ihtiyaç vardır. Kinematik viskozite, akışkanın iç sürtünmesinin bir ölçüsüdür ve sıklıkla akışkanın akış karakteristiklerini anlamak için kullanılır.
- "Döner hız" ise dakikada 20 devir (rpm) olarak belirtilmiştir. Bu değer, bir dönen bileşenin veya ekipmanın operasyonel hızını ifade eder ve genellikle türbinler, pompalar veya karıştırıcılar gibi döner ekipmanlarda önemlidir.
- Hesaplamalar 10^{-4} yakınsama hassasiyetine göre belirlenmiştir.

5.1.4. Sonuçlar ve tartışmalar

Elde edilen sonuçlar Tablo 5.5'te sunulmuştur (kararlı durum, $t=0$ s).

Tablo 5.5 : Simülasyon sonuçları.

Özellikler Tork Gücü (W)
Çark (yukarı) 0.0027533413 5,77e-3
Çark (aşağı) 0.0054068898 11,32e-3

Tablo 5.5, bir simülasyonun sonuçlarını gösteren bir tabloyu içeriyor. Tablo 5.4. belirli bir bileşen olan "Çark" için tork ve güç özelliklerine ait değerleri listeliyor. Bu değerler, simülasyonda elde edilen sonuçları ve çarkın farklı konumlarındaki performansını yansıtıyor.

- "Çark (yukarı)" için tork değeri 0.0027533413 birim olarak belirtilmiş. Bu, çarkın yukarı konumundayken üzerine uygulanan dönme momentini ifade ediyor. Tork, bir kuvvetin dönme etkisi yaratma kapasitesidir ve genellikle Newton-metre (Nm) cinsinden ölçülür.
- Aynı çark için güç (Power) değeri 5,77e-3 watt (W) olarak verilmiş. Bu değer, çarkın yukarı konumundayken gerçekleştirdiği işin hızını ifade eder. Güç, birim zamanda yapılan iş veya tüketilen enerji miktarını ölçer.
- "Çark (aşağı)" için tork değeri, 0.0054068898 birim olarak daha yüksek bir değerle listelenmiş. Bu, çarkın aşağı konumundayken uygulanan torkun yukarı konuma göre daha yüksek olduğunu gösteriyor.
- Bu çark konumu için güç değeri ise 11,32e-3 watt olarak verilmiş ve yine bu değer, çarkın aşağı konumundayken daha fazla güç ürettiğini veya tükettiğini gösteriyor.

Özellikle, mühendislik ve tasarım süreçlerinde bu tür veriler, ekipmanın verimliliğini, gereksinimlerini ve optimizasyon potansiyelini değerlendirmek için kritik öneme sahiptir.

En iyi hvgö'nün fiziksel özelliklerini bulmak için. Hem yoğunluk hem de kinematik viskozite değerleri optimize edilmelidir. Optimizasyon sonuçları Tablo 5.6' da sunulmuştur.

Bir optimizasyon çalışmasının sonuçlarını özetleyen bir tablodur. Bu tablo, farklı yoğunluk ve kinematik viskozite değerlerine göre bir çarkın yukarı ve aşağı konumlarındaki tork ve güç ölçümlerini listeliyor.

Tablo 5.6 farklı yoğunluklarla başlayarak (860 kg/m³'den 1000 kg/m³'ye kadar) ve ardından farklı kinematik viskozite değerleriyle (0,01 kg/m-s'den 0,1 kg/m-s'ye kadar)

çarkın performansını gösteriyor. Her yoğunluk için "Çark (yukarı)" ve "Çark (aşağı)" olmak üzere iki ayrı tork ve güç değeri bulunuyor. "Toplam (W)" sütunu, her bir senaryo için çarkın üst ve alt konumlarındaki güç değerlerinin toplamını veriyor.

- Örneğin, yoğunluk 860 kg/m^3 olduğunda, çarkın yukarı konumundaki tork 0.002659 ve güç $5,57\text{e-}3$ watt olarak ölçülmüş. Çarkın aşağı konumundaki tork 0.005399 ve güç $11,31\text{e-}3$ watt, toplam güç ise 0,01688 watt.
- Yoğunluk arttıkça (880 kg/m^3 , 900 kg/m^3 , vs.) tork ve güç değerlerinde de genel bir artış görülüyor. Bu eğilim, yoğunluğun artışıyla tork ve güç değerlerinin nasıl etkilendiğini gösteriyor.
- Kinematik viskozite için de benzer bir analiz yapılmış ve viskozite arttıkça hem tork hem de güç değerlerinde önemli bir artış görülüyor.

Tablo 5.6 : Optimizasyon sonuçları.

	Özellikler	Tork	Güç (W)	Toplam (W)
1	Yoğunluk (860 kg/m^3)*			
	Çark (yukarı)	0.002659	$5,57\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.005399	$11,31\text{e-}3$	0,01688
2	Yoğunluk (880 kg/m^3)			
	Çark (yukarı)	0.002696	$5,65\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.005398	$11,31\text{e-}3$	0,01696
3	Yoğunluk (900 kg/m^3)			
	Çark (yukarı)	0.002736	$5,73\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.005413	$11,34\text{e-}3$	0,01707
4	Yoğunluk (920 kg/m^3)			
	Çark (yukarı)	0.002753	$5,77\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.005406	$11,32\text{e-}3$	0,01709
5	Yoğunluk (1000 kg/m^3)			
	Çark (yukarı)	0.002918	$6,11\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.005476	$11,47\text{e-}3$	0,01758
6	Kinematik viskozite ($0,01 \text{ kg/m-s}$)			
	Çark (yukarı)	0.002598	$5,44\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.005009	$1,05\text{e-}2$	0,0159
7	Kinematik viskozite ($0,03 \text{ kg/m-s}$)			
	Çark (yukarı)	0.004354	$9,12\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.015165	$31,32\text{e-}3$	0,04044
9	Kinematik viskozite ($0,04 \text{ kg/m-s}$)			
	Çark (yukarı)	0.005510	$11,54\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.019820	$41,51\text{e-}3$	0,05305
10	Kinematik viskozite ($0,05 \text{ kg/m-s}$)			
	Çark (yukarı)	0.006905	$14,46\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.024468	$51,25\text{e-}3$	0,06751
11	Kinematik viskozite ($0,1 \text{ kg/m-s}$)			
	Çark (yukarı)	0.01163	$24,37\text{e-}3$	
	Çark (aşağı)	0.04232	$88,63\text{e-}3$	0,11300

*kinematik viskozite $0,01082 \text{ kg/m-s}$ 'de tutuldu.

Tablonun altında yer alan not, kinematik viskozitenin yoğunluk değerleri üzerinde yapılan testler sırasında $0,01082 \text{ kg/m-s}$ 'de sabit tutulduğunu belirtiyor. Bu, yoğunluk testlerinde sadece yoğunluğun değişken olduğunu ve viskozitenin sabit kaldığını gösterir.

Bu optimizasyon sonuçları, çarkın farklı çalışma koşullarında nasıl performans gösterdiğini değerlendirmek için kullanılabilir ve tasarımın veya işletme şartlarının iyileştirilmesi için önemli veriler sağlar.

Farklı yakıt türleri ile yapılan çalışmaların güç değerleri Tablo 5.7'de verilmiştir.

Tablo 5.7 çeşitli ticari ağır yoğunluklu yağların model girdilerini ve hesaplanan güç değerlerini içeren bir tablodur. Tablo 5.6. farklı yakıt tiplerinin kinematik viskozitesi, yoğunluğu ve toplam güç (tork) ile en iyi koşullarda elde edilen güç (W) değerlerini listeliyor. Yakıt tipleri arasında hem damıtılmış yakıtlar (örneğin, ISO 8217 standardına göre sınıflandırılmış DMA, DMB, DMC tipleri) hem de artık yakıtlar (RMA, RMB, RMD, RME, RMH, RMK) bulunuyor.

Tablo 5.7 : Ticari ağır yoğunluklu yağların model girdileri ve hesaplanan güç değerleri (Shokry, Abd Elfattah, El-Gayar, Farag, & Sedahmed, 2020).

Yakıt Tipi	Kinematik Viskozite Cst	Yoğunluk, g/cm ³	Toplam Güç (Tork)	En İyi Koşullar (W)
Akaryakıt 6	275	0,971	0.0222140090 0.0832643830	0,220910 0
<i>Damıtılmış bunker yağları (ISO 8217)</i>				
DMA	6	0,88	0.0022539234 0.0035008672	0,0120500
DMB	10	0,89	0.0025637871 0.0045964089	0,0149960
DMC	13	0,91	0.0029160690 0.0059864992	0,0186500
<i>Artık Bunker yağları (ISO 8217)</i>				
RMA 30	29	0,95	0.0042718064 0.0139574300	0,0381800
RMB 30	29	0,974	0.0043771296 0.0143067450	0,0391300
RMD 80	79	0,979	0.0100893180 0.0358607200	0,0096238
RME 180	179	0,99	0.0185313660 0.0662508660	0,1775675
RMH 380	379	0,99	0.0237429180 0.0969753480	0,2528300
RMH 700	699	0,99	0.0265656060 0.1243132000	0,2528320
RMK 380	379	1,009	0.0241980380 0.0988354720	0,2528320
RMK 700	699	1,009	0.0271165720 0.1265201100	0,2528320
<i>HFO (ASTM D396)</i>				
No.1	2,1	0,8008	0.0017386205 0.0024869115	0,0102255
No.2	3,4	0,8489	0.0019698856 0.0029124196	0,0102255
No.4	24	0,9331	0.0020628816 0.0029762405	0,0105539
No.4 light	5,5	0,9331	0.0023539522 0.0036146424	0,0105539
No.5	14,9	0,9648	0.0021961851 0.0032175158	0,0113384
No.5 light	8,8	0,9331	0.0025999542 0.0044405984	0,0147457
No.6	50	0,9648	0.0067080722 0.0239092250	0,0641247

- "Akaryakıt 6" gibi ağır bunker yağlarının kinematik viskozitesi ve yoğunluğu, bu yakıtların fiziksel özelliklerini tanımlıyor. Örneğin, "Akaryakıt 6" için kinematik viskozite 275 cSt ve yoğunluk 0,971 g/cm³ olarak belirtilmiş.
- Toplam güç (tork) değerleri ve en iyi koşullarda elde edilen güç değerleri, yakıtların enerji dönüşüm verimliliğini ifade ediyor. Bu değerler, yakıtların bir motor ya da jeneratörde ne kadar etkili bir şekilde iş yapabileceğini gösterir.
- "HFO (ASTM D396)" kategorisi altında listelenen "No.1", "No.2", "No.4", "No.5" ve "No.6" gibi yakıt tipleri, farklı yoğunluk ve viskozite değerlerine sahip. Bu, ASTM D396 standardına göre sınıflandırılmış ağır fuel oil (HFO) tipleridir.

Tablo, bu yakıtların motor performansı ve enerji verimliliği üzerindeki etkisini değerlendirmek için kullanılabilir. Örneğin, kinematik viskozitenin artması veya yoğunluğun değişmesi, motorun güç çıkışını nasıl etkilediğini gösterir ve bu bilgiler mühendislerin yakıt seçimi ve motor tasarımı üzerindeki kararları için önemlidir.

5.1.5. Modelleme sonuçlarının ekonomik analizi

Modelde elde edilen güç değerleri için 1 kg/m dizel üretmek için gereken ekserji değerleri Tablo 5.8'de verilmiştir.

Tablo 5.8 : Birim ürün için gereken enerji değerleri.

Malzeme	Viskozite	Zaman (1kg/m için)	Ekserji sonuçları (J/kg)
HVGO's	0,01082 kg/m-s	0,010820s	4,3253
DMC	0,01183 kg/m-s	0,01183s	7,2785
HFO no 2	0,008211 kg/m-s	0,008211s	5,3963
Mixture	0,1000 kg/m-s	0,100000s	0,4680

Bu sonuçlara göre, karışım uygulandığında kg başına yaklaşık 0,1696 J enerji tüketildiğinden ekonomik maliyeti hesaplayabiliriz. Buna göre, endüstride kullanılan birim elektrik maliyeti \$0,15/kWh olarak alınırsa, karışımın elektrik tüketim maliyeti 1 saniye için 91.584,00 \$'dır. En iyi durum olarak alınan HVGO'nun karıştırma maliyeti 842.400,00 \$ olarak hesaplanmıştır (Rhee et al., 2021).

5.1.6. Modelleme sonuçlarının üretim hızı analizi

Yüksek Reynolds sayılarında türbülansın dağılması için son yedi on yıl boyunca türbülans ders kitaplarına ve araştırma çabalarına hakim olan tek mekanizma

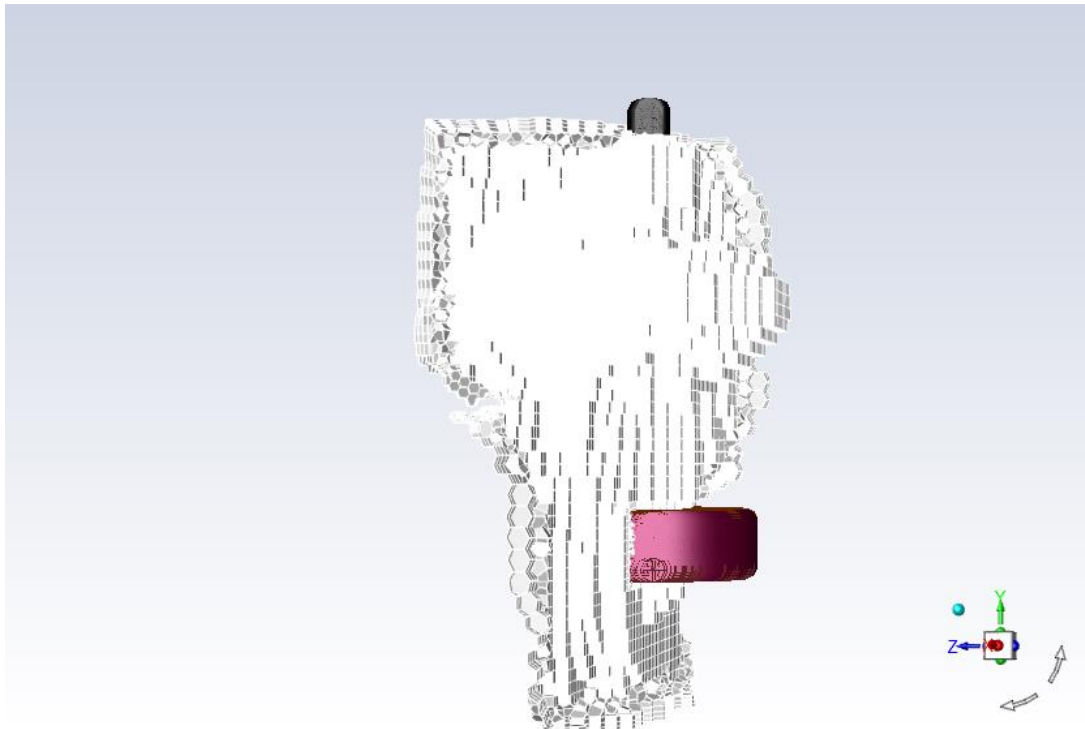
Richardson-Kolmogorov kaskadıdır. Sert engeller, türbülanslı akışların onlara bağlandığı veya onlardan etkilendiği zaman kendi dağılma süreçlerini de tanıtır. Ancak, Richardson-Kolmogorov kaskadı, sınırı olmayan türbülanslı akışlarda olduğu gibi, bu akışların birçoğunda mevcuttur (veya en azından mevcut olduğu düşünülmektedir) ve bu inceleme bu nedenle bu kaskad tarafından oluşturulan her yerde bulunan türbülans dağılma sürecine odaklanmaktadır (Campbell, Cardoso, & Hayhurst, 2006). En düşük ayrışma oranına sahip durum en iyi durumu temsil eder. Hesaplamalar aşağıdaki formüle göre bulunmuştur.

$$\varepsilon = \frac{U^3}{L} \quad (5.1)$$

Burada U^2 , türbülanslı kinetik enerjiye eşittir. Akışkan uygulamasına girilen 0,01'lik türbülanslı kinetik enerji ve 0,1'lik türbülanslı dağılma oranından L değeri kolayca belirlenebilir. Bu durumda, L değeri 0,01 m olarak sıvı akışının birim integral uzunluğu alınabilir (Campbell et al., 2006). Buna göre, Tablo 5.9' da oluşturulmuştur.

Tablo 5.9 : Ayırma oranlarına göre elde edilen koşulların sonuçları.

Material	U^2	U^3	ε ($m^2/s^3=W/kg$)	Time (for the 1kg/m)	U^3_{new}	U^2_{new}	% estimated product conversion
HVGO's	1,619	2,060	206,0	0,010820s	2,22892	1,706	5,10
DMC	1,620	2,062	206,2	0,01183s	2,439346	1,812	10,6
HFO no 5 light	1,617	2,056	205,6	0,008211s	1,6881816	1,418	14,03



Şekil 5.4 : Maksimum static pressure is 3746,469 pascal.

Şekil 5.4'de karışımdaki ham maddenin merkezden dönme hareketine bağlı olarak mikser etrafında değiştiği görülmektedir. Maksimum basınç değeri genellikle reaktör ortamına bağlı olarak üst mikserde ham madde tarafından uygulanan maksimum basıncı gösterir. Şekil 5.4'de görüldüğü üzere, en düşük basınçlar karıştırma hareketinin daha az olduğu alt bölgede meydana gelir. Benzer sistemlerde, maksimum basıncın dönme eksenine bağlı olarak duvarlara uygulandığı bilinmektedir. Statik basınç ve yoğunluğun aynı eğilimi verdiğini söyleyebiliriz. Merkezden olan hareketin, basıncın düşük olduğu bölgelerde ham maddenin yoğunluğunu küçük miktarlarda oluşturduğunu söyleyebiliriz. Ancak, merkezden olan dönme hareketinin düşük olduğu taban bölgesinde yoğunluk profili düşük olduğunu söyleyebiliriz. Yoğunlukla basıncın değişimi için benzer yorumlar birçok çalışmada mevcuttur. 20 dev/dk yaklaşık olarak 2,094 m/s'ye karşılık gelir. Genellikle maksimum hızın 1,16 m/s olduğu durum, karıştırılan ham maddenin karıştırma sistemine uyguladığı basıncı ortaya koymaktadır. Bunun çok fazla olması, genel olarak karıştırmanın iyi yapılmadığını tahmin etmemize olanak tanır. Büyük enerji zengini hareketlerin sürekli olarak daha küçük girdaplara aktarıldığı bölgeler, en yüksek karıştırma hızına sahip bölgelerdir. Bu, girdaplar tarafından yüksek enerjili zeminden düşük enerjili zemine ısı enerjisi olarak dağıtıldığı varsayımından kaynaklanmaktadır. Yüksek türbülans yoğunluğu, reaktör boyutunun aslında olması gerektiğinden daha küçük olması nedeniyle türbülans yoğunluğunun arttığı anlamına gelir. Bu, düşük hacim geometrisinde karıştırma hızını artırmanın, beslemedeki mikrosferik katalizörün daha verimli karışmasını kolaylaştıracağı anlamına gelir. Moleküler viskozitenin karıştırma oranı boyunca sabit kalmış olması, sistemin karıştırılması sırasında ham maddenin herhangi bir faz değişikliği olmadan katalizörle karıştırılabileceğini göstermektedir. Duvar kayma gerilimindeki artış, karışımın ideal olmadığı ve katalizörün reaktörde kolayca karışmadığı anlamına gelir. Reaksiyon süresi boyunca karışımın homojenliği, karıştırma hızına bağlı olarak ideal viskozite ve yoğunlukta bir karışım beslenerek mümkündür. Yüzey sürtünme katsayısı, homojen karışımdaki kütle transferinin tam olarak gerçekleşip gerçekleşmediği hakkında bilgi verir. Bu durum, yoğunluk artışının sürekli arttığı ve boyutsuz kütle transferi ve ısı transferini artırdığı daha yoğun bir bölgeden daha az yoğun bir bölgeye geçiş olarak açıklanabilir. Bu nedenle etkili bir müdahalede bulunulmuştur. Bu değerin yüksek olması, bunun en önemli göstergesidir. Bir karıştırma reaktörünün kütle dengesizliği çok düşük olmalıdır. Bu, homojen

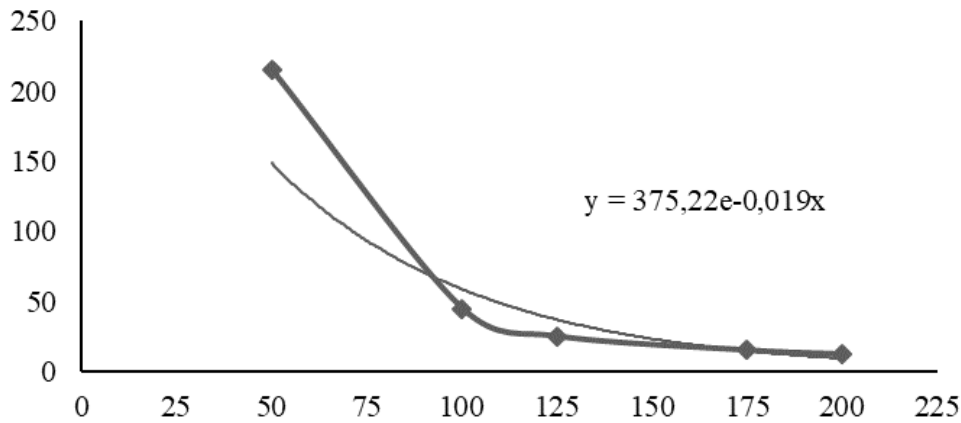
kariřımın bozulduęu durumların en önemli göstergesidir. Bu aynı zamanda kariřtırıcı tarafından tüketilen gücü en aza indirmeye de yardımcı olur.

5.1.7. Modelin doęrulanması

Model sonuçları, deneysel deęerlerle aynı çıktıları göstermektedir. Örneęin, deneyde kullanılan uygun katalizör yaklaşık 1100 kg/m³tür ve hesaplanan mikrosferik katalizör yoğunluęu 1150 kg/m³tür. Model iyi bir řekilde doęrulanmıřtır.

Tablo 5.10 : Ham madde (DEAY) viskozitesinin sıcaklıęa göre deęiřimi.

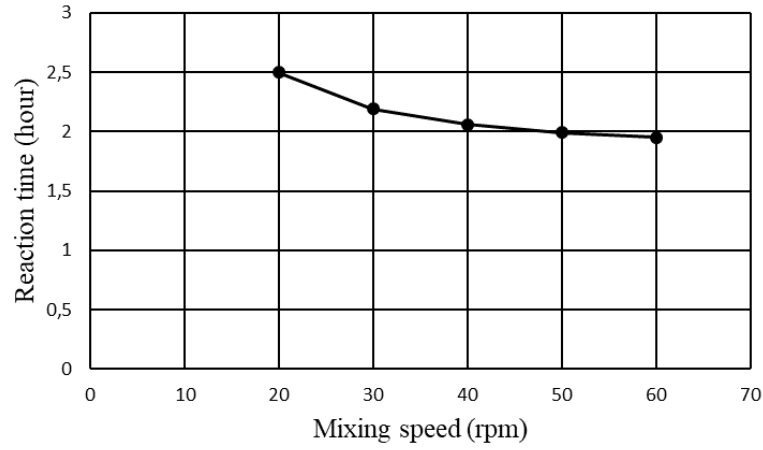
Temperature °C	Viscosity (cPs)
50	215
T100	45
125	25
175	15
200	12
370	0,33 60



řekil 5.5 : Hammadde vizkozitesinin sıcaklıęa göre deęiřimi.

5.1.8. Kariřtırıcı hızının optimizasyonu

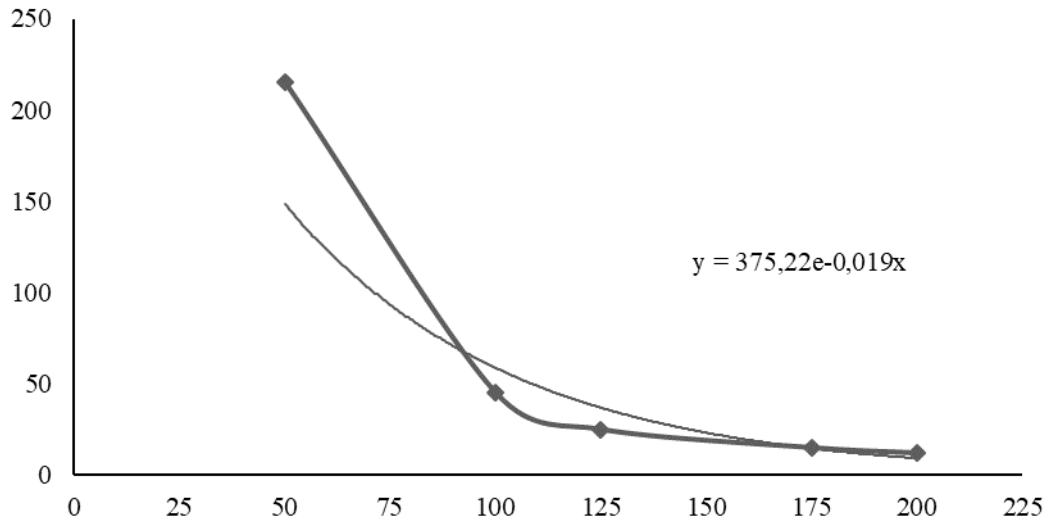
Yeni bir çalıřma, 920 kg/m³ ve 0,052 kg/ms özelliklerine sahip ham ağır yakıt yaęı benzeri bir madde için en iyi kariřtırma hızını bulmak amacıyla gerçekteřtirildi. Kariřtırma hızı 20, 30, 40, 50, 60 dev/dak aralıęında deęiřmektedir.



Şekil 5.6 : Tepkime süresi ile karıştırma hızı arasındaki değişen ilişki.

Tablo 5.11 : Ayırma oranlarına göre elde edilen koşulların sonuçları.

Material	U^2	U^3	ϵ ($m^2/s^3=W/kg$)	Time (for the 1kg/m)	U^3_{new}	U^2_{new}	% estimated product conversion
HVGO's	1,619	2,060	206,0	0,010820s	2,22892	1,706	5,10
DMC	1,620	2,062	206,2	0,01183s	2,439346	1,812	10,6
HFO no 5 light	1,617	2,056	205,6	0,008211s	1,6881816	1,418	14,03



Şekil 5.7 : Hammadde vizkozitesinin sıcaklığa göre değişimi.

Şekil 5.6' da görüldüğü üzere, karıştırma hızı 20 dev/dak'dan 60 dev/dak'ya artırıldığında, tepkime süresi 2,5 saat (deneysel sonuç) ile yaklaşık 1,95 saat arasında azaldı. Karıştırma hızı 20 dev/dak'dan 60 dev/dak'a artırıldığında hesaplanan tepkime dönüşümü %70,01'den yaklaşık %90,0'a kadar arttı. Şekil 5.6' da görüldüğü gibi bu artış doğrusal bir artış değildir. Sürecin ekonomik değeri açısından tepkime süresinin en çok kısaldığı değişiklik, karıştırma hızının 20 dev/dak'tan 30 dev/dak'ya değiştiği zamanda meydana geldi. Bu durumda, yararlı enerji kullanım değeri 0,002257565 J/kg

olarak hesaplanmıştır. Bu değer, tüm karıştırma hızı değerlerinde elde edilen ekserji değerleriyle karşılaştırıldığında en düşük değerdir. Hem maksimum tepkime süresi azalması hem de en düşük ekserji değeri nedeniyle, simülasyonla bulunan ideal karıştırma hızı 40 dev/dak'dır.

5.1.9. Kanat hızının optimizasyonu ve doğrulama

HAD çalışmalarında dönüşüm oranları 30 rpm'de %16.2, 40 rpm'de %11.9 ve 50 rpm'de %20.3 olarak hesaplanmıştır. Gerçek deneylerde ise bu değerler sırasıyla %25.8, %23.4 ve %26.8 olarak bulunmuştur. R^2 değeri %95.2'dir.

Sunulan veriler, farklı kanat hızları (30, 40 ve 50 rpm) içeren bir işlemde, Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD) çalışmalarından elde edilen dönüşüm oranları ile gerçek deneylerde bulunan değerler arasında önemli bir fark olduğunu göstermektedir. Ayrıca, %95.2 olan R^2 değeri, çalışmanızdaki değişkenler arasında yüksek düzeyde bir korelasyon olduğunu göstermektedir.

5.1.10. HAD ve deneysel sonuçlar arasındaki uyumsuzluk

- HAD sonuçları, deneysel bulgulara (sırasıyla aynı hızlarda %25.8, %23.4 ve %26.8) kıyasla daha düşük dönüşüm oranları göstermektedir (%16.2, %11.9 ve %20.3). Bu farklılık birkaç faktörden kaynaklanıyor olabilir:
- Model kısıtlamaları: HAD modeli, kanatçıkların etrafındaki detaylı akışkan dinamikleri gibi fiziksel sistemin karmaşıklıklarını tam olarak yakalayamayabilir.
- Basitleştirilmiş varsayımlar: HAD simülasyonları genellikle gerçek dünya davranışlarından farklılıklara yol açabilen basitleştirmeler veya varsayımlar (örneğin, idealize akış koşulları veya malzeme özellikleri) gerektirir.
- Deneysel değişkenlik: Gerçek deneylerde, HAD modelinde tam olarak yansıtılmayan koşullar (örneğin, sıcaklık dalgalanmaları, malzemelerdeki safsızlıklar) olabilir.

5.1.11. Yüksek R^2 değeri çıkarımları

- %95.2'lik R^2 değeri oldukça yüksektir ve çalışmanızdaki girdi değişkenleri ile sonuçlar arasında güçlü bir korelasyon olduğunu gösterir. Bu, mutlak değerlerdeki farklılıklara rağmen, HAD simülasyonlarında gözlemlenen

eğilimlerin veya desenlerin deneysel verilerle yakından uyumlu olduğunu öne sürmektedir.

- Bu yüksek R^2 değeri umut vericidir çünkü, HAD modelinin tam olarak dönüşüm oranlarını tahmin etmede mükemmel olmamasına rağmen, işlemdeki değişikliklerin yönünü ve göreceli büyüklüklerini anlamada hala değerli olduğunu ima eder.

5.1.12. Gelecek çalışmalar için düşünceler

- Farklılığı azaltmak için HAD modelinin daha ayrıntılı bir şekilde geliştirilmesi gerekebilir. Bu, kritik alanlarda daha detaylı ağ yapısı oluşturulmasını, daha karmaşık akışkan davranış modellerinin dahil edilmesini veya simülasyon parametrelerinde ayarlamalar yapılmasını içerebilir.
- Daha fazla deneysel doğrulama, HAD modelinin nerede ayarlama gerektirdiğini belirlemeye yardımcı olabilir.
- HAD ve deneysel sonuçlar arasındaki tutarlı eğilimler, yüksek R^2 değeri tarafından gösterildiği gibi, mutlak değerler farklı olsa bile, işlem tasarımı veya işletme parametrelerinde tahmin edici ayarlamalar yapmak için kullanılmalıdır. HAD çalışmaları ile gerçek deneyler arasında dönüşüm oranlarında dikkate değer farklılıklar olmasına rağmen, yüksek korelasyon katsayısı, HAD modelinin sistemin temel davranışlarını etkili bir şekilde yakaladığını göstermektedir. Bu, modeli daha da geliştirmek ve süreç optimizasyonu ve karar verme için güvenilir bir araç olarak kullanmak için bir fırsat sunmaktadır.



6. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, karıştırma hızının 20 dev/dak olduğunda verilen bir geometri için en uygun ham maddeyi belirlemek amaçlanmıştır. Karıştırma hızının önemi, ağır petrol fraksiyonu ile ham maddenin 370 °C tepkime sıcaklığına ısıtılınca kadar homojen hale gelmesidir. Sıvı katalizörün çatlatma mekanizmasını etkili bir şekilde harekete geçirebilmesi için gerekli olan ideal fiziksel karıştırma koşulları oluşturulmuştur. Bu durumda, karıştırma mekanizmasındaki torka bağlı olarak tüketilen gücü bularak en ideal ham maddenin RME 180 olduğunu söyleyebiliriz. Ancak, Tablolarda belirtilen kap için ideal koşullara (880 kg/m³, 0,1000 kg/m-s) RME'yi (990 kg/m³, 0,1808 kg/m-s) uyarlamak için belirtilen diğer bileşenlere uyarlanacaktır. (Burada, yoğunluğa dayalı olarak ideal karışımın yapılmasına karar verildi (Cao, Dubé, & Tremblay, 2008).) RME (%40) ve HFO No.1 (%59) karışımı için karışım kullanılabilir ve katalizör besleme yoğunluğu 1152,8 kg/m³ olabilir. Literatür, yoğunluğu yaklaşık 1152,8 kg/m³ olan bir mikrosferik katalizörün tepkime için daha yararlı olabileceğini göstermektedir (Di Blasi & Branca, 2013). Sonraki çalışma, HFO + RME karışımının çatlatılması için katalizör üzerinde çalışılacaktır. Sonuç olarak, karışım kullanıldığında, işletme maliyeti en iyi duruma göre \$6.5e-08'den \$7.03-9'a düşer, bu da 10'da biridir. Bu durumda, karışımın işletme maliyeti ideal koşullardadır. Karıştırma sırasında moleküllerin dağılma oranlarının (ϵ) RME180 ve HFO no 5 hafif yağını ayrı ayrı kullanmak yerine, ideal koşullar veren HVGO koşullarında kullanıldığında dönüşüm yüzdesinin %6,61 ve %15,75'ten %27,95'e değiştirilebileceği görülecektir.

Özetle işlemde kullanılan hammadde, 370 °C'ye kadar 600 mmbar'da destile edilmiş endüstriyel atık yağ kalıntılarıdır. Ham madde, yoğunluğu 920 kg/m³ ve parlama noktası 220 °C olan bir madde olarak tanımlanmıştır. Vizkozite ölçümleri, sıcaklığın artışıyla üstel bir fonksiyon olarak azalmakta ve 370 °C'de 0,33 cps olarak ölçülmüştür.

FTIR analizi, ham maddenin ve elde edilen ürünlerin kimyasal bileşenlerini belirlemek için kullanılmıştır. Analizler, alifatik C-C ve C-C-H bağlarını, aromatik ve alifatik

C=C çift bağlarını ve C-H bağlarını tespit etmiştir. Bu spektrumlar, örneklerin kimyasal içeriklerinin kalitatif ve kantitatif analizlerinde kullanılmıştır.

Verimlilik hesaplamalarına göre, ilk çevrimde hammadde olarak kullanılan 10 kg'dan 5 kg destilat elde edilmiş ve verim %50 olarak hesaplanmıştır. İkinci çevrimde, kalan hammadde miktarından 2.25 kg destilat elde edilmiş ve verim %47.4 olarak bulunmuştur. Toplamda, hammadde miktarının %72.5'i destilat olarak kazanılmıştır.

Gösterilen üç farklı FTIR spektrumu, ham maddenin ve işlemden geçmiş ürünlerin (filtrelenmiş ve kalan kalın dip) kimyasal yapılarının karşılaştırmalı bir değerlendirmesini sunmaktadır. Bu spektrumlar, işlemin her aşamasında maddenin kimyasal yapısındaki değişiklikleri gözlemlemek için kullanılmıştır.

Bu analizlerin sonuçları, distilasyon işlemi sırasında maddenin kimyasal ve fiziksel özelliklerindeki değişiklikleri anlamak, ürün kalitesini değerlendirmek ve süreç verimliliğini optimize etmek için kullanılabilir.

HAD çalışmaları ve gerçek deneyler arasında dönüşüm oranları açısından önemli farklar bulunmuştur. HAD'da 30 rpm'de %16.2, 40 rpm'de %11.9 ve 50 rpm'de %20.3 olarak hesaplanan dönüşüm oranları, gerçek deneylerde sırasıyla %25.8, %23.4 ve %26.8 olarak bulunmuştur. %95.2'lik R^2 değeri, değişkenler arasında yüksek düzeyde korelasyon olduğunu gösterir. Ancak, HAD sonuçlarının düşük çıkması model kısıtlamaları, basitleştirilmiş varsayımlar veya deneysel değişkenlik gibi faktörlerden kaynaklanıyor olabilir.

Yüksek R^2 değeri, modelin kesin dönüşüm oranlarını tahmin etmede mükemmel olmamasına rağmen, süreçteki değişikliklerin yönünü ve göreceli büyüklüklerini anlamada değerli olduğunu gösterir. Bu durum, modelin daha detaylı ağ yapısı oluşturulması, karmaşık akışkan davranış modellerinin dahil edilmesi veya simülasyon parametrelerinde ayarlamalar yapılması gibi yollarla geliştirilmesi gerektiğine işaret eder. Ayrıca, deneysel doğrulama, HAD modelinin nerede ayarlanması gerektiğini daha iyi belirlemeye yardımcı olabilir. HAD ve deneysel sonuçlar arasındaki tutarlı eğilimler, işlem tasarımı veya işletme parametrelerinde tahmin edici ayarlamalar yapmak için kullanılabilir. HAD modeli, mutlak değerler farklı olsa bile, temel davranışları etkili bir şekilde yakaladığından, süreç optimizasyonu ve karar verme için güvenilir bir araç olarak kullanılabilir.

KAYNAKLAR

- Abdelgalil, A. A., & Alkahtani, H. M. (2023). Chapter Two - Crizotinib: A comprehensive profile. In A. A. Al-Majed (Ed.), *Profiles of Drug Substances, Excipients and Related Methodology* (Vol. 48, pp. 39-69): Academic Press.
- Aimikhe, V. J., Iloke, E., Okoro, E. E., & Ogali, O. I. (2024). 2 - Challenges of wet natural gas. In M. R. Rahimpour, M. A. Makarem, & M. Meshksar (Eds.), *Advances in Natural Gas: Formation, Processing, and Applications* (pp. 29-52): Elsevier.
- Ali, W., Khan, M. S., Qyyum, M. A., & Lee, M. (2018). Surrogate-assisted modeling and optimization of a natural-gas liquefaction plant. *Computers & Chemical Engineering*, 118, 132-142. doi:<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.08.003>
- Allen, D. T. (1991). STRUCTURAL MODELS OF CATALYTIC CRACKING CHEMISTRY. In G. Astarita & S. I. Sandler (Eds.), *Kinetic and Thermodynamic Lumping of Multicomponent Mixtures* (pp. 163-180). Amsterdam: Elsevier.
- Ancillotti, F., & Fattore, V. (1998). Oxygenate fuels: Market expansion and catalytic aspect of synthesis. *Fuel Processing Technology*, 57(3), 163-194. doi:[https://doi.org/10.1016/S0378-3820\(98\)00081-2](https://doi.org/10.1016/S0378-3820(98)00081-2)
- Andreev, P. F., Bogomolov, A. I., Dobryanskii, A. F., & Kartsev, A. A. (1968). CHAPTER IV - THERMODYNAMICS OF LOW TEMPERATURE TRANSFORMATION OF HYDROCARBONS. In P. F. Andreev, A. I. Bogomolov, A. F. Dobryanskii, & A. A. Kartsev (Eds.), *Transformation of Petroleum in Nature* (pp. 174-221): Pergamon.
- Asinger, F. (1968a). CHAPTER 2 - THE DIRECT PREPARATION OF THE OLEFINS. In F. Asinger (Ed.), *Mono-Olefins* (pp. 53-217): Pergamon.
- Asinger, F. (1968b). CHAPTER 12 - DOUBLE-BOND ISOMERIZATION IN THE MONO-OLEFINS AND ITS PRACTICAL IMPORTANCE. In F. Asinger (Ed.), *Mono-Olefins* (pp. 1020-1113): Pergamon.
- Babu, P. R., & Sarma, V. V. (2019). Chapter 11 - Fungi as Promising Biofuel Resource. In J. S. Singh & D. P. Singh (Eds.), *New and Future Developments in Microbial Biotechnology and Bioengineering* (pp. 149-164): Elsevier.
- Bai, Y., & Bai, Q. (2005). Chapter 21 - Wax and Asphaltenes. In Y. Bai & Q. Bai (Eds.), *Subsea Pipelines and Risers* (pp. 383-398). Oxford: Elsevier Science Ltd.
- Bai, Y., & Bai, Q. (2010). Chapter 16 - Wax and Asphaltenes. In Y. Bai & Q. Bai (Eds.), *Subsea Engineering Handbook* (pp. 483-504). Boston: Gulf Professional Publishing.

- Bai, Y., & Bai, Q. (2019). 16 - Wax and Asphaltenes. In Y. Bai & Q. Bai (Eds.), *Subsea Engineering Handbook (Second Edition)* (pp. 435-453). Boston: Gulf Professional Publishing.
- Beşergil, P. D. B. (2007). *Hampetrolden Petrokimyasallara El Kitabı* (P. D. B. Beşergil Ed. Vol. 1. baskı).
- Bozkurt, O. D., Okonsky, S. T., Alexopoulos, K., & Toraman, H. E. (2022). Chapter Four - Catalytic conversion of SPW and products upgrading. In D. Moscatelli & M. Pelucchi (Eds.), *Advances in Chemical Engineering* (Vol. 60, pp. 117-168): Academic Press.
- Bricker, J. C., Rekoske, J. E., & Glover, B. (2007). 7 - New Catalytic Technologies for the Industrial Production of Ethylene and Propylene. In K. Eguchi, M. Machida, & I. Yamanaka (Eds.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 172, pp. 49-54): Elsevier.
- Calendar of forthcoming events. (1992). *Applied Catalysis A: General*, 81(2), N22. doi:[https://doi.org/10.1016/0926-860X\(92\)80107-N](https://doi.org/10.1016/0926-860X(92)80107-N)
- Campbell, A. N., Cardoso, S. S. S., & Hayhurst, A. N. (2006). A Scaling Analysis of the Effects of Natural Convection, when Sal'nikov's Reaction: $P \rightarrow A \rightarrow B$ Occurs, Together With Diffusion and Heat Transfer in a Batch Reactor. *Chemical Engineering Research and Design*, 84(7), 553-561. doi:<https://doi.org/10.1205/cherd.05213>
- Cao, P., Dubé, M. A., & Tremblay, A. Y. (2008). Methanol recycling in the production of biodiesel in a membrane reactor. *Fuel*, 87(6), 825-833. doi:<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.05.048>
- Cha, B., Kim, J., Son, S. R., Park, D. S., & Il, M. (2012). CPFD simulation of fluidized bed flow in FCC regenerator. In I. D. L. Bogle & M. Fairweather (Eds.), *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 30, pp. 1153-1157): Elsevier.
- Chapter 1 - Fluid catalytic cracking process description—converter section. (2020). In R. Sadeghbeigi (Ed.), *Fluid Catalytic Cracking Handbook (Fourth Edition)* (pp. 1-22): Butterworth-Heinemann.
- Chapter 5 - FCC catalysts. (2020). In R. Sadeghbeigi (Ed.), *Fluid Catalytic Cracking Handbook (Fourth Edition)* (pp. 83-110): Butterworth-Heinemann.
- Chapter 7 - Chemistry of FCC reactions. (2020). In R. Sadeghbeigi (Ed.), *Fluid Catalytic Cracking Handbook (Fourth Edition)* (pp. 119-128): Butterworth-Heinemann.
- Chapter 17 - Explosion. (2012). In S. Mannan (Ed.), *Lees' Loss Prevention in the Process Industries (Fourth Edition)* (pp. 1367-1678). Oxford: Butterworth-Heinemann.
- Chen, Z., Xu, J., Fan, Y., Shi, G., & Bao, X. (2015). Reaction mechanism and kinetic modeling of hydroisomerization and hydroaromatization of fluid catalytic cracking naphtha. *Fuel Processing Technology*, 130, 117-126. doi:<https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2014.09.037>

- Chennappa, G., Naik, M. K., Udaykumar, N., Vidya, M., Sreenivasa, M. Y., Amaresh, Y. S., & Mathad, P. F. (2019). Chapter 10 - Plant growth promoting microbes: a future trend for environmental sustainability. In J. S. Singh (Ed.), *New and Future Developments in Microbial Biotechnology and Bioengineering* (pp. 163-178): Elsevier.
- Chester, A. W. (2007). Chapter 6 CO combustion promoters: past and present. In M. L. Ocelli (Ed.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 166, pp. 67-77): Elsevier.
- Corma, A., Mocholi, F., Orchilles, V., Koermer, G. S., & Madon, R. J. (1990). Methylcyclohexane and methylcyclohexene cracking over zeolite Y catalysts. *Applied Catalysis*, 67(1), 307-324. doi:[https://doi.org/10.1016/S0166-9834\(00\)84453-X](https://doi.org/10.1016/S0166-9834(00)84453-X)
- Davis, R. E. (1964). Nucleophilic Displacement Reactions at the Sulfur-Sulfur Bond. In A. F. Scott (Ed.), *Survey of Progress in Chemistry* (Vol. 2, pp. 189-238): Elsevier.
- Deka, A., & Misra, R. D. (2024). Influence of retention time and catalyst concentrations on catalytic pyrolysis yields of polyethylene and polystyrene. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 46(1), 5072-5093. doi:10.1080/15567036.2024.2335368
- Dewangan, S., & Bhatia, A. K. (2023). Chapter 5 - Vitamins and metabolites. In C. Verma & D. K. Verma (Eds.), *Handbook of Biomolecules* (pp. 119-131): Elsevier.
- Di Blasi, C., & Branca, C. (2013). Modeling a stratified downdraft wood gasifier with primary and secondary air entry. *Fuel*, 104, 847-860. doi:<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.10.014>
- Dolz, M., Monterrey, D. T., Beltrán-Nogal, A., Menés-Rubio, A., Keser, M., González-Pérez, D., . . . Alcalde, M. (2023). Chapter Four - The colors of peroxygenase activity: Colorimetric high-throughput screening assays for directed evolution. In H. Renata (Ed.), *Methods in Enzymology* (Vol. 693, pp. 73-109): Academic Press.
- Ehm, C., Zaccaria, F., & Cipullo, R. (2019). Chapter 9 - From Mechanistic Investigation to Quantitative Prediction: Kinetics of Homogeneous Transition Metal-Catalyzed α -Olefin Polymerization Predicted by Computational Chemistry. In M. Soroush (Ed.), *Computational Quantum Chemistry* (pp. 287-326): Elsevier.
- Fan, X., Yu, H., Deng, Z., He, Z., & Zhao, Y. (2022). Cracking and deformation of cuboidal sandstone with a single nonpenetrating flaw under uniaxial compression. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 119, 103284. doi:<https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103284>
- Fan, Y., Yang, J., Xu, A., Zhu, J., & Shi, Y. (2024). Bio-aromatics synthesis via catalytic pyrolysis of cellulose with lithium-ion battery cathodes and modified HZSM-5 coupled in-situ plasma mode. *Renewable Energy*, 226, 120429. doi:10.1016/j.renene.2024.120429

- Farobie, O., Amrullah, A., Syaftika, N., Bayu, A., Hartulistiyoso, E., Fatriasari, W., & Nandiyanto, A. (2024). Valorization of Rejected Macroalgae *Kappaphycopsis cottonii* for Bio-Oil and Bio-Char Production via Slow Pyrolysis. *ACS Omega*. doi:10.1021/acsomega.4c00678
- Fazlyeva, R., Rezvani, H., Askarova, A., Khalilnezhad, A., Cheremisin, A., & Riazi, M. (2023). Chapter 5 - In situ combustion. In A. Hemmati-Sarapardeh, A. Alamatsaz, M. Dong, & Z. Li (Eds.), *Thermal Methods* (pp. 155-215): Gulf Professional Publishing.
- Fluid catalytic cracking. (2023). Retrieved from https://en.wikipedia.org/wiki/Fluid_catalytic_cracking
- Francis Prashanth, P., Shravan, B., Vinu, R., M, L., & Ramesh Prabu, V. (2021). Production of diesel range hydrocarbons from crude oil sludge via microwave-assisted pyrolysis and catalytic upgradation. *Process Safety and Environmental Protection*, 146, 383-395. doi:<https://doi.org/10.1016/j.psep.2020.08.025>
- Gallucci, F. (2023). 3 - Packed bed membrane reactors. In A. Basile & F. Gallucci (Eds.), *Current Trends and Future Developments on (Bio)Membranes* (pp. 59-75): Elsevier.
- Ganesh Kumar, B., & Prakash, K. S. (2023). Chapter 9 - Functionalization of carbon nanotubes: Fundamentals, strategies, and tuning of properties. In S. Mallakpour & C. M. Hussain (Eds.), *Functionalized Carbon Nanomaterials for Theranostic Applications* (pp. 181-193): Elsevier.
- Geoffroy, G. L., & Wrighton, M. S. (1979). 3 - Olefin Complexes. In G. L. Geoffroy & M. S. Wrighton (Eds.), *Organometallic Photochemistry* (pp. 171-218): Academic Press.
- Gerona, R. (2024). Chapter 2 - NPS chemistry, classification, and metabolism. In R. Gerona (Ed.), *Designer Drugs* (pp. 29-64): Elsevier.
- Ghafarnejad, F., & Rahimpour, M. R. (2024). 11 - Synthetic natural gas from oil shale. In M. R. Rahimpour, M. A. Makarem, & M. Meshksar (Eds.), *Advances in Natural Gas: Formation, Processing, and Applications Volume: 1: Natural Gas Formation and Extraction* (pp. 261-286): Elsevier.
- Giudici, C., Serse, F., Nobili, A., Bracconi, M., Maestri, M., & Pelucchi, M. (2023). Chapter One - Catalytic and non-catalytic chemical kinetics of hydrocarbons cracking for hydrogen and carbon materials production. In M. Pelucchi & M. Maestri (Eds.), *Advances in Chemical Engineering* (Vol. 61, pp. 1-62): Academic Press.
- Grubbs, R. H., Trnka, T. M., & Sanford, M. S. (2003). Chapter 4 - Transition Metal–Carbene Complexes in Olefin Metathesis and Related Reactions. In H. Kurosawa & A. Yamamoto (Eds.), *Current Methods in Inorganic Chemistry* (Vol. 3, pp. 187-231): Elsevier.
- Gulati, S., Kumar, S., Baul, A., & Lingam B, H. N. (2024). Chapter 6 - Nanoceramics: novel and benign materials in prosthodontics. In S. Mallakpour & C. M. Hussain (Eds.), *Industrial Applications of Nanoceramics* (pp. 79-98): Elsevier.

- Gupta, R., Pachisia, S., & Gupta, R. (2023). Chapter 3 - Supramolecular coordination complexes from metalloligands: Heteronuclear complexes and coordination polymers and their applications in catalysis. In S. Shanmugaraju (Ed.), *Supramolecular Coordination Complexes* (pp. 43-68): Elsevier.
- Haensel, V. (1951). Catalytic Cracking of Pure Hydrocarbons. In W. G. Frankenburg, V. I. Komarewsky, E. K. Rideal, P. H. Emmett, & H. S. Taylor (Eds.), *Advances in Catalysis* (Vol. 3, pp. 179-197): Academic Press.
- Hassan, S. N., Sani, Y. M., Abdul Aziz, A. R., Sulaiman, N. M. N., & Daud, W. M. A. W. (2015). Biogasoline: An out-of-the-box solution to the food-for-fuel and land-use competitions. *Energy Conversion and Management*, 89, 349-367. doi:https://doi.org/10.1016/j.enconman.2014.09.050
- Hassner, A., & Namboothiri, I. (2012). WACKER-TSUJI Olefin Oxidation to WÜRTZ Coupling. In A. Hassner & I. Namboothiri (Eds.), *Organic Syntheses Based on Name Reactions (Third Edition)* (pp. 507-531). Oxford: Elsevier.
- Hatanaka, S., Shimada, K., & Morita, E. (2007). 6 - Selective Catalytic Cracked Gasoline Hydrodesulfurization. In K. Eguchi, M. Machida, & I. Yamanaka (Eds.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 172, pp. 43-48): Elsevier.
- Hopmann, C., Greif, H., & Wolters, L. (2024). Lesson 2 - Raw Materials and Polymer Synthesis. In C. Hopmann, H. Greif, & L. Wolters (Eds.), *Training in Plastics Technology (Third Edition)* (pp. 9-22): Hanser.
- Houdry Cracking Process. In *Comprehensive Organic Name Reactions and Reagents* (pp. 1501-1503).
- Huang, S. L. (2001). Cadmium adsorption by sediment in a turbulence tank. *Water Research*, 35(11), 2635-2644. doi:https://doi.org/10.1016/S0043-1354(00)00576-5
- Jain, A., & Vinu, R. (2022). Chapter Three - Kinetic experiments for pyrolytic recycling of solid plastic waste. In D. Moscatelli & M. Pelucchi (Eds.), *Advances in Chemical Engineering* (Vol. 60, pp. 77-116): Academic Press.
- Jiao, K.-P., Mo, W.-L., Yang, X.-Q., Zhang, S.-P., Guo, J., Wei, X.-Y., & Fan, X. (2024). *Compositional Characteristics of Alkanolyses Soluble Portions and Thermal Cracking Behavior of Insoluble Portions from Zhundong Sub-Bituminous Coal: The Influence of Low-Carbon Alkanols*.
- Jimmy, J., Rastini, E., & Santoso, A. (2024). Fischer-tropsch synthesis: effect of temperature and iron-cobalt ratio in Fe-Co/meso-HZSM-5 catalyst on liquid product distribution. *EUREKA: Physics and Engineering*, 13-20. doi:10.21303/2461-4262.2024.003094
- Jin, C., Wang, F., Zhu, Y., Deng, S., Qi, H., & Du, L. (2024). Thermal Oxidation Behavior and Mechanisms for Silicon-Containing Arylacetylene Resins: Experimental and Reactive Force Field Molecular Dynamics Simulations. *ACS Applied Polymer Materials*, 6. doi:10.1021/acsapm.3c02845
- Jin, H., Bai, B., Wang, W., Cao, C., Lu, B., Shi, J., & Guo, L. (2023). Chapter 4 - Resource utilization of thermosetting plastics in supercritical water. In H. Jin, B. Bai, W. Wang, C. Cao, B. Lu, J. Shi, & L. Guo (Eds.), *The Resource Utilization of Plastic Waste with Supercritical Water Treatment* (pp. 201-225): Elsevier.

- Jouhara, H., Reay, D., McGlen, R., Kew, P., & McDonough, J. (2024). Chapter 5 - Additive manufacturing applied to heat pipes. In H. Jouhara, D. Reay, R. McGlen, P. Kew, & J. McDonough (Eds.), *Heat Pipes (Seventh Edition)* (pp. 209-243): Butterworth-Heinemann.
- Kadja, G. T. M., Culsum, N. T. U., Ledyastuti, M., & Rachmawati. (2024). Chapter 17 - Microscopic and spectroscopic analysis of aged polymer composites. In A. Uthaman, S. Thomas, & H. Mayookh Lal (Eds.), *Aging and Durability of FRP Composites and Nanocomposites* (pp. 387-424): Woodhead Publishing.
- Kaiser, M. J. (2020). Chapter 2 - Flow Assurance Issues. In M. J. Kaiser (Ed.), *The Offshore Pipeline Construction Industry* (pp. 39-60): Gulf Professional Publishing.
- Karaca, H., & Koyunoğlu, C. (2022). *Algal Biotechnology for Fuel Applications*: Bentham Science Publishers.
- Khan, W. S., Asmatulu, E., Uddin, M. N., & Asmatulu, R. (2022). 1 - Introduction. In W. S. Khan, E. Asmatulu, M. N. Uddin, & R. Asmatulu (Eds.), *Recycling and Reusing of Engineering Materials* (pp. 1-25): Elsevier.
- Kimya Teknolojisi. (2014). Retrieved from Ankara:
- Konno, H., Tago, T., Nakasaka, Y., Ohnaka, R., Nishimura, J.-i., & Masuda, T. (2013). Effectiveness of nano-scale ZSM-5 zeolite and its deactivation mechanism on catalytic cracking of representative hydrocarbons of naphtha. *Microporous and Mesoporous Materials*, 175, 25-33. doi:https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2013.03.016
- Koyunoğlu, C. (2019). *New advancements in fuels and lubricants for the aerospace industry*: Hiperlink eği.ilet.yay.san.tic.ve ltd.sti.
- Li, C. Y., Yan, S. H., Qiu, Z. H., Tang, L. W., & Gu, M. Y. (2001). Effect of vanadium on light olefins selectivity. In M. L. Occellie & P. O'Connor (Eds.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 134, pp. 133-139): Elsevier.
- Lin, W., Wu, Y., Su, G., Xiao, J., & Wang, S. (2023). Ultrasound Irradiation for Upgrading Vacuum Residue: A Comprehensive Study on Its Effects on Rheological, Structural, Thermal Behavior, and Catalytic Hydrocracking Performance. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 62(49), 21120-21129. doi:10.1021/acs.iecr.3c03126
- Lyons, B., Bernardi, A., Shah, N., & Chachuat, B. (2023). Methane-to-X: an economic assessment of methane valorisation options to improve carbon circularity. In A. C. Kokossis, M. C. Georgiadis, & E. Pistikopoulos (Eds.), *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 52, pp. 2435-2440): Elsevier.
- Manzoor, T., Dar, I. A., Ali, A., Manzoor, T., Ahmad, S. B., Ismail, S., . . . Ahmad, S. M. (2023). Chapter 2 - Pharmacogenomics in drug metabolism. In S. A. Ganie, A. Ali, M. U. Rehman, & A. Arafah (Eds.), *Pharmacogenomics* (pp. 33-55): Academic Press.
- McFarlane, R. C., Reineman, R. C., Bartee, J. F., & Georgakis, C. (1993). Dynamic simulator for a Model IV fluid catalytic cracking unit. *Computers & Chemical Engineering*, 17(3), 275-300. doi:https://doi.org/10.1016/0098-1354(93)80021-E

- Meenakshi Sundaram, A. C., & Karimi, I. A. (2024). Chapter 10 - Dynamic simulation models for an LNG storage tank. In D. A. Wood & J. Cai (Eds.), *Sustainable Liquefied Natural Gas* (Vol. 3, pp. 293-304): Elsevier.
- Meirer, F., Kalirai, S., Morris, D., Soparawalla, S., Liu, Y., Mesu, G., . . . Weckhuysen, B. M. (2015). Life and death of a single catalytic cracking particle. *Sci Adv*, 1(3), e1400199. doi:10.1126/sciadv.1400199
- Mohamed, M. F., Shehata, W. M., Abdel Halim, A. A., & Gad, F. K. (2017). Improving gasoline quality produced from MIDOR light naphtha isomerization unit. *Egyptian Journal of Petroleum*, 26(1), 111-124. doi:https://doi.org/10.1016/j.ejpe.2016.02.009
- Murugan, R. (2023). 2 - Heterocycles in polymers. In G. W. Gribble & R. A. Aitken (Eds.), *Progress in Heterocyclic Chemistry* (Vol. 35, pp. 93-118): Elsevier.
- Nakamura, I., Zhang, A., & Fujimoto, K. (1995). Hydroisomerization of n-pentane over hybrid catalysts, new concept and design of hybrid catalyst. In H. K. Beyer, H. G. Karge, I. Kiricsi, & J. B. Nagy (Eds.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 94, pp. 464-471): Elsevier.
- Natesakhawat, S., Popczun, E. J., Baltrus, J. P., Wang, K., Serna, P., Liu, S., . . . Lekse, J. W. Investigation of AFeO₃ (A=Ba, Sr) Perovskites for the Oxidative Dehydrogenation of Light Alkanes under Chemical Looping Conditions. *n/a(n/a)*, e202300596. doi:https://doi.org/10.1002/cplu.202300596
- Nazarova, G., Ivanchina, E., Ivashkina, E., Kiseleva, S., & Stebeneva, V. (2015). Thermodynamic Analysis of Catalytic Cracking Reactions as the First Stage in the Development of Mathematical Description. *Procedia Chemistry*, 15, 342-349. doi:https://doi.org/10.1016/j.proche.2015.10.054
- Neto, E. T., Imtiaz, S. A., & Ahmed, S. (2023). 5 - Single-event kinetic modeling of catalytic dewaxing on commercial Pt/ZSM-5. In S. A. Imtiaz (Ed.), *Modelling of Chemical Process Systems* (pp. 149-179): Elsevier.
- Ng, L. F., & Yahya, M. Y. (2024). 11 - Fatigue properties of the biocomposites for the aircraft structures. In C. Muthukumar, S. M. K. Thiagamani, S. Krishnasamy, J. Parameswaranpillai, & S. Siengchin (Eds.), *Biocomposites for Industrial Applications* (pp. 209-226): Woodhead Publishing.
- Niyogi, K., Micale, D., Cafaro, D., Bracconi, M., & Maestri, M. (2023). Chapter Two - Fluid dynamics aspects and reactor scale simulations of chemical reactors for turquoise hydrogen production. In M. Pelucchi & M. Maestri (Eds.), *Advances in Chemical Engineering* (Vol. 61, pp. 63-132): Academic Press.
- Pang, W. (2011). Chapter 3 - Synthesis and Purification at Low Temperature. In R. Xu, W. Pang, & Q. Huo (Eds.), *Modern Inorganic Synthetic Chemistry* (pp. 39-62). Amsterdam: Elsevier.
- Pauline, A. L., & Joseph, K. (2021). Hydrothermal carbonization of crude oil sludge – Characterization of hydrochar and hydrothermal liquor. *Process Safety and Environmental Protection*, 154, 89-96. doi:https://doi.org/10.1016/j.psep.2021.08.014
- Pizzano, A. (2021). Chapter One - Asymmetric hydrogenation of functionalized olefins. In M. Diéguez & A. Pizzano (Eds.), *Advances in Catalysis* (Vol. 68, pp. 1-134): Academic Press.

- Polotti, G. (2020). Chapter Eight - Perspectives from industry. In D. Moscatelli & M. Sponchioni (Eds.), *Advances in Chemical Engineering* (Vol. 56, pp. 259-330): Academic Press.
- Poslovina, L. P., Stepanov, V. G., Malysheva, L. V., Paukshtis, E. A., Vostrikova, L. A., & Ione, K. G. (1997). Hydroconversion of aromatics on metal-zeolite catalysts. In H. Chon, S.-K. Ihm, & Y. S. Uh (Eds.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 105, pp. 997-1004): Elsevier.
- Qu, K., & Dan, D. (2024). Chapter 4 - Atmospheric environmental analysis. In K. Qu & D. Dan (Eds.), *Environmental Analytical Chemistry* (pp. 101-130): Elsevier.
- Rahimi, N., & Karimzadeh, R. (2011). Catalytic cracking of hydrocarbons over modified ZSM-5 zeolites to produce light olefins: A review. *Applied Catalysis A: General*, 398(1), 1-17. doi:<https://doi.org/10.1016/j.apcata.2011.03.009>
- Rahimpour, M. R., Jahanmiri, A., Mohamadzadeh Shirazi, M., Hooshmand, N., & Taghvaei, H. (2013). Combination of non-thermal plasma and heterogeneous catalysis for methane and hexadecane co-cracking: Effect of voltage and catalyst configuration. *Chemical Engineering Journal*, 219, 245-253. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cej.2013.01.011>
- Ren, T.-T., Mu, Y., Liu, L., Li, X.-Y., & Yu, H.-Q. (2009). Quantification of the shear stresses in a microbial granular sludge reactor. *Water Research*, 43(18), 4643-4651. doi:<https://doi.org/10.1016/j.watres.2009.07.019>
- Rhee, C., Yu, S. I., Kim, D. W., Bae, I. H., Shin, J., Jeong, S. Y., . . . Shin, S. G. (2021). Density profile modeling for real-time estimation of liquid level in anaerobic digester using multiple pressure meters. *Chemosphere*, 277, 130299. doi:<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130299>
- Roy, T. K., Suresh, A., Sinha, A., Biswas, J. P., & Maiti, D. (2023). Chapter Four - Investigation on high-valent iron complex mediated organic transformations: Reactivity and mechanistic impact. In D. Chatterjee & R. van Eldik (Eds.), *Advances in Inorganic Chemistry* (Vol. 81, pp. 185-204): Academic Press.
- Sadeek, S. A., Mohammed, E. A., Shaban, M., Abou Kana, M. T. H., & Negm, N. A. (2020). Synthesis, characterization and catalytic performances of activated carbon-doped transition metals during biofuel production from waste cooking oils. *Journal of Molecular Liquids*, 306, 112749. doi:<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.112749>
- Sadeghbeigi, R. (2012a). Chapter 1 - Process Description. In R. Sadeghbeigi (Ed.), *Fluid Catalytic Cracking Handbook (Third Edition)* (pp. 1-42). Oxford: Butterworth-Heinemann.
- Sadeghbeigi, R. (2012b). Chapter 6 - Chemistry of FCC Reactions. In R. Sadeghbeigi (Ed.), *Fluid Catalytic Cracking Handbook (Third Edition)* (pp. 125-135). Oxford: Butterworth-Heinemann.
- Saidi, M., & Safaripour, M. (2024). Chapter Eleven - Ammonia emission control using membranes. In A. Basile & M. R. Rahimpour (Eds.), *Progresses in Ammonia: Science, Technology and Membranes* (pp. 343-372): Elsevier.
- Sánchez de Rojas Gómez, M. I., & Frías Rojas, M. (2013). 4 - Natural pozzolans in eco-efficient concrete. In F. Pacheco-Torgal, S. Jalali, J. Labrincha, & V. M. John (Eds.), *Eco-Efficient Concrete* (pp. 83-104): Woodhead Publishing.

- Schobert, H. H. (1990). Chapter 9 - Processing of petroleum fractions. In H. H. Schobert (Ed.), *The Chemistry of Hydrocarbon Fuels* (pp. 211-254): Butterworth-Heinemann.
- Schuurman, Y., Fogassy, G., & Mirodatos, C. (2013). Chapter 10 - Tomorrow's Biofuels: Hybrid Biogasoline by Co-processing in FCC Units. In K. S. Triantafyllidis, A. A. Lappas, & M. Stöcker (Eds.), *The Role of Catalysis for the Sustainable Production of Bio-fuels and Bio-chemicals* (pp. 321-349). Amsterdam: Elsevier.
- Seo, P., Phan, P., Pham, D., Yun, D., Ro, I., Park, S., & Kang, K. (2024). Catalytic aquathermolysis of contaminated polyolefin plastic waste over an in situ iron hydroxide/oxide nanocatalyst derived from an oil-soluble iron precursor. *Chemical Engineering Journal*, 150957. doi:10.1016/j.cej. 2024.150957
- Sharma, S., Bhatt, K., Shrivastava, R., & Nadda, A. K. (2023). Chapter 14 - Tyrosinase and Oxygenases: Fundamentals and Applications. In G. Brahmachari (Ed.), *Biotechnology of Microbial Enzymes (Second Edition)* (pp. 323-340): Academic Press.
- Shih, S. (1993). H-Zeolites: Catalytic Materials for Chemical Reactions Studied by ESR and Computer Simulations. In M. Doyama, J. Kihara, M. Tanaka, & R. Yamamoto (Eds.), *Computer Aided Innovation of New Materials II* (pp. 1091-1093). Oxford: Elsevier.
- Shokry, F., Abd Elfattah, M., El-Gayar, D. A., Farag, H. A., & Sedahmed, G. H. (2020). Effect of drag reducing polymers and impeller geometry on the rate of mass and heat transfer at the wall of a cylindrical stirred tank reactor in relation to catalytic reactor design. *Alexandria Engineering Journal*, 59(1), 509-518. doi:https://doi.org/10.1016/j.aej.2020.01.025
- Shuikin, N. I., Timofeyeva, Y. A., Plotnikov, Y. N., Dobrynina, T. P., Petryayeva, G. S., & Smirnov, V. S. (1963). Preparation of C6–C10 alkenes by the catalytic dehydrogenation of alkanes. *Petroleum Chemistry U.S.S.R.*, 2(3), 328-340. doi:https://doi.org/10.1016/0031-6458(63)90057-1
- Sinnott, S. B., & Aluru, N. R. (2006). Chapter 13 - Carbon nanotubes as nanoelectromechanical systems components. In L. Dai (Ed.), *Carbon Nanotechnology* (pp. 361-488). Amsterdam: Elsevier.
- Smith, R., Inomata, H., & Peters, C. (2013). Chapter 3 - Chemical Information and Know-How. In R. Smith, H. Inomata, & C. Peters (Eds.), *Supercritical Fluid Science and Technology* (Vol. 4, pp. 121-174): Elsevier.
- Solis Maldonado, C., Rivera de la Rosa, J., Lucio-Ortiz, C. J., Sandoval-Rangel, L., Martínez-Vargas, D. X., & Luna Sánchez, R. A. (2018). Applications of Heterometallic Complexes in Catalysis. In B. Kharisov (Ed.), *Direct Synthesis of Metal Complexes* (pp. 369-377): Elsevier.
- Soltani, S., Zamaniyan, A., Towfighi Darian, J., & Soltanali, S. (2024). Improvement of catalyst activity in cracking of n-hexane via metal (Fe/Ga) impregnation over ZSM-12 catalyst. *Journal of Saudi Chemical Society*, 28(3), 101833. doi:https://doi.org/10.1016/j.jscs.2024.101833

- Song, C., Wang, Z., Zhao, J., Qin, X., Peng, M., Gao, Z., . . . Ma, D. (2024). Photothermal conversion of CO₂ into lower olefins at the interface of the K-promoted Ru/Fe₃O₄ catalyst. *Chem Catalysis*, 100960. doi:10.1016/j.checat.2024.100960
- Sotoodeh, K. (2022). Chapter One - Natural gas technology. In K. Sotoodeh (Ed.), *Cryogenic Valves for Liquefied Natural Gas Plants* (pp. 1-55): Gulf Professional Publishing.
- Sousa-Aguiar, E. F. (2016). Chapter 6 - Y Zeolites as a Major Component of FCC Catalysts: Main Challenges in the Modification Thereof. In B. F. Sels & L. M. Kustov (Eds.), *Zeolites and Zeolite-Like Materials* (pp. 265-282). Amsterdam: Elsevier.
- Speight, J. G. (2011a). Chapter 2 - Refining Processes. In J. G. Speight (Ed.), *The Refinery of the Future* (pp. 39-80). Boston: William Andrew Publishing.
- Speight, J. G. (2011b). Chapter 11 - Thermal Decomposition of Hydrocarbons. In J. G. Speight (Ed.), *Handbook of Industrial Hydrocarbon Processes* (pp. 395-428). Boston: Gulf Professional Publishing.
- Speight, J. G. (2011c). Chapter 12 - Petrochemicals. In J. G. Speight (Ed.), *Handbook of Industrial Hydrocarbon Processes* (pp. 429-466). Boston: Gulf Professional Publishing.
- Speight, J. G. (2016). Chapter 3 - Residua and Asphalt. In J. G. Speight (Ed.), *Asphalt Materials Science and Technology* (pp. 91-136). Boston: Butterworth-Heinemann.
- Speight, J. G. (2017). Chapter 2 - Organic Chemistry. In J. G. Speight (Ed.), *Environmental Organic Chemistry for Engineers* (pp. 43-86): Butterworth-Heinemann.
- Speight, J. G. (2019). Chapter 9 - Catalytic Cracking Processes. In J. G. Speight (Ed.), *Heavy Oil Recovery and Upgrading* (pp. 357-421): Gulf Professional Publishing.
- Speight, J. G. (2020a). 3 - Refining chemistry. In J. G. Speight (Ed.), *The Refinery of the Future (Second Edition)* (pp. 85-124): Gulf Professional Publishing.
- Speight, J. G. (2020b). 6 - Catalytic cracking. In J. G. Speight (Ed.), *The Refinery of the Future (Second Edition)* (pp. 197-226): Gulf Professional Publishing.
- Speight, J. G. (2020c). Chapter 12 - Petrochemicals. In J. G. Speight (Ed.), *Handbook of Industrial Hydrocarbon Processes (Second Edition)* (pp. 511-552). Boston: Gulf Professional Publishing.
- Spence, A. L., Cogan, P. S., Calderon, B. B., Kaye, A. D., & Potthoff, K. L. (2023). Chapter 16 - Basic pharmacology of opioid substances. In A. D. Kaye, R. D. Urman, E. M. Cornett, & A. N. Edinoff (Eds.), *Substance Use and Addiction Research* (pp. 185-208): Academic Press.
- Stöcker, M. (2005). Gas phase catalysis by zeolites. *Microporous and Mesoporous Materials*, 82(3), 257-292. doi:https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2005.01.039

- Suganuma, S., & Katada, N. (2020). Innovation of catalytic technology for upgrading of crude oil in petroleum refinery. *Fuel Processing Technology*, 208, 106518. doi:https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2020.106518
- Talavera-Prieto, N. M. C., Ferreira, A. G. M., Moreira, R. J., & Portugal, A. T. G. (2020). Monitoring of the transesterification reaction by continuous off-line density measurements. *Fuel*, 264, 116877. doi:https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116877
- Tan, J. Z., Hullfish, C. W., Zheng, Y., Koel, B. E., & Sarazen, M. L. (2023). Conversion of polyethylene waste to short chain hydrocarbons under mild temperature and hydrogen pressure with metal-free and metal-loaded MFI zeolites. *Applied Catalysis B: Environmental*, 338, 123028. doi:https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2023.123028
- Tien, C. (1994). 1 - INTRODUCTION. In C. Tien (Ed.), *Adsorption Calculations and Modelling* (pp. 1-7). Boston: Butterworth-Heinemann.
- Tien, C. (2019). Chapter 1 - Introduction. In C. Tien (Ed.), *Introduction to Adsorption* (pp. 1-6): Elsevier.
- Tirumareddy, P., Borugadda, V. B., & Dalai, A. K. (2023). Chapter 3 - Recent advances in technological developments to produce oxygenated biocrudes via hydrothermal liquefaction followed by their catalytic upgradation. In N. Kumar, K. Mathiyazhagan, V. R. Sreedharan, & M. A. Kalam (Eds.), *Advancement in Oxygenated Fuels for Sustainable Development* (pp. 27-59): Elsevier.
- Tsai, S.-T., Chao, P.-H., Liu, S.-B., & Tsai, T.-C. (2008). Synergism of acidic zeolite and Pt/zeolite in aromatics transalkylation. In A. Gédéon, P. Massiani, & F. Babonneau (Eds.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 174, pp. 1183-1186): Elsevier.
- Tsai, S.-T., Chao, P.-H., Wang, I., & Tsai, T.-C. (2010). Dual-bed catalyst system for improving product purity and catalytic stability in alkylbenzene transalkylation. *Applied Catalysis A: General*, 385(1), 73-79. doi:https://doi.org/10.1016/j.apcata.2010.06.047
- Tsai, T.-C., Chao, P.-H., & Zeng, W.-L. (2007). Selective naphthene cracking over cascade dual catalyst in heavy aromatics transalkylation. In R. Xu, Z. Gao, J. Chen, & W. Yan (Eds.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 170, pp. 1611-1616): Elsevier.
- Uljon, S. (2023). Chapter One - Advances in fentanyl testing. In G. S. Makowski (Ed.), *Advances in Clinical Chemistry* (Vol. 116, pp. 1-30): Elsevier.
- Undavalli, V. K., Ling, C., & Khandelwal, B. (2021). Chapter 6 - Impact of alternative fuels and properties on elastomer compatibility. In B. Khandelwal (Ed.), *Aviation Fuels* (pp. 113-132): Academic Press.
- Van Landeghem, H. (1980). Multiphase reactors : mass transfer and modeling. *Chemical Engineering Science*, 35(9), 1912-1949. doi:https://doi.org/10.1016/0009-2509(80)80136-9

- Vega-Ramon, F., Wang, W., Wu, W., & Zhang, D. (2023). Developing a rigorous chemical reaction network reduction strategy for n-hexadecane hydroisomerisation. In A. C. Kokossis, M. C. Georgiadis, & E. Pistikopoulos (Eds.), *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 52, pp. 157-162): Elsevier.
- Venuto, P. B. (1994). Organic catalysis over zeolites: A perspective on reaction paths within micropores. *Microporous Materials*, 2(5), 297-411. doi:https://doi.org/10.1016/0927-6513(94)00002-6
- Wang, F., Lin, Z., Wu, Z., Peng, W., Zhan, P., Shao, L., . . . tong, z. (2024). Controllable lignin valorization to value-added aromatic chemicals by a UV-assisted ternary heterogeneous photo-fenton catalytic system. *Fuel*, 361, 130625. doi:10.1016/j.fuel.2023.130625
- Wang, H., Wang, X., & Wang, Z. (2022). Performance assessment method of dynamic process based on SFA-GPR. *Journal of Process Control*, 111, 27-34. doi:https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2022.01.001
- Wang, K., Ding, J., Deng, J., Zhai, X., & Zhang, Y. (2024). Hydrogen generation mechanism of oil-rich coal oxidation in low temperature. *Energy*, 293, 130739. doi:https://doi.org/10.1016/j.energy.2024.130739
- Wong, S. L., Armenise, S., Nyakuma, B. B., Bogush, A., Towers, S., Lee, C. H., . . . Muñoz, M. (2023). Plastic pyrolysis over HZSM-5 zeolite and fluid catalytic cracking catalyst under ultra-fast heating. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 169, 105793. doi:https://doi.org/10.1016/j.jaap.2022.105793
- Wu, F., Argyle, M. D., Dellenback, P. A., & Fan, M. (2018). Progress in O₂ separation for oxy-fuel combustion—A promising way for cost-effective CO₂ capture: A review. *Progress in Energy and Combustion Science*, 67, 188-205. doi:https://doi.org/10.1016/j.pecs.2018.01.004
- Wu, S., Qiu, L., Wang, L., He, Y., Wang, Q., Liu, H., . . . Che, Y. (2024). Catalytic dehydrogenation cracking characteristics of vacuum residue over solid basic catalyst. *Fuel*, 368, 131578. doi:https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131578
- Wypych, G. (2024). 26 - CURATIVES. In G. Wypych (Ed.), *Encyclopedia of Polymer and Rubber Additives* (pp. 161-166): ChemTec Publishing.
- Yang, X., Chu, T., Wang, L., Li, H., Wang, J., & Yu, M. (2024). Mechanochemical evolution of coal microscopic groups: A new pathway for mechanical forces acting on coal spontaneous combustion. *Science of The Total Environment*, 925, 171471. doi:https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.171471
- Yet, L. (2023). 5.4 - Five-membered ring systems: with more than one N atom. In G. W. Gribble & R. A. Aitken (Eds.), *Progress in Heterocyclic Chemistry* (Vol. 34, pp. 255-304): Elsevier.
- Zaccaria, F., Sian, L., Zuccaccia, C., & Macchioni, A. (2020). Chapter One - Ion pairing in transition metal catalyzed olefin polymerization. In P. J. Pérez (Ed.), *Advances in Organometallic Chemistry* (Vol. 73, pp. 1-78): Academic Press.
- Zakariyaou, S. Y., Ye, H., Oumarou, A. D., Abdoul Aziz, M. S., & Ke, S. (2023). Characterization of Equilibrium Catalysts from the Fluid Catalytic Cracking Process of Atmospheric Residue. *Catalysts*, 13(12). doi:10.3390/catal13121483

- Zana, R., Frasc, J., Soulard, M., Lebeau, B., & Patarin, J. (2001). On the mechanism of formation of organized mesoporous silica that may be used as catalysts for FCC. In M. L. Occellie & P. O'Connor (Eds.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 134, pp. 293-297): Elsevier.
- Zhang, J., Wang, X., Chen, Z., Zhang, X., Yue, J., Zhou, R., . . . Xu, G. (2024). Regulation of volatile reactions through thermal/catalytic cracking during scrap tires pyrolysis for high-valued chemicals production. *Energy*, 294, 130807. doi:10.1016/j.energy.2024.130807
- Zhang, X.-P., Ji, P.-Q., Zhang, Q., Liu, Q.-S., & Wu, S.-C. (2021). Study of contact pressure distribution between cutter and rock surface using the discrete element method. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 146, 104875. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2021. 104875
- Zhao, C., & Lercher, J. A. (2013). Chapter 9 - Catalytic Depolymerization and Deoxygenation of Lignin. In K. S. Triantafyllidis, A. A. Lappas, & M. Stöcker (Eds.), *The Role of Catalysis for the Sustainable Production of Bio-fuels and Bio-chemicals* (pp. 289-320). Amsterdam: Elsevier.
- Zhao, G. L., Teng, J. W., Xie, Z. K., Yang, W. M., Chen, Q. L., & Tang, Y. (2007). Catalytic cracking reactions of C4-olefin over zeolites H-ZSM-5, H-mordenite and H-SAPO-34. In R. Xu, Z. Gao, J. Chen, & W. Yan (Eds.), *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 170, pp. 1307-1312): Elsevier.
- Zhao, Z., Zou, M., Huang, H., & Tong, J. (2023). 2 - Protonic electrocatalytic membrane reactors. In A. Basile & F. Gallucci (Eds.), *Current Trends and Future Developments on (Bio)Membranes* (pp. 21-57): Elsevier.



ÖZGEÇMİŞ

Ad-Soyad : Tamer ÇINAR

ÖĞRENİM DURUMU:

- **Lisans** : 1989, Orta Doğu Teknik Üniversitesi Kimya Mühendisliği
- **Yükseklisans** : 1992, Illinois Institute Of Technology, Kimya Mühendisliği Ana Bilim Dalı

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLER:

- 1992-1998: Devlet Su İşleri Genel Müdürlüğünde Uzman Teknik Personel Olarak Çalışmıştır
- 1998-2006: Onduline Avrasya A.Ş. Üretim Ve Arge Müdürü Olarak Görev Yapmıştır.
- 2006- Halen : Özel Sektörün Değişik Firmalarında Genel Müdür, Fabrika Müdürü, Kalite Ve Arge Müdürlüğü Görevlerini Yürütmüş Olup Halen Bu Alanlardaki Çalışmalarına Devam Etmektedir

TEZDEN TÜRETİLEN ESERLER:

- Koyunoğlu C., Çınar T. Exergy-Based Analysis of Polymer Recycling in the Automotive Sector", 14th International Exergy, Energy, and Environment Symposium Program (IEEEES-14), 24-27 Aralık 2023, İstanbul, Türkiye
- Çınar T. Petrol ve Petrol Türevi Atıkların Değerlendirilmesi, MMO Dergisi, Eylül 2022, Sayı 69. Erişim Adresi: (<https://www.mmo.org.tr/eylul-2022-sayi-69/makale/makale-petrol-ve-petrol-turevi-atiklarin-degerlendirilmesi>)
- Koyunoğlu C., Gündüz F., Karaca H., Çınar T., Soyhan G.G, Developing an Adaptive Catalyst for an FCC Reactor Using a CFD RSM, CFD DPM, and CFD DDPM–EM Approach, Fuel, 334 (2023) 126550.