

**AMBERLİT – 35 KATALİZÖRÜNÜN GÖZENEK
YAPISININ ÜÇ BOYUTLU (3D) RASTGELE AĞ MODELİ
ÜZERİNDEN MODELLENMESİ VE AĞ BOYUTU ETKİSİNİN
İNCELENMESİ**

Veli ŞİMŞEK

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
KİMYA MÜHENDİSLİĞİ**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**HAZİRAN 2008
ANKARA**

Veli Şimşek tarafından hazırlanan, AMBERLİT-35 KATALİZÖRÜNÜN GÖZENEK YAPISININ ÜÇ (3D) BOYUTLU RASTGELE AĞ MODELİ ÜZERİNDEN MODELLENMESİ VE AĞ BOYUTU ETKİSİNİN İNCELENMESİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof.Dr. Kırali MÜRTEZAOĞLU
Tez Danışmanı, Kimya Müh. Anabilim Dalı

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile Kimya Mühendisliği Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof.Dr. Müjgan ÇULFAZ
Kimya Müh. Anabilim Dalı, G.Ü.

Prof.Dr. Kırali MÜRTEZAOĞLU
Kimya Müh. Anabilim Dalı, G.Ü.

Prof.Dr. Suna BALCI
Kimya Müh. Anabilim Dalı, G.Ü.

Prof.Dr. Süleyman TEKELİ
Metal Eğitim Bölümü, G.Ü.

Prof.Dr.Çiğdem GÜLDÜR
Kimya Müh. Anabilim Dalı, G.Ü.

Tarih: 17/06/2008

Bu tez ile G.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Yüksek Lisans derecesini onamıştır.

Prof. Dr. Nermin ERTAN
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Veli ŞİMŞEK

**AMBERLİT – 35 KATALİZÖRÜNÜN GÖZENEK
YAPISININ ÜÇ BOYUTLU (3D) RASTGELE AĞ MODELİ
ÜZERİNDEN MODELLENMESİ VE AĞ BOYUTU ETKİSİNİN
İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

Veli ŞİMŞEK

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Haziran 2008**

ÖZET

Bu çalışmada: Kaliteli benzin veya çevre dostu benzin eldesinde kullanılan katalizörlerden biri olan Amberlit-35 katalizörünün gözenekliliğinin tayini ve fiziksel karakterizasyonu için, bilgisayar ortamında üç boyutlu ağ modeli kullanıldı. Ayrıca, farklı ağ boyutlarında (N=30- 40- 50); gözenek hacim dağılımı, rastgele gözenek ağ görüntüleri ve üç boyutlu ağ görüntüleri üzerindeki etkileri araştırıldı. Çalışmanın ilk aşamasında, gözenekli malzemelerin modellenmesi için Compact Visual Fortran derleyicisi altında çalışan KALINET programı, gözeneklerin üç boyutlu (3-D) rastgele gözenek ağ görüntülerinin farklı kesitleri için kullanılan SECTION programı ve üç boyutlu (3-D) ağ çizimleri için kullanılan KALINET3D programı fortran77'den fortran90'a dönüştürüldü. Programlar; GİNO5.5 ile desteklenip ve CVF (compact visual fortran) derleyicisi altında çalışır hale getirildi. Amberlit-35 katalizörü için gerçekleştirilen civa penetrasyon deneyi sonucunda, Amberlit-35 katalizörünün gözenekliliği 0.30 olduğu hesaplandı. Amberlit-35 katalizörü için penetrasyon 6491-35410 psia basınç aralığında gerçekleştiği gözlenmiştir. Teorik penetrasyon eğrisi her bir basınç aralığındaki gözenek sayıları değiştirilerek deneysel penetrasyon eğrisi

ile akıřtırıldı. İlk olarak  boyutlu ađ modeli; 30x30x30 boyutunda 83700 adet gzenek ieren, gzenek hacim dađılımı belirlendi. Daha sonra farklı ađ boyutlarında, gzenek hacim dađılımı, rastgele gzenek ađ grntleri ve  boyutlu ađ grntleri zerindeki etkilerini karřılařtırmak iin, tekrar aynı iřlemler 40x40x40-50x50x50 boyutlarında 196800- 382500 adet gzenek ieren ađ modelleri zerinde denendi. Ađ boyutu zerinde yapılan deđiřiklerin, elde edilen sonularda herhangi bir deđiřime neden olmadıđı ve deneysel sonular ile uyumlu oldukları gzlendi. alıřmanın ikinci kısmında Compact Visual Fortran (CVF) derleyici altında alıřan SECTION programında gzenekli yapılar 3-D boyutlu olarak gzlendi. Compact Visual Fortran (CVF) derleyicisi altında alıřan KALINET3D programı ile gzenekli yapıların yatayla farklı aılarda 3-D boyutlu grntleri oluřturuldu. Sonu olarak: Kaliteli benzin eldesinde kullanılan Amberli-35 katalizrnn gzenekliliđini belirleyen civa porozimetresi yntemi bilgisayar ortamında, farklı ađ boyutları kullanılarak gerekleřtirildi. Ortalama gzeneklilik 0.30 olarak belirlendi. Bu deđer deneysel civa porozimetresinde elde edilen sonu (0.30) ile uyumlu olduđu gzlendi. Ayrıca, gzenekli yapı zerinde ađ boyutunun etkisi olmadıđı belirlendi.

Bilim Kodu : 912.1.080
Anahtar Kelimeler : Civa porozimetresi, gzeneklilik, ađ boyutu, ađ modeli
Sayfa Adedi : 110
Tez Yneticisi : Prof. Dr. Kırallı MRTEZAOđLU

**APPLICATION OF MERCURY POROSIMETRY
OF AMBERLYST-35 TO THREE DIMENSIONAL (3D) STOCHASTIC
NETWORK MODEL AND RESEARCHING OF NETWORK SIZE EFFECT
ON STRUCTURE OF POROUS MEDIA**

(M. Sc. Thesis)

Veli ŞİMŞEK

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

June 2008

ABSTRACT

In this study, investigation was done on the physical characterization and determination of the porosity for a ion exchange catalyst called Amberlyst-35, which is used to produce for environmentally benign gasoline by using 3-D network modeling. In addition effect of different pore sizes were investigated in porous media. First step of this study, KALINET program which is run by Compact Visual Fortran (CVF) for modeling of porous structures, porous 3-D random images for different section uses the SECTION program and 3-D network drawing uses the KALINET3D program were transformed from fortran77 to fortran90. Thereby programs were run by Compact Visual Fortran (CVF). Second step of this study, the results of mercury porosimetry experiments conducted with Amberlyst-35 revealed a porosity value of 0.30. It was also observed from the experiments that penetration was occurred between 6491- 35410 psia. Next, as the results obtained from the program theoretical penetration curve was drawn and was fitted to the experimental penetration values by changing the number of pores in each pressure interval and finally the pore size distribution. Firstly, The pore size distribution was done by 3-D network model size of : (N)

=30x30x30 which included 83700 pores. It was also same process that were applied network size (N) 40x40x40-50x50x50 which included 196800-382500 pores respectively. On the other hand, various sections of the images 3-D stochastic pore network were obtained from the SECTION program, which uses the data generated by KALINET under Compact Visual Fortran (CVF). Next, 3-D network images were drawn by KALINET3D computer program. As a conclusion the mercury porosimetry method which determine the porosity of ion exchange catalyst Amberlyst-35 was come true with the computer programs and it was obtained that the average porosity of sectioned images is (0.30). It is coincidence with porosity (0.30) obtained from experimental mercury porosimetry. It was also concluded that effect of network size could not be changed after a definite dimension upon structure of porous media.

Science Code : 912.1.080

Key Words : Mercury porosimetry , porosity, network size, network modelling

Page Number : 110

Adviser : Prof. DR. Kırallı MÜRTEZAOĞLU

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca bilgi ve tecrübelerinden faydalandığım, bana yol gösteren değerli hocam Prof. Dr. Kırali MÜRTEZAOĞLU'na teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarım boyunca beni teşvik eden, maddi ve manevi her türlü kolaylığı sağlayan başta ablam Sayın Elif ŞİMŞEK'e ve uzun yıllar boyunca iyi eğitim ve öğretimi bana sağlamak için her türlü desteklerini esirgemeyen aileme sonsuz şükranlarımı bir borç bilirim

Gazi Üniversitesi Mühendislik ve Mimarlık Fakültesi Kimya Mühendisliği Bölümü hocalarıma, asistan arkadaşlarıma ve eğitimimin her aşamasındaki katkılarından dolayı ve Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü çalışanlarına teşekkür ederim.

Ayrıca; modern ve çağdaş Türk toplumunun oluşmasında en büyük paya sahip olan ve bu çağdaş yaşama katkı sağlayacak bir birey olarak yetişmem için zemin hazırlayan, sonsuz gurur duyduğum Ulu Önder Gazi Mustafa Kemal ATATÜRK'e ve atalarima şükranlarımı sunmayı bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	vi
TEŞEKKÜR.....	viii
İÇİNDEKİLER.....	ix
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	xii
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	xiii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xv
1.GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER VE KAYNAK ARAŞTIRMASI.....	5
2.1. Gözenek Modelleri	5
2.1.1. Tek boyutlu ve iki boyutlu gözenek modelleri	6
2.1.2. Üç boyutlu gözenek modelleri	10
3. ÜÇ BOYUTLU (3-D) AĞ MODELİNİN AMBERLIT-35 KATALİZÖRÜ POROZİMETRİSİNE UYGULAMASI.....	16
3.1. Bilgisayar Programları Üzerinde Yapılan Dönüşümler	16
3.2. Civa Porozimetrisi.....	18
3.2.1. Civa porozimetresi prensibi	19
3.3. Amberlit-35 Katalizörü Civa Penetrasyon Eğrisinin Yorumlanması.....	21
3.4. Üç Boyutlu (3-D) Ağ Modelinin Civa Porozimetrisine Uygulanışı.....	25
3.5. Üç Boyutlu (3-D) Rastgele Ağ Modeli.....	25
3.6. Üç Boyutlu (3-D) Ağ Modeli İçin Bilgisayar Programları.....	31
3.6.1. Üç boyutlu ağ için penetrasyon programı	31

Sayfa

3.6.2. Üç boyutlu (3-D) ağın kesitini almak için bilgisayar programı	32
3.7. Amberlit-35 Katalizörü Simülasyonu.....	34
3.8. Amberlit-35 katalizörünün Bilgisayar ile Oluşturulan Kesitleri.....	37
3.9. Üç Boyutlu (3-D) Ağlar için Amberlit-35 Katalizörü Partiküllerinin Bilgisayar ile Oluşturulan Kesiti.....	37
3.9.1. Düzenli kübik ağ kesiti	38
3.9.2. Düzensiz kübik ağın kesitlenmesi	41
3.10. Üç Boyutlu (3-D) Bir Ağ Çizimi	48
4. Ağ Boyutunun Etkisi	52
4.1 Ağ Boyutlarının Karşılaştırılması	54
4.1.1. Sadece dikey gözenekleri kesen kesit (ISECT=1).....	54
4.1.2. Dikey ve yatay gözenekleri kesen yatay düzlem (ISECT=2)....	57
4.1.3. Yataya 45° eğimli düzlem	59
4.1.4. Pürüzsüz elips (IELIPSE=1)	61
4.1.5. Düz ve pürüzlü elips (IELIPSE=2)	63
4.1.6. Dolambaçlı ve pürüzlü elips (IELIPSE=3).....	65
5. SONUÇ VE DEĞERLENDİRMELER.....	67
6. ÖNERİLER	69
KAYNAKLAR.....	70
EKLER.....	75
EK-1. KOMUTLAR.....	76
EK-2. Veri dosyası (KALINET programı N=30 için).....	79
EK-3. Bilgisayar çıktısı(KALINET programından)(Şekil 3.2çin	80
EK-4. SECTION programı için veri dosyaları N=30.....	85
EK-5. Bilgisayar çıktısı (SECTION programından N=30) (Şekil 3.10).....	86

Sayfa

EK-6. Veri dosyası (KALINET programı N=40 için).....	89
EK-7. Bilgisayar çıktısı (KALINET programından) (Şekil 4.1 için).....	90
EK-8. SECTION programı için veri dosyaları N=40.....	95
EK-9. Bilgisayar çıktısı (SECTION programından N=40) (Şekil 4.6).....	96
EK-10. Veri dosyası (KALINET programı N=50 için).....	100
EK-11. Bilgisayar çıktısı(KALINET programından)(Şekil 4.1 için)	101
EK-12. SECTION programı için veri dosyaları N=50.....	106
EK-13. Bilgisayar çıktısı (SECTION programından N=50) (Şekil 4.7).....	107
EK-14. Amberlit – 35 katalizörünün civa porozimetresi verileri	110
ÖZGEÇMİŞ.....	111

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. Dönüşümler f77'den f90'a.....	16
Çizelge 3.2. Dönüşümler f77'den f90'a	17
Çizelge 3.3. Dönüşümler f77'den f90'a.....	17
Çizelge 3.4. Dönüşümler f77'den f90'a	18
Çizelge 3.5. Amberlit-35 katalizörü için deneysel gözenek hacim dağılım verisi.....	24
Çizelge 3.6. Amberlit-35 katalizörü (üç boyutlu ağ için) için teorik gözenek hacim dağılım verisi.....	36

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 3.1. Penetrasyon eğrilerinin gösterimi.....	20
Şekil 3.2. Amberlit-35 katalizörünün deneysel penetrasyon eğrisi.....	23
Şekil 3.3. Amberlit-35 katalizörünün deneysel gözenek hacim dağılımı.....	24
Şekil 3.4. KALINET penetrasyon programı çalışma diyagramı.....	29
Şekil 3.5. Düzenli ve düzensiz üç boyutlu (3-D) ağa örnek (N=30).....	30
Şekil 3.6. Deneysel ve bilgisayar ile hazırlanan penetrasyon eğrileri.....	35
Şekil 3.7. Amberlit-35 katalizörünün deneysel ve teorik gözenek hacim dağılımları.....	37
Şekil 3.8. Sadece dikey gözeneklerin kesiti (ISECT=1) (N=30X30X30, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	39
Şekil 3.9. Hem dikey hem de yatay gözenekleri kesen yatay düzlem kesiti (ISECT=2) (N=30X30X30, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)....	40
Şekil 3.10. Yataya 45° eğimli düzlem (ISECT=3) (N=30X30X30, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	42
Şekil 3.11. Pürüzsüz elips (ISECT=4 IELIPSE=1) (N=30X30X30, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	43
Şekil 3.12. Düz ve pürüzlü elips (ISECT=4 IELIPSE=2) (N=30X30X30, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	44
Şekil 3.13. Dolambaçlı ve pürüzlü elips (ISECT=4 IELIPSE=3) (N=30X30X30 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	45
Şekil 3.14. Üç boyutlu (3-D) değişik gözenek çap ve basınç Uygulamaları (ISECT=1 ve ISECT=2)	46
Şekil 3.15. Üç boyutlu (3-D) değişik gözenek çap ve basınç uygulamaları (ISECT=4 IELIPSE 2)	47
Şekil 3.16. Düzenli üç boyutlu (3-D) ağda farklı basınç ve çap uygulamaları.....	50

Şekil	Sayfa
Şekil 3.17. Düzensiz üç boyutlu (3-D) ağda farklı basınç ve çap uygulamaları.....	51
Şekil 4.1. Deneysel penetrasyon eğrisi ve bilgisayar ile hazırlanan teorik penetrasyon eğrileri (N=30-40-50).....	53
Şekil 4.2. Sadece dikey gözeneklerin kesiti (ISECT =1) (N=40X40X40, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	55
Şekil 4.3. Sadece dikey gözeneklerin kesiti (ISECT =1) (N=50X50X50, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	56
Şekil 4.4. Hem dikey hem de yatay gözenekleri kesen yatay düzlem (ISECT =1,N=40X40X40, 6491-35410 PSIA, 328.6-60.2 Å).....	57
Şekil 4.5. Hem dikey hem de yatay gözenekleri kesen yatay düzlem (ISECT =2,N=50X50X50, 6491-35410 PSIA, 328.6- 60.2 Å).....	58
Şekil 4.6. Yataya 45 eğimli düzlem ISECT=3 (N=40X40X40, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	59
Şekil 4.7. Yataya 45 eğimli düzlem ISECT=3 (N=50X50X50, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	60
Şekil 4.8. Pürüzsüz elips (ISECT=4 IELIPSE=1, N=40x40x40) (6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	61
Şekil 4.9. Pürüzsüz elips (ISECT=4 IELIPSE=1, N=50x50x50) (6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	62
Şekil 4.10. Düz ve pürüzlü elips (ISECT=4 IELIPSE=2, N=40X40X40) (6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	63
Şekil 4.11. Düz ve pürüzlü elips (ISECT=4 IELIPSE=2, N=50X50X50) (6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	64
Şekil 4.12. Dolambaçlı ve pürüzlü elips(ISECT=4,IELIPSE=3,N=40x40x40) (6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	65
Şekil 4.13. Dolambaçlı ve pürüzlü elips(ISECT=4IELIPSE=3,N=50x50x50) (6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å).....	66

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
3D	Üç Boyutlu
P	Basınç
r	Gözenek Yarıçapı
σ	Civanın Yüzey Gerilimi
θ	Civanın Kontak Açısı; Gözeneklilik
μm	Mikrometre
D	Gözenek Çapı
$F_v(D)$	Gözenek Hacim Dağılım Fonksiyonu
N	Ağ Boyutu
N_T	Toplam Gözenek Sayısı
FM	Hareket kesri
PL	Gözenek boyu
RO(I)	Rastgele gözenek çapları değişkeni
(V/V_{toplam})	Boyutsuz hacim
NSUB	Alt-ağ boyutu
Å	Angstrom

Kısaltmalar**Açıklama****CVF**

Compact Visual Fortran

IMSLInternational Mathematics and Statistical
Libraries**SC**

Basit Kübik

1. GİRİŞ

Gözenekli malzeme: Gözenekli malzeme içerisinde gözeneklerin, farklı büyüklük ve boyutlarda heterojen veya homojen olarak dağıldığı, doğal veya yapay katı malzemelerdir. Gözenekli malzemeler yaşamın her sahasında karşımıza çıkmaktadır. İlerleyen teknolojiden etkilenecek doğada oynadığı rolü gün geçtikçe arttırmaktadır. Dünya'daki birçok hafif (sünger vb.) malzemelerden tutunda, uzay teknolojisinde, endüstride ve günlük yaşamda kullanılan temel malzemelerin birçoğu gözenekli yapıdadır.

Doğada bulunan maddelerin büyük bir kısmı azda olsa gözenekli yapıya sahiptirler. Yapay olarak elde edilen özel dökme demir, plastiklerden ve bazı maddeler (elmas vs.) haricinde doğada bulunan maddelerin tamamı farklı derecede gözenekli yapıya sahiptir. Doğal bir madde veya malzeme yapısında boşluklar ihtiva ediyorsa o malzeme veya madde gözenekli yapıya sahiptir. Yapısındaki boşluklara ise gözenek adı verilir. Gözeneklilik (porozite) ise, ε , malzeme içindeki toplam boşluk hacminin gözenekli malzemenin veya maddenin toplam hacmine oranı ile elde edilir. Gözeneklilik; gözenekli bir malzemenin en önemli özelliğidir. Çünkü malzemenin tüm fiziksel (gözeneklerin homojen veya heterojen dağılımı) özellikleri gözeneklilikten etkilenir [Ishakoğlu ve Boytaş, 2002]. Bir malzemenin gözenekli ortama sahip olması için şu özellikleri taşıması gerekir. a) Malzeme kendi boyutundan çok küçük ve birbiri ile bağlantılı boşluklar içerir. Bir katı matris içinde oluşan bu boşluklar içerisinde su, hava veya farklı akışkanlardan oluşan karışımlar bulundurulur. b) Akışkan gözenekli katı malzemenin bir ucundan girip diğer ucundan çıkabilmelidir [Dullien, 1992]. Doğal bir gözenekli ortam içinde bulunan boşlukların büyüklüğü ve şekli düzensizdir. Gözenekli ortamın bütün makroskobik özellikleri rasgelelik ve düzensizlikten etkilenir. Yani, makroskobik gözenek yapısı değişkenleri gözenekli maddenin ortalama özelliklerini temsil eder. En önemli gözenek yapısı değişkenleri; gözeneklilik, geçirgenlik ve akış yatağı olarak bilinir. Akış yatağı ve gözeneklilik ortama ait özellikleri temsil ederken, geçirgenlik ise gözenekli ortamın kütle geçiş özelliğini temsil eder

[Alazmi ve Vafai, 2000]. Gözeneklerin özelliklerinin sadece gözenek boyları ve dağılımına bağlı olmadığı , bunların yanında en önemlisinin gözeneklerin geometrik şekilleri olduğunu belirtmişlerdir [Mann ve El –Nafaty 1996, Rieckmann ve Keil, 1997].

Gözenek ortamının, makroskopik özelliklere bağlı olduğu belirlenmiştir. Örneğin; Boşalma ve emme kılcal eğrileri gibi. Geçirgenlik ve yayılma, mikroskopik gözenek yapıları üzerinde, gözenek yapı modellerinin temelini oluşturulması için kullanılmıştır [Sahimi, 1995 , Dullien, 1992].

Gözenekli ortamın, ilerleyen teknoloji içerisinde çok önemli olduğu son zamanlarda yapılan çalışmalar ile iyice pekiştirilmiştir. Bunlardan birisi de "Çevre Dostu Benzin" eldesinde önemli yer tutan katalizör teknolojisidir. Yakıtların olumsuz etkilerini azaltmak ya da tamamen ortadan kaldırmak amacıyla yapılan çalışmalardan birisi kaliteli benzin, bir başka deyişle çevre dostu benzin eldesidir. Kaliteli benzin, düşük molekül ağırlıklı hidrokarbonlardan oluşmaktadır ve ayrıca içerisine yanma kalitesini artırıcı maddeler, depoziti önleyici katkı maddeleri ve kıvam artırıcılar ilave edilmektedir. Benzin katkı maddesi olarak oksijenli bileşiklerin kullanılması ise uzun zamandan beri araştırma konusudur. 1980'li yılların başlarında kurşunsuz benzine artan talep oksijenli yakıt bileşenlerine olan ilgiyi artırmıştır. Çevre dostu benzin eldesinde katkı maddesi olarak kullanılan eterlerin sentezinde, daha önce belirtildiği gibi, yüksek aktiviteleri ve seçiciliklerinden dolayı tercihli olarak asidik karakterli iyon değiştirici reçine katalizörler kullanılır [Özmen, 2004]. Bu katalizörlerden birisi de kuvvetli asidik özellikte makro retiküler yapısında bir reçine olan Amberlit-35'tir .

Gözenekli yapıya sahip malzemelerin farklı etkenler altındaki özellikleri ve davranışlarının (gözenekliliği, gözenek boyut dağılımı, gözenek uzunluğu v.b.) belirlenmesi için kullanılan civa porozimetri yöntemi en yaygın metodudur. Civa porozimetrisi; bir katı malzemenin gözeneklilik, hacim ve yüzey alanını, artan basınç altında numune içerisindeki gözeneklere ulaşan

civa hacminin ölçülmesi sonucu karakterize etmek için kullanılan bir methodtur. Gözenekli yapıya sahip malzemelerin gözenek ortamlarının daha iyi anlaşılır hale getirilmesi için bilim adamları tarafından, gözenek alan modellerinin geliştirilmiştir. Yapılan bu gelişmeler sonucunda, bir çok bilim adamı, üç boyutlu (3-D) ağ modelinin, gözenekli malzemelerin gözenek yapısını karakterize etmek için civa penetrasyon deneylerine göre, gerçekçi modellerden biri olduğu görüşünü savunmaktadırlar.

Yapılan bu çalışmada gözenekli malzemelerin modellenmesi için Compact Visual Fortran derleyicisi altında çalışan KALINET programı, gözeneklerin üç boyutlu (3-D) rastgele gözenek ağ görüntülerinin farklı kesitleri için kullanılan SECTION programı ve üç boyutlu (3-D) ağ çizimleri için kullanılan KALINET3D programı fortran77' den fortran90' a dönüştürüldü. Böylece Compact Visual Fortran derleyicisi altında ve GINO 5.5 ile ticari olarak desteklenen programlar çalışır hale getirildi.

Ayrıca kaliteli benzin üretiminde katalizör olarak kullanılan Amberlit - 35 katalizörünün gözenekliliğinin belirlenmesi için yapılan civa porozimetresi deneyi sonucunda elde edilen parametreler, bilgisayar ortamında modellenmiştir. İlk başta, gözenek hacim dağılımını veren civa porozimetresi ile elde edilen deney verilerinden yararlanarak, basınç ve boyutsuz hacim değerleri ile civa penetrasyon eğrileri çizilmiştir. Civa porozimetresini simüle eden ve Compact Visual Fortran(CVF) derleyicisi altında çalışan, KALINET (kalinetd_VisF_pressure_PSIa.f90) programında; elde edilen basınç ve boyutsuz hacim değerleri ile teorik penetrasyon eğrileri oluşturuldu. Daha sonra elde edilen penetrasyon eğrileri ile civa penetrasyon eğrisi karşılaştırılmıştır. 30x30x30 - 40x40x40 – 50X50X50 boyutlarında 83700 – 196800 – 382500 adet gözenek içeren üç boyutlu ağ modellerinin gözenek hacim dağılımını belirlenmiş ve ağ boyutlarının gözenekli malzemeler üzerindeki etkisi incelenmiştir.

İkinci aşamada kullanılan KALINET programında elde edilen veriler yardımıyla SECTION (Section_gino_CVF_son_pressure.f90) programı çalıştırılarak üç boyutlu rasgele gözenek ağın farklı kesitleri görüntülenmiş ve kaydedilmiştir. Bu çalışmada kullanılan katalizörün gözeneklerinin görsel sonuçları yani civanın izlediği yol hakkında görsel sonuçlar elde etmek için, KALINET ve KALINET 3D programlarında elde edilen veriler kullanılmış ve uygun üç boyutlu ağ çizimleri ile görsel sonuçlar elde edilmiştir.

Sonuç olarak: Elde edilen ölçümler sonucunda gözenek çap dağılımı hesaplamalarının yapılabileceği ve gözenek sayısının belirlenebileceği, ayrıca ağ boyutu üzerinde yapılan değişikliklerin, elde edilen sonuçlarda herhangi bir değişime neden olmadığı ve deneysel sonuçlar ile uyumlu oldukları gözlenmiştir

2. KURAMSAL TEMELLER VE KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Gözenek Modelleri

Gözenekli ortamları meydana getiren gözenekler çoğunlukla çıplak gözle görülemezler. Gözenekli yapıya sahip malzemelerin, gözenekli olmayanlara göre birçok durumda farklı davranma sebeplerini ve gözenekliğinin, numune üzerinde bir seri deneylerin yapılması; numunenin davranışlarının izlenmesiyle belirlenir.

Gözenekli ortamların gözenek yapılarının daha iyi anlaşılabilmesine duyulan ilgi, gözenek modellerinin sanal ortamda geliştirilmesine neden olmuştur. Bu nedenle, gözenekli yapılarda meydana gelebilecek olayların önceden öngörülebilmesi için gözenek modellerinin oluşturulması, oluşturulan bu modeller üzerinde bazı tahminlerde bulunulması önem teşkil etmektedir. Her bir model, sadece bazı fiziksel proseslerin davranışlarıyla ilgilenen bir hipotezin matematiksel ifadesini yansıtır. Bir modelin kurulmasındaki gaye, belirli bir soruya cevap vermek için oluşturulsa da ; bu sorunun formu, matematiksel modellerin kurulması yolunda etkili olur.

Simülasyon yöntemi ; teknolojik gelişmelerin içerisinde gittikçe önemi artan bir yöntemdir. Simülasyon; bünyesinde gerçek bir sistemi temsil eden modelden veya modellerden meydana gelir. Bilgisayar ortamında yapılan simülasyon, gerçek verilere dayalı olayların bilgisayar ortamında modellenmesidir. Simülasyon yöntemi; değişik problemleri çözmedeki başarısı nedeniyle, farklı gayeleri gerçekleştirmek için değişik alanlarda kullanılabilir. Bilgisayar dilinde kullanılan genel amaçlı programlama dilleri, FORTRAN, PASCAL, C ve CC++ 'dır.

Teknolojideki hızlı gelişim programlama dilleri üzerinde olumlu etkiler göstermiştir. Simülasyon ve modelleme yöntemleri karmaşık ve pahalı problemleri basit ve ucuz hale dönüştürülmesindeki başarıları nedeniyle,

teknoloji'deki gelişmeler modelleme ve simülasyon konularında yoğunlaşmıştır.

Bu çalışmada gerçekleştirilen modellemenin temeli, gerçek veriler ile oluşturuldu. Yani modellemenin gerçek veriler ile uyumlu, karmaşık yapının basitleştirilmesi ve sonuçta gerçek durumu yansıtabilmesi göz önünde tutuldu. Bu özellikler nedeniyle, birden fazla girdi ve birden fazla çıktı olasılığına sahip, girdi ve çıktıların deneme yanılma yöntemiyle rastlantısal olduğu fakat gerçek karakteristik özelliklerin ön planda tutulduğu bir modelleme (stokastik modelleme) kullanıldı.

Civa porozimetresi penetrasyon eğrileri ile gözenek boyut dağılımı ve gözenek kısımları çıkarılmıştır [Rigby ve Gladden, 2000]. Bu veriler Deshielding metodu ile yeniden uyarlanmış. Elde edilen veriler NMR, kabuk yoğunluğu, kabuk kafesi bekleme zamanı ile birleştirilmiş. Deshielding methodu ile geleneksel methodlarla mümkün olmayan, uzaysal geometrik yapıya sahip gözeneklerdeki dağılma olayı gerçekleştirilmiştir[Rigby ve Gladden, 2000].

Gözenek modelleri kullanımlarına göre üç farklı şekilde sınıflandırılabilir:

- a. Tek boyutlu modeller (örn: paralel tüp demeti modelleri)
- b. İki boyutlu modeller (örn: ağ modelleri)
- c. Üç boyutlu modeller (örn: küresel paket modelleri)

2.1.1. Tek boyutlu ve iki boyutlu gözenek modelleri

Gözenekli malzemelerin en basit modelleri, değişik çap ve eşit uzunluklara sahip olan silindirik kılcal gözenek demetlerinden meydana gelenlerdir. Bu modellerin önemli olmasının nedeni, gözeneklerde meydana gelen

davranışların (denge ve akış özelliklerinin) daha basit bir şekilde tanımlanabilir olmasıdır.

Ancak bu modellerin dezavantajı; bu modeller ile elde edilen verilerin, gözenek içinde hapsolan cıvanın neden olduğu histerez olayını ve bazı temel özellikleri tanımlamada yetersiz olmalarıdır.

Gözeneklerin rastgele oryantasyonları sonucu biraraya gelerek oluşturdukları gözenek kesişimlerinin daha gerçekçi görünmesi ve bu konfigürasyonun matematiksel uygunluğundan dolayı avantajlıdır. Bu durumun, çoğu kez gözenekli yapının rastgele bir modeli olduğu iddia edilir, fakat gerçekte saklı paralel demettir. Yani paralel tüp demeti modeli ile benzer cıva penetrasyon eğrisini vermesidir.

Gözenekler üzerinde, ilerlemenin dallama algoritmasının bir fonksiyonu olan matematiksel bir ifadeyi kullanarak, gözeneklerin bütün özelliklerini önceden belirlemeye çalışılmıştır. Tanecik ağzında bekleyen bir çok gözenek ile ilerleme prosesi başlar. Böylece ilerleme prosesinin başlamasıyla gözenek dalı oluşur. Oluşan dallar birleşme yerlerinden bölünerek yeni dallar meydana gelir ve bu dallarda oluşan gözeneklerde iki ön kısım oluşur. Taneciğin dış yüzeyine ulaşıldığında veya geriye gitmeye başlandığında ilerleme durur. Böylece tüm yapının karakterizasyonu gerçekleşmişti [Beeckman, 1990].

Makro gözenekli pelletleri temsil etmek için paralel tüp demeti üzerinde yeniden yapılanma yapılarak ,” kabuk etkisi” ni ortaya koyan boğumlu paralel tüp modeli ortaya atılmıştır.” Kabuk makro gözenek modeli ” ile geri çekilme eğrileri ve cıva penetrasyon eğrileri yeniden teorik ifadeler türetilmiştir. Sonuçta ise, ortaya çıkan histerezin olayının “ kabuk etkisi den kaynaklandığı sonucu elde edilmiştir. Üretimi gerçekleştirilen hidrokarbon üzerinde katalizör aktivasyon kaybının belirlenmesi için karbon katmanlarının birikmesi ve gözenekli kısmın fiziksel kesişimlerinin hesaba katılması gerektiği ortaya çıkarılmıştır [Androutsopoulos ve Mann, 1976].

Civanın hapsolmasını göstermek için gözeneğin yapısı, dökme camlarda meydana getirilerek saydamlık elde edilmiştir. Gözenekler ilk önce boşaltılmış ve daha sonra ise civa ile basınç altında doldurulmuştur. Periyodik boğuma sahip gözeneklerde civa tutulması meydana gelmekte ve civa tutulması, gözenek-düğüm oranı geniş olan kısımlarda, dar olanlara göre daha fazladır. Fakat büyük gözenekler ile dar düğümler birbirine bağlanmış ise, basıncın düşürülmesi ile civa kopması oluşabileceği, daha sonra gözeneklerden civa çekimi olabileceği, büyük düğümlere sahip gözeneklerin daha etkili boşaltıldığı sonucuna varılmıştır [Wardlaw, 1976].

Gözenek yapısını belirlemek için kullanılan civa porozimetresi tekniğinden yararlanılarak elde edilen penetrasyon ve geri çekilme eğrilerini karşılaştırmak için kare ağ modeli geliştirilmiştir. Civa porozimetresinde yaygın olarak gerçekleşen histerezis ve hapsolmanın belirlenmesi incelenmiş, gözenekli bir malzemenin gözenek boyut dağılımının kabul edilebilirliğinin belirlenmesi için ilk uygulama olmuştur [Androutsopoulos ve Mann, 1979] .

Birbirine bağlı silindirik gözenekler (gözenekli yapılar) ile iki boyutlu ağ modeli içerisinde ısı işlemi simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Fick yasası ile gözenek segmenti içerisindeki nemin transferi tanımlanmıştır. Sonuçta: Stokastik gözenek ağı içerisindeki küçük gözenekler tarafından büyük gözeneklerin perdelendiği görülmüştür. Bir tek boyut ile gözeneklerin idealleştirilmiş ağında gerçek gözenek ortamı taklit edilmiş ve önceden düşünülen etkiler ile difüzyon katsayısı karşılaştırılmış [Prachyawarakorn ve ark., 2008].

Rastgele ağ ortamı üzerinde bilgisayar simülasyonunu kullanarak , gözenekli ortamda birbirine karışmayan akışkanların (su- petrol) 2-D'lu ağda hareketleri incelenmiştir. Yatak kısmında kalan petrolün gözenek içerisinde kalmasının, gözenek yapısına bağlı olmadığı fakat ağ büyüklüğüne bağlı olduğu bulunmuştur [Chandler ve ark., 1982].

İki boyutlu gözenek modeli kılcal basınç karakterizasyonunu gerçekleştirmek için düzenli iki boyutlu ağ içerisinde rastgele ağ dağılmış değişik yarıçaplarda, kısa ve silindirik tüplerden meydana gelen gözenek sistemlerinde dört farklı tipte ağ modeli oluşturulmuştur. Yapılan bu çalışmalar sonucunda elde edilen istatistiksel bilgilerin tüp demeti modelinin, gözenekli kısmın yapısı hakkında yetersiz bilgiye sahip olduğu belirlenmiştir. Ayrıca; gözeneklerin idealize ağlarının ve kumtaşı örneklerinin kılcal basınç karakteristikleri arasında benzerlik bulunduğu iddia edilmiştir. Bu durum bağlantırlılık faktörü ile karakterize edilmiştir [Fatt, 1956] .

Düşük ergime noktalı alaşım, FCC (fluid catalytic cracking) örneğine daldırma yöntemi uygulanmış ve FCC katalizörünün yüzey bölgeleri SEM (Taramalı elektron mikroskobu) ile rastgele iki boyutlu gözenek ağ modeli 2-D (30X30) kullanılmış ve morfolojik gözenek yapıların yaklaşık olarak boyutları haritalanmıştır [El – Nafaty ve Mann, 2001].

Bu çalışmada gözenekli kısımlarda kapiller yoğunlaşma simülasyonu geliştirilmiştir. İlk başta kapiller yoğunlaşma ile gözenek ağ modeli birleştirilerek kritik yarıçapların hesaplanması için bir algoritma oluşturulmuş. Kapiller basınç altında kritik yarıçapın hesaplanması için çok bileşenli Kelvin eşitliği kullanılmıştır. Fick yasasının Whilst reaksiyonu birinci koşul kabul edilmiş ve diffüzyon olayı simüle edilmiştir [Wood ve Gladden, 2002].

Periyodik Boğumlu Gözenekler

Paralel tüp demeti modeli, gözeneklerin uzunluğu boyunca gözenek yarıçaplarının değişmesi ile tekdüze olmayanları içerecek bir kapsamdadır. Bu viskoz akış ve moleküler difüzyona karşı koyar. Böylece bu sebeple adsorpsiyon izotermelerindeki histerez olayı açıklayabilir. Değişik gözenek kesitlerinin içine girilebilirliği üzerindeki etkilerin neler olduğunun belirlenmesinin bir yoludur[Özmen, 2004].

2.1.2. Üç boyutlu gözenek modelleri

Küresel Paket Modelleri

Küresel paket modelleri, gözenekli ortamdaki hemen hemen bütün taşınım olayları için en çok kullanılan üç boyutlu gözenek modelidir. Bu modeller üzerindeki gelişmeler; gözenekğin mikro küreler arasında kalan boşluk kısımlarından meydana geldiği, pek çok sayıda rastgele üst üste gelmiş katı mikro kürelerden oluştuğu, öngörülen gözenekli bir maddede yer alan “rastgele küresel paket modelleri”nin geliştirilmesine dayanır.

Üç boyutlu (3-D) ağ modelinin temelinde, yağ ve ıslak polietilen kullanılmış. Gözenek ağının ve gözenek ortamının tanımlanması için, X-ray mikrotomografik yöntemle simüle edilerek, rastgele seçilmiş ağların oluşturulduğu gözlenmiştir. Bu model, dar kısımlarda hacim, yüzey alanı, şekil faktörü ve temel yarıçapların ölçülmesi gerçekleştirilmiştir. Sonuçta: Gözenek ortamı içerisindeki üç fazın farklılıklarının kanıtlanabileceği ortaya konulmuştur (yağ,su,hava) [Prodanovic ve ark., 2005].

Bu çalışmada, üç boyutlu devamlı olmayan gözenek ortamının değişik geometrik ve topolojik (yapısal) parametrelerini çıkarmak için, çok yönlü ve yeterli olan bir methodology(metodoloji) gösterilmiştir. Bu yeni yaklaşım ; Gözeneklerdeki geri çekilme topolojisi ile benzer gözenek boşluklarının küçültülmüş gösterimi gerçekleştirilmiştir. Gözenek boşluğunda bir ağ eksen ve bu eksenleri ile oluşturulan etkileşiminin muhafaza edilmesi küçültülmüş(thinning) algoritma ile sağlanmıştır. Bu yeni yöntem ve stokastik simülasyon ile gözenek ağı ve düzensiz şekiller için, 2-D ve 3-D'lu gözenek ağları oluşturulmuştur [Liang ve arkadaşları, 2000].

Üç boyutlu bir model içerisinde tek tip olmayan küreleri içeren katı bir yapının gözeneklerine civanın girebilmesi için, gerekli basınç ifadeleri türetmişlerdir. Bu kürelerin davranışları gözeneklerden geçmek için gerekli olan basıncı ve

katının iç kısımlarına doğru gidilebilecek en geniş açıklık, kürelerin yarıçaplarına doğru olan açıklıkların boyutu ile ilişki kuracak şekilde tanımlamışlardır [Frevel ve Kressley, 1963].

Çok sayıda rastgele üst üste binmiş katı mikro küre barındıran ve gözenekli kısımları bu mikro küreler arasında kalan boşlukların oluşturduğu varsayılan gözenekli malzemeler için rastgele küre modelini önermiştir. Bu rastgele küre modelinin, bazı gözenekli malzemelerin örneğin; silikajel gibi gözenekli bir malzemenin özelliklerini kesin öngörülerle elde edildiği neticesine varmıştır[Van Ekel, 1973].

Elmas Tüp Paketleme, Kapalı Kübik Paket, Gövde Merkezli Kübik ve Basit Paket tiplerini içerdikleri durumlar için gözenekli ortamdaki etkin yayılma katsayılarını incelemişlerdir. Bu çeşit paketlerin, gözenekli yapıya sahip olduklarını belirlemişlerdir. Bu modellerle ilgili en büyük sorun ise paketlerin sahip olduğu gözenek boşluklarının geometrisinin karmaşıklığıdır[Katsuzawa ve Kobayashi, 1984].

Gözenek Ağı

Üç boyutlu gözenek ağları üzerinde yapılan çalışmalar çok eski olup, yaklaşık tüm durumlarda gözeneklerin tıpkı, iki boyutlu ağlarda olduğu gibi gözeneklerin silindirik yapıda oldukları öngörülür. En doğal ağ ise, bağlantırlık faktörünün 10'a eşit olduğu ağdır. Bu model; gözenekli malzemelerdeki gözenekli ortamın gözenek dağılımının, civanın gözeneklere nüfuz etmesi üzerindeki etkisini belirtmek amacıyla kullanılmıştır. Gözeneklerin yarıçapı ağda rastgele dağıtılarak düğüm noktalarının sıfır hacme sahip oldukları öngörülmüştür [Kzenzhek, 1963] .

Aynı model; düğüm noktalarında birleşen gözeneklerin adedini değiştirerek, farklı sayıda gözenek içerecek şekilde genelleştirilmiştir. Ağ, içinde 18 adet

silindirik gözeneğin bulunduğu basit kübik hücrelerden meydana gelmiştir [Nicholson ve Petropoulos, 1971].

Substrat (enzimlerin etki ettiği madde) içerisindeki kapiller proseslerin benzer karakteristikleri için gerçek gözenek ortamının gözenek ağ modeli ile simülasyonu çalışılmıştır. DSBM(dual site-bond model) teorik temelli destekler ile gözenek ortamının çeşitli yapısal özelliklerin uygunluğunu tanımlamak ve gözenek ağ modellerini simüle etmek mümkündür. Daha sonra DSBM' nin teoriksel temelli prensipleri desteklenmiş ve Monte Carlo yöntemiyle heterojen 3 boyutlu gözenek ağ modelleri yapılmıştır. Şu özellikler göz önünde tutulursa, substratların yapısal (topohogical) özelliklerinin ortaya çıkarılabileceği düşünülmüştür; a)Farklı boyutlarda boşlukların olması b)Gözenek elementlerinin birbirleriyle bağlanması c) Geometrik sınırlamanın olması. Bu özelliklerin düzenli ve düzensiz ağlar içerisinde önemli etkilere neden oldukları belirlenmiştir [Androutsopoulos ve Mann, 1979].

Halka şeklindeki katalizör pelletlerinin karakterizasyonunu simüle etmek için milyonlarca gözenek içeren geniş ağ yapıları kullanılmıştır. Geliştirilen geniş ağ yapısından rastgele üç boyutlu ağlar oluşturulmuştur. Nicel mikroskopi ve civa porozimetresi bağımsız deneysel teknikleri ile görüntü analiz yöntemleri kullanılmıştır. Üç boyutlu rastgele ağlarda gözenek yapıları ölçmek için simülasyon ve deneysel teknikleri kullanılarak elde edilen sonuçların karşılaştırılabileceği ortaya çıkmıştır [Allamy ve ark., 2003].

Gözenek ortamındaki kılcal basınç, bağıl geçirgenlik ve geçirgenlik gibi özelliklerin verileri ile makroskopik belirlemeler yapılabileceği, gözenek boyut davranışlarının araştırılması için ağ modellerinin kullanışlı bir yöntem olduğu sonucuna varmışlardır. Ağ modellerinin fiziksel olarak temsil edileceği, nicel ve öngörülen sonuçlarla elde edilebileceği belirlenmişti [Matthew ve ark., 2007].

Gözenekli ortamın geçirgenliğinin belirlenmesi için matematiksel bir model geliştirmiştir. Bu model, makroskopik taşınım yönüne göre, keyfi yönlerin bir set kübik ağını içerir ve her bir ağ farklı çaplarda kılcal gözenek ihtiva eder [Dullien, 1975]. Bir kılcal kübik ağın isotropik geçirgenlik özelliğine sahip olduğunu göstermiş ve oldukça sıkıştırılmış malzemelerin çok geniş aralıklarda geçirgenlikleri için deneysel sonuçlar ile, uygun gözenek boyut dağılımları ve gözeneklilik değerleri kullanılarak hesaplanmış geçirgenlikler arasında uyumluluklar bulmuştur[Dullien, 1975].

Bir malzemenin iç yüzey bölmelerinde boşlukların kompleks bir yolla doldurulması ile oluşan gözenek ortamı, interfacial sistem olarak açıklanabilir. İlk aşamada, gözenek ortamındaki düzensizliğin bazı deneysel tekniklerle 3-D'lu yapı ile öngörülmesinin(image) mümkün olduğu belirlenmiştir. İkinci aşamada ise, düzensiz gözenekli malzemelerin, geometriksel ve özellikle topolojik özelliklerinin analizi yapılmıştır. Tamamlanmamış morfolojik karakterizasyonların bir kısmında değişik gözenek ağlarının 3-D'lu temsili olarak elde edilmesi birkaç strateji ile ilgilenilmiştir. Sonuçta, geometrik sınırlama ile geçirgenlik arasındaki bağlantı gösterilmiştir [Levitz, 2007].

Civa porozimetrisinde yer alan penetrasyon ve geri çekilme proseslerini incelemek için [Golshan, 1979]. İki boyutlu kübik ağ modeli ile aynı prensiplere dayanan üç boyutlu bir model geliştirmiştir. Bu model β (bağlantı) faktörünü artırır [Androustopoulos, 1976]. Bağlantı faktörü arttıkça kılcal basınç eğrisinin de tüp demetleri modelinden elde edilen eğriye yaklaşımaya eğilimli olduğunu bulmuştur. Bu durum; her bir gözeneğe giden yolların sayısı arttıkça, ağ dış sınırından belirli herhangi bir gözeneğe kadar büyük bir gözenekler zincirine sahip olma ihtimalinde de bir artış olduğu durumunun sonucudur[Golshan, 1979].

Gözenekli cisimler içerisindeki yüksek porozitenin, geçirgenliğin ve yayılmanın önceden bir gözenek ağ modeli ile belirlenebileceği öngörülmüştür. Toplam porozite üzerinde gözenek boyut fonksiyonu ve civa

penetrasyon eğrileri ayrı ayrı deneysel verileri hesaplanmış ve yakınlıkları ağ modeli ile yapılandırılmıştır. X- alumine örneğinin stokastik 3-D 'lu reprodüksiyon yöntemi ile gözenek boyutu fonksiyonu çekilmiş ve yeniden stokastik yapılanma gerçekleştirilmiştir. Kesilen 2-D'lu gözenek ortamı boyunca yeni yapılanma tekniği kullanılarak morfolojik bilgilerin temeli oluşturulmuştur. Eğer civa penetrasyon eğrileri hesaplanırsa, ağ içerisindeki geniş ve dar gözeneklerde elde edilen deneysel verilerin uyum içerisinde olması gerektiği sonucuna varılmıştır [Capek ve ark., 2007].

Üç boyutlu(3-D) gözenek ağlarında gaz tutunma ve civa penetrasyonunun gözenek boyut izotermi dağılımını araştırmışlardır. Gözeneklerin üç boyutlu ağda düğümler tarafından birbirine bağlanmış gibi davrandıkları görülmüştür [Wall ve Brown, 1981]. Başka bir çalışmada Monte Carlo yöntemi ile dış sınır ağın içi kısımlarını bağlayan farklı boyutlardaki yolları bulmak için olasılıkları hesaplamışlardır [Wall ve Brown, 1981].

Taneli bir malzemedeki gözenekleri tanımlamak için kübik-kafes modeli kullanmış ve doymamış sıvı (su) akışının fiziksel olayını incelemiştir . Sıvı akış denkleminin yönelik doymuşlaşma olayı ile katsayılar arasındaki ilişkiyi bu modelin başarıyla gösterdiği neticesine ulaşmıştır [Kuramae, 1982]. Bu model; düzensiz şekillerde ve sabit olmayan hacimlerde olan gözeneklerden oluşan taneli malzemelerde de olduğu gibi, düğümler tarafından birleştirilmiş sabit hacimli çok sayıda gözenek içerdiğinden, taneli malzemeyi doğru olarak temsil edemez [Kuramae, 1982].

Civa porozimetri proseslerinin (ilerleme/ çekilme) basit bir kübik gözenek ağ modeline dayanan bilgisayar simülasyonunu ele almışlar ve sabit olmayan çeşitli yapısal parametrelerin etkilerini test etmişlerdir. Conner ve Lane, bağlanırlığı (4,6 ve 8) ve kafes boyutunu (5X5X5, 7X7X7 ve 9X9X9 kafesleri) değiştirmişler ve farklı boyut dağılımlarını boğazlara ve gözeneklere tahsis etmişlerdir. Civa porozimetre kılcal basınç eğrilerinin yorumunu basitleştirmek için bazı genel kurallar sunulmuş ancak, gözenek yapısı hakkında temel bir

bilgi olmadan, bu uygulamanın çok da amacına uygun sonuçlar vermeyeceğine dikkat çekilmiştir [Conner, 1984].

Civa penetrasyon eğrilerini kullanarak geçirgenliği ve diğer özelliklerini simüle etmek için kumtaşına kübik ve tetrahedral ağlar uygulanmıştır. Bir ağ düğümünün engellenmesiyle o düğümde birleşen bütün gözeneklerin bloke edildiği varsayıldığını modifiye eden bir süzülme teorisi kullanmışlardır. Asıl gözenek yapısının verilerinin kullanılması durumunda ve modifiye edilmiş süzülme teorisi ile beraber kullanılan ağların, drenaj içindeki kum taşı numunesinin civa geçirgenlik eğrilerinin, penetrasyon eğrilerinin ve iletken olmayan doygunluk eğrilerinin modellenmesi içinde kullanılabileceği sonucuna ulaşmışlardır [Chatzis ve Dullien, 1985].

3. ÜÇ BOYUTLU (3-D) AĞ MODELİNİN AMBERLİT-35 POROZİMETRİSİNE UYGULAMASI

Gözenekli malzemelerde gözenek geometrisinin etkilerinin daha iyi anlaşılabilmesi için, gözenekli malzemelerin geometrik özelliklerinin simülasyonu, modellenmesi ve ölçülmesi için yapılan çalışmalar uzun sürelerden beri yapılmakta, gün geçtikçe de artmaktadır.

3.1. Bilgisayar Programları Üzerinde Yapılan Dönüşümler

Compact Visual Fortran derleyicisi altında çalışan KALINET, SECTION ve KALINET 3D programları; fortran 77'den fortran 90' a dönüştürülürken önemli değişiklikler yapıldı. Bunlar; fortran90 ile fortran77 arasındaki bazı temel farklılıklardan dolayı, ayrıca rotalar (routines) ve ana programla ile bağımlı ve bağımsız çalışan alt – programlar üzerinde bazı değişiklikler gerçekleştirildi. Fortran 90'nı fortran 77'den ayıran temel farklar; Fortran 90 tarafından dizinler için dinamik olarak yer ayırımının yapılması, buna ek olarak Case, Exit, Cycle ve Select etiketlerinin olması , free format , satır atlamasının , karakter sayısının ve açıklamaların farklı yazılması vb. gibi özelliklerle açıklanabilir. Dönüşümlere bir örnek aşağıdaki Çizelge 3.1'de verilmiştir.

Çizelge3.1.Dönüşümler f77'den f90'a (Rotaların devamı EK– 1' de verilmiştir)

Fortran77	Fortran 90
<pre> IF(ISGR.EQ.1) THEN NI=2*N+1 NT=3*(N+1)*N**2 OPEN(20,FILE='D:\z_Veli\veriler4\Kalineta.out.txt') WRITE(20,110) N,N,N,NT 110 FORMAT(1H1,/,1H0,/,30X,'NETWORK SIZE ',I2,' X ',I2,' X ',I2, \$ /,1H0,/,30X,'NON-SEGREGATED MODEL',/, \$ 30X,'*****',/,1H0,/, \$ 20X,'AND CONTAINING ',I6,' PORES',/,1H0) </pre>	<pre> IF(ISGR.EQ.1) THEN NI=2*N+1 NT=3*(N+1)*N**2 OPEN(20,FILE='D:\z_Veli\veriler4\Kalineta.out.txt') WRITE(20,110) N,N,N,NT 110 FORMAT(1H1,/,1H0,/,30X,"NETWORK SIZE ",I2,"X",I2,"X",I2,/,& 1H0,/,30X,'NON-SEGREGATED MODEL',/,& 30X,'*****',/,1H0,/,& 20X,'AND CONTAINING ',I6,' PORES',/,1H0) </pre>

Veri dosyası oluşturmak için kullanılan KALINET ana programında, genel fortran77'den fortran90'a dönüşümler yapıldı. Ana programda ve alt-programlarda; use ginof77 yerine use ginof90 yazıldı. Çizelge 3.2 gösterilmiştir.

Çizelge3.2.Dönüşümler f77'den f90'a (Rotaların devamı EK– 1' de verilmiştir)

Fortran77	Fortran 90
<pre> SUBROUTINE SECTION1(N,PL,JPL) C REAL M(61,61,61),PPRE(61,61,61) COMMON /BLK2/FACTOR COMMON /BLK8/M COMMON /BLK11/DDRAW COMMON /BLK22/PPRE </pre>	<pre> SUBROUTINE SECTION1(N,PL,JPL) ! use gino_F90 use graf_F90 REAL M(61,61,61),PPRE(61,61,61) COMMON /BLK2/FACTOR COMMON /BLK8/M COMMON /BLK11/DDRAW COMMON /BLK22/PPRE </pre>

Gözenekli yapıların çizimi için kullanılan SECTION programında; fortran77'den fortran 90' a dönüşümler yapıldı. Bu işlemler gerçekleştirildikten sonra çizilen gözeneklerin BMP(Bitmap) ' deki görüntüleri aynı boyuta sahip noktalar halinde oluştu. Bu problemleri ortadan kaldırmak için KALINET ana program da CALL MOVTO2 (X,Z) ' nin yerine, CALL gMoveTo2D(X, Z-R) ve CALL DOT(R) 'nin yerine Call gDrawArcBy2D(0.0,R,0.0,0.0,GCLOCKWISE) yazıldı. İşlemler tekrarlanarak gözeneklerin çizimleri gerçekleştirildi. Çizelge 3.3'de verilmiştir.

Çizelge3.3.Dönüşümler f77'den f90'a (Rotaların devamı EK– 1' de verilmiştir)

Fortran77	Fortran 90
<pre> call lincol(1) CALL PORESEC(I,JPL,K) CALL MOVTO2(X,Z) CALL DOT(R) ENDIF 200 CONTINUE </pre>	<pre> call gSetLineColour(1) CALL PORESEC(I,JPL,K) CALL gMoveTo2D(X,Z) CALL gMoveTo2D(X,Z-R) CallgDrawArcBy2D(0.0,R,0.0,0.0,GCLOCKWISE) ENDIF 200 CONTINUE </pre>

Gözeneklerin üç boyutlu (3-D) ağ görüntülerini çizmek için kullanılan KALINET 3D programında ; genel fortran77'den fortran 90'a dönüşümler yapıldı. Ana programda ve alt- programlarda; use gino_ f77 yerine use gino _f90 ve use graf_ F90 eklendi. Çizelge 3.4'de verilmiştir.

Çizelge3.4.Dönüşümler f77'den f90'a (Rotaların devamı EK– 1' de verilmiştir)

Fortran77	Fortran 90
<pre> SUBROUTINE STORE(NI) C REAL M(61,61,61),PPRE(61,61,61) COMMON /BLK2/M COMMON /BLK5/PL COMMON /BLK22/PPRE </pre>	<pre> SUBROUTINE STORE(NI) ! use gino_F90 use graf_F90 REAL M(61,61,61),PPRE(61,61,61) COMMON /BLK2/M COMMON /BLK5/PL COMMON /BLK22/PPRE </pre>

3.2. Civa Porozimetrisi

Gözenekli malzemelerin gözenek boyut dağılımının belirlenmesi için yaygın olarak kullanılan tekniklerden biri tanesi Civa porozimetrisidir. Bu yöntemin çalışma prensibi, civanın yüzey ıslatmayan özelliğine bağlıdır. Civa; bir çok sıvının aksine katı yüzeylerin büyük bir kısmı ile 90°'den büyük kontak açısı (θ) yapar. Civa bu özelliğinden dolayı belli büyüklüğün altındaki kılcallara (gözeneklere) kendiliğinden ulaşamaz. Dairesel silindirik gözeneğe civanın girmesi için gerekli olan basınç, gözeneğin kesit alanda daireysel ve silindirik boyu olduğu kabul edilerek Washburn eşitliğinden Eş 3.1'den hesaplanabilir.

$$P = - \frac{2\sigma \cos\theta}{r} \quad (3.1)$$

P: uygulanan basınç, N/m²

r: gözenek yarıçapı

σ civanın yüzey gerilimi, 480 mN/m²

θ : civanın kontak açısı, 160°

Bu kullanılan eşitlik, Eş 3.1 veya gözenek çapı (D) kullanılarak oluşturulan Eş 3.2 'de; civa porozimetresi deneyinde elde edilen kılcal basınç verileri yorumlayarak, gözenekli malzemelerin gözenek dağılımını belirlemek ve gözenek modelleri ile karşılaştırmak için kullanılır.

$$P = - \frac{4 \sigma \cos \theta}{D} \quad (3.2)$$

3.2.1. Civa porozimetresi prensibi

Civa porozimetresi deneylerinde belirli bir basınçta (P) gözeneklere giren civa hacmi (V) ölçülür.

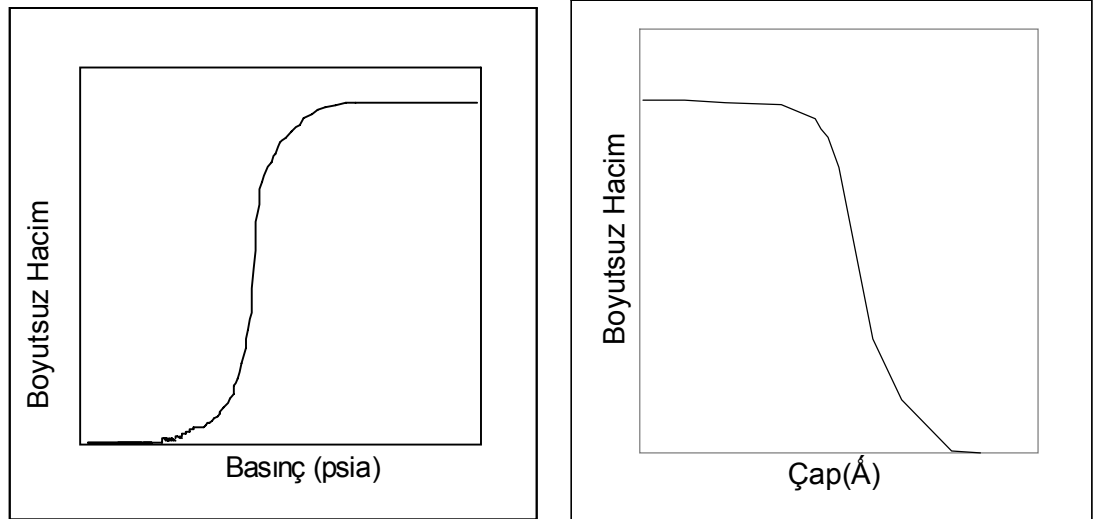
Civa porozimetresi deneyi, bir numuneyi tamamen havadan arındırma ve sonra civa ile kaplama, ve daha sonra da yüksek basınç uygulama adımlarına sahip olmalıdır. Civa porozimetresi çalışma prosesi şu şekilde gelişir;

Numunenin nemden arındırılması için, numune bir gün boyunca etüv 'de kurutulur. Nemin den arındırılan numune kullanılmadan önce tartılarak not edilir. Daha sonra numune Penetrometre içerisine yerleştirilir ve tekrar tartılarak not edilir. Daha sonra bir dilatometreye (genleşme ölçer) yerleştirilir. Dilatometre, numuneyi içeren kısım ve dilatometreyi oluşturan hassas bir delgi boru takımı ve kapsülü olmak üzere iki parçadan oluşur.

İlk önce civa porozimetresi deneyinde düşük basınç kısmında civa (basınç 2.5 psia olana kadar) piknometre içerisindeki numunenin gözeneklerine tamamen girene, basınç 2.5 psia 'a düşene kadar işlem gerçekleştirilir.

Numune ve civa içeren piknometre tekrar tartılarak not edilir. Daha sonra, yüksek basınç altında piknometre basınç hücresine yerleştirilir. Hücre hidrolik akışkan ile doldurulur ve basınç istenen düzeye ulaşana kadar adım adım artırılır ve belirli basınç seviyelerinde gözeneklere giren civa hacmi okunur.

Böylece elde edilen veriler, gözenek geometrisini tahmin edebilmek için temel kaynakları oluşturur. Bu veriler grafiksel olarak hacme (V) karşılık basınç grafiği ve boyutsuz hacme (V/V_{toplam}) karşılık basınç grafiği olmak üzere iki yolla gösterilebilir.



Şekil 3.1. Boyutsuz hacmin basınç'a karşı ve boyutsuz hacmin çap' a karşı penetrasyon eğrileri

Yapılan bu çalışmada, deneysel veriler ile civa penetrasyon eğrisi Şekil 3.2 boyutsuz hacme (V/V_{toplam}) karşılık basınç grafiği olarak gösterilmiştir. Washburn denklemi ve civa penetrasyon eğrilerini kullanarak Şekil 3.1 gözenek hacim dağılım fonksiyonu $[F_V(D)]$ Eş 3.3 'te verilmiştir.

$$F_V(D) = - \frac{dV}{dD} \quad (3.3)$$

Eş.3.3 ifadesi Eş.3.4 olarak alınabilir.

$$F_V(D) \approx - \frac{\Delta V}{\Delta D} \quad (3.4)$$

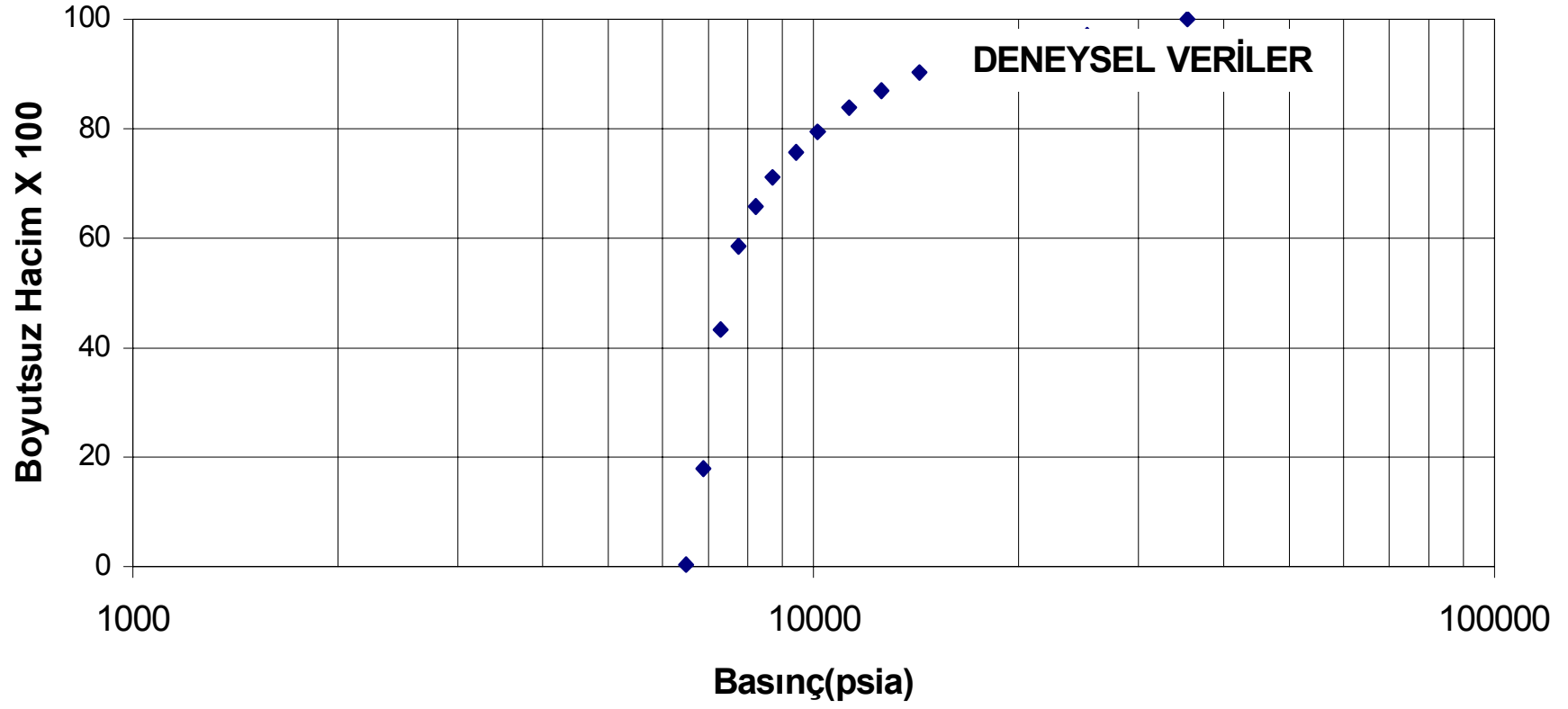
$\Delta V=0.1$ kabul edilerek ve civa penetrasyon eğrisinden ΔD 'nin değeri hesaplanarak; her bir histogram çubuğunun her bir basınç aralığındaki gözenek hacminin % 10'unu temsil ettiği gözenek hacim dağılım histogramını veren $F_V(D)$ 'ye karşılık D grafiği çizilebilir.

3.3. Amberlit-35 Katalizörü Civa Penetrasyon Eğrisinin Yorumlanması

Bu çalışmada: Kaliteli benzin için katkı maddesi olarak kullanılan Amberlit – 35 katalizörünün civa porozimetresi deneyi sonucunda elde edilen parametreler kullanıldı. Amberlit – 35 katalizörü için civa porozimetre deneyi, deney basıncının 6491 psia' da başlayarak 35410 psia' a kadar değiştirilmesi ile gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmada Gazi Üniversitesi Kimya Mühendisliği Kinetik Laboratuvarına ait Quanto Chrome civa porozimetresi kullanılmış ve civa kontak açısı 160° olarak alınmıştır. Deneysel çalışmanın sonuçları incelendiğinde 6491 psia (328.6 Å) basınçta penetrasyonun başlayıp, 6886 psia' da ve 310 Å gözenek çapı büyüklüğüne kadar % 18.9 civa penetrasyonu gerçekleştiği, 6886 – 14301 psia' da (310 – 169.6 Å) ise civa penetrasyonunun %86.96'sının gerçekleştiği ve 14301 – 35410 psia' da %100 civa penetrasyonun gerçekleştiği Şekil 3.2 gözlenmiştir.

Washburn denklemini Eş 3.1 ve Şekil 3.2 'yi kullanarak, gözenek hacim dağılım fonksiyonu, $F_V(D)$, uygun boyut aralıkları tahmin edilerek, birçok eşit hacim aralıkları üzerinde belirtilebilir. Yapılan bu çalışmada, $\Delta V =0.1$ olarak alındı. Elde edilen dağılım ise her bir histogram bloğunun gözenek hacminin

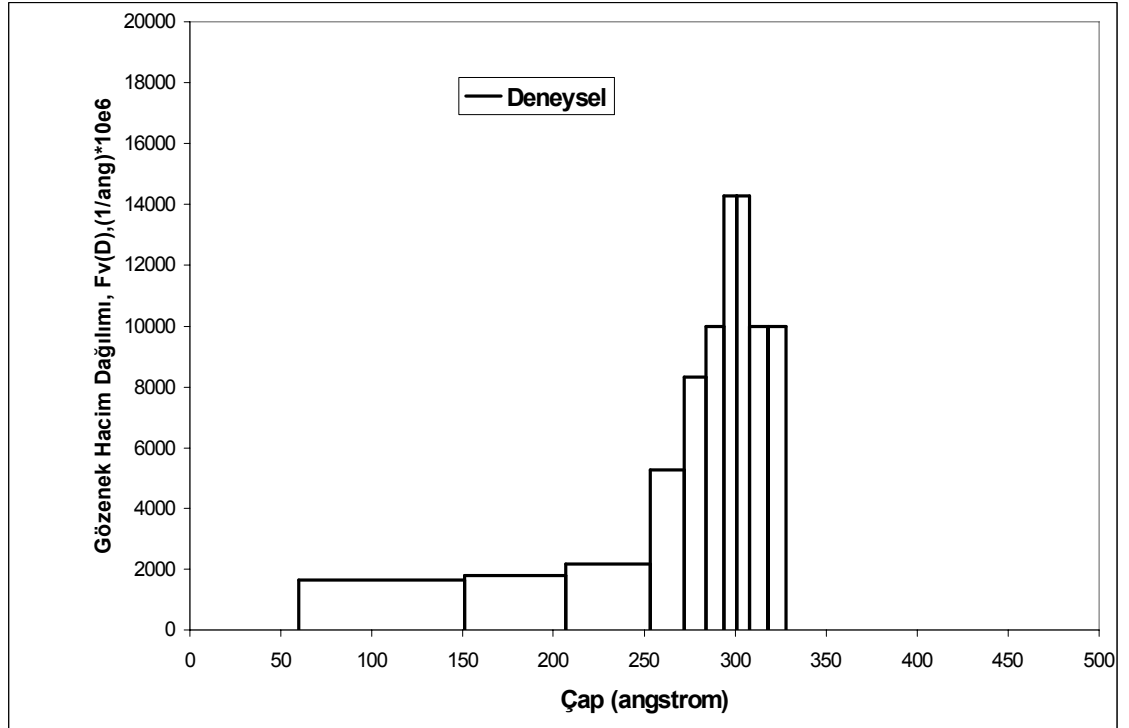
% 10' unu temsil ettiđi bir histogram haline evrilmiřtir. Deđerler izelge 3.5.
'de verilmiř ve řekil 3.3 'te izilmiřtir.



Şekil 3.2. Amberlit-35 katalizörünün deneysel civa penetrasyon eğrisi

Çizelge 3.5. Amberlit-35 katalizörü için deneysel gözenek hacim dağılım verisi

$V=V+dV$	$D=D-dD$	$(dV/dD) \times 10^6 \text{ Å}^{-1}$
0,0-0,1	328,6 - 316,5	9999
0,1-0,2	316,5 - 310,69	9999
0,2-0,3	310,69 - 301,51	14285
0,3-0,4	301,51 - 291,7	14285
0,4-0,5	291,7 - 281,2	9999
0,5-0,6	281,2 - 268,53	8332
0,6-0,7	268,53 - 256,95	5262
0,7-0,8	256,95 - 209,91	2172
0,8-0,9	209,91 - 154,15	1786
0,9-1,0	154,15 - 60,2	1659



Şekil 3.3. Amberlit-35 katalizörünün deneysel gözenek hacim dağılımı

3.4. Üç Boyutlu (3-D) Ağ Modelinin Civa Porozimetrisine Uygulanması

Civa penetrasyon eğrisini teorik olarak gerçekleştirmek için, bilgisayar programları geliştirilmiştir [Golshan, 1979]. Üç boyutlu (3-D) düzgün kübik ağdaki gözenek boyutları için bilinen dağılım fonksiyonları kullanılmış ve tablet veya toz malzemeler üzerinde teorik çalışmalar gerçekleştirilerek yapılmıştır [Sbaiti, 1983]. Ayrıca bu model, yeniden modifiye edilerek PVC taneciklerinin karakterizasyonu üzerinde gerçekleştirilmiştir. Bu model (üç boyutlu ağ modeli) Manchester Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Enstitüsü Kimya Mühendisliği Bölümü'nde gerçekleştirilmiş ve Üniversite'nin Bilgi İşlem Merkezi'nin temin etmiş olduğu kütüphaneler (NAG, GINO, çizim programları) kullanılarak Ana Bilgisayar (Main Frame) üzerinden gerçekleştirilmiştir [Mürtezoğlu, 1994].

Oluşturulan üç boyutlu ağ modeli yeniden modifiye edilerek kişisel bilgisayarlarda çalışır hale getirilmiştir. Ayrıca başka merkezi desteklere ihtiyaç olmaksızın “ Masaüstü” nde çalışır duruma getirilmiştir [Özmen, 2004]. Bu teorik penetrasyon ağ üzerinde gerçekleştirmek için şu kabuller yapılmıştır.

- a. Gözenek uzunluğu tüm ağ için aynıdır.
- b. Gözenek şekli pürüzsüz silindirikdir.
- c. Ağ kübiktir ve bağlantı faktörü sabit ve 10'a eşittir.
- d. Ağın yapısının yüzeyi civa ile direkt temastadır.
- e. Tüm ağ, başlangıçtan itibaren tamamen vakum altındadır.

3.5. Üç Boyutlu (3-D) Rastgele Ağ Modeli

Üç boyutlu (3-D) rastgele ağ modeli, her yönde N (ağ boyutu) adet kesişen silindirik gözenek kesitinden oluşan kübik bir ağı içermektedir. Oluşan bu kesitlerin çapları ağa rastgele dağıtılır. Ağ girişindeki toplam gözenek kesiti (N_T) Eş.3.5 'den hesaplanır[Özmen, 2004].

$$N_T = 3 \cdot N^2 \cdot (N+1) \quad (3.5)$$

Gözenekli ortamın gözenekliliği belirlemek için ;

$$\varepsilon = \frac{\text{Toplam gözenek hacmi}}{\text{Numune hacmi}} \quad (3.6)$$

eşitliği kullanılır.

Bu çalışmada kullanılan üç boyutlu (3-D) ağ modelinde silindirik gözeneklerin eşit uzunlukta oldukları kabul edilerek, gözeneklilik;

$$\varepsilon = \frac{(\pi/4) \sum_{l=1}^{N_T} [RO(l)]^2 \cdot PL}{[PL \cdot (N+1)]^3} \quad (3.7)$$

eşitliği kullanılır.

Burada;

RO(l) değişkeni: Rastgele gözenek çaplarını içerir

N: Ağ boyutu

N_T : Düzenli/düzensiz kübik ağdaki toplam gözenek sayısıdır.

PL: Gözenek boyutu

Bu eşitliği tekrar düzenleyerek;

$$PL = \left[\frac{\pi \sum_{l=1}^{N_T} [RO(l)]^2}{4 * \epsilon * (N+1)^3} \right]^{1/2} \quad (3.8)$$

eşitliği elde edilir.

Yukarıda verilen eşitlikler Eş 3.7 ve Eş 3.8 kullanılarak elde edilen gözeneklilik, ağ boyutu ve program; bölümlü veya bölümsüz, gösterim veya çakıştırma gibi dört olasılığı belirlenmiş modelin versiyonuna göre bir set gözenek atanır. Bundan dolayı, verilen gözeneklilik ve ağ boyutu ile program; ayrılmış ya da ayrılmamış, çakıştırma ya da gösterim olan dört olasılıklı modelin belirlenmiş bir versiyonuna göre bir set gözenek çapı yaratır.

Düzenli kübik model oluşturulmak isteniyor ise PL,(gözenek uzunluğu) her bir gözeneğe uzunluk olarak atanır ve rastgele olarak üretilen gözeneklere tahsis edilir.

Fakat düzensiz bir kübik model oluşturmak isteniyorsa gözeneklerin uzunlukları (PL) eşit ve ağın başlangıçta kübik olduğu varsayılır.

Bu kabulde, gözeneklerin düğüm noktaları 0.5'ten büyük olmamak şartıyla rastgele -FM, FM düğümleri etrafında ardışık olarak hareket eder. Daha sonra her bir gözeneğin uzunluğu, uçlarından bağlanmış iki düğümün koordinatları bilinerek hesaplanabilir.

Düzenli ve düzensiz kübik ağlar Şekil 3.5'te gösterilmiştir. Gözenek uzunluklarının belirlenmesi için gözenek çapları aşağıdaki üç yoldan biriyle ilişkilendirilebilir.

a) Gözeneklerin çapları uzunluklarından bağımsızdır.

veya

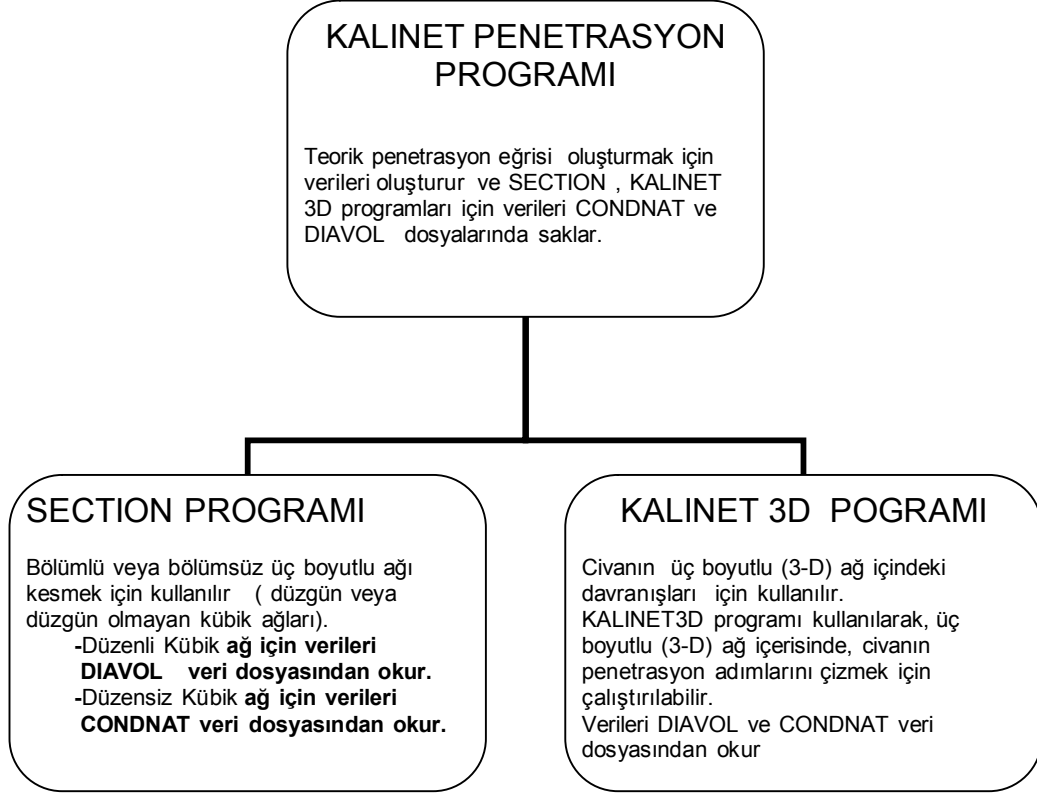
b) Gözeneklerin çapları uzunluklarıyla ilişkilendirilebilir; örneğin, uzun gözeneklerin büyük çapları vardır ya da kısa gözeneklerin küçük çapları vardır.

yada

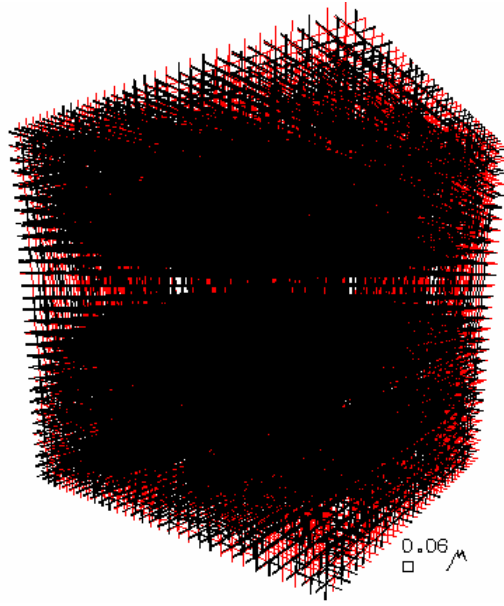
c) Gözeneklerin çapları uzunluklarıyla ters orantılı olarak ilişkilendirilebilir; örneğin, uzun gözeneklerin küçük çapları vardır, kısa gözeneklerin büyük çapları vardır.

İlk önce , gözeneklerin boşaltıldığı varsayılır, civa çevresel gözenek girişleri ile temas halindedir ve kullanılan basınç, ağdaki en geniş gözenek kesitini penetre etmek için ihtiyaç duyulan basınçtan daha düşüktür. Washburn denklemi Eş 3.1 kullanılarak, civa ucunun hareketini önceden tahmin edebilmek için ağın teorik bir penetrasyonu ele alınır. Program tarafından verilen her bir basınç adımı, mevcut basınçta doldurulabilen her bir gözenğin doldurulmasını ve civa ucunun sıradaki gözeneğe hareket etmesini kontrol etmek için; tüm ağ, dış sınır çizgisinden itibaren taranır. Böylece, iki ucunun yapışmadığının varsayıldığı en küçük gözenek hariç tüm ağın tamamen doldurulduğu varsayılır. Civa geri çekilmesinin ise belirli bir basınç azalmasıyla başlayacağı varsayılır. Ağın birkaç defa yeniden oluşturulması ve daha sonra penetrasyon davranışının hesaplanması; gözeneklerin herhangi bir belirli gözenek boyut dağılım fonksiyonuna uydukları zaman oluşması gereken ortalama basınç eğrisi hakkında fikir verir.

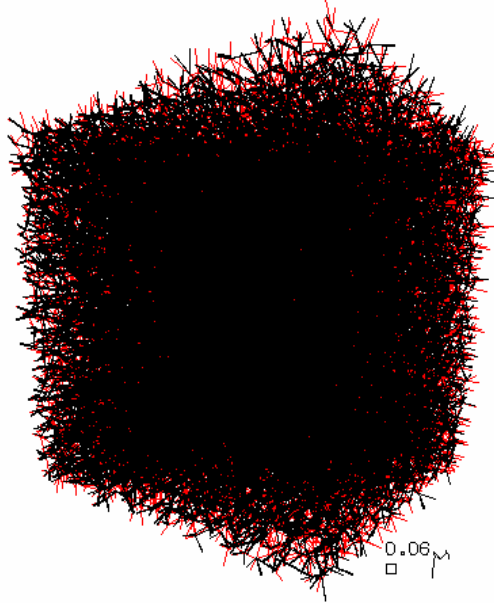
Yapılan bu çalışmada civanın geri çekilmesi ile ilgili bir çalışma yapılmamıştır. KALINET penetrasyon programı çalışma diyagramı aşağıdaki Şekil 3.4' te ki gibi tanımlanabilir.



Şekil 3.4. KALINET penetrasyon programı çalışma diyagramı



(a)



(b)

Şekil 3.5. (a,b), Düzenli ve düzensiz üç boyutlu (3-D) ağa örnek a) Düzenli ağ modeli, $D_{min}=60.2\text{\AA}$ – $D_{max}=328.6\text{\AA}$, (35410-6491psia, $N=30$), b) Düzensiz ağ modeli, $D_{min}=60.2\text{\AA}$ – $D_{max}=328.6\text{\AA}$, (35410-6491psia, $N=30$)

3.6. Üç Boyutlu (3-D) Ağ Modeli için Bilgisayar Programları

3.6.1. Üç boyutlu ağ için penetrasyon programı

Ayrılmış ve ayrılmamış (bölümlü ve bölümsüz) modeller için gerekli olan penetrasyon eğrisini hesaplamak için KALINET bilgisayar programı kullanıldı (EK-2) . Kalinet programı bir veri dosyası ile çalışmak için tasarlanmıştır. Bu veri dosyası şu temel kabulleri içerir;

1. Çalışma türü, ağın tipi
2. Minimum çap, maksimum çap, adım aralığı, simülasyonların sayısı, gözeneklilik, gözeneklilik için tolerans
3. Ağ boyutu
4. Aralıkların sayısı
5. Her bir aralıktaki gözenek sayısı
6. Aralıkların sınırları

Program “gösterim” ve “çakıştırma” olmak üzere iki türden birinde çalışabilir. Gösterim türü, bazı standart gözenek boyut dağılımlarının kullanıldığı türdür (normal, anti-normal, log-normal, üniform veya iki dağılımlı üniform arasından). Bu tür, farklı dağılımların penetrasyon eğrisi üzerindeki etkilerini karşılaştırmak için kullanılır. “Çakıştırma” ise esasen, bir penetrasyon eğrisini tekralamak (replicate) için deneysel boyut dağılımının ortaya çıkarıldığı türdür. Bu süreç; çeşitli sayıda gözenek aralık sınırlarının tahsis edilmesiyle ve sonra, deneysel veri ile teorik olarak elde edilen penetrasyon eğrisi birbirlerine uyana kadar, deneme yanılma prosedürü ile farklı sayıda gözeneklerin belirlenen çap aralıklarına ; minimum – maksimum gözenek çap aralığını uygun bir şekilde aralıklara ayırarak bu aralıklardaki gözenek sayılarının deneysel penetrasyon eğrisi ile teorik penetrasyon eğrisinin üst üste örtüşmesi sağlanana kadar devam eder.

Veri Dosyası Oluşturulması

Gözenek çaplarını oluşturmak için kullanılan gösterim ya da çakıştırma seçenekleri ile çalışan KALINET programı, bu yöntemlerden hangisine ihtiyaç duyuyorsa o yöntemi IMSL (International Mathematics and Statisticak Libraries) ya da CVF (Compact Visual Fortran) derleyicisi tarafından desteklenen kütüphane programını çağırarak gözenek çapları oluşturulur. Bu program tarafından belirlenen gözenek çapları ve uzunlukları ağın teorik penetrasyon eğrisinin oluşturulmasında kullanılır. Minimum çapın penetre olayı gözenek çapları ve hacimlerinin birim gözenek uzunlukları tarafından sağlanır. Böylece KALINET programı ile elde edilen toplam gözenek hacmi veri dosyası DIAVOL'da saklanır. Düzenli kübik opsiyonu seçilmeyipte, düzensiz kübik opsiyonu seçilirse, ağın düğümleri koordinatları başka bir veri dosyası olan CORDNAT'ta saklanır. Oluşturulan bu veri dosyaları; üç boyutlu (3-D) ağı kesmek için SECTION programı tarafından (EK-4) ve uygun basınç artırımları ile civa penetrasyon aşamalarını üç boyutlu ağ içinde çizmek için uyarlanan KALINET3D programı (EK-3) tarafından okunabilir.

KALINET programı; baştan başa bir ağ boyutunun (örn: $N=23$ $NSUB=15$) bir kısmını çizmek için veri dosyaları oluşturmak amacıyla kullanılmıştır [Sbaiti, 1983, Khalaf, 1998 ve Roudaki 1989]. KALINET programı olası en büyük ağ boyutunun ($N=NSUB=30$) tamamını temsil etmek için modifiye edilmiştir. Sonuçta KALINET programı kişisel bilgisayar üzerinde çalışır hale getirilmiştir[Mürtezaoğlu,1994].

3.6.2. Üç Boyutlu (3-D) ağı kesitini almak için bilgisayar programı

SECTION programı, verileri DIAVOL dosyasından okur (ve ayrıca bir düzensiz kübik ağ modeli için CORDNAT veri dosyasından okur.) ve sonra tüm bir ağı, görsel olarak iki türlü irdeleyebilir;

- a) Düzenli kübik ağı kesmek
- b) Düzensiz kübik ağı kesmek

Birinci kategoride, ağı kübiktir ve üç yolla kesilir

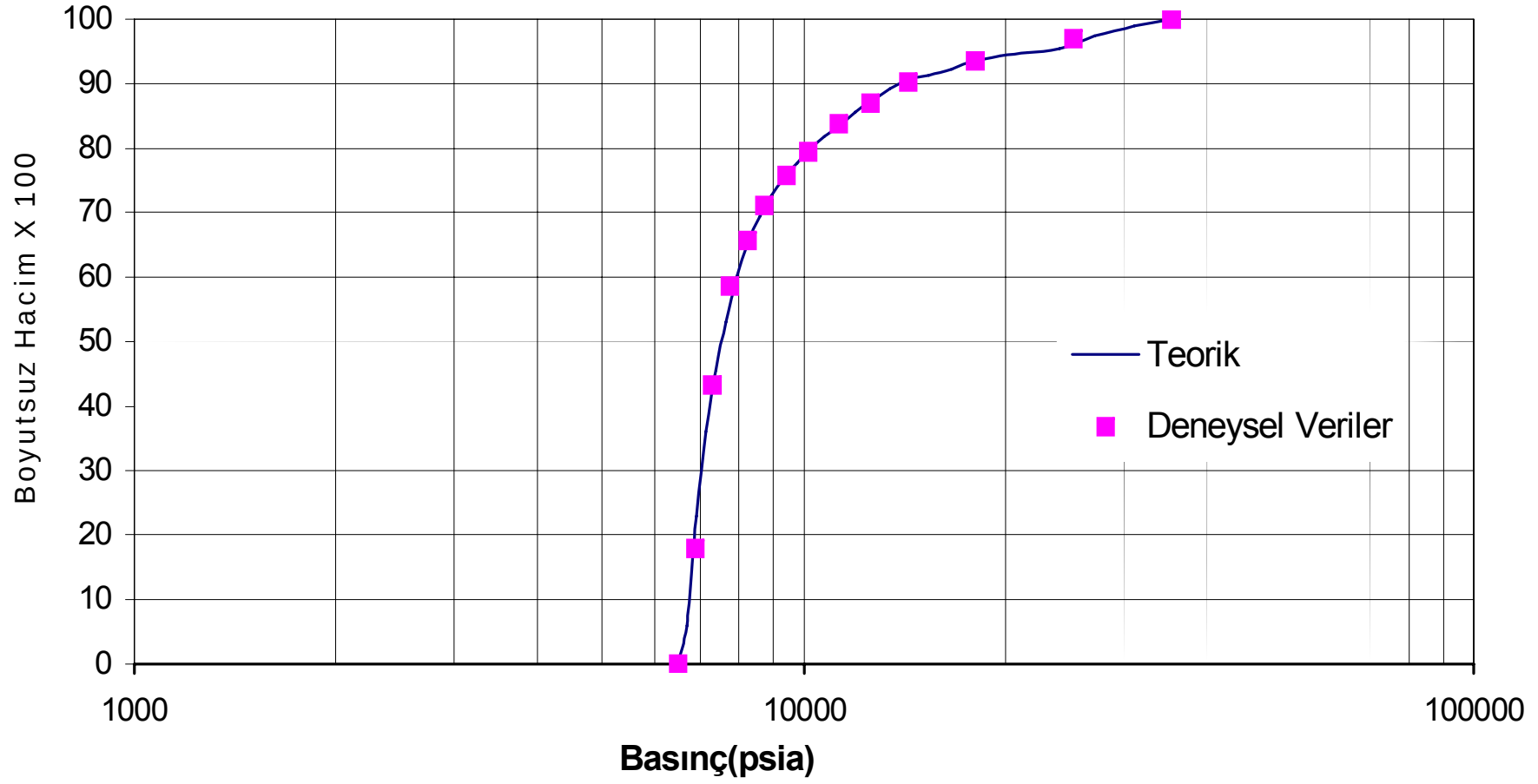
- a) Sadece dikey gözenekleri kesen yatay düzlem (düğümmler arasında)
- b) Dikey ve yatay gözenekleri kesen, düğümlerin düzlemindeki yatay düzlem
- c) Yataya 45° eğimli düzlem ve ortaya çıkan kısımlar diğer seceneklere göre biraz daha rastgele yerlerinden çıkarılmış ve buna ek olarak da kesişme ve rotasyon açılarına rastgele atanabilirler. Düğümler, orijinal yerlerinde (pozisyonlarından) 0 ile 0.5 arasındaki rastgele FM (hareket kesri) faktörü tarafından yerlerinden çıkarılabilirler.

İkinci kategoride ise, ağı düzensiz ve kübiktir. Ayrıca buna ek olarak keyfi bir $AX+BY+CZ=D$ düzlemi tarafından kesilir. Buna ek olarak; KALINET programı tarafından oluşturulan DIAVOL veri dosyası KALINET3D programı için kullanılarak, civa penetrasyon aşamaları üç boyutlu (3-D) bir ağı içinde çizilmesi içinde kullanılabilir. Ağıın iskeleti; ızgara çubuklarının gözeneklerini temsil ettiği ve bu çubukların kesişim noktalarının düğümlerini temsil ettiği, üç boyutlu ızgaraya eşittir. Şebekenin çubuklarının gözenekleri temsil ettiği ve çubukların kesişim noktalarının düğümleri temsil ettiği, bir 3-boyutlu şebekeye eşittir. Bir koşum boyunca ağı boyutu, FM (hareket kesri), rotasyon açısı ve çizilecek minimum gözenek çapı interaktif veri olarak verilir.

SECTION ve KALINET3D programları, bir “çizim kütüphanesi” olarak bilinen GINO-F’i (Graphical INput/Output) kullanır.

3.7. Amberlit-35 Katalizörü Simülasyonu

Bu bölümde daha önce tanımlanan bilgisayar simülasyon tekniği direkt olarak kaliteli benzin üretiminde katkı maddesi olarak kullanılan Amberlit – 35 katalizörü numunelerine uygulanmıştır. Civa porozimetre deney sonuçları ile elde edilmiş olan penetrasyon eğrisi, bölümsüz üç boyutlu (3-D) ağı kullanılması ve deneme yanılma yoluyla uygun hale getirilmiştir. Çakıştırma yöntemiyle elde edilen penetrasyon eğrisi (teorik penetrasyon eğrisi) Şekil 3.5 için KALINET bilgisayar programı veri dosyası EK-2’te ve çıktısı EK- 3 ‘te verilmiştir . 83700 gözenek içeren 30x30x30 ağ boyutu kullanılmıştır. Kullanılan bu boyutun ağ kesitleri çizildiğinde, (N= NSUB ebatı; 30x30x30) SECTION programına veri oluşturmak için KALINET programında kullanılması uygundur. Simülasyon tarafından kullanılan bölümsüz modelin uygun ortalaması ve deneysel eğriler Şekil 3.6’da gösterilmiştir. Penetrasyon eğrisine uyarlanan üç boyutlu (3-D) ağ modelini ; gözeneklerin gözenek Çizelge 3.6. hacim dağılım fonksiyonu $F_v(D)$, Şekil 3.7’de gösterilmiştir. Her bir histogramdaki her eleman, gözenek hacminin %10’unu temsil etmektedir.

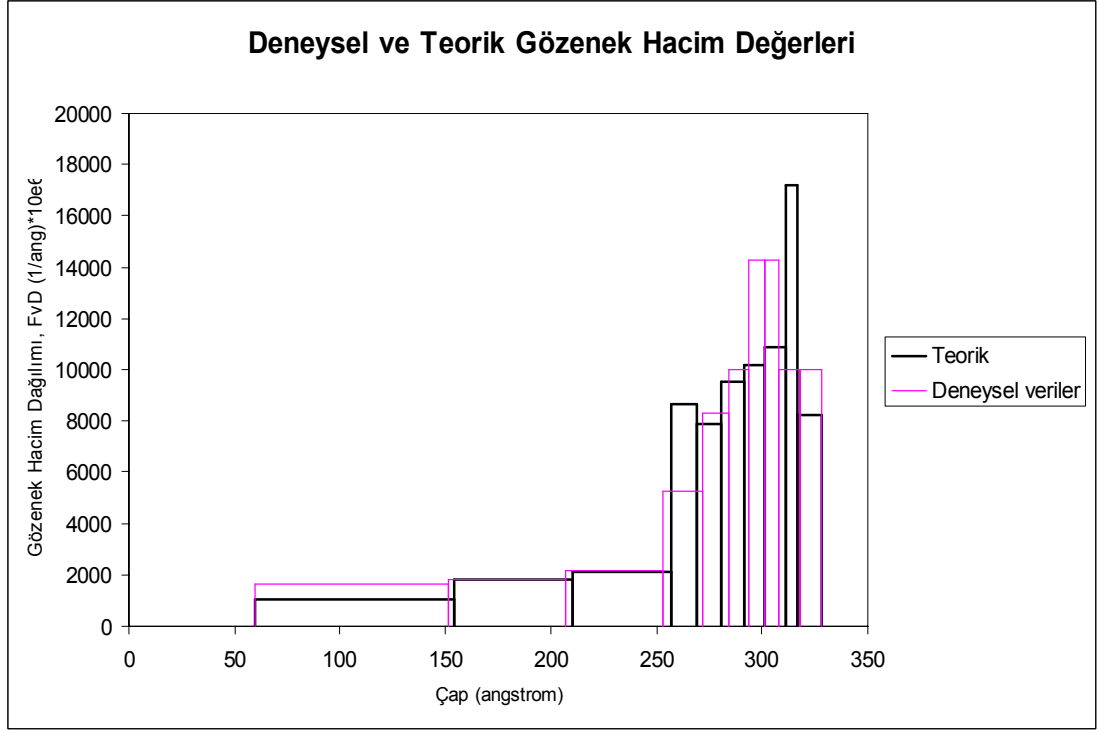


Şekil 3.6. Deneysel ve bilgisayar ile hazırlanan penetrasyon eğrileri

Washburn denklemini Eş 3.1 ve Şekil 3.6 teorik penetrasyon eğrisi kullanarak, gözenek hacim dağılım fonksiyonu, $F_V(D)$, uygun boyut aralıklarını tespit ederek, birçok eşit hacim aralıkları üzerinde gösterilebilir. Bu yapılan çalışmada, $\Delta V=0.1$ değeri kullanılmış ve elde edilen dağılım, her bir histogram bloğunun gözenek hacminin % 10'unu temsil ettiği bir histogram formunda işaretlenmiştir. Veriler Çizelge 3.6. 'de verilmiş ve Şekil 3.7'de çizilmiştir. Histogram, gözenek hacminin % 52'i 300Å'un altında olduğunu göstermektedir. Washburn Eş 3.1' de civa kontak açısı (θ) değeri 160 ° olarak alındı (literatürde civa kontak açısı; 120° - 160° değerleri arasında değişmektedir).

Çizelge 3.6. Amberlit-35 katalizörü (üç boyutlu ağ için) için teorik gözenek hacim dağılım verisi

$V=V+dV$	$D=D-dD$	$(dV/dD) \times 10^6 \text{ Å}^{-1}$
0,0-0,1	328,6 - 318,6	8264
0,1-0,2	318,6 - 308,6	17212
0,2-0,3	308,6 - 301,59	10893
0,3-0,4	301,59 - 294,6	10194
0,4-0,5	294,6 - 284,6	9524
0,5-0,6	284,6 - 272,58	7893
0,6-0,7	272,58 - 253,58	8636
0,7-0,8	253,58 - 207,57	2126
0,8-0,9	207,54 - 151,56	1793
0,9-1,0	151,56 - 60,2	1064



Şekil 3.7. Amberlit-35 katalizörünün deneysel ve teorik gözenek hacim dağılımları

3.8. Amberlit-35 Katalizörünün Bilgisayar ile Oluşturulan Kesitleri

Bölümsüz düzgün ve düzgün olmayan kübik ağları kullanılarak, Amberlit-35 katalizörünün penetrasyon eğrisi, çakıştırma yöntemiyle uygun hale getirilmesiyle elde edilen gözenek sayı dağılım verisi Şekil 3.7 KALINET programının çalıştırılmasında kullanılabilir.

Bu araştırmada kullanılan ağların baştan başa bir N=30 alt-ağ boyutu için veriler, SECTION ve KALINET3D programları tarafından kullanılmak üzere saklanır.

3.9. Üç Boyutlu (3-D) Ağları için Amberlit-35 Partiküllerinin Bilgisayar ile Oluşturulan Kesiti

Eğer SECTION programı düzenli bir kübik ağ oluşturacak ise veriyi, veri

dosyası DIAVOL'dan okur. Fakat düzensiz kübik bir ağ oluşturacaksa o zaman veriyi CORDNAT'tan okuyarak ağın bir kısmının bir kesitini çeşitli yollarla üretir;

- a) Düzenli kübik ağı kesmek
- b) Düzensiz kübik ağı kesmek

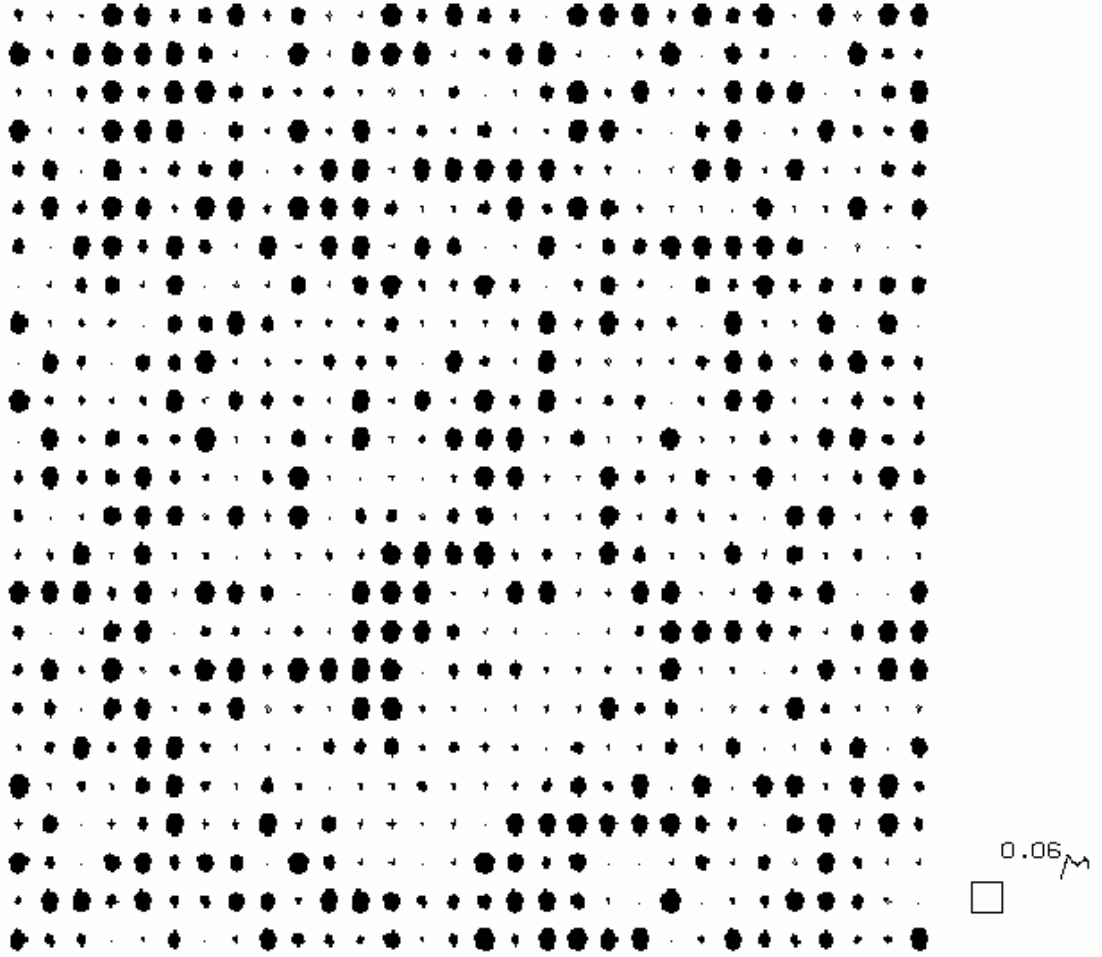
3.9.1. Düzenli kübik ağ kesiti

- a) Sadece dikey gözenekleri kesen yatay düzlem
- b) Dikey ve yatay gözenekleri kesen yatay düzlem
- c) Yataya 45° eğimli düzlem

Sadece dikey gözenekleri kesen kesit (ISECT=1)

Üç boyutlu (3-D) ağı, dikey gözenekleri sadece bir “tek sayılı” düzlemde kesen yatay düzlem ile kesitlenir. Her gözenek kendisinin başlıca eksenine 90°’de kesilir ve eğer gözenekler silindirik varsayılırsa elde edilen kesit bir daire olacaktır.

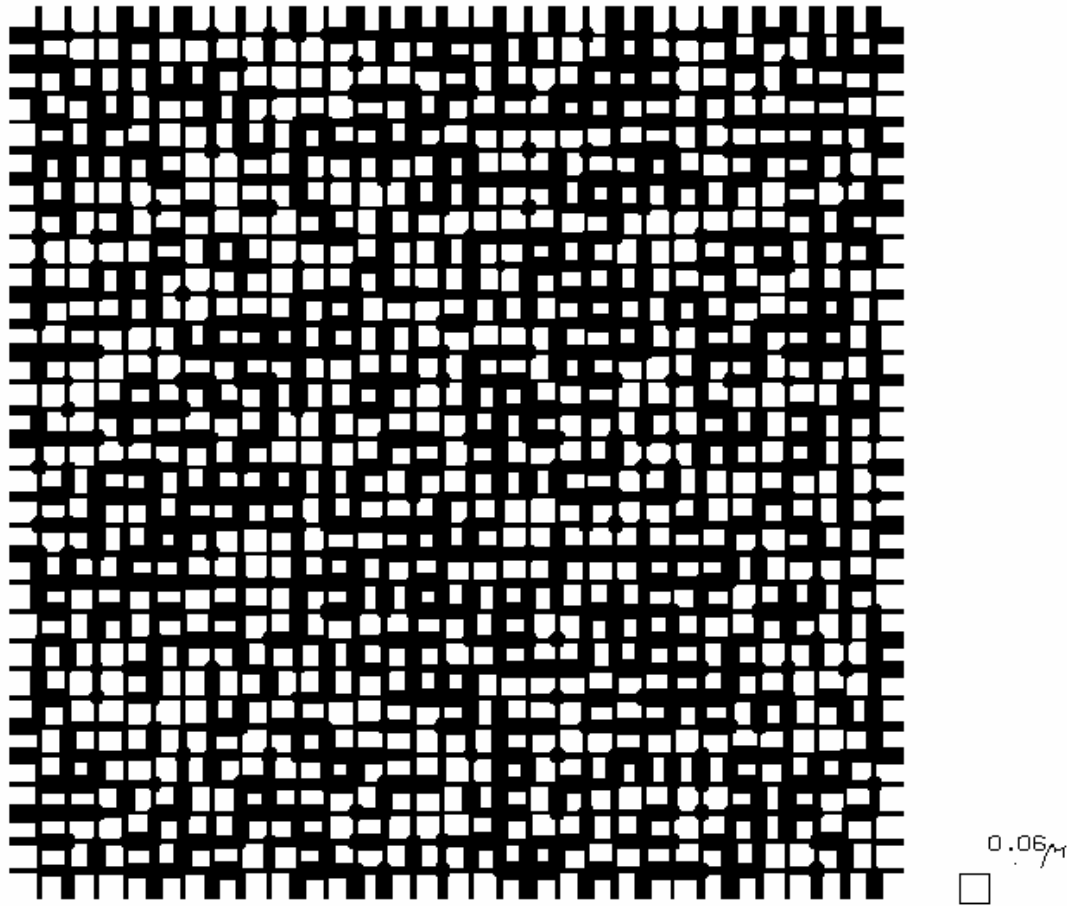
Bilgisayar tarafından oluşturulan kesite bir örnek; Amberlit-35 katalizörünü temsil eden bir tam $N=30$ ebatını bir ayrılmamış ağlarının alt-ağı ($NSUB=30$ ebatı) için Şekil 3.8’de gösterilmiştir. SECTION programı için veri dosyası EK-4(a)’ da verilmiştir.



Şekil 3.8. Sadece dikey gözeneklerin kesiti (ISECT =1)
 (N=30X30X30, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

Dikey ve yatay gözenekleri kesen yatay düzlem (ISECT=2)

Üç boyutlu (3-D) ağın, hem yatay hem de dikey gözeneklerini “çift sayılı” düzlemde kesen bir yatay düzlem ile kesitlenir. Bilgisayar tarafından oluşturulan kesite bir örnek; Amberlit-35 katalizörünü temsil eden partiküllerin kesit ağ (N=30) görüntüleri. Şekil 3.9’da gösterilmiştir. SECTION programı için veri dosyası EK-4(b)’de verilmiştir.



Şekil 3.9. Hem dikey hem de yatay gözenekleri kesen yatay düzlem
(N=30X30X30, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

3.9.2. Düzensiz kübik ağın kesitlenmesi

Düzensiz kübik ağın kesitlenmesinde, SECTION programı , düzensiz üç boyutlu (3-D) ağını farklı yollarda çizmek için, veriyi DIAVOL ve CORDNAT veri dosyasından okur.

Üç boyutlu (3-D) düzensiz kübik ağı, $AX+BY+CZ=D$ formundaki bir denklemle verilen bir keyfi düzlem ile alternatifli olarak kesitlenir. Bir üç boyutlu (3-D) koordinat sisteminde, yukarıdaki denklemle verilen düzlem, iki nokta arasındaki bir silindirik gözenegın merkez eksenıyla kesişecektir. Üç boyutlu (3-D) boşluğunda, belirleyici özellik, koordinatlarıyla ve üç açısıyla tanımlanır: Kesişme, dikey eksen etrafındaki rotasyon ve kendi eksen etrafındaki rotasyondur. Bir düzlem tarafından kesitlenmiş herhangi bir kısım için, kesişme noktasının koordinatları, kesişme açısı ve dikey eksen etrafındaki rotasyon açısı hesaplanabilir. Ortaya çıkan elipsin eksen uzunluklarının boyutları, kesişme açısından yararlanılarak tam olarak hesaplanabilir, böylece ortaya çıkan elips çizilebilir.

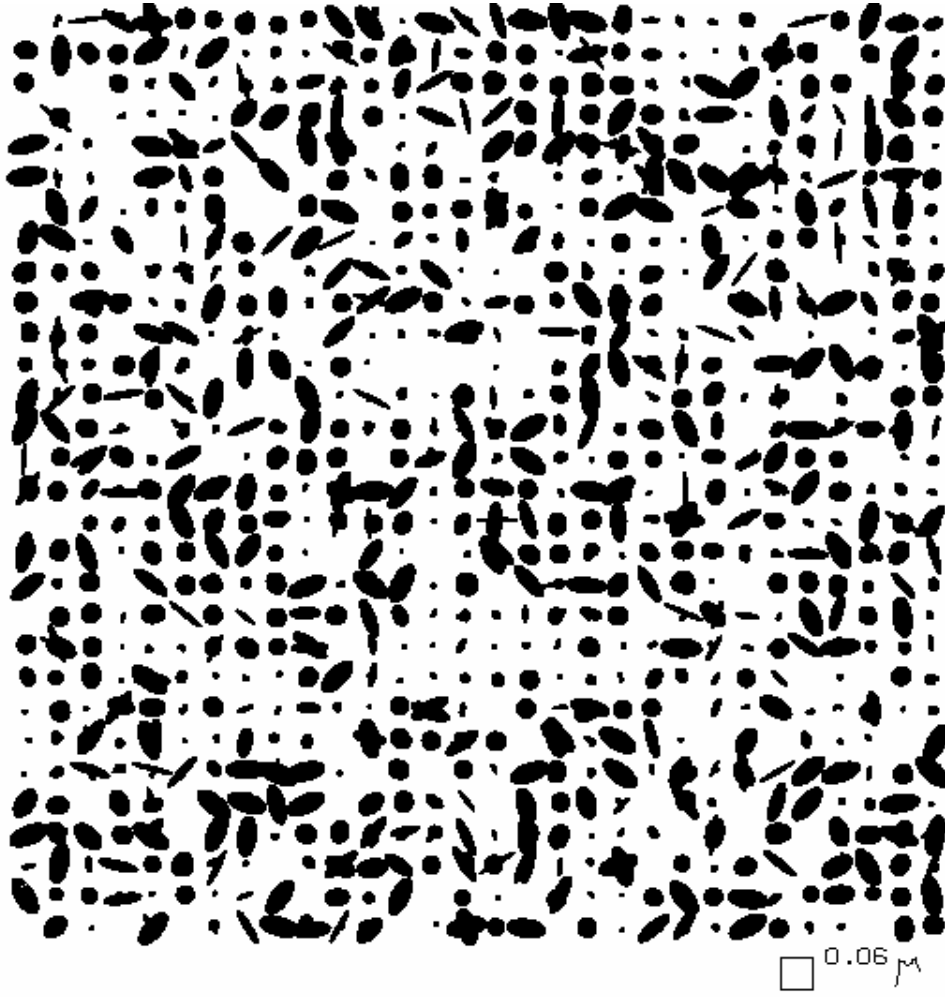
Üç boyutlu (3-D) düzensiz ağın kesitleri yeniden aşağıdaki gibi modifiye edilebilir:

1. Pürüzsüz Elips (IELIPSE=1)
2. Düz ve Pürüzlü Elips (IELIPSE=2)
3. Bükümlü ve Pürüzlü Elips (IELIPSE=3)

Yataya 45° eğimli düzlem

Üç boyutlu (3-D) ağı içerisinde oluşabilecek en fazla gözenek sayısını elde etmek için, üç boyutlu ağı yatay düzleme 45° eğimli olarak kesitlenecektir. Eğer silindirik gözenekler kesitlendiğinde, ortaya çıkan kesit bir elips olacaktır. Şekil 3.10'da simüle edilen Amberlit-35 katalizör numunesi için bu tipin ortaya çıkan ağı kesitlerini (N=30) göstermekte ve bu kesitleme için veri

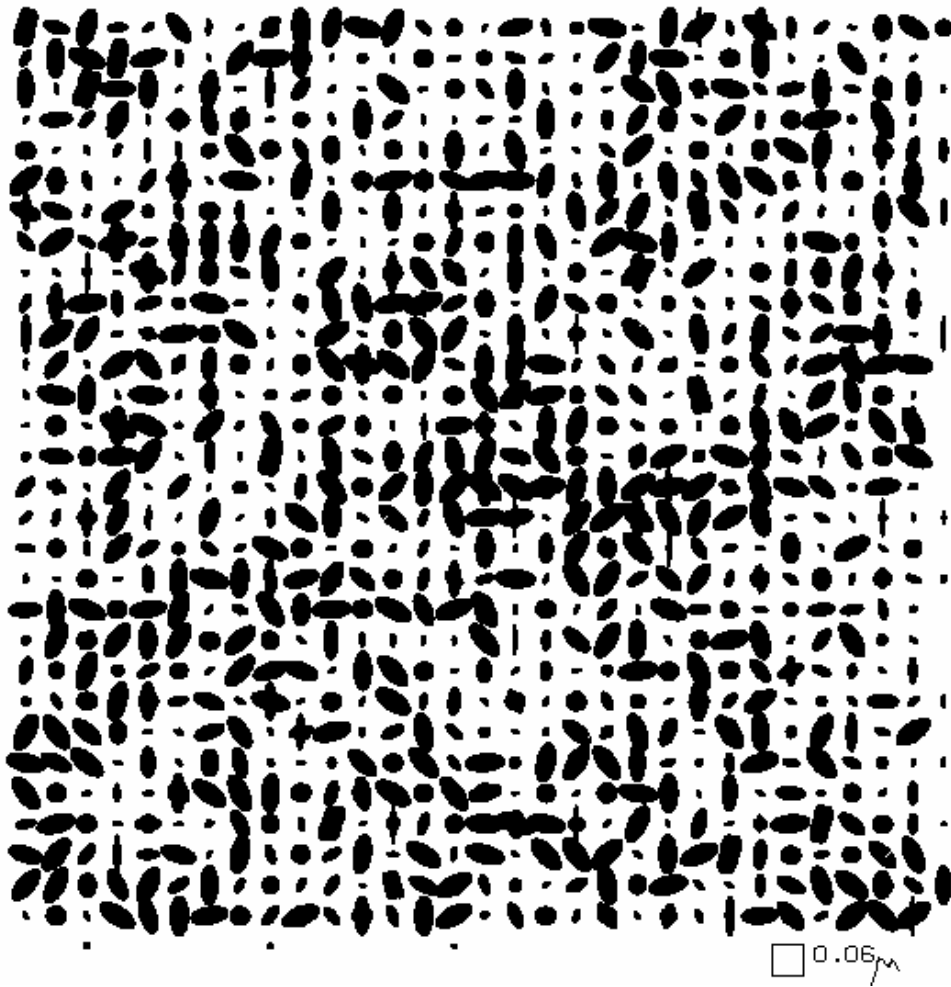
dosyası EK-4(c)'de ve bilgisayar çıktısı (SECTION programındaki) EK-5'de verilmiştir.



Şekil 3.10. Yataya 45 eğimli düzlem ISECT=3
(N=30X30X30, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

Pürüzsüz elips (IELIPSE=1)

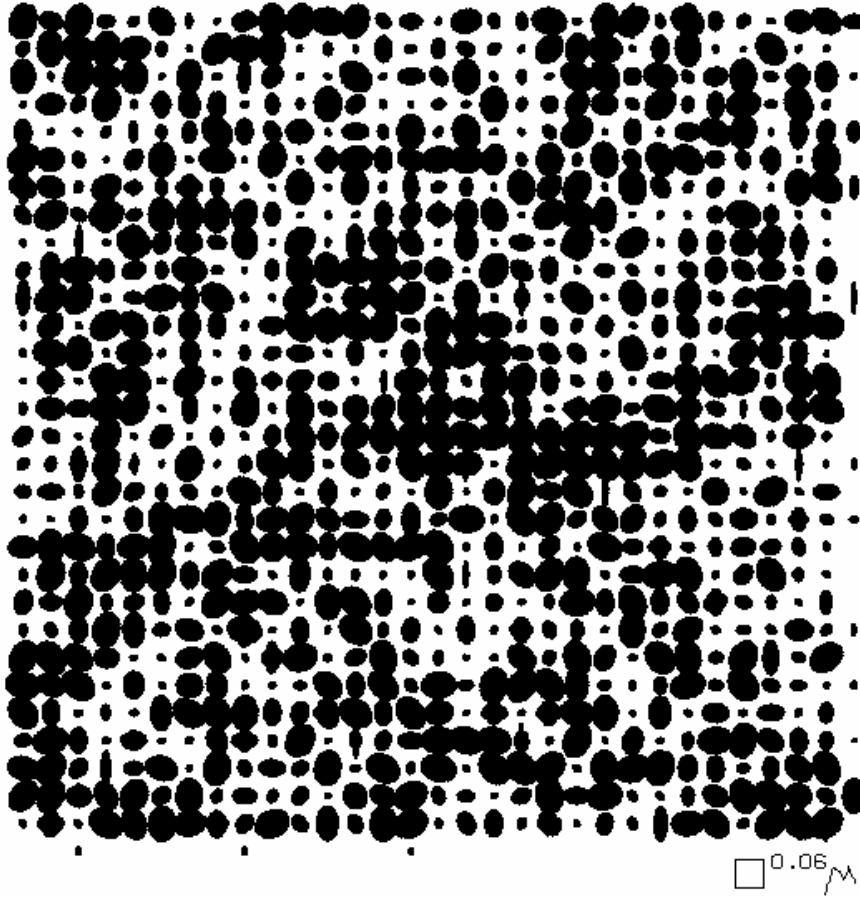
Kesitli düzlem, bir $AX+BY+CZ=D$ formundaki bir denklem kullanılarak seçilir. Eğer IELIPSE=1 kullanılırsa ($N=30$), ortaya çıkan elipsler takımı Şekil 3.11 'de , gösterildiği gibi pürüzsüz olur. Gerçek kesitlenmiş belirleyici nitelik sayısının veri dosyası EK-4(d) (SECTION programında) EK-5'de verilmiştir.



Şekil 3.11. Pürüzsüz elips (IELIPSE=1, $N=30 \times 30 \times 30$)
(6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

Düz ve pürüzlü elips (IELIPSE=2)

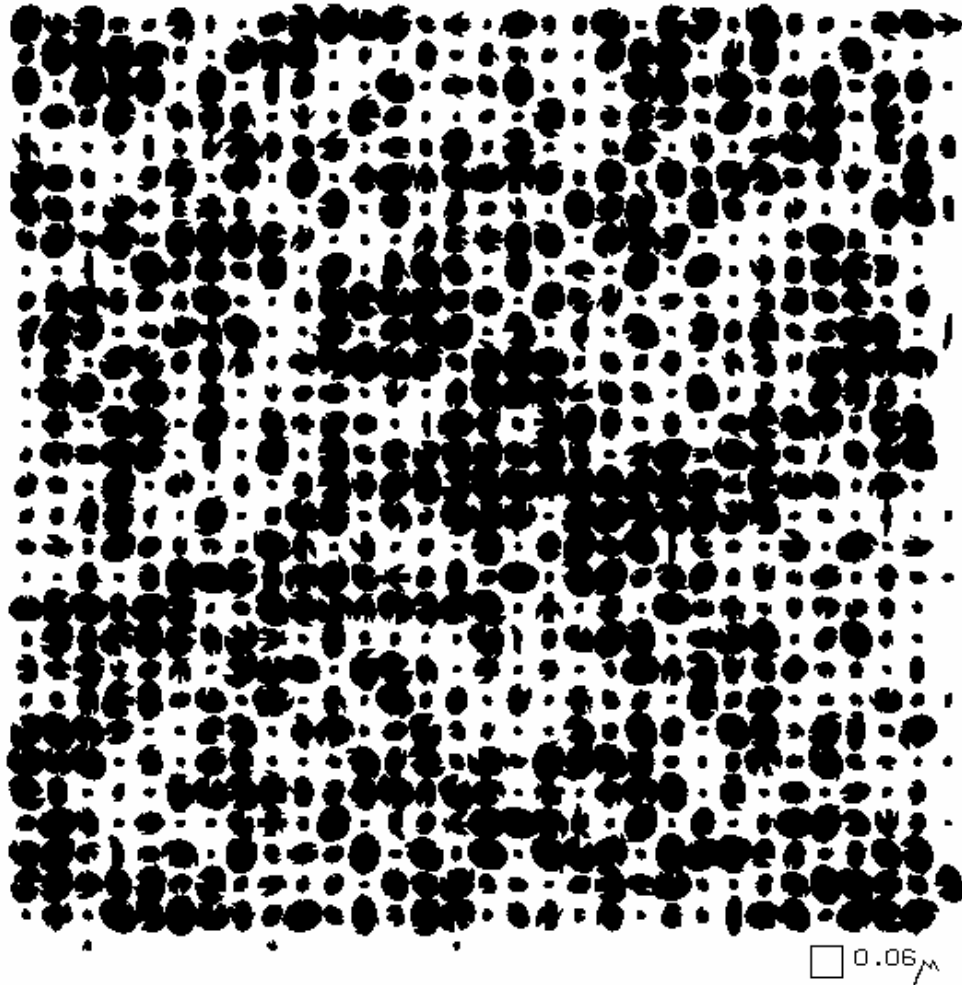
Elips, çevresine pürüzlü bir köşesi olacak şekilde çizilebilir. Bu, elipsin karşı tarafındaki kesitine normal olan iki nokta arasındaki dikey uzunluğun -RFNS ve +RFNS % arasındaki bir pürüzlülük faktörü (0.0 ile 1.0 arasında değişir) eklenerek yapılır. Bu rastgele faktör, iki limit ($\pm$ RFNS) arasındaki sayıları oluşturarak, CVF'nin (Compact Visual Fortran) çağırılmasıyla meydana getirilir. Şekil 3.12 $X-2Y+Z=0.0$ düzlemiyle bir üç boyutlu (3-D) kesitini gösterir. Bilgisayar çıktı ve gerçek kesitlenmiş gözenek boyut dağılımı verileri EK-4(e)'te verilmiştir.



Şekil 3.12. Düz ve pürüzlü elips (IELIPSE=2, N=30X30X30)
(6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

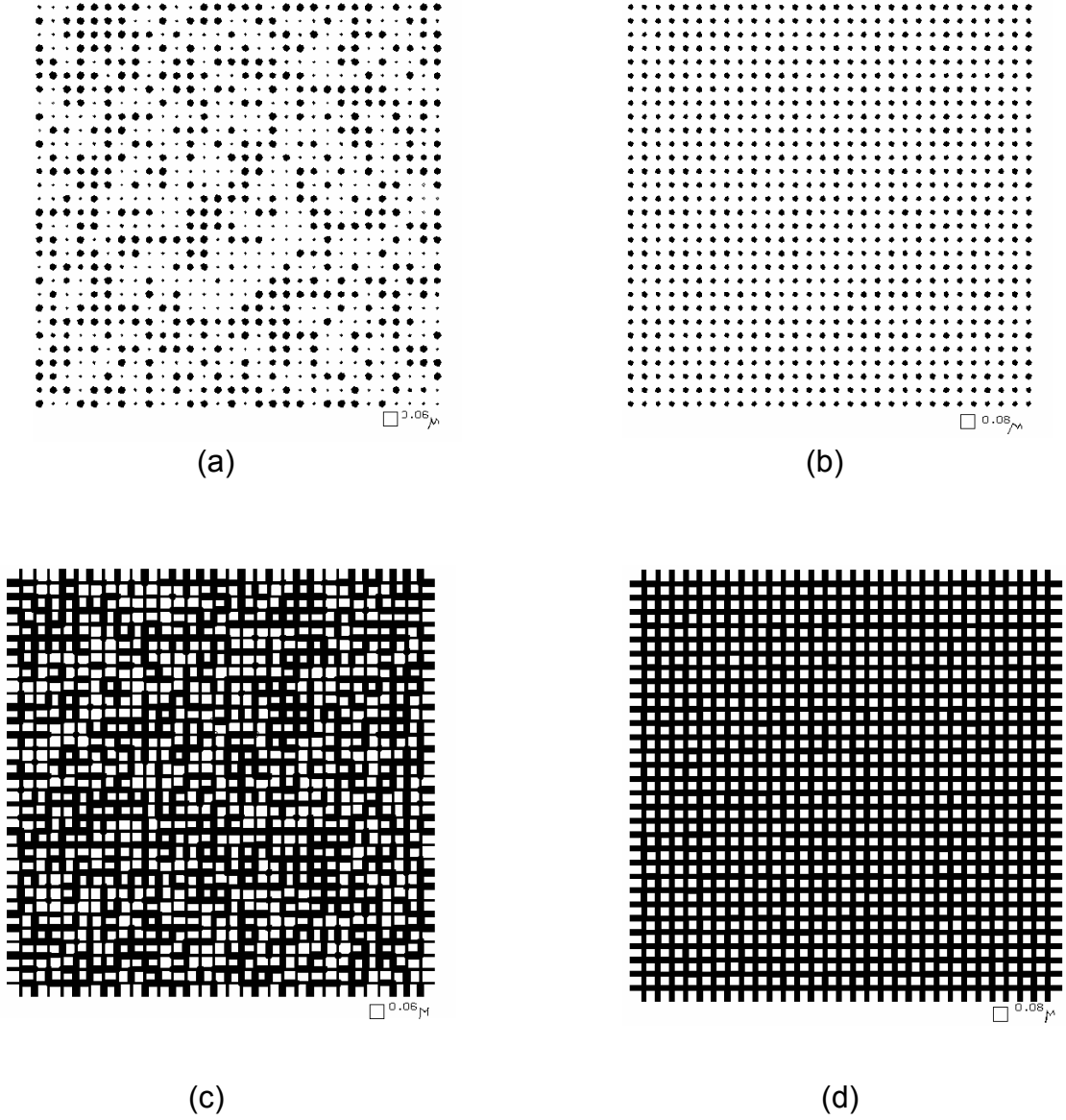
Dolambaçlı ve pürüzlü elips (IELIPSE=3)

Bu elips, bir pürüzlü çevre gibi bir dolambaçlı/dönen eksen ile de çizilebilir. Bu, yatayın rastgele 3 parçaya bölünmesiyle ve bir sınırlı rastgele açı tarafından iki uç bölümün döndürülmesiyle yapılır. Şekil 3.13 pürüzlü ve dolambaçlı/dönen elipsin bir üç boyutlu (3-D) kesitinin bir örneğini göstermektedir. Veri dosyası EK- 4 (f) 'de verilmiştir.

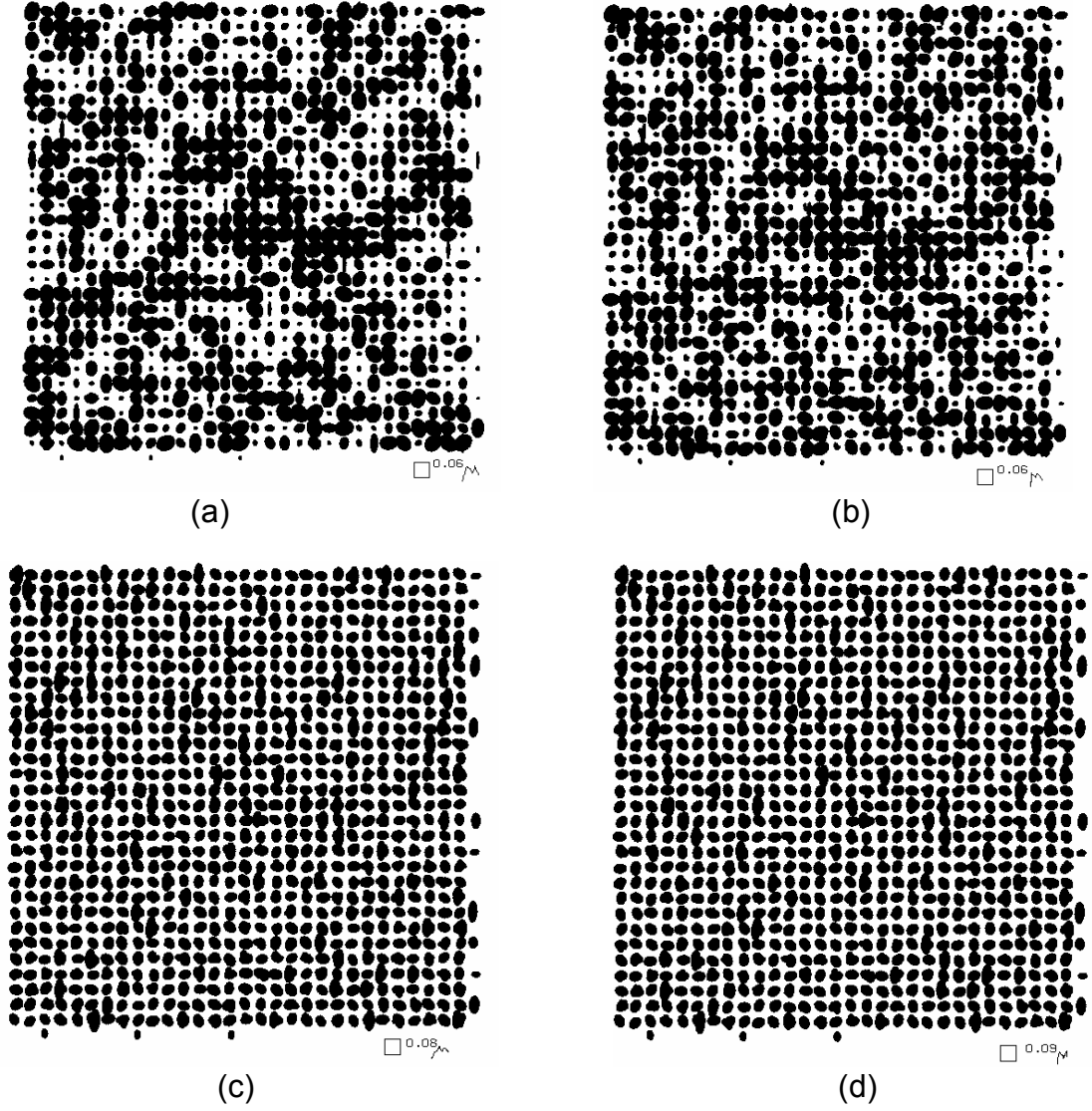


Şekil 3.13. Dolambaçlı ve pürüzlü elips (IELIPSE=3, N=30X30X30)
(6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

Section programından elde edilen değişik gözenek çap(N=30) uygulamalar ile üç boyutlu (3-D) çizimleri Şekil 3.14 karşılaştırılmıştır.



Şekil 3.14. Üç boyutlu (3-D) değişik gözenek çap ve basınç Uygulamaları, (a) ISECT 1; Dmin-max= 100-328.6 Å (21330 -6491 psia) (b) ISECT 1; Dmin-max= 280-328.6 Å (7618 – 6491 psia), (c) ISECT 2; Dmin-max= 100-328.6 Å (21330 - 6491 -psia), (d) ISECT 2; Dmin-max= 280-328.6 Å (7 618 – 6491 psia)



Şekil 3.15. Üç boyutlu (3-D) değişik gözenek çap ve basınç Uygulamaları,(a) ISECT5(IEIPSE2)Dmin-max=60.2-328.6Å (35410 - 6491 psia),(b) ISECT5(IEIPSE2)Dmin-max=100-328.6 Å (21330 - 6491 psia),(c) ISECT5(IEIPSE2)Dmin-max= 280 Å280-328.6 Å (7618 - 6491 psia),(d) ISECT5(IEIPSE2)Dmin-max=325-328.6 Å (6563 - 6491 psia)

3.10. Üç Boyutlu (3-D) Bir Ağ Çizimi

Bu bölümde daha önce açıklandığı üzere; ağın penetrasyonu KALINET programının çalıştırılmasıyla hesaplanır. Daha sonra elde edilen uygun veriler (gözenek hacmi, birim gözenek uzunluğu, gözeneğin çapı, toplam gözenek hacmi ve penetre edilmesine izin verilen minimum çap) DIAVOL veri dosyasında saklanır.

Teorik penetrasyon aşamalarının bir üç boyutlu (3-D) ağ içinde oluşturulması, aşağıdaki şu varsayımlar ile bulunur:

- Ağdaki gözenekler silindiriktir.
- Ağın tüm çevresinin civardaki civa ile direkt teması vardır.
- Ağın koordinasyon sayısı 10'dur ve tüm ağ başlangıçtan itibaren vakum altındadır.

KALINET3D programı kullanılarak, üç boyutlu bir koordinat sistemindeki bilgisayar ile elde edilen üç boyutlu (3-D) ağın, penetrasyon adımlarını çizmek için çalıştırılabilir. KALINET3D programının, üç boyutlu (3-D) ağları çizebilmesi için oluşturulan DIAVOL veri dosyasına ihtiyacı vardır. Yani KALINET programının çalıştırılmasıyla üretilen DIAVOL veri dosyasında saklanan veriler, KALINET3D programı verileri saklandıkları gibi aynı sıradan okur.

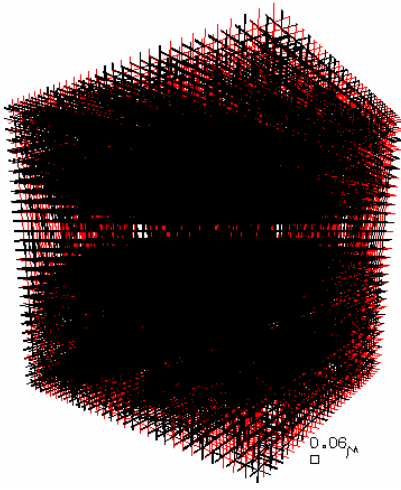
Bu yapılan çalışmalarda, KALINET3D programı, kısmi penetrasyon davranışının aşamalarını belirlemek için üç boyutlu (3-D) ağ yapısına modifiye edilir. KALINET3D programı, uygulanan basınca uygun olarak civa tarafından doldurulan ve gerçekten penetre edilen gözenekleri çizmek için geliştirilmiştir. Penetrasyon serisi, ağda izin verilen en büyük gözenek çapına (D_{MAX}) eşit olan bir basınçla başlar. Basınç daha sonra, bir silindirik gözenek çapına (D) eşit olan P basıncına yükseltilir. Daha sonra da, ağın etrafı kontrol

edilir. Ancak D'den daha büyük gözenekler varsa penetre edildiği ve şeklini değiştirdiği varsayılır.

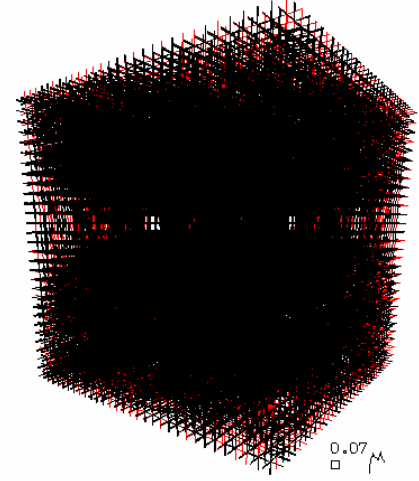
Bu durumda ağın içi kontrol edilir: ve gösterge ağın düğümleri boyunca hareket ettirilerek, her bir düğüm için, o düğüme bağlı olan altı gözenek kontrol edilir. Ancak bu altı gözenekten herhangi birisinin penetre edildiği an kalan beş gözenek kontrol edilir, eğer bu gözeneklerden herhangi biri penetre edilmemiş ve D'den daha büyük çapa sahipse, o gözenek penetre edilerek, penetre edilmiş bir gözenek olarak kabul edilir. Bu işlemler, en küçük gözenek (D_{MIN}) de penetre edilene kadar basıncın arttırılması ile tekrarlanır. Sonuçta, tüm ağ penetre edilmiş ve üç boyutlu (3-D) ağ çizilmiş olur.

GINO-F (Graphical INput\Output-FORTRAN) programı, standart kütüphane alt-programları gibi üç boyutlu (3-D) bir ağı çizmek için direkt olarak kullanılabilir.

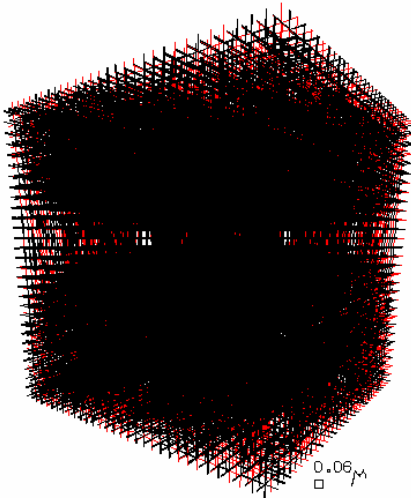
KALINET3D programı ile elde edilen Amberlit –35 katalizörünün düzenli üç boyutlu ağ çizimi Şekil 3.16'da verilmiştir.



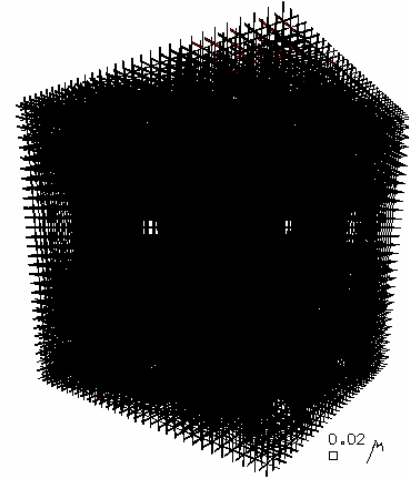
(a)



(b)



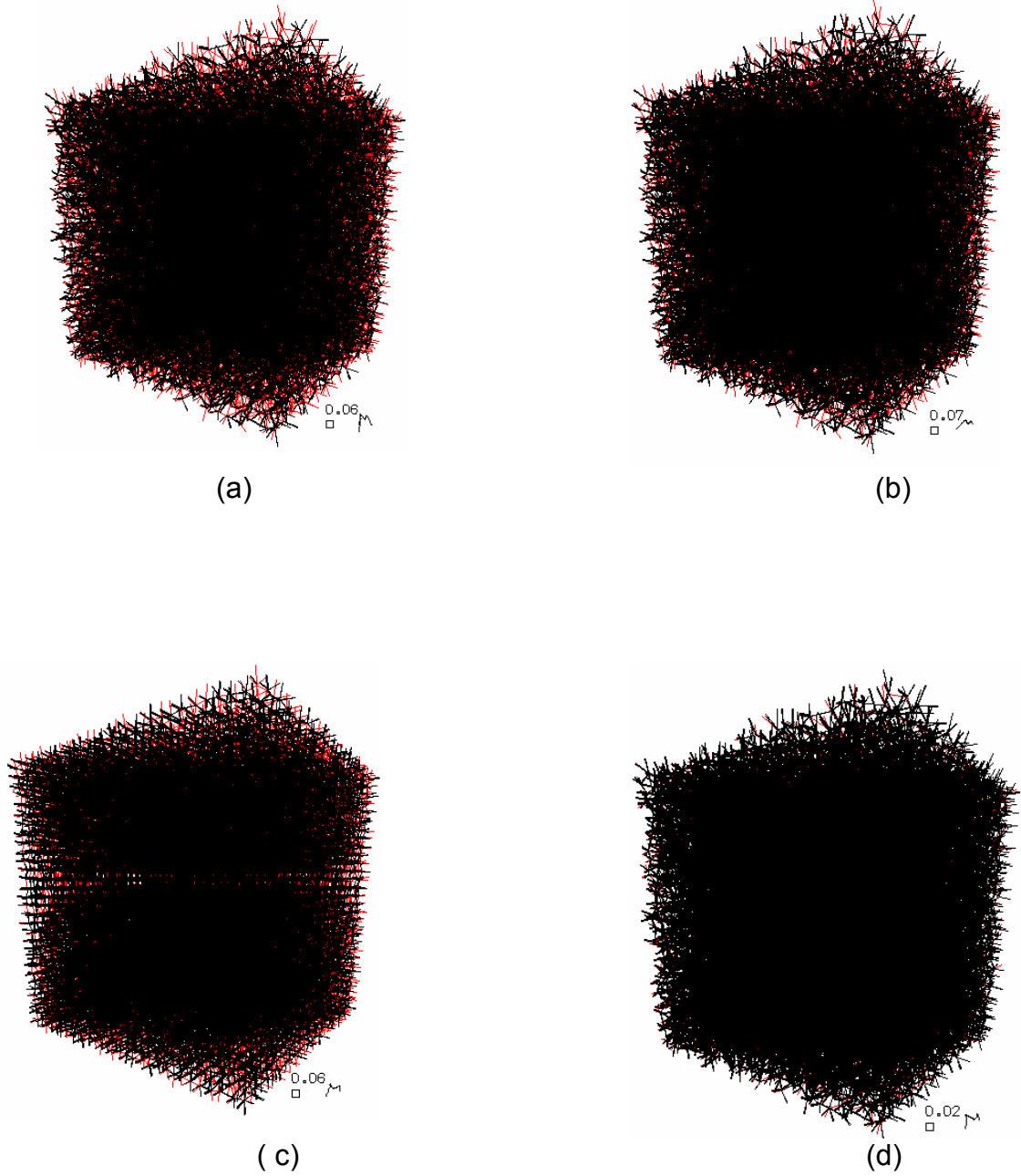
(c)



(d)

Şekil 3.16. Düzenli üç boyutlu (3-D) ağda farklı basınç ve çap Uygulamaları, (a) ($N=30 \times 30 \times 30$) $D_{min}=60.2-328.6 \text{ \AA}$, 6491 psia 35410 - 6491 psia, (b) ($N=30 \times 30 \times 30$) $D_{min-max}=200-328.6 \text{ \AA}$, 35410 - 32495.2 psia, (c) ($N=30 \times 30 \times 30$) $D_{min-max} = 100-328.6 \text{ \AA}$, 21316.8- 6491 psia, (d) ($N=30 \times 30 \times 30$) $D_{min-max} = 60.2-65.6 \text{ \AA}$, 35410 - 32495.2 psia

Düzensiz üç boyutlu (3-D) ağda farklı basınç ve çap uygulamaları
Şekil 3.17 verilmiştir.

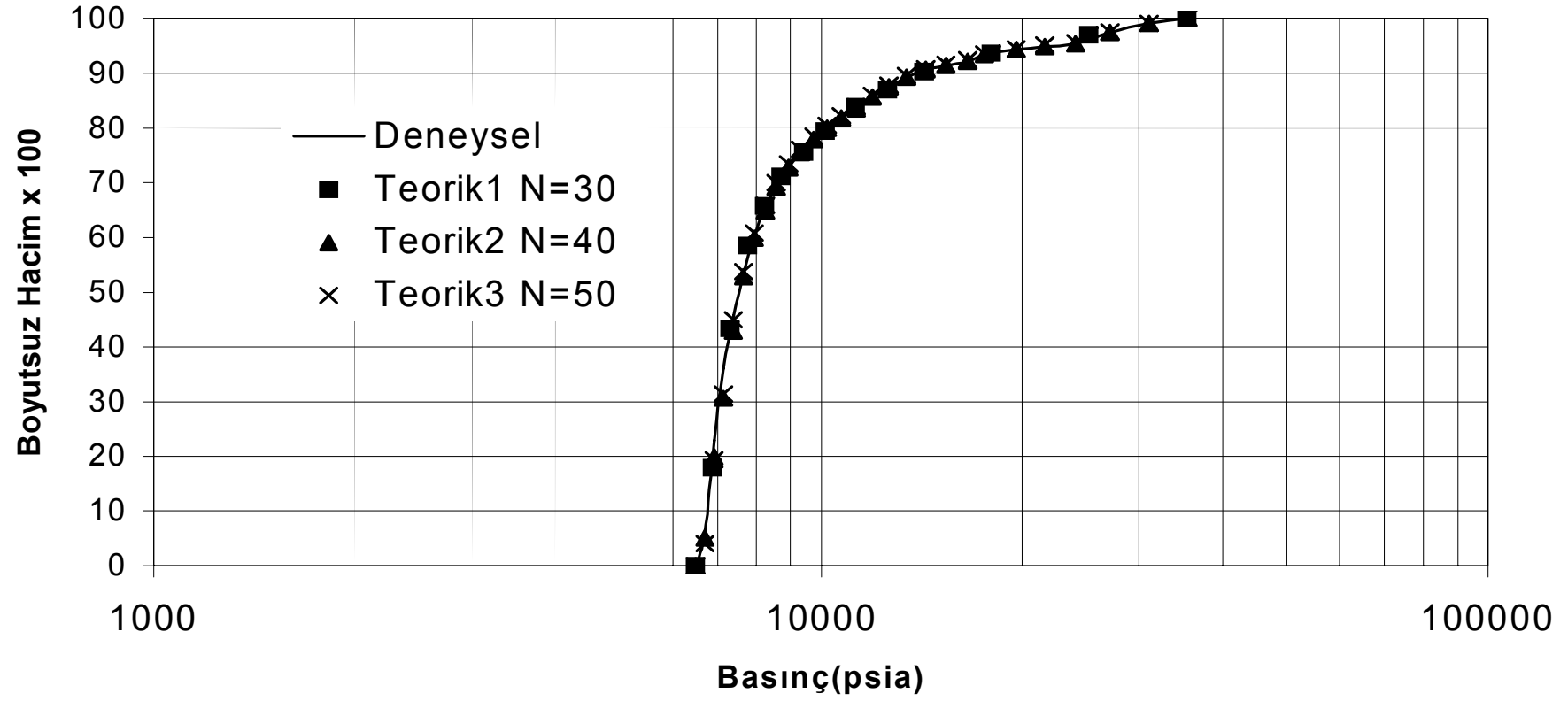


Şekil 3.17. Düzenli üç boyutlu (3-D) ağda farklı basınç ve çap Uygulamaları, (a) ($N=30 \times 30 \times 30$) $D_{min}=60.2-328.6 \text{ \AA}$, 6491 psia 35410 - 6491 psia, (b) ($N=30 \times 30 \times 30$) $D_{min-max}=200-328.6 \text{ \AA}$, 35410 - 32495.2 psia, (c) ($N=30 \times 30 \times 30$) $D_{min-max} = 100-328.6 \text{ \AA}$, 21316.8- 6491 psia, (d) ($N=30 \times 30 \times 30$) $D_{min-max} = 60.2-65.6 \text{ \AA}$, 35410 - 32495.2 psia

4. AĞ BOYUTUNUN ETKİSİ

Stokastik olarak 3 boyutlu ağ modelleri üzerinde yapılan çalışmalar şu ana kadar $N=30(30 \times 30 \times 30)$ ağ boyutları üzerinde gerçekleştirilmemiştir (bilgisayar sınırlamaları vb. sebeplerden dolayı).

Ancak yapılan bu çalışmada ise; gözenek sayısı ve gözenek dağılımlarının ağ boyutları üzerindeki etkisini(ağ boyutunun model üzerindeki etkisi) incelemek ve karşılaştırılması için $N=30, 40$ ve 50 ($30 \times 30 \times 30$ - $40 \times 40 \times 40$ - $50 \times 50 \times 50$) ağ boyutları üzerinde gerçekleştirilmiştir. Deneysel veri değiştirilmediği için, Amberlit-35 için elde edilen civa deneysel penetrasyon eğrisi $N=40$ ve $N=50$ içinde baz alınarak $N=40$ ve $N=50$ için teorik penetrasyon eğrileri oluşturulmuş ve Şekil 4.1 gösterilmiştir.



Şekil 4.1. Deneysel penetrasyon eğrisi ve bilgisayar ile hazırlanan teorik penetrasyon eğrileri (N=30-40-50)

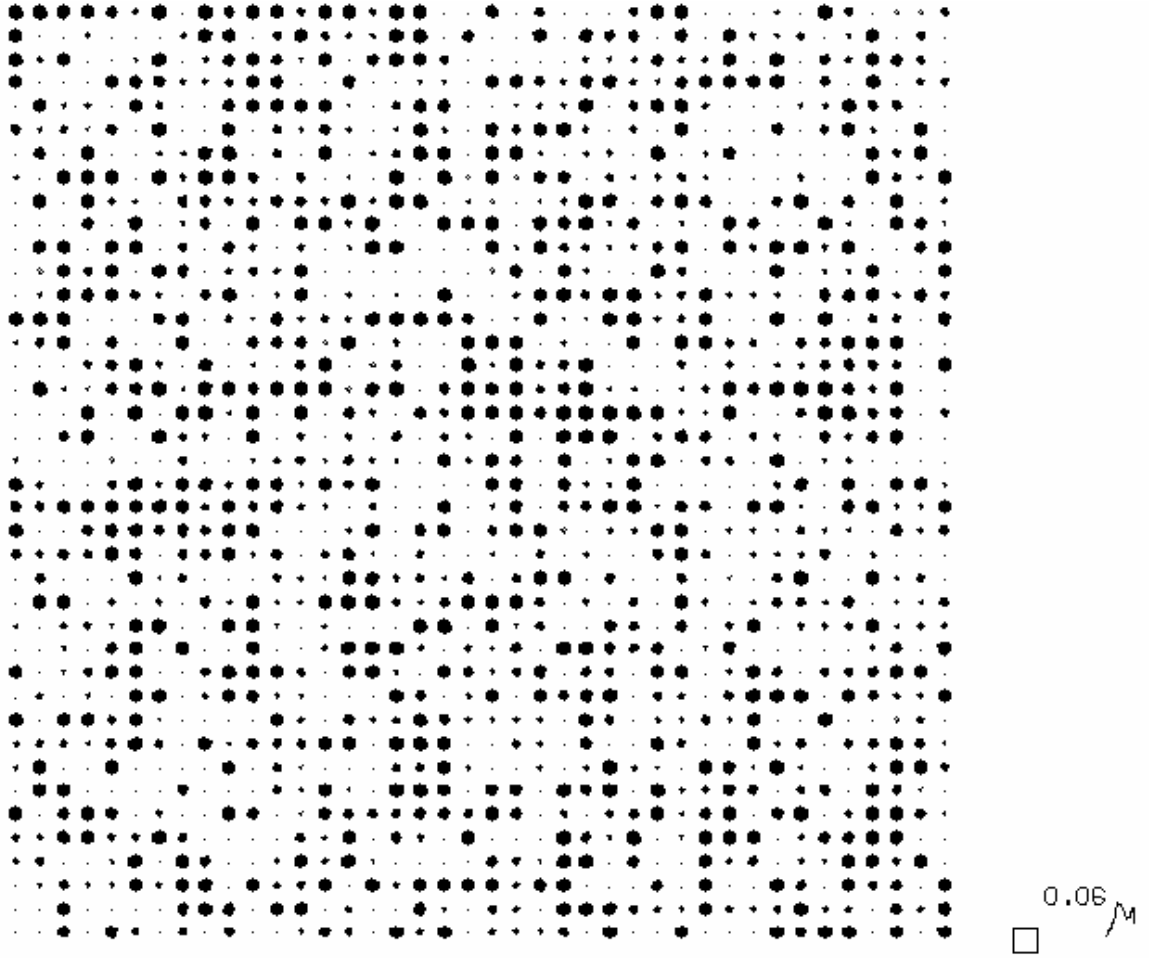
4.1. Ağ Boyutlarının Karşılaştırılması

Bu bölümde daha önce Amberlit-35 katalizörünün gözenek ağ boyutunu modellemesi için yapılan işlemler; N=30 ağ boyutunda olduğu gibi , 196800 – 382500 gözenek içeren N=40 ve N=50 ağ boyutları içinde tekrarlandı (40x40x40-50x50x50). Kullanılan bu ağ boyutlarının farklı kesitleri SECTION ve KALINET3D programları tarafından çizildi.

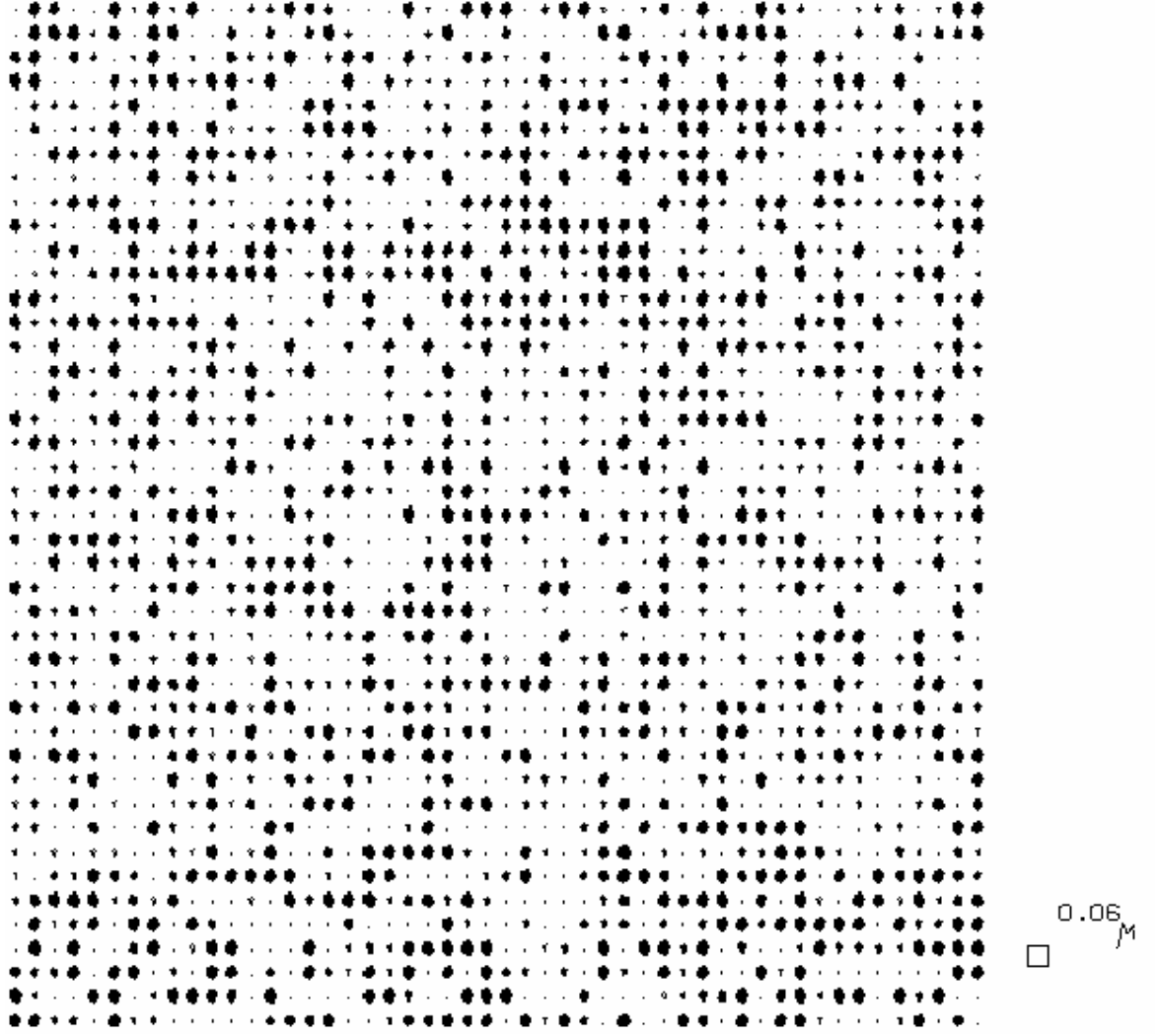
4.1.1. Sadece dikey gözenekleri kesen kesit (ISECT=1)

Üç boyutlu (3-D) ağı, dikey gözenekleri sadece bir “tek sayılı” düzlemde kesen yatay düzlem ile kesitlenir. Her gözenek kendisinin başlıca eksenine 90°’de kesilir ve eğer gözenekler silindirik varsayılırsa elde edilen kesit bir daire olacaktır.

Bilgisayar tarafından oluşturulan kesite bir örnek; Amberlit-35 katalizörünü temsil eden bir tam N=40-50 ebatlarının bir ayrılmamış ağlarının alt-ağı (NSUB=40-50 ebatları) için Şekil 4.2 ve Şekil 4.3’de gösterilmiştir. SECTION programı için veri dosyaları EK-8(a) ve EK-12(a)’ da verilmiştir.



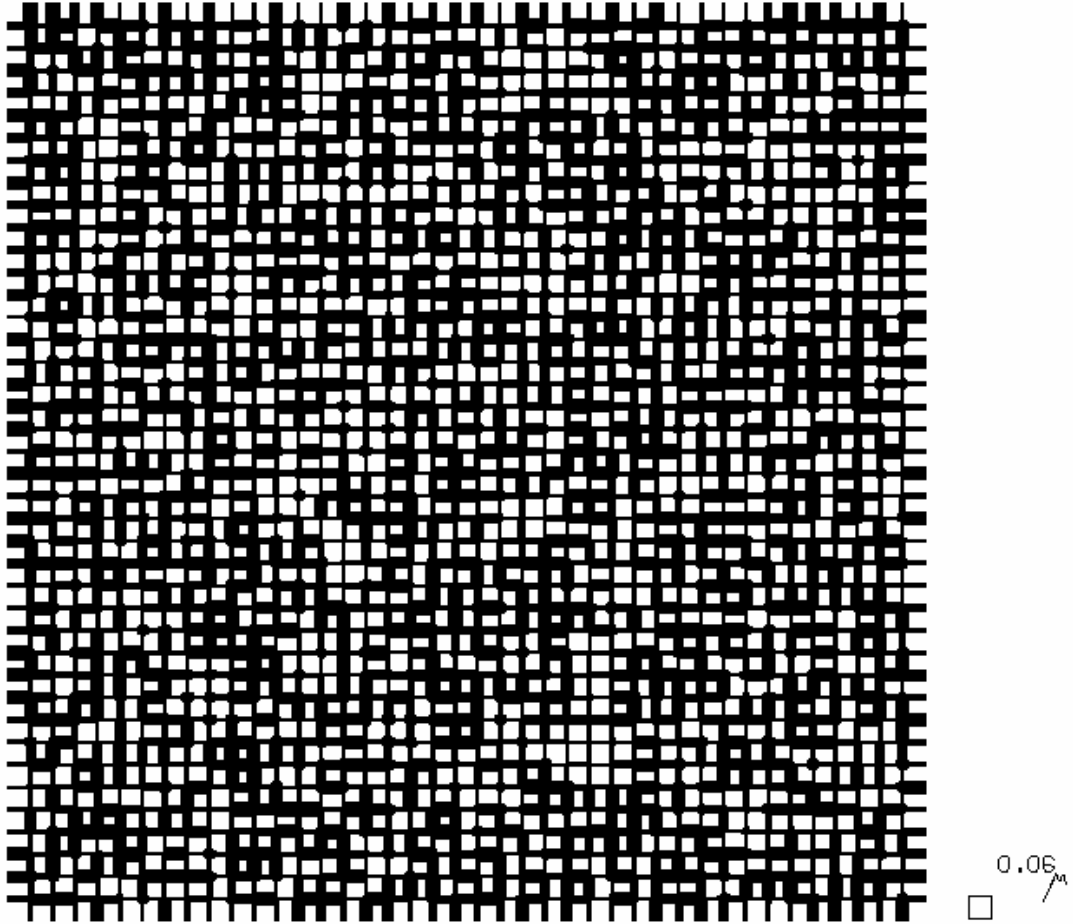
Şekil 4.2. Sadece dikey gözeneklerin kesiti (ISECT =1)
 (N=40X40X40, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)



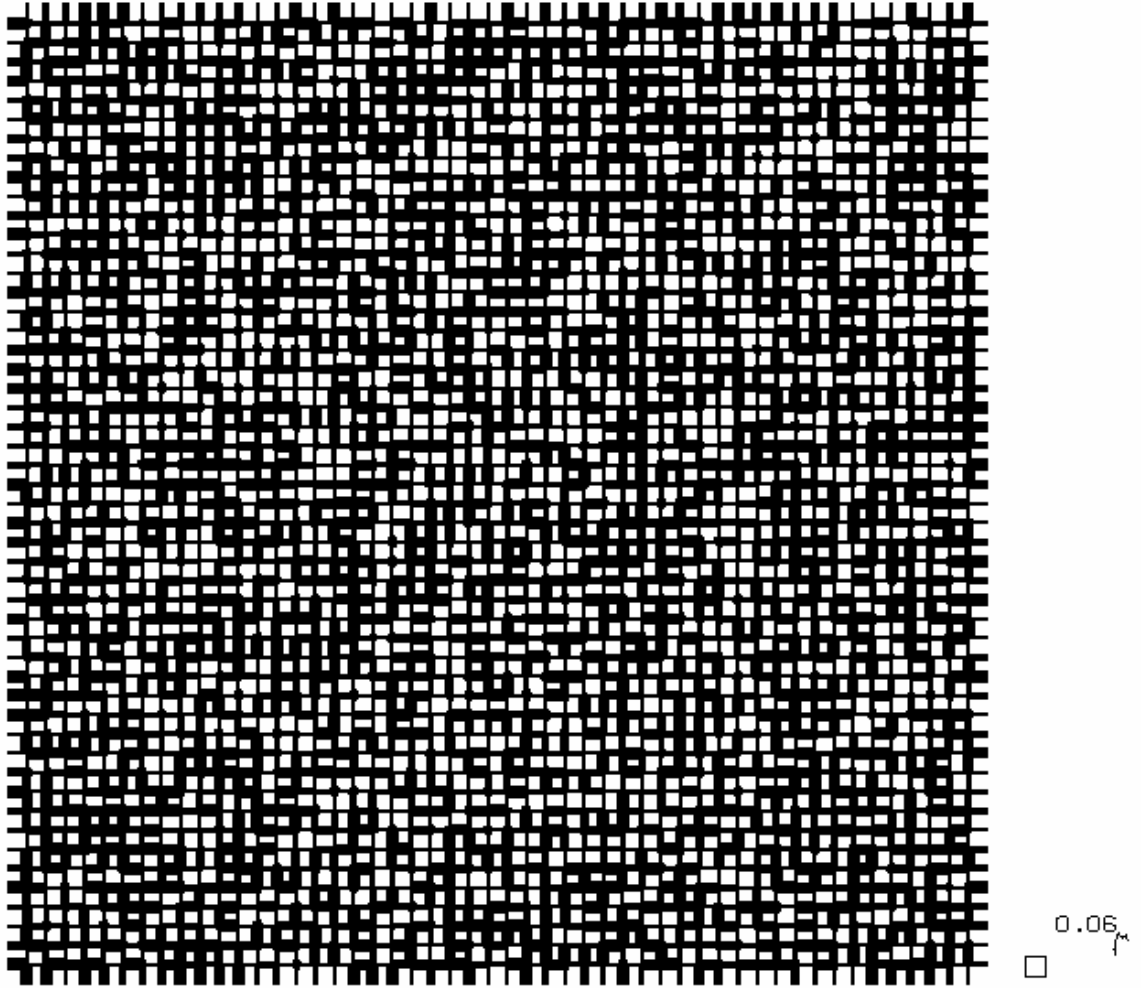
Şekil 4.3. Sadece dikey gözeneklerin kesiti (ISECT =1)
 (N=50X50X50, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

4.1.2. Dikey ve yatay gözenekleri kesen yatay düzlem (ISECT=2)

Üç boyutlu (3-D) ağın, hem yatay hem de dikey gözeneklerini “çift sayılı” düzlemde kesen bir yatay düzlem ile kesitlenir. Bilgisayar tarafından oluşturulan kesite bir örnek; Amberlit-35 katalizörünü temsil eden partiküllerin kesit ağ (N=40-50) görüntüleri. Şekil4.4 ve Şekil4.5’de gösterilmiştir. SECTION programı için veri dosyası EK-8(b) ve EK-12(b) ’de verilmiştir.



Şekil 4.4. Hem dikey hem de yatay gözenekleri kesen yatay düzlem
(N=40X40X40, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

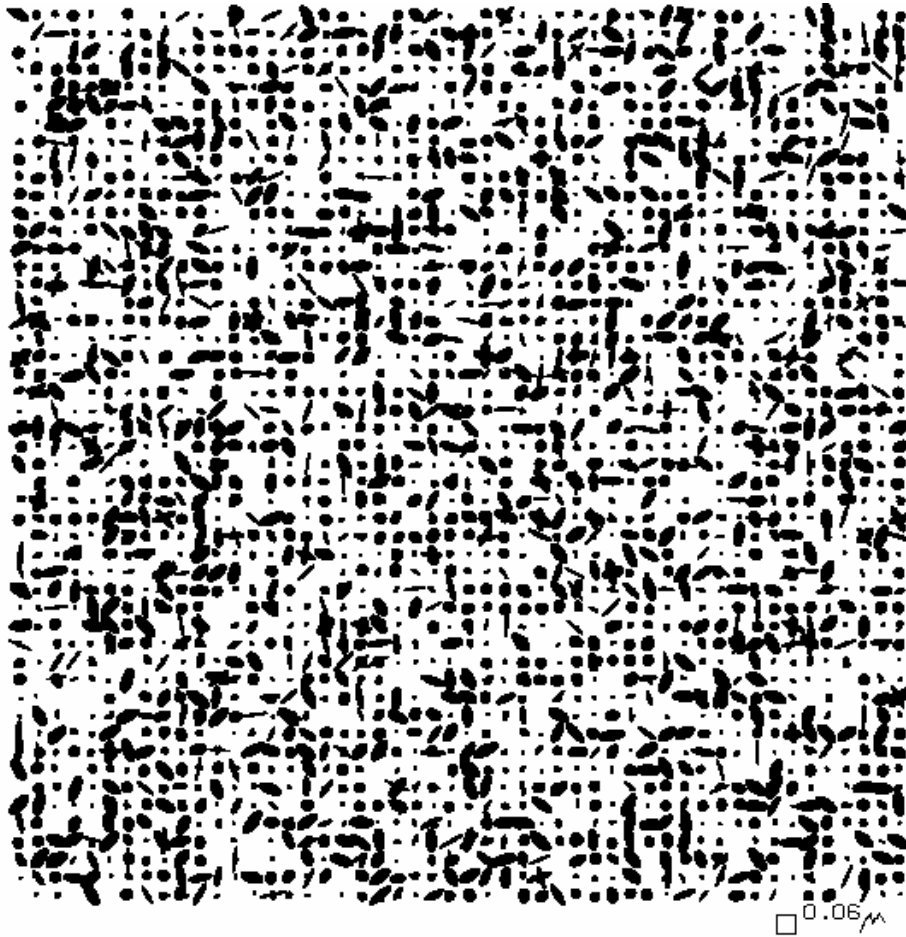


Şekil 4.5. Hem dikey hem de yatay gözenekleri kesen yataydüzlem
(N=50X50X50, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

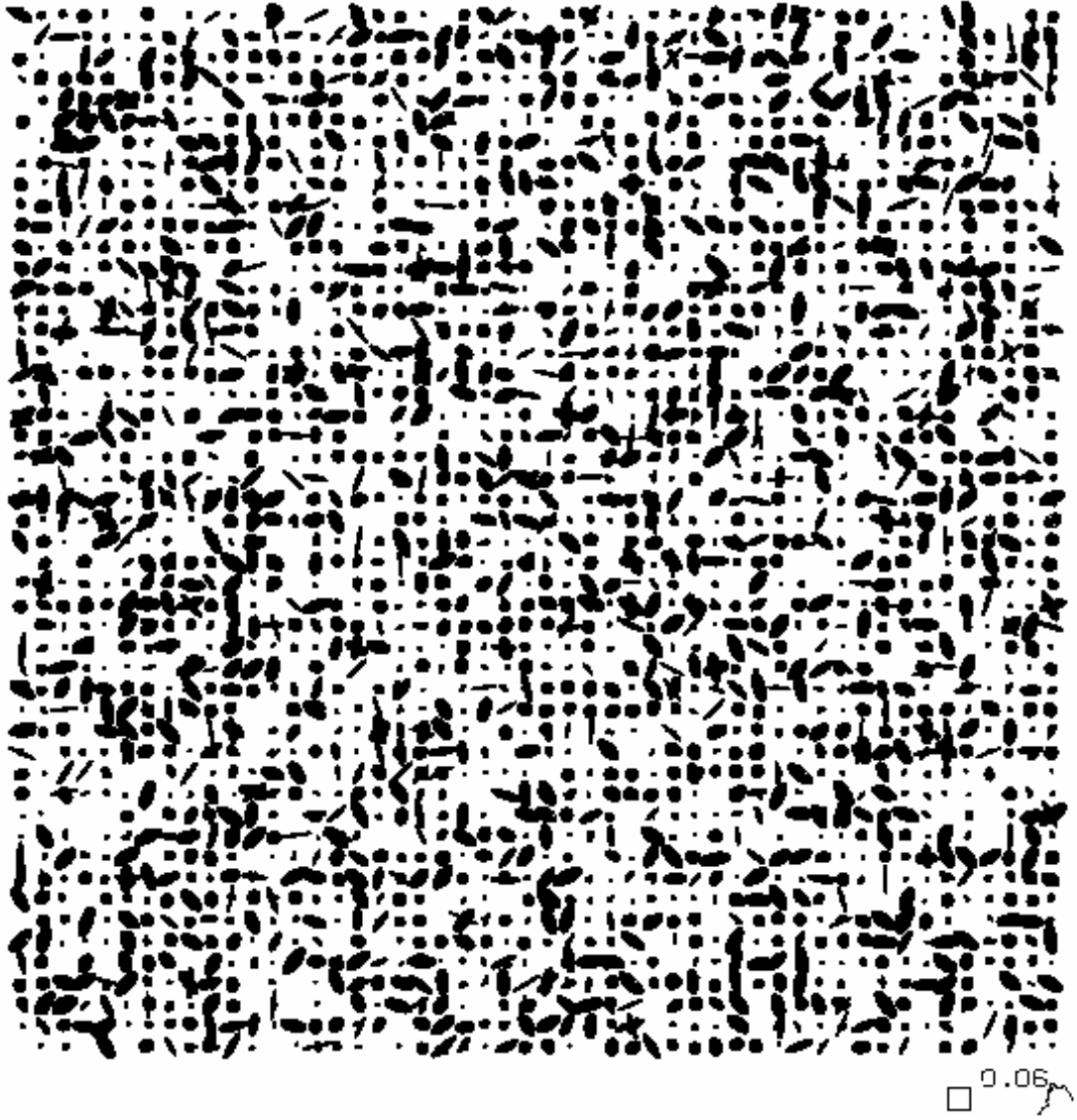
4.1.3. Yataya 45° eğimli düzlem

Üç boyutlu (3-D) ağı içerisinde oluşabilecek en fazla gözenek sayısını elde etmek için, üç boyutlu ağı yatay düzleme 45° eğimli olarak kesitlenecektir. Eğer silindirik gözenekler kesitlendiğinde, ortaya çıkan kesit bir elips olacaktır. Şekil 4.6 ve Şekil 4.7 simüle edilen Amberlit-35 katalizör

numunesi için bu tipin ortaya çıkan ağ kesitlerini (N=40-50) göstermekte ve bu kesitlemeler için veri dosyaları EK-8(c) ve EK-12(c) verilmiş ve bilgisayar çıktıları (SECTION programındaki) EK-9 ve EK-13'de verilmiştir.



Şekil 4.6. Yataya 45 eğimli düzlem ISECT=3
(N=40X40X40, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

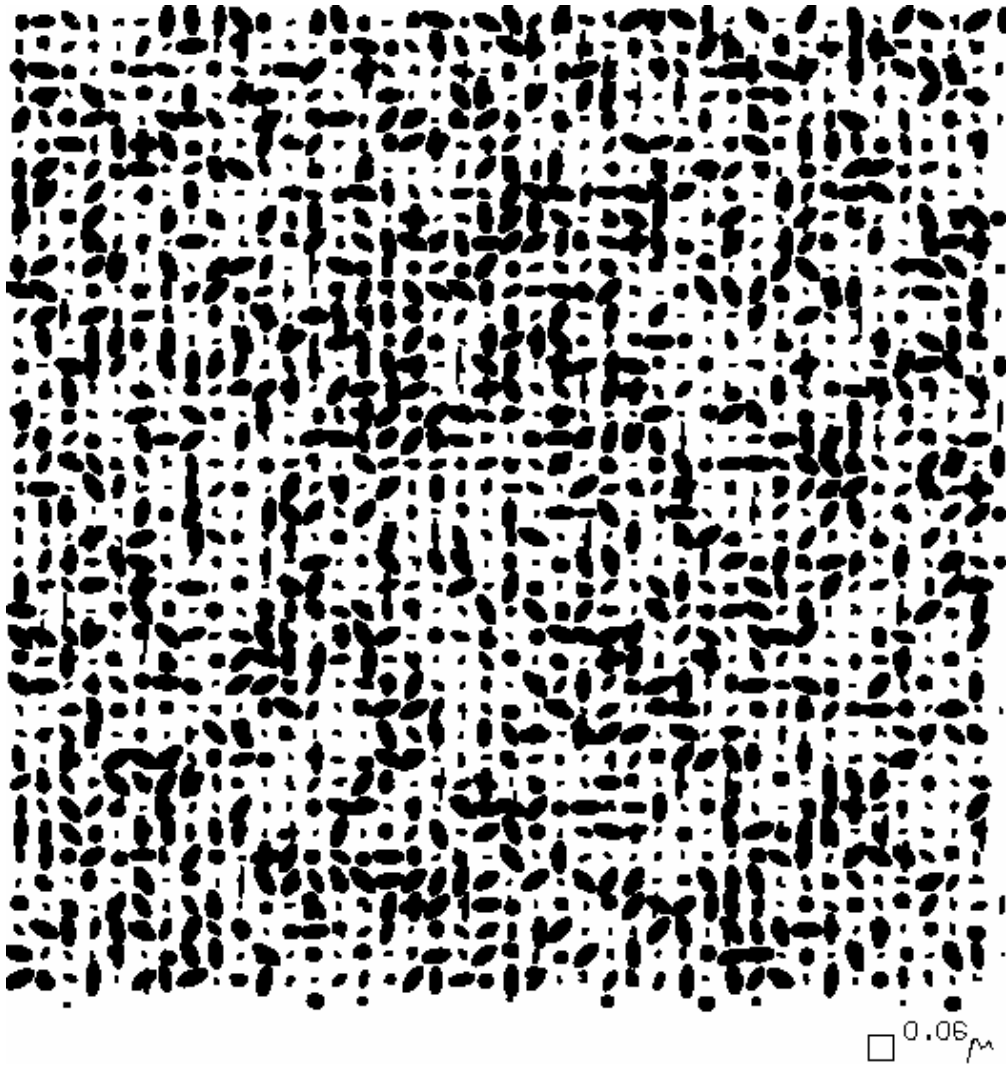


Şekil 4.7. Yataya 45 eğimli düzlem ISECT=3

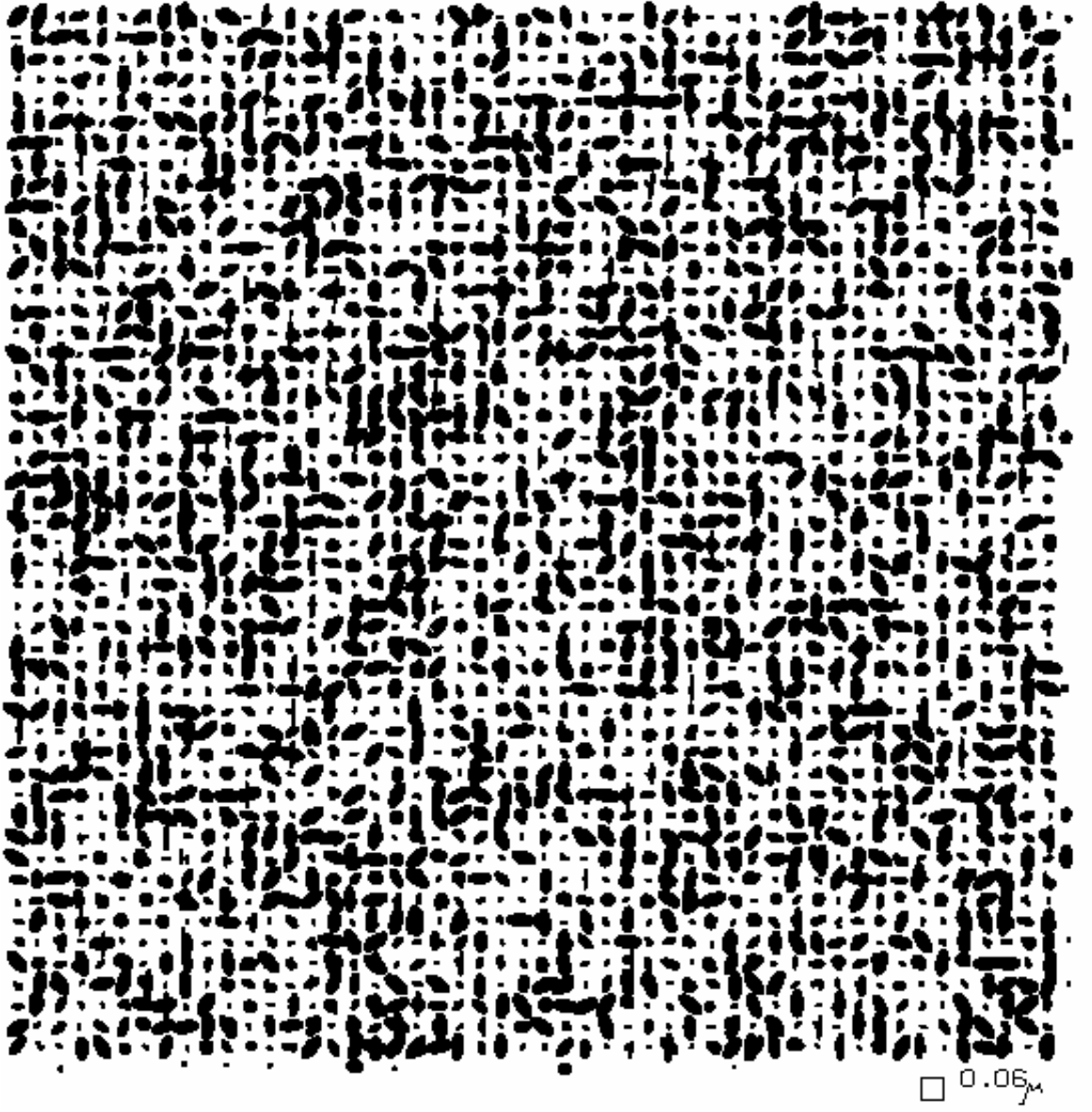
(N=50X50X50, 6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

4.1.4. Pürüzsüz elips (IELIPSE=1)

Kesitli düzlem, bir $AX+BY+CZ=D$ formundaki bir denklem kullanılarak seçilir. Eğer IELIPSE=1 kullanılırsa ($N=40-50$), ortaya çıkan elipsler takımı Şekil 4.8 ve Şekil 4.9'de , gösterildiği gibi pürüzsüz olur. Gerçek kesitlenmiş belirleyici nitelik sayısının veri dosyaları EK-8(d) ve EK-12(d) verilmiş ve bilgisayar çıktıları (SECTION programındaki) EK-9 ve EK-13'de verilmiştir.



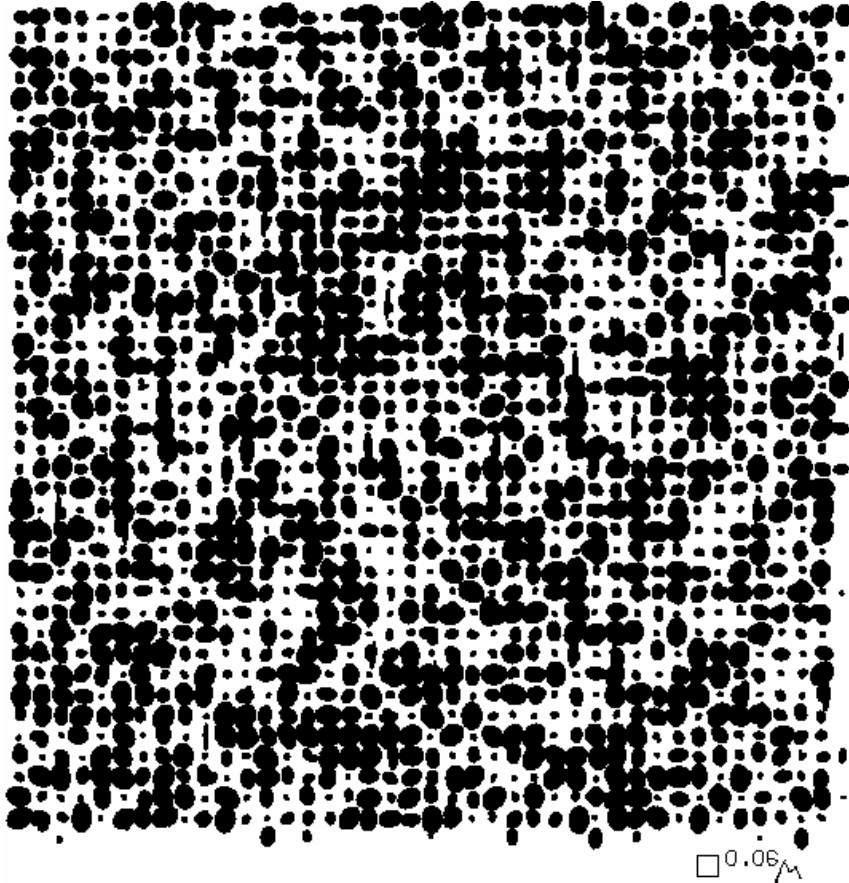
Şekil 4.8. Pürüzsüz elips (IELIPSE=1, $N=40 \times 40 \times 40$)
(6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)



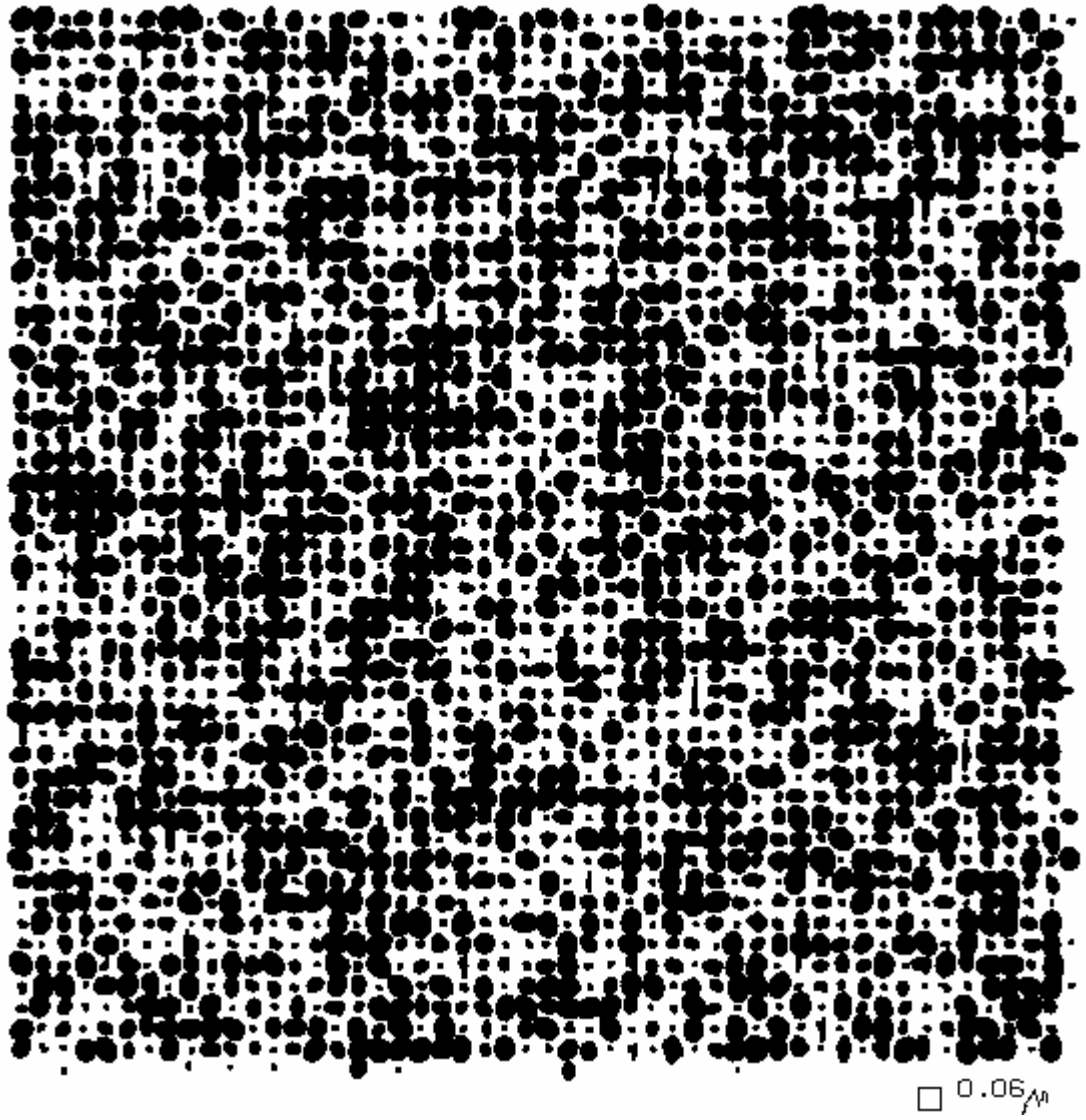
Şekil 4.9. Pürüzsüz elips (IELIPSE=1, N=50x50x50)
(6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

4.1.5. Düz ve pürüzlü elips (IELIPSE=2)

Elips, çevresine pürüzlü bir köşesi olacak şekilde çizilebilir. Bu, elipsin karşı tarafındaki kesitine normal olan iki nokta arasındaki dikey uzunluğun -RFNS ve +RFNS % arasındaki bir pürüzlülük faktörü (0.0 ile 1.0 arasında değişir) eklenerek yapılır. Bu rastgele faktör, iki limit ($\pm$ RFNS) arasındaki sayıları oluşturarak, CVF'nin (Compact Visual Fortran) çağırılmasıyla meydana getirilir. Şekil 4.10 ve Şekil 4.11 $X-2Y+Z=0.0$ düzlemiyle bir üç boyutlu (3-D) kesitini gösterir. Bilgisayar çıktı ve gerçek kesitlenmiş gözenek boyut dağılımı verileri EK-8(e) ve EK-12(e)'de verilmiştir.



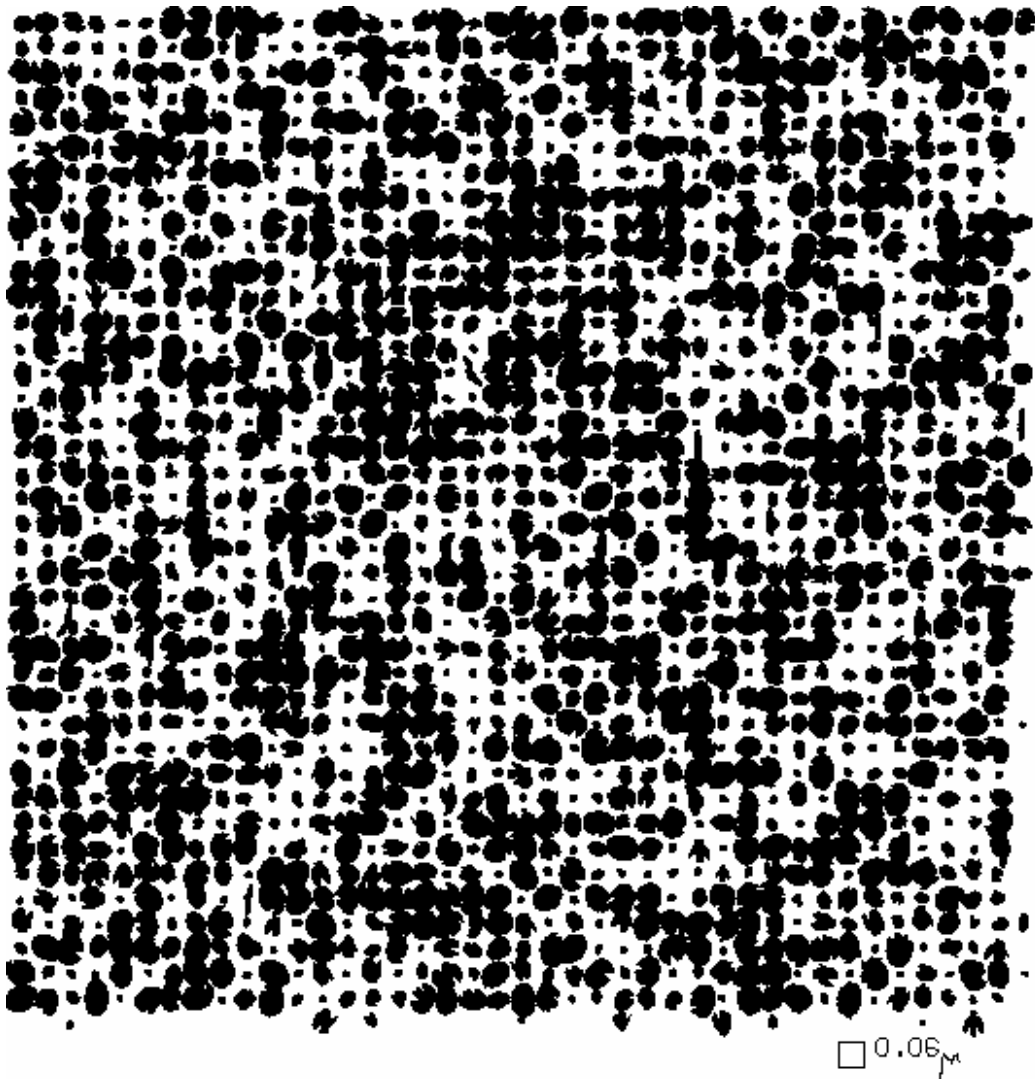
Şekil 4.10. Düz ve pürüzlü elips (IELIPSE=2, N=40X40X40)
(6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)



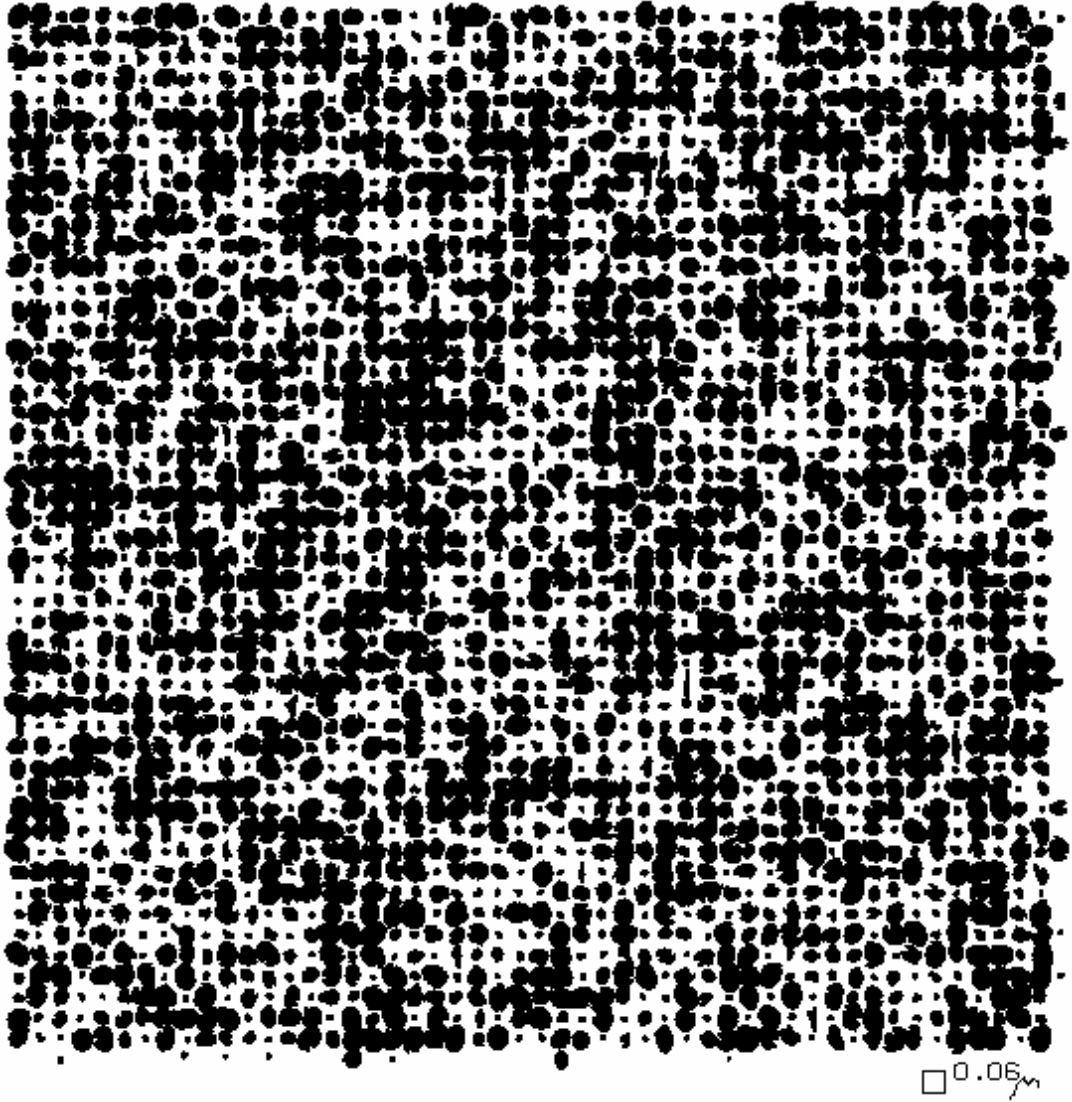
Şekil 4.11. Düz ve pürüzlü elips (IELIPSE=2, N=50X50X50)
(6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)

4.1.6. Dolambaçlı ve pürüzlü elips (IELIPSE=3)

Bu elips, bir pürüzlü çevre gibi bir dolambaçlı/dönen eksen ile de çizilebilir. Bu, yatayın rastgele 3 parçaya bölünmesiyle ve bir sınırlı rastgele açı tarafından iki uç bölümün döndürülmesiyle yapılır. Şekil 4.12 ve Şekil 4.13 pürüzlü ve dolambaçlı/dönen elipsin bir üç boyutlu (3-D) kesitinin bir örneğini göstermektedir. Veri dosyaları EK- 8 (f) ve EK-12(f)'de verilmiştir.



Şekil 4.12. Dolambaçlı ve pürüzlü elips (IELIPSE=3, N = 40x40x40)
(6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å)



Şekil 4.13. Dolambaçlı ve pürüzlü elips (IELIPSE=3, $N = 50 \times 50 \times 50$)
(6491-35410 PSIA, 328.6 – 60.2 Å) veri dosyası EK-12. (f) 'de verilmiştir.

KALINET ana programı ve SECTION programı ile ağ boyutları $N=30-40-50$ ve 83700-196800-382500 adet gözenek içeren ağ modelleri kullanılarak. Amberlit-35 katalizörünün gözenek kesit görüntüleri elde edilerek karşılaştırıldı. Karşılaştırılan kesit görüntüleri üzerinde ağ boyutlarının etkisi olmadığı gözlemlendi.

5. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRMELER

Yapılan bu çalışmada, kaliteli benzin üretiminde katalizör olarak kullanılan gözenekli yapıya sahip Amberlit – 35 katalizörünün gözenek boyut dağılımının belirlenmesi için civa porozimetresinden elde edilen deneysel parametrelere dayanarak bilgisayar simülasyon yöntemleri kullanılmıştır. Civa porozimetresi deneyi ile elde edilen deneysel sonuçları ve 6491 psia' a ile 35410 psia'a basınç aralığındaki hacim değişimleri incelenerek, deneyin bu basınçlar arasında gerçekleştiği görüldü. Elde edilen deneysel verilerle oluşturulan civa penetrasyon eğrisi ve gözenek hacim dağılım histogramı sonuçlarına bakılarak, penetrasyon gelişiminin 6491 psia (442 Å) basıncı civarında başlayıp 35410 psia (2409 Å) sonuçlandığı gözlemlendi.

Amberlit – 35 katalizörü taneciklerinin gözenek yapılarını simüle etmek için taneciklerin gözenek çaplarının rastgele dağıtılmış olduğu yani tamamen rastgele ya da bölümsüz üç boyutlu ağ modeli uygulanmıştır. Bu simüle prosesinde kullanılan 30 x 30 x 30 , 40 x 40 x 40 ve 50x50x50 ağ modellerinin 83700, 196800 ve 382500 adet düz silindirik yapıda gözenekler içerdiği ve bu ağ modellerinin simüle edilen teorik penetrasyon eğrileri ile deneysel penetrasyon eğrisinin karşılaştırılması için üç boyutlu ağ oluşturulmasında kullanıldı. Ayrıca farklı ağ boyutları ile oluşturulan penetrasyon eğrileri, üç boyutlu rastgele gözenek ağ görüntüleri ve üç boyutlu ağ görüntüleri incelendi. Kullanılan her iki ağ boyutunun da deneysel sonuçlar ile uyumlu olduğu gözlemlendi.

Simüle edilerek oluşturulan penetrasyon eğrisi için deneysel olarak elde edilen civa porozimetresi verilerinden boyutsuz hacim ve basınç değerleri, civa porozimetresini simüle eden ve Compact Visual Fortran (CVF) derleyicisi altında çalışan KALINET programına taşındı. Böylece KALINET programı tarafından elde edilen veriler ile oluşturulan teorik penetrasyon eğrisi ile deneysel penetrasyon eğrisi karşılaştırıldı. Deneme ve yanılma yolu ile uygun gözenek boyutları elde edildi.

Compact Visual Fortran (CVF) derleyicisi altında çalışan KALINET programındaki veriler SECTION programında kullanılarak üç boyutlu rastgele gözenek ağının farklı kesitleri elde edildi. Çakıştırma yöntemi ile oluşturulan deneysel penetrasyon eğrisi ile birlikte üç boyutlu ağ uygulamasında elde edilen penetrasyon verileri uyumlu hale getirildi. Bu sonuçlar; bilgisayar simülasyonu ile oluşturulan “ Sanal malzemenin “ kesitlerini “ gerçek malzeme “ kesitleri ile uyumlu olması gerektiğini gösterdi.

Üç boyutlu ağ çizimleri oluşturmak için tekrar KALINET programı tarafından oluşturulunan veriler kullanıldı. Ayrıca uygulanan farklı basınçlar altında civa penetrasyonunun gözenekli yapı içerisindeki hareketleri gözlemlendi. Yani civanın sayısal veriler ile gerçekleştirilen civa penetrasyonunun gözenekli malzemeler içerisindeki izlediği yol görsel olarak oluşturuldu.

Sonuçta: Başlangıçta stokastik olarak düşünülen bir problemin çözümü için, bilgisayar ortamında sayısal değerler kullanılarak, simülasyon yöntemiyle oluşturulan teorik verilerin deneysel veriler ile uyumlu olabileceği gösterildi. Ayrıca bu çalışma gözenekli malzemelerin gözenek yapılarının belirlenmesinde, üç boyutlu ağ modelinin kullanılabileceğinin kanıtı olmuştur. Sonuçta: Bu çalışma gözenekli malzemelerin gözeneklerinin belirlenmesinde yapılacak araştırmalar için pusula görevini üstlenebileceğini ortaya çıkarmıştır.

6. ÖNERİLER

Bu çalışmada stokastik kabullerin gerçek veriler ile uyumlu olabileceği kanıtlanmıştır. Birçok bilim adamı; gözenekli malzemelerin gözenek yapılarını daha iyi karakterize etmek için kullanılan civa penetrasyonu deneylerine karşı üç boyutlu (3-D) ağ modelinin daha gerçekçi bir model olduğunu düşünmüşlerdir.

Geliştirilen (3-D) ağ modelinin tüm ağ üzerinde uygulanabileceği ve ağ boyutlarıdaki artışların gözenek dağılımları üzerindeki etkileri incelenebilir. Gerçek ve sanal numune kesitleri arasındaki uyumluluk görüntü analiz yöntemleri ile karşılaştırılabilir.

Kesit düzleminin geçtiği bölgenin belirlenmesi için KALINET3D programı ile çizilen üç boyutlu (3-D) ağ üzerinde $AX + BX + CZ = D$ düzlemi tanımlanmalı.

KAYNAKLAR

Alazmi, B., Vafai, K., “ Analysis of variants within the porous media transport models”, **Journal of Heat Transfer**., 122, 303 –326 (2000).

Allamy, A., Mann, R., Holt, A., “modeling of catalyst particle skin effects using a 3-D pore network model and quantitative microscopy”, **Chem. Eng. Sci.**, 58(10):1989-2000 (2003).

Androutsopoulos, G.P. and Mann, R., “Modelling of the skin effect in catalyst pellets”, **Chem.Eng. Sci.**, 31(12): 1131-1138(1976).

Androutsopoulos, G.P. and Mann, R., “ Evaluation of mercury porosimeter experiments using a network pore structure model “, **Chem. Eng. Sci.**, 34 (10) : 1203 – 1212 (1979).

Androutsopoulos, G.P.,”Modelling of the pore structure in catalyst pellets”, Ph.D Thesis, **University of Manchester Institue of Science and Technology**, Manchester, 1 – 60 (1976).

Beeckman, J. W., “Mathematical description of heterogeneous materials”, **Chem. Eng. Sci.**, 45(8): 2603 – 2610(1990).

Capek, P., Hejtmanek, V., Brabec, L., Zikanova, A. and Kocirik, M., “Network modelling of capillary pressure curves, permeability, and diffusivity”, **Chem. Eng. Sci.**, 62, 5117-5122(2007).

Chandler, R., Koplik, J., Lerman, K. and Willemsen, J.F., “Capillary displacement and percolation in porous media”, *J. Fluid Mech.*, 119:249- 267 (1982).

Chatzis, I. and Dullien, F.A.L., “The modeling of mercury porosimetry and the relative permeability of mercury in sandstones using percolation theory”, **Int. Chem. Eng.**, 25(1):47-66(1985).

Conner, W.C., Lane ,A.M. and Hoffman, A.j., “Measurement of the morphology of high surface area solids: Hysteresis in mercury porosimetry”, **J. Colloid Interface Sci.**, 100(1): 185-193(1984)

Dullien, F.A.L., “ Porous media, fluid transport and pore structure”, **Academic Press San Diego**.1-4 (1992).

Dullien, F.A.L., “ Porous Media : Fluid Transport and Pore Structure Second ed. **Academic: Press, San Diego**, 1-35 (1992).

Dullien, F.A.L,” New network permeability model of porous media”,**AIChE J.**, 21(2):299-307(1975).

El – Nafaty, U. A. and Mann, R., “ Coke burnoff in a typical particle analyzed by an SEM mapped 2 – D network pore structure”, **Chem . Eng. Sci**, 865-872 56(2001).

Fatt, I., “ The network model of porous media I. Capillary characteristics”, **Pet. Trans., AIME**, 207. 144-159(1956).

Frevel, L. K. and Kressley, L.J., “ Modifications in Mercury Porosimetry “, **J. Anal. Chem.**, 35(10): 1492 (1963).

Golshan, H., “ Development and application of stochastic pore structure models” ,**Ph.D Thesis, University of Manchester Institue of Science and Technology**, Manchester, 1- 75 (1979).

Ishakoğlu, A. ve Boytaş, A. F., “ Measurement and evaluation of saturations for water, ethanol and light non- aqueous phase liquid in a porous medium by gamma attenuation, **Applied Radiation and Isotopes**, 56, 601-606(2002)

Katsuzawa, H. and Kobayashi, J.I.,” Pore structure of catalyst and particle diffusion of gas “, **J. Catal.**, 86(2): 427-432(1984).

Khalaf, K. M., “ Characterisation of FCC catalyst particles using 3-D stochastic pore networks”, **Ph.D. Thesis, University of Manchester Institue of Science and Teknology**, Manchester, 1-100(1998).

Kuramae, M., “ Investigation of unsaturated liquid flow in a granular bed using a cubic – lattice pore model”, **Int. Chem. Eng** ., 22(4):666-673 (1982)

Kzenzhek, O.S., **Russ.J.Phys. Chem.**, 37:691 (1963).

Levitz, P., “ Toolbox for 3D imaging and modeling of porous media: Relationship with transport properties”, **Cement and Concrete Research** 37,351- 359(2007).

Liang, Z., Ioannidis, M.A. and Chatzis, I., “ Geometric and topological Analysis of three – dimensional porous media: Pore space partitioning Based on morphological skeletonization”, **Journal of Colloid and Interface Science**, 221, 13-34(2000).

Mann R., El –Nafaty, ‘ Probing internal structures of FCC catalysts particles: From paralel bundles to fractals. **Stud.Surf.Sci.**, U.A 100,355-364(1996);

Matthew, T.B., Karsten, E. T., Hjortso, M., “ Coupling pore –scale networks to continuum scale models of porous media”, **Computers & Gesciences** 33, 393 – 410 (2007).

Mürtezaoğlu, K., “Further developments in the use of visualised porosimetry for PVC structure characterization”, **Ph.D. Thesis, University of Manchester Institue of Science and Technology**, Manchester, 6-54, 65-104(1994).

Nicholson, D and Petropoulos, J.H.,“ Capillary models for porous media: III. Two-phase flow in a three – deimensional network with Gaussian radius distribution”, **J. Phys. D: Appl. Phys.**,4: 181-189(1971).

Özmen, M.,” Physical Characterization of The Catalyst used in the production of environmentally benign gasoline by using visual analysis method “ **M.Sc.Thesis Gazi University Institute of Science and Technology** ,2-30 (2004)

Prachayawarakorn, S., Prakotmak, P. and Sopanronnarit, S.,” Efectts of pore size distribution and pore – architecture assembly on drying characteristics of pore networks”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, (51): 344-352(2008).

Prodanovic, M., Lindquist, W.B., Seright, R. S., “ Porous structure and fluid Partitioning in polyethylene cores from 3D X- ray microtomographic imaging”, **Journal of Colloid and Interface Science**, 298, 282- 298 (2005).

Rieckmann C., Keil F.J.,’ Multicomponent diffusion and reactin in 3-D networks. Ind. **Engang. Chem. Res.**, 3275-3281(1997).

Rigby, S., P. and Gladden, L. F., “ Deconvolving pore shielding effects in mercury porosimetry data using NMR techniques”, **Chem. Eng. Sci.**, 55: 5599-5612(2000).

Roudaki, S.J.M., “Application of three – dimensional stochastic pore network to zinc oxide particles”, **M.Sc. Dissertation, University of Manchester Institue of Science and Technology**, Manchester 1- 40(1989).

Sahimi, M., “Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock: **From Classical Methods to Modern Approaches. VCH**, Weinheim, Germany, (1995).

Sbaiti, B., “Modelling of oil bearing rock using a three dimensional network model”, **M.Sc. Thesis, University of Manchester Institue of Science and Technology**, Manchester, 1-40(1983).

Van Ekelen, H.A.M., “ The random – spheres model for porous materials”, **J. Catalysis**, 29(1): 75-82(1973).

Wall, G.C. and Brown, R.J.C., “The determination of pore size distribution from sorption isotherms and mercury penetration in interconnected pores: the application of percolation theory”, **J. Collid and Interface Sci.**, 82(1): 141(1981).

Wardlaw, N., C., “ Pore geometry of carbonate rocks as revealed by pore casts and capillary pressure,” Am. Assoc. Petr. Geol. Bull., 60. 245(1976).

Wood, J., Gladden, L.F.,” Modelling diffusion and reaction accompanied by capillary condensation using three – dimensional pore networks. Part 1. Fickian diffusion and pseudo – first – order reaction kinetics”, **Chem. Eng. Sci.**, 57, 3033-3045(2002).

EKLER

EK-1 Komutlar

Bu çalışmada kullanılan komutlar açıklamaları ile birlikte sunulmuştur

FORTTRAN 77	FORTTRAN 90	AÇIKLAMA
GINO	gOpenGino	Gino programını başlatır
PICBEG	gOpenSeg	Yeni segmenti başlatır
MOVTO2	gDrawLineTo2D	Noktaların pozisyonunu belirler(absolute değer ile 2-D içerisinde)
MOVTO3	gDrawLineTo3D	Noktaların pozisyonunu belirler(absolute değer ile 2-D içerisinde)
BROKEN	gSetBrokenLine	Çizgi tiplerini seçer
BUFLIM	gSetWorkspaceLimit	Workspace alanını belirler
CHAFIX	gDisplayRealFixed	Sabit noktaların gerçek değerlerini takip eder
CHASTR	gDisplayStr	Çıktıların karakter dizini
DEBUG	gDebug	Gino içerisindeki bilgilerin akışını takip eder
DEVEND	gCloseDevice	Terminate device output (ayırma)
DEVFIL	gSetDeviceFilename	Çıktı dosyasını seçer
DEVSUS	gSuspendDevice	Çıkan aygıtları askıya alır
ERRMAX	gSetMaxErrorLimit	Maksimum hata numaralarını belirler
GINEND	gCloseGino	Gino programını kapatır
LINCOL	gSetLineColour	Renk seçimini yapar
LINBY2	gDrawLineBY2D	Doğru parçalarını çizer (2-D içerisinde)
LINBY3	gDrawLineBY3D	Doğru parçalarını çizer (3-D içerisinde)
MOVBY2	gMoveBy2D	Noktaların pozisyonunu belirler(relative değer ile 2-D içerisinde)

EK-1 (Devam) Komutlar

FORTTRAN 77	FORTTRAN 90	AÇIKLAMA
MOVBY3	gMoveBy3D	Noktaların pozisyonunu belirler(relative değer ile 3-D içerisinde)
MOVTO2	gMoveTo2D	Noktaların pozisyonunu belirler(absolute değer ile 2-D içerisinde)
MOVTO3	gMoveTo3D	Noktaların pozisyonunu belirler(absolute değer ile 3-D içerisinde)
PICDRA	gDrawSeg	Var olan doğru parçasını yeniden çizer
PICEND	gCloseSeg	Açılmış güncel segmenti kapatır
ROTAT2	gRotate2D	X,Y'nin orjin etrafında dönme hareketini sağlar
ROTAT3	gRotate3D	X,Y ve Z'nin orjin etrafında dönme hareketini yapar
SDFBUF	gDefineSegWorkspace	Software de dosyaları görmek için çalışma alanı yaratır
SHEAR2	gShear2D	X ve Y eksenini keser
SHEAR3	gShear3D	X, Y ve Z eksenlerini keser
SHIFT2	gShift2D	X ve Y'nin orijin ekseninde yerdeğiştirmelerini sağlar
SHIFT3	gShift3D	X, Y ve Z'nin orijin ekseninde yerdeğiştirmelerini sağlar
WINDO2	gSetWindow2D	Windows u 2-D içerisinde tanımlar
WINDO3	gSetWindow3D	Windows u 3-D içerisinde tanımlar
WINDOW	gSetWindowMode	Windows yapısını yerleştirmede kullanılır
VIEW	gGenerateView	Generate view transformation

EK-1 (Devam) Komutlar

FORTTRAN 77	FORTTRAN 90	AÇIKLAMA
ARCBY2	gDrawArcBy2D	2-D içerisinde relative değer ile daireyi çizer
BMG	gBmg	Çerçeve (Bitmap)
MWIN	gMwin	Varsayılan windows' u açar
BOX	gDrawBox	Çizim alanı

EK – 2 Veri Dosyasi (Kalinet Programi İçin N=30x30x30)

2 , 1 , 2

0.001

60.2, 328.6 , 60.2, 10.0 , 30 ,0 , 0.30, 0.01

30

11

28900 , 4200 , 4000 , 2250 , 1000 , 1000,

4000, 3550,7300,9000, 18500

60.2, 85.,107., 124., 134., 144., 151.,

170., 188., 247., 314.4, 328.6

2 , 2 , 2

EK - 3 Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından) (Şekil 3.2 için)

NETWORK SIZE 30 X 30 X 30

NON-SEGREGATED MODEL

AND CONTAINING 83700 PORES

IRREGULAR CUBIC NETWORK WITH PORES
HAVING DIAMETERS INDEPENDANT OF THEIR LENGTHS

FITTING VERSION

INTERVAL 1 FROM	60.20	TO	85.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 28900
INTERVAL 2 FROM	85.00	TO	107.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 4200
INTERVAL 3 FROM	107.00	TO	124.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 4000
INTERVAL 4 FROM	124.00	TO	134.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 2250
INTERVAL 5 FROM	134.00	TO	144.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 1000
INTERVAL 6 FROM	144.00	TO	151.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 1000

EK -3 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından) (Şekil 3.2 için)

FITTING VERSION

INTERVAL 7 FROM	151.00	TO	170.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 4000
INTERVAL 8 FROM	170.00	TO	188.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 3550
INTERVAL 9 FROM	188.00	TO	247.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 7300
INTERVAL 10 FROM	247.00	TO	314.40	NUMBER OF SEGMENTS	= 9000
INTERVAL 11 FROM	314.40	TO	328.60	NUMBER OF SEGMENTS	= 18500

EK -3 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından) (Şekil 3.2 için)

REQUIRED POROSITY = 0.300
CALCULATED POROSITY = 0.300
AVERAGE PORE LENGTH = 0.06 MICROMETERS

SUCCESSFUL ALLOCATION

PENETRATION DATA

PRES.(A) PSIA	DIAMETER A	DIMENSIONLESS T.D.N.M.	VOL. P.B.M.	PENETRATED PORES	PENETRABLE PORES
6491.00	328.60	0.0	0.0	0	0
6694.00	318.60	6.5	38.6	2182	12942
6911.67	308.60	23.7	56.4	8060	19224

EK -3 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından) (Şekil 3.2 için)

7143.14	298.60	32.7	60.0	11200	20592
7390.65	288.60	43.4	63.3	15029	21942
7655.93	278.60	52.4	66.3	18364	23235
7940.96	268.60	59.9	69.1	21295	24551
8248.04	258.60	65.2	71.8	23521	25914
8579.82	248.60	69.5	74.3	25523	27264
8939.41	238.60	72.9	76.5	27242	28554
9330.46	228.60	75.6	78.3	28719	29757
9757.29	218.60	78.1	80.1	30215	30971
10225.04	208.60	80.2	81.7	31669	32254
10739.89	198.60	82.1	83.2	33076	33518
11309.34	188.60	83.7	84.5	34396	34732
11942.57	178.60	85.8	86.4	36443	36662

EK -3 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından) (Şekil 3.2 için)

12650.90	168.60	87.7	88.0	38480	38613
13448.57	158.60	89.4	89.6	40620	40702
14353.58	148.60	90.8	91.0	42623	42676
15389.20	138.60	91.6	91.7	43833	43872
16585.87	128.60	92.4	92.5	45538	45568
17984.34	118.60	93.5	93.5	47818	47831
19640.35	108.60	94.4	94.4	50232	50236
21632.28	98.60	95.0	95.0	52233	52237
24073.84	88.60	95.5	95.5	54110	54111

EK -4 Section Programı İçin Veri Dosyaları (30x30x30)

a) ISECT1 için;

30 , 1 , 1

60.2 , 328.6, 10.0 , 60.2

21

b) ISECT2 için;

30 , 1 , 2

60.2, 328.60, 10.0 , 60.2

12

c) ISECT3 için;

30 , 1 , 3

60.2, 328.60, 10.0 , 60.2

0.1, 1

d)ISECT4 (ELIPS1) için;

30 , 1 , 4

60.2, 328.6, 10.0 , 60.2

1.0,-2.0,1.0,0.0,1.0

e)ISECT4 (ELIPS2) için;

30, 1, 4

60.2, 328.6, 10, 60.2

1.0, -2.0, 1.0, 0.0, 2.0

0.7

f)ISECT4 (ELIPS3) için;

30, 1, 4

60.2, 328.6, 10, 60.2

1.0, -2.0, 1.0, 0.0, 3.0

0.7

EK - 5 Bilgisayar Çıktısı (Section Programından) (Şekil 3. 10 için)

3-D NON-SEGREGATED NETWORK

SIZE = 30
TOTAL NUMBER OF PORES = 83700

PLAIN AT 45 DEGREES TO THE HORIZONTAL
CUTTING PORES OF A REGULAR CUBIC NETWORK AND THE
POSITIONS OF THE RESULTING SECTIONS RANDOMIZED

DATA FROM DIAVOL & CORDNAT HAVE BEEN READ
AVERAGE PORE LENGTH = 0.06 MICROMETERS
MINIMUM DIAMETER PENETRATED = 60.2 ANG
EQUIVALENT TO 100.0 % OF THE TOTAL PORE VOLUME

NUMBER OF PORES SECTIONED = 2700

INTERVAL 1 FROM	60.20 TO	70.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	= 356
INTERVAL 2 FROM	70.20 TO	80.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	= 369
INTERVAL 3 FROM	80.20 TO	90.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	= 231

EK - 5 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Section Programından) (Şekil 3. 10 için)

INTERVAL 4 FROM	90.20 TO	100.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	54
INTERVAL 5 FROM	100.20 TO	110.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	65
INTERVAL 6 FROM	110.20 TO	120.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	84
INTERVAL 7 FROM	120.20 TO	130.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	67
INTERVAL 8 FROM	130.20 TO	140.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	44
INTERVAL 9 FROM	140.20 TO	150.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	37
INTERVAL 10 FROM	150.20 TO	160.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	62
INTERVAL 11 FROM	160.20 TO	170.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	62
INTERVAL 12 FROM	170.20 TO	180.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	68
INTERVAL 13 FROM	180.20 TO	190.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	56
INTERVAL 14 FROM	190.20 TO	200.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	43
INTERVAL 15 FROM	200.20 TO	210.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	35
INTERVAL 16 FROM	210.20 TO	220.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	44

EK - 5 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Section Programından) (Şekil 3. 10 için)

INTERVAL 17	FROM	220.20	TO	230.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	30
INTERVAL 18	FROM	230.20	TO	240.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	37
INTERVAL 19	FROM	240.20	TO	250.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	41
INTERVAL 20	FROM	250.20	TO	260.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	43
INTERVAL 21	FROM	260.20	TO	270.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	55
INTERVAL 22	FROM	270.20	TO	280.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	33
INTERVAL 23	FROM	280.20	TO	290.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	51
INTERVAL 24	FROM	290.20	TO	300.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	40
INTERVAL 25	FROM	300.20	TO	310.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	52
INTERVAL 26	FROM	310.20	TO	328.60	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	641

EK – 6 Veri Dosyası (Kalinet Programı N=40x40x40 için)

2 , 1 , 2

0.01

60.2, 328.6 , 60.2, 10.0 , 40 ,0 , 0.30, 0.01

40

11

68069 , 9875 , 9405, 5173 , 2351, 2351,

9405, 8347, 17164, 21161, 43499

60.2, 85.,107., 124., 134., 144., 151.,

170., 188., 247., 314.4, 328.6

2 , 2 , 2

EK -7 Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından N=40x40x40 İçin) (Şekil 4.1 İçin)

NETWORK SIZE 40X40X40

NON-SEGREGATED MODEL

AND CONTAINING 196800 PORES

IRREGULAR CUBIC NETWORK WITH PORES
HAVING DIAMETERS INDEPENDANT OF THEIR LENGTHS

FITTING VERSION

INTERVAL	1	FROM	60.20	TO	85.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 68069
INTERVAL	2	FROM	85.00	TO	107.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 9875
INTERVAL	3	FROM	110.00	TO	124.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 9405
INTERVAL	4	FROM	124.00	TO	134.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 5173

EK - 7 (Devam)Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından N=40x40x40) (Şekil 4.1 İçin)

FITTING VERSION

INTERVAL	5	FROM	134.00	TO	144.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 2351
INTERVAL	6	FROM	144.00	TO	151.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 2351
INTERVAL	7	FROM	151.00	TO	170.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 9405
INTERVAL	8	FROM	170.00	TO	188.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 8347
INTERVAL	9	FROM	188.00	TO	247.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 17164
INTERVAL	10	FROM	247.00	TO	314.40	NUMBER OF SEGMENTS	= 21161
INTERVAL	11	FROM	314.40	TO	328.60	NUMBER OF SEGMENTS	= 43499

EK - 7 (Devam)Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından N=40x40x40) (Şekil 4.1 İçin)

REQUIRED POROSITY = 0.300

CALCULATED POROSITY = 0.302

AVERAGE PORE LENGTH = 0.06 MICROMETERS

SUCCESSFUL ALLOCATION

PENETRATION DATA

PRES.(A)	DIAMETER	DIMENSIONLESS	VOL.	PENETRATED	PENETRABLE
PSIA	A	T.D.N.M.	P.B.M.	PORES	PORES
6491.00	328.60	0.0	0.0	0	0
6694.73	318.60	5.0	39.1	3979	30822

EK - 7 (Devam)Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından N=40x40x40) (Şekil 4.1 İçin)

6911.67	308.60	19.9	56.5	15949	45251
7143.14	298.60	30.7	60.0	24722	48375
7390.65	288.60	43.4	63.3	35361	51533
7655.93	278.60	52.9	66.4	43568	54722
7940.96	268.60	59.8	69.3	49998	57883
8248.04	258.60	65.5	71.9	55543	61020
8579.82	248.60	69.6	74.3	60061	64132
8939.41	238.60	72.9	76.4	63946	66995
9330.46	228.60	75.7	78.3	67504	69846
9757.29	218.60	78.2	80.1	71126	72846
10225.04	208.60	80.3	81.7	74455	75755
10739.89	198.60	82.1	83.2	77720	78708
11309.34	188.60	83.8	84.5	80949	81671

EK - 7 (Devam)Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programından N=40x40x40) (Şekil 4.1 İçin)

11942.57	178.60	85.9	86.4	85780	86221
12650.90	168.60	87.8	88.1	90514	90805
13448.57	158.60	89.5	89.7	95614	95790
14353.58	148.60	90.9	91.0	100276	100379
15389.20	138.60	91.6	91.7	103148	103214
16585.87	128.60	92.5	92.5	107038	107083
17984.34	118.60	93.5	93.5	112439	112465
19640.35	108.60	94.4	94.4	117942	117955
21632.28	98.60	95.0	95.0	122549	122559
24073.84	88.60	95.5	95.5	127095	127103
27136.67	78.60	97.0	97.0	146429	146429
31092.45	68.60	98.8	98.8	173802	173802
35430.94	60.20	100.0	100.0	196800	196800

EK – 8 Section Programı İçin Veri Dosyaları (40x40x40)

a) ISECT1 için;

40 , 1 , 1

60.2 , 328.6, 10.0 , 60.2

21

b) ISECT2 için;

40 , 1 , 2

60.2, 328.60, 10.0 , 60.2

12

c) ISECT3 için;

40 , 1 , 3

60.2, 328.60, 10.0 , 60.2

0.1, 1

d)ISECT4 (ELIPS1) için;

40 , 1 , 4

60.2, 328.6, 10.0 , 60.2

1.0,-2.0,1.0,0.0,1.0

e)ISECT4 (ELIPS2) için;

40, 1, 4

60.2, 328.6, 10, 60.2

1.0, -2.0, 1.0, 0.0, 2.0

0.7

f)ISECT4 (ELIPS3) için;

40, 1, 4

60.2, 328.6, 10, 60.2

1.0, -2.0, 1.0, 0.0, 3.0

0.7

EK – 9 Bilgisayar Çıktısı (Section Programından N=40x40x40) (Şekil 4.6 için)

3-D NON-SEGREGATED NETWORK

SIZE = 40

TOTAL NUMBER OF PORES = 196800

PLANE OF EQUATION :

$1.00 * X + -2.00 * Y + 1.00 * Z = 0.00$

CUTTING PORES OF A RANDOMIZED CUBIC NETWORK

DATA FROM DIAVOL & CORDNAT HAVE BEEN READ

AVERAGE PORE LENGTH = 0.06 MICROMETERS

MINIMUM DIAMETER PENETRATED = 60.2 ANG

EQUIVALENT TO 100.0 % OF THE TOTAL PORE VOLUME

EK – 9 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Section Programından N=40x40x40) (Şekil 4.6 için)

NUMBER OF PORES SECTIONED = 3199

INTERVAL 1 FROM	60.20 TO	70.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	419
INTERVAL 2 FROM	70.20 TO	80.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	382
INTERVAL 3 FROM	80.20 TO	90.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	338
INTERVAL 4 FROM	90.20 TO	100.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	90
INTERVAL 5 FROM	100.20 TO	110.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	79
INTERVAL 6 FROM	110.20 TO	120.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	80
INTERVAL 7 FROM	120.20 TO	130.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	91
INTERVAL 8 FROM	130.20 TO	140.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	70
INTERVAL 9 FROM	140.20 TO	150.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	40
INTERVAL 10 FROM	150.20 TO	160.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	71
INTERVAL 11 FROM	160.20 TO	170.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	67
INTERVAL 12 FROM	170.20 TO	180.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	67

EK – 9 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Section Programından N=40x40x40) (Şekil 4.6 için)

INTERVAL 13	FROM	180.20	TO	190.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	81
INTERVAL 14	FROM	190.20	TO	200.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	52
INTERVAL 15	FROM	200.20	TO	210.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	40
INTERVAL 16	FROM	210.20	TO	220.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	38
INTERVAL 17	FROM	220.20	TO	230.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	43
INTERVAL 18	FROM	230.20	TO	240.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	53
INTERVAL 19	FROM	240.20	TO	250.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	39
INTERVAL 20	FROM	250.20	TO	260.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	54
INTERVAL 21	FROM	260.20	TO	270.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	51
INTERVAL 22	FROM	270.20	TO	280.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	67
INTERVAL 23	FROM	280.20	TO	290.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	44
INTERVAL 24	FROM	290.20	TO	300.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	45
INTERVAL 25	FROM	300.20	TO	310.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	47
INTERVAL 26	FROM	310.20	TO	328.60	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	751

EK – 9 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Section Programından N=40x40x40) (Şekil 4.6 için)

INTERVAL 13	FROM	180.20	TO	190.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	81
INTERVAL 14	FROM	190.20	TO	200.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	52
INTERVAL 15	FROM	200.20	TO	210.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	40
INTERVAL 16	FROM	210.20	TO	220.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	38
INTERVAL 17	FROM	220.20	TO	230.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	43
INTERVAL 18	FROM	230.20	TO	240.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	53
INTERVAL 19	FROM	240.20	TO	250.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	39
INTERVAL 20	FROM	250.20	TO	260.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	54
INTERVAL 21	FROM	260.20	TO	270.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	51
INTERVAL 22	FROM	270.20	TO	280.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	67
INTERVAL 23	FROM	280.20	TO	290.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	44
INTERVAL 24	FROM	290.20	TO	300.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	45
INTERVAL 25	FROM	300.20	TO	310.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	47
INTERVAL 26	FROM	310.20	TO	328.60	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	751

EK – 10 Veri Dosyası (Kalinet Programı N=50x50x50 için)

2 , 1 , 2

0.1

60.2, 328.6 , 60.2, 10.0 , 50 ,0 , 0.30, 0.01

50

11

130000, 19193 , 18280, 10054, 4569, 4569,

18280, 16223, 33360, 41128, 86844

60.2, 85.,107., 124., 134., 144., 151.,

170., 188., 247., 314.4, 328.6

2 , 2 , 2

EK – 11 Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programı N=50x50x50 İçin) (Şekil 4.1 İçin)

NETWORK SIZE 50X50X50

NON-SEGREGATED MODEL

AND CONTAINING 382500 PORES

IRREGULAR CUBIC NETWORK WITH PORES
HAVING DIAMETERS INDEPENDANT OF THEIR LENGTHS

FITTING VERSION

INTERVAL 1 FROM	60.20 TO	85.00	NUMBER OF SEGMENTS	=130000
INTERVAL 2 FROM	85.00 TO	107.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 19193
INTERVAL 3 FROM	110.00 TO	124.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 18280
INTERVAL 4 FROM	124.00 TO	134.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 10054
INTERVAL 5 FROM	134.00 TO	144.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 4569
INTERVAL 6 FROM	144.00 TO	151.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 4569

EK -11 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Kalinet Programı N=50x50x50 İçin) (Şekil 4.1 için)

FITTING VERSION

INTERVAL 7 FROM	151.00 TO	170.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 18280
INTERVAL 8 FROM	170.00 TO	188.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 16223
INTERVAL 9 FROM	188.00 TO	247.00	NUMBER OF SEGMENTS	= 33360
INTERVAL 10 FROM	247.00 TO	314.40	NUMBER OF SEGMENTS	= 41128
INTERVAL 11 FROM	314.40 TO	328.60	NUMBER OF SEGMENTS	= 86844

REQUIRED POROSITY = 0.300

CALCULATED POROSITY = 0.302

AVERAGE PORE LENGTH = 0.06 MICROMETERS

SUCCESSFUL ALLOCATION

EK -11 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Kalınet Programı N=50x50x50 İçin) (Şekil 4.1 için)

PENETRATION DATA

PRES.(A) PSIA	DIAMETER A	DIMENSIONLESS T.D.N.M.	VOL. P.B.M.	PENETRATED PORES	PENETRABLE PORES
6491.00	328.60	0.0	0.0	0	1
6694.73	318.60	4.3	39.4	6681	61303
6911.67	308.60	19.4	57.3	30605	90364
7143.14	298.60	32.7	60.6	50900	96274
7390.65	288.60	45.8	63.8	72481	102279
7655.93	278.60	54.2	66.8	87902	108410
7940.96	268.60	60.8	69.7	100051	114595
8248.04	258.60	66.0	72.3	110324	120784
8579.82	248.60	70.3	74.7	119323	126932

EK -11 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Kalınet Programı N=50x50x50 İçin) (Şekil 4.1 için)

8939.41	238.60	73.6	76.9	127189	132742
9330.46	228.60	76.4	78.7	134223	138381
9757.29	218.60	78.7	80.5	140901	144056
10225.04	208.60	80.7	82.1	147259	149669
10739.89	198.60	82.5	83.5	153500	155280
11309.34	188.60	84.1	84.8	159640	160976
11942.57	178.60	86.2	86.6	168873	169718
12650.90	168.60	88.0	88.3	178341	178876
13448.57	158.60	89.8	89.9	188273	188599
14353.58	148.60	91.1	91.1	197208	197397
15389.20	138.60	91.8	91.8	202733	202880
16585.87	128.60	92.7	92.7	210255	210355
17984.34	118.60	93.7	93.7	222811	220867
19640.35	108.60	94.5	94.5	231512	231542

EK -11 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Kalınet Programı N=50x50x50 İçin) (Şekil 4.1 için)

21632.28	98.60	95.1	95.1	240609	240625
24073.84	88.60	95.6	95.6	249335	249346
27136.67	78.60	97.1	97.1	286241	286241
31092.45	68.60	98.9	98.9	338607	338607
35430.94	60.20	100.0	100.0	382500	382500

EK – 12 Section Programi İçin Veri Dosyalari (50x50x50)

a) ISECT1 için;

50 , 1 , 1

60.2 , 328.6, 10.0 , 60.2

21

b) ISECT2 için;

50 , 1 , 2

60.2, 328.60, 10.0 , 60.2

12

c) ISECT3 için;

50 , 1 , 3

60.2, 328.60, 10.0 , 60.2

0.1, 1

d)ISECT4 (ELIPS1) için;

50 , 1 , 4

60.2, 328.6, 10.0 , 60.2

1.0,-2.0,1.0,0.0,1.0

e)ISECT4 (ELIPS2) için;

50, 1, 4

60.2, 328.6, 10, 60.2

1.0, -2.0, 1.0, 0.0, 2.0

0.7

f)ISECT4 (ELIPS3) için;

50, 1, 4

60.2, 328.6, 10, 60.2

1.0, -2.0, 1.0, 0.0, 3.0

0.7

EK – 13 Bilgisayar Çıktısı (Section Programından) (Şekil 4.7 için)

3-D NON-SEGREGATED NETWORK

SIZE = 50

TOTAL NUMBER OF PORES = 382500

PLANE OF EQUATION :

$1.00 * X + -2.00 * Y + 1.00 * Z = 0.00$

CUTTING PORES OF A RANDOMIZED CUBIC NETWORK

DATA FROM DIAVOL & CORDNAT HAVE BEEN READ

AVERAGE PORE LENGTH = 0.06 MICROMETERS

MINIMUM DIAMETER PENETRATED = 60.2 ANG

EQUIVALENT TO 100.0 % OF THE TOTAL PORE VOLUME

NUMBER OF PORES SECTIONED = 4993

INTERVAL 1 FROM	60.20 TO	70.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	616
INTERVAL 2 FROM	70.20 TO	80.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	610
INTERVAL 3 FROM	80.20 TO	90.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	495

EK - 13 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Section Programından) (Şekil 4.7 için)

INTERVAL 4 FROM	90.20 TO	100.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	105
INTERVAL 5 FROM	100.20 TO	110.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	115
INTERVAL 6 FROM	110.20 TO	120.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	188
INTERVAL 7 FROM	120.20 TO	130.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	154
INTERVAL 8 FROM	130.20 TO	140.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	88
INTERVAL 9 FROM	140.20 TO	150.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	70
INTERVAL 10 FROM	150.20 TO	160.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	132
INTERVAL 11 FROM	160.20 TO	170.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	125
INTERVAL 12 FROM	170.20 TO	180.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	105
INTERVAL 13 FROM	180.20 TO	190.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	113
INTERVAL 14 FROM	190.20 TO	200.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	68
INTERVAL 15 FROM	200.20 TO	210.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	73
INTERVAL 16 FROM	210.20 TO	220.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	76

EK - 13 (Devam) Bilgisayar Çıktısı (Section Programından) (Şekil 4.7 için)

INTERVAL 17	FROM	220.20	TO	230.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	84
INTERVAL 18	FROM	230.20	TO	240.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	74
INTERVAL 19	FROM	240.20	TO	250.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	72
INTERVAL 20	FROM	250.20	TO	260.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	81
INTERVAL 21	FROM	260.20	TO	270.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	90
INTERVAL 22	FROM	270.20	TO	280.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	89
INTERVAL 23	FROM	280.20	TO	290.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	57
INTERVAL 24	FROM	290.20	TO	300.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	75
INTERVAL 25	FROM	300.20	TO	310.20	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	64
INTERVAL 26	FROM	310.20	TO	328.60	NUMBER OF SEGMENTS SECTIONED	=	1174

EK – 14 Amberlit – 35 katalizörünün civa porozimetresi verileri

BASINÇ (atm)	BASINÇ (psia)	ÇAP (Å)	INTRUDED VOL. Hg cc/g
441,56	6491,00	328,6	0,0000
468,43	6886,00	329,6	0,0477
497,27	7310,00	291,8	0,1153
527,95	7761,00	274,8	0,1560
559,79	8229,00	259,2	0,1750
593,13	8719,00	244,6	0,1894
640,95	9422,00	226,4	0,2014
690,68	10153,00	210,2	0,2120
766,39	11266,00	189,4	0,2231
855,78	12580,00	169,6	0,2315
972,85	14301,00	149,2	0,2403
1224,90	18006,00	118,4	0,2491
1717,34	25245,00	84,6	0,2583
2408,84	35410,00	60,20	0,2662

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ŞİMŞEK, Veli
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 25.11.1976 Darende
 Telefon : 0 (312) 480 29 47
 e-mail : ilevsimsek@hotmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Kimya Mühendisliği Bölümü	2008
Lisans Gazi	S.D.Üniversitesi/Çevre Mühendisliği Bölümü	2001
Önlisans	Akdeniz Üniversitesi M.S.O Tıbbi Laborant	1997
Lise	Malatya Lisesi	1994

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2006	Lidea Eğitim ve Danışmanlık	Danışman
2004 – 2005	American Life Hayat Sigorta A.Ş	Sale Agent
1999 – 2000	İller Bankası	Stajer
1998 – 1999	Çevre Bakanlığı	Stajer

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Tenis, Resim yapmak, Kitap okumak, Basketbol, Yüzmek