

65623/PR-

1998-7
✓



TÜRKİYE BİLİMSEL VE
TEKNİK ARAŞTIRMA KURUMU

THE SCIENTIFIC AND TECHNICAL
RESEARCH COUNCIL OF TURKEY

65623

KİMYA MÜHENDİSLİĞİ PROSES TASARIMI
ÖN BİLGİ TOPLAMA, DEPOLAMA ve
KULLANIMINA YÖNELİK
VERİ TABANI (DATABANK)
YAZILIM PAKETİ

PROJE NO : KTÇAG-118

Makina, Kimyasal Teknolojiler, Malzeme ve İmalat Sistemleri
Araştırma Grubu

Mechanical Engineering, Chemical Technologies, Material
Sciences and Manufacturing Systems Research Grant
Committee

65623

**KİMYA MÜHENDİSLİĞİ PROSES TASARIMI
ÖN BİLGİ TOPLAMA, DEPOLAMA ve
KULLANIMINA YÖNELİK
VERİ TABANI (DATABANK)
YAZILIM PAKETİ**

PROJE NO : KTÇAG-118

**PROF.DR. BİLGİN KISAKÜREK
Y.DOÇ.DR. AKİF ŞENELT (AÜFF)
DR. FUAT İNALAKDERE (AÜFF)
FARİBA KARBASI**

**HAZİRAN 1998
ANKARA**

ÖNSÖZ

Kimya mühendisliği proses tasarımı alanında gerekli olan ve çok karmaşık ve değişik yönlü mühendislik hesaplarını bilgisayar yardımı ile çözmek, yeni teknolojiye yönelik proses seçimini, ve bu seçimin gerektirdiği ısı ve kütle denge hesapları ile, çeşitli kimyasal maddelerin ve bu maddelerden elde edilebilecek yeni ürünlerin tasarımda kullanılacak dizayn özelliklerini bir data-bank biçiminde programlamak ilgili tasarım mühendisinin yapması gereken işlevlerin en önemlilerinden birisidir.

Proses dizaynı için gerekli olan işlemlerin bilgisayar-destekli bir yazılım paketi biçiminde tasarım mühendisinin hizmetine sunulması, eldeki mevcut bilgilerin daha verimli olarak kullanılması, verimlilik açısından büyük tasarruf sağlayacaktır. Kullanıcı istediği anda kendi tecrübesi ile sisteme müdahale edebilecek, istediği değişiklikleri anında yapabilecek ve bunların sonucunu grafiksel olarak izleme imkanına sahip olabilecektir.

Kimyasal maddeler hakkında çeşitli dizayn bilgilerini içeren ve bu bilgileri proses tasarımcılarının kullandıkları çeşitli bilgisayar paketlerine direk olarak entegre edilebilen ve içeriği kullanıcıya açık olan yazılımlar şu anda ilgili sahada hemen hemen yok denecek kadar azdır.

Bu çalışmada bir '**Elektronik El Kitabı**' hazırlanmıştır. Bu kitapta eldeki verilerin ve diğer tasarım bilgilerinin databank yazılımı açısından gerekli ön organizasyonu yapılmış ve proses tasarım mühendisinin pratik kullanımına sunulmuştur. Ön bilgilerin depolandığı ve istenildiği anda tasarımcının önüne serilebileceği bir biçimde veri tabanı geliştirilmiştir. Bunun neticesinde, bu sahada yurdumuzda yavaş yavaş da olsa faaliyet gösteren bilgisayar-destekli proses tasarım grupları için yeni bir bilgi kaynağı oluşturulmuştur. Bu yaklaşım memleketimizde bu konuda yapılan ilk ön çalışma olarak mütalaa edilebilir.

Bu çalışma Türkiye Bilimsel ve Teknik Araştırma Kurumu ve Orta Doğu Teknik Üniversitesi' nin destekleri ile gerçekleştirilmiştir. Bizden maddi ve manevi desteği esirgemeyen her iki kuruma teşekkürlerimizi sunarız.

Proje Yöneticisi
Prof.Dr. Bilgin Kısakürek

ÖZ

KİMYA MÜHENDİSLİĞİ PROSES TASARIMI ÖN BİLGİ TOPLAMA, DEPOLAMA VE KULLANIMINA YÖNELİK VERİ TABANI (DATABANK) YAZILIM PAKETİ

Modern kimya mühendisliğinin en önemli dallarından biri olan proses tasarımı alanında son on yılda bilgisayar yardımı ile çok karmaşık ve değişik yönlü mühendislik hesaplarının çözümünde büyük ilerlemeler kaydedilmiş, yeni benzetişim yöntemleri geliştirilmiştir. Bu tür yeniliklerin daha verimli bir biçimde kullanılabilmesi için tasarım mühendisine her bakımdan kolaylık sağlayan düzgün yazılmış, modern proses tasarımına dönük ve bilgisayar dili açısından uygun bir biçimde programlanmış bilgisayar yardımcı proses tasarım ve benzetişim entegre paketlerine gereksinim vardır.

Proses tasarımı çok yönlü ve yaklaşımı bilinçli bir organizasyonu gerektirir. Memleketimizde bu türde bilgisayar destekli bir uygulamaya yeni yeni başlanmaktadır. Geliştirilmeye çalıştırılan bu entegre yazılımda; değişik proses seçimi yaklaşımları, ısı ve kütle denge hesapları, maliyet ve işletme analizleri ile yurdumuzdaki halen rafineri ve petrokimya tesislerinde kullanılan ve üretilen kimyasal maddelerin ve bu maddelerden elde edilebilecek yeni ürünlerin proses tasarımı için gerekli olan kimyasal özellikleri bir databank biçiminde sunulmaya çalışılmıştır.

Bu çalışma, bu tür bilgileri ve yaklaşım metodlarını bünyesinde bulunduran ve yurt dışımda son on senedir kullanılan diğer özel benzetişim programların da yardımı ile, geliştirilen bu yazılım paketi kimya mühendisliği proses tasarım bilgilerini ülkemizde yeni gelişmeye başlayan bilgisayar destekli mevcut tasarım gruplarının hizmetine sokan ön bir çalışma biçiminde değerlendirilmelidir.

Araştırmada bilgisayar destekli proses tasarımında gerekli olan ve yepyeni bir yaklaşım olan 'Elektronik El Kitabı' nın ön bilgileri elde edilmiştir. Bu el kitabının hazırlanmasında, öncelikle bir işletmenin hayati unsuru olan ve sürekli gelişen çağdaş yöntemleri izlemek isteyen tüm Üst Düzey Yöneticilerinin gereksinimleri de mümkün olduğu biçimde dikkate alınmıştır.

Anahtar Kelimeler: Elektronik El Kitabı, Proses Tasarımı.

ABSTRACT

COMPUTER-AIDED DATABANK SOFTWARE FOR PRELIMINARY DESIGN INFORMATION, STORAGE AND USAGE IN CHEMICAL ENGINEERING PROCESS DESIGN

In the last decade, great improvements are made in carefully designed and perfectly computerized process design and calculations. Very important new approaches are made in this area. It is a known fact that a well-documented, well-designed, and perfect programmed computer-aided process design packages are a must for the process engineer.

In order to direct this process design development into a logical organization, an efficient route with the help of computer-aided entegrated simulation packages is essential. This kind of new approach is being preferred for the first time in our country. The projected integrated computer-aided design software package contains various new process selection methods, heat and mass balance calculations, cost estimation and operational expense analysis, and predicts and use the chemical design properties of various materials that are commonly available in refinery and petrochemical industry.

In this study, with the help of the available process design packages used in developed countries, the prepared entegrated databank can easily be used in the pioneering design study groups that are newly developing in our country.

These chemical properties essential for computer-aided design study are prepared in the form of an electronic databank. This databank will help the process design engineer in the initial startup study for his chemical engineering equipment design. The design methodology is presented in such a way that all the necessary requirements of the project manager are somewhat included in a simple and eqaily understandable manner.

Key Words: Electronic Databank, Process Design.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
Önsöz	i
Öz	ii
Abstract	iii
Tablo ve Şekil Listesi	iv
1. BÖLÜM. GİRİŞ	
Tablo 1.1. Tanımlar	1
Tablo 1.2. Proses Simülasyonun Faydaları	1
Tablo 1.3. Proses Simülasyonun Getirdiği Problemler	2
Tablo 1.4. Simülasyon Prensipleri	3
Tablo 1.5. Uyulması Gereken Kurallar	3
Tablo 1.6. Cevaplandırılması Gerekli Sorular	4
Tablo 1.7. Proses Tasarım Akım Şeması	5
Şekil 1.8.Çalışma Takvimi	5
2. BÖLÜM. ELEKTRONİK EL KİTABI	
ŞEKİL 2.1. Amaç	7
ŞEKİL 2.2. Elektronik El Kitabının Sağlayacağı Katkılar	7
2.3. Simülasyon Yöntemi	8
2.4. Termodinamik Veri Tabanı	9
2.5. Temel İşlemler Veri Tabanı	10
3. BÖLÜM. ENDÜSTRİYEL KOMPONENT DATABANK VERİLERİ	
3.1. Komponent Databank Veri Tabanı	13
3.2. Veri Tabanı Kullanımı	15
4. BÖLÜM. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	
4.1. Tamamlanan Fortran Modülleri	17
4.2. Tamamlanan Databank Fiziksel Veri Modülleri	18
4.3. Modüllerin Entegrasyonu	19
4.4. Bir Rafineri Tasarım Uygulaması	20
4.5. Öneriler	21
REFERANSLAR	36
EKLER	
Ek 1. Temel İşlem Modülleri	37
Ek 2. Temel İşlem Modülü İçin Gerekli Databank Veri Tarama Programı	40
Ek 3. Databank Veri Seçim Programı	42
Ek 4. Kırıkkale Petrol Rafinerisi. Uygulama Deneyi	47

TABLO LİSTESİ

	Sayfa
Tablo 1. Proses Tasarım Akım Şeması	6
Tablo 2. Temel İşlemler Modülü	11
Tablo 3. Sıvı-Gaz Faz Denge Hesaplama Modülü	11
Tablo 4. Proses Tasarım. Komponent Madde Özellikleri	14
Tablo 5. Endüstriyel Genel Maddelerin Kısa Dökümü	21
Tablo 6. Endüstriyel Genel Maddelerin Ayrıntılı Dökümü	22
Tablo 7. Elektronik Komponent Verileri. Grup 1	25
Tablo 8. Elektronik Komponent Verileri. Grup 2	26
Tablo 9. Elektronik Komponent Verileri. Grup 3	27
Tablo 10. Elektronik Komponent Verileri. Grup 4	30
Tablo 11. Elektronik Komponent Verileri. Grup 5	31
Tablo E1. Temel İşlem Modül Tanımları	37
Tablo E2. Databank Veri Tarama Programı	40
Tablo E3. Databank Veri Seçim Programı	42

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 1. Distilasyon Kolon Sıvı-Gaz Denge Akım Şeması	16
---	----

1. BÖLÜM

GİRİŞ

Kimya mühendisliği proses tasarımı alanında gerekli olan ve çok karmaşık ve değişik yönlü mühendislik hesaplarını bilgisayar yardımı ile çözmek, yeni teknolojiye yönelik proses seçimini, ve bu seçimin gerektirdiği ısı ve kütle denge hesapları ile, çeşitli kimyasal maddelerin ve bu maddelerden elde edilebilecek yeni ürünlerin tasarımda kullanılacak dizayn özelliklerini bir databank biçiminde programlayarak tasarım mühendisi için bir "Elektronik El Kitabı" hazırlamak bu çalışmanın amacını oluşturur.

1.1. Tanımlar

Bir fabrikanın veya belli bir ünitesinin ısı ve kütle denklemlerinin bilgisayar yardımı ile elde edilmesi 'Proses Simülasyonu' veya 'Proses Akım Şeması' diye tanımlanır. Kullanılan bilgisayar programına 'Proses Simülatör' denir. Bu programın basit bir şekilde yazılması, tek veya birbirleri ile seri/paralel biçimde bağlanmış olan proses ünitelerini rahatlıkla tanımlayabilmesi, ve mühendislik hesaplarını hızlı bir biçimde gerçekleştirmesi gerekir.

1.2. Proses Simülasyonun Faydaları

Planlanan bu araştırmada proses tasarımı için tamamen yeni yazılım tekniklerine göre geliştirilen bu entegre elektronik el kitabının avantajlarını şu şekilde sıralamak mümkündür.

- Çok hızlı ve hatasız hesaplama. Eskiden aylarca sürebilen proses tasarım hesaplamaları bilgisayar yardımı ile çok kısa bir zaman birimi içinde gerçekleşir.
- Kullanılacak veri tabanı yazılımı ile tasarım için gerekli olan bilgilerin anında hesapların içine taşınabilmesi. Tasarım mühendislerinin önüne sınırsız genişlikte ve çeşitli özellikteki bilgiler anında database programının yardımı ile getirilebilir, sonuçlar mükemmel bir döküman şeklinde saklanır.
- Dünya standartlarına uygun tasarım modeli geliştirilir. Elde edilen model mevcut diğer modeller ile kolaylıkla mukayese edilebilir.

- Proses tasarımında çok fazla ortaya çıkan ve uzun kütle ve ısı transferi hesapları gerektiren geri-akım problemlerinin fonksiyonel bir biçimde ele alınabilir.
- Tasarım mühendisine 3-boyutlu düşünme olanağı verir. Gelişmiş 3-boyutlu grafik paketleri bu çalışmada hazırlanan elektronik el kitabının içine kolaylıkla entegre edilir.
- Bilgisayarlar arasındaki ağı kullanarak mevcut tasarımın başka kişiler tarafından da aynı anda kullanılabilmesi veya modife edilebilmesine olanak tanır.

1.3. Proses Simülasyonun Getirdiği Problemler

Bu çalışmada, yılda yaklaşık 150 milyar dolar olan kimya sanayi fabrika proses maliyetlerinin gene yaklaşık 25 milyar dolarlık proses tasarım harcamaları bu tasarımlarda kullanabilecek mevcut bilgisayar-yardımlı simülasyon paketlerinin sınıflandırılması ve kısa bir tanıtımı yapılmış (Leesley, 1982), ve bu paketler için geçerli olan ve yurdumuz rafineri ve petrokimya sanayinde kullanılan çok çeşitli kimyasal maddeler için elektronik bir veri tabanının ön bilgileri oluşturulmuştur.

Yurt dışında gelişmiş teknolojilere sahip ülkelerde bile, tasarım paketlerinin yukarıda sayılan sayısız avantajlarına rağmen, proses tasarımına direk olarak katkıda bulunması halen tam olarak gerçekleşmiş değildir. Mevcut paketlerin kullanımı %10 gibi düşük bir seviye kalmıştır. Bunu nedeni olarak,

- Proses tasarımında konservatif düşünceden uzaklaşamaması. Endüstride yeni bir proses tasarımının gerçekleştirilmesi için 3:1 oranında müsbet gelişmelerin beklentisi vardır. Bu rakamın altında seyreden yeni bir ufuk çizgisi proje yöneticisi tarafından realiteye konamaz.
- Geliştirilen yeni tasarım yöntemlerinin şüphe ile karşılanması.
- Tasarımda yapılan varsayımların mevcudiyetinin tam olarak bilinmemesi veya bu varsayımların kullanılıp kullanılmadığı durumlarının yeterince açıklık kazanmaması.
- Genel olarak mevcut tasarım paketleri çok özel durumlarda başarılı olurlar. Fakat prosesin çalışma şartlarında oluşan değişiklikler karşısında bu paketler yetersiz kalabilir. Randıman alınabilmesi için paket üzerinde çok fazla maliyeti arttırıcı modifikasyonlar gerekebilir.

1.4. Simülasyon Prensipleri

Basit bir proses simülasyon yazılımında uygulanan programlama yaklaşımı şöyle özetlenir (Aspen, 1994);

- Proses seçimi,
- Başlangıç kütle-denge hesapları,
- Ayrıntılı ısı ve kütle denge hesapları,
- Doğrusal olmayan denklemler için çözüm önerileri,
- Karışımların termodinamik özelliklerini veri tabanı biçiminde depolama,
- Özelliği bilinmeyen maddeler için çeşitli varsayım metodları kullanma, ve,
- Proses optimizasyonu.

Isı ve kütle denge hesapları iki etapta yapılır. Birinci etapta, tek bir ünite için denge hesapları elde edilir ve tasarım bilgi akım şeması yaratılır. İkinci etapta ise, ayrıntılı hesaplamalara girilir ve icab eden durumlarda da pratik olan kısa-hesaplama yöntemi kullanılır.

Termodinamik veri tabanının yaratılmasında; (a) Molekül ağırlıklar, (b) Kritik özellikler, (c) Chao-Seader verileri, (d) API ideal gaz entalpi verileri, (e) Antoine katsayıları, ve (f) Kübik entalpi katsayılarının kullanılması tercih nedenidir. Gereken durumlarda yoğunluk, viskozite, yüzey gerilimi, ısı kapasitesi, ve termal kondaktivite değerleri elektronik el kitabının veri tabanına eklenir.

1.5. Uyulması Gereken Kurallar

Elektronik el kitabının hazırlanması çeşitli kuralların göstereceği metodik yaklaşım altında olmalıdır. Bu kurallar şu şekilde sıralanabilir.

- Ayırımlarda geniş aralıklı ayırma faktörleri tercih edilmelidir. Örneğin, distilasyonda kısmi uçuculuk faktörü gibi.
- Yüksek ve alçak sıcaklık ve basınç değerlerinden mümkün olduğu kadar uzak durulmalıdır.
- Komponent gruplandırmaları minimum ayırıcı sayısı elde edilecek şekilde yapılmalıdır.

- Ürünlerin kirlilik oranları minimal düzeyde tutulmalı ve termal değişiklerin konsant-rasyonlara etkileri önlenmelidir.
- Ürünün piyasa değeri düşük ise maliyeti ve işletimi yüksek bir proses kesinlikle tercih edilmemelidir.
- Katı-fazlı sistemlerden kaçınılmalıdır.
- Denge farkı prensibi üzerine kurulmuş sistemler reaksiyon hız farkı üzerine kurulmuş sistemlere tercih nedenidir.
- Enerji ayırım elemanları kütle ayırım elemanlarına tercih nedenidir.
- Pahalı ayırım elemanlarından uzak durulmalıdır.

Yukarıda özetlenen kuralların ışığında yazılım paketi şu özellikleri de bünyesinde bulundurmalıdır.

- Termodinamik veriler çok yönlü ve güvenilir olmalıdır.
- Proses verilerine çabucak ulaşılabilmelidir.
- Hızlı ve doğru hesaplamalara olanak sağladığı için pakette çok sayıda temel işlemler modülü bulunmalıdır. Modüller arasında entegra bağlantı olmalıdır.
- Hesaplama yöntemleri sonuca çabucak ulaşır biçimde geliştirilmelidir.
- Proses çıktıları temiz ve anlaşılır olmalı, mümkünse güzel çizimler ile desteklenmelidir.
- Tasarım mühendisi pakete her zaman müdahale edebilmeli, veri tabanındaki sonucu görebilmeli, hesapları yakından takip edebilmeli ve program üzerinde istediği değişikliği yapabilmelidir.

1.6. Cevaplandırılması Gerekli Sorular

Geliştirilen paketin daha da mükemmel bir duruma dönüştürülmesi için şu sorulara yanıt vermesi gerekir (Perris, 1973).

- Sistemde bulunan suyu nasıl değerlendirilecektir. Suyun mevcudiyeti hesaplama yönteminde çeşitli modifikasyonlara nasıl neden olur?
- Hesaplarda hidrojen, karbon monoksit, karbon dioksit ve hidrojen sülfür ne gibi bir işleme tabi tutulacaktır?

- Hesaplama yöntemi sonuca hızlı bir biçimde ulaşacak şekilde nasıl yönlendirilecektir?
- Hesaplarda sonuca ulaşamadığı durumlarda ne yapılacaktır?

1.7. Proses Tasarım Akım Şeması

Bu araştırmada geliştirilmeye gayret edilen Elektronik El Kitabı en gelişmiş durumunda Tablo 1. de özetlenen tüm bilgileri tasarım mühendisine sunma amacını taşır. Diğer taraftan bu bilgilerin bu kadar kapsamlı olması aynı zamanda kullanıcı açısından da irdeleme problemleri yaratacağı aşikardır. Ayrıca bu kadar kapsamlı bilgilerin tek bir pakete sığdırılması pratik olarak ve zaman açısından mümkün değildir.

Daha önce de belirtildiği gibi, planlanan bu araştırmada proses tasarımı için tamamen yeni yazılım tekniklerine göre geliştirilecek bu entegre yazılımın çalışma etaplarını şu şekilde sıralamak mümkündür.

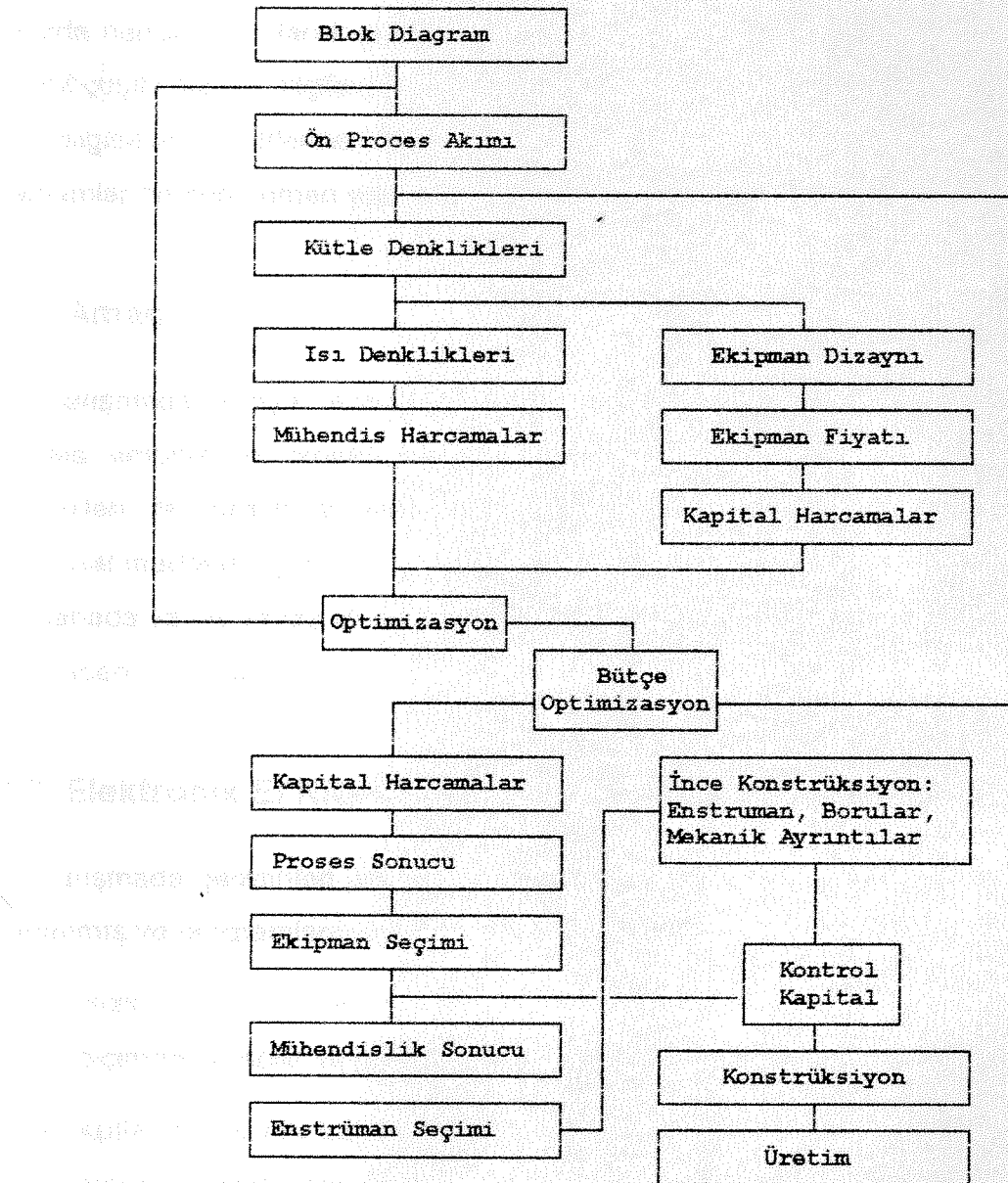
- Çok hızlı ve hatasız hesaplama yöntemleri geliştirilmiştir.
- Kullanılacak veri tabanı yazılımı ile tasarım için gerekli olan bilgilerin anında bu hesapların içine taşınabilmesi ve kullanılabilmesine çalışılmıştır.
- Dünya standartlarına uygun kimya mühendisliği proses tasarım modelinin ön bir çalışma protip modeli çıkarılmıştır.
- Proses tasarımında çok fazla ortaya çıkan ve uzun kütle ve ısı transferi hesapları gerektiren geri-akım problemlerinin fonksiyonel bir biçimde ele alınması gerekirken bu konuda yeterli bir ilerleme kaydedilmemiştir.
- Bilgisayarlar arasındaki ağı kullanarak mevcut tasarımın başka kişiler tarafından da aynı anda kullanılabilmesine olanak sağlanmıştır.

1.8. Çalışma Takvimi

Bu araştırmada şu ana kadar yapılabilen etaplar tabloda işaretlenen ilk üç blok kısım şeklinde gösterilmiştir. Önümüzdeki yıllarda diğer kısımlara da bölüm bölüm girilecektir. Önerilen çalışma takvimi şu şekilde idi. Bu takvime mümkün mertebe uyum sağlanmış, sadece son kısım için 6 aylık daha fazla zaman harcanmıştır.

1. Ön yazılımın geliştirilmesi - 6 ay
2. Yardımcı paketlerin sınıflandırılması, satın alınması - 12 ay
3. Fortran programı yazılımı - 4 ay
4. Veri tabanı için kütüphane çalışması - ilk 6 ay
5. Veri tabanının programa entegre edilmesi - son 5 ay
6. Sonuçların rafineri ve petrokimya tesislerinde denenmesi - son 2 ay.

TABLO 1. Proses Tasarım Akım Şeması



2. BÖLÜM

ELEKTRONİK EL KİTABI

Daha önceki bölümde de belirtildiği gibi, yılda yaklaşık 150 milyar dolar olan kimya sanayi fabrika proses maliyetlerinin gene yaklaşık 25 milyar dolarlık proses tasarım harcamalarının büyük bir bölümü son on senedir yavaş yavaş bilgisayar-yardımlı simülasyon paketlerinin yardımı veya yönlendirmesi üzerine yoğunlaşmaktadır. Bu tür yaklaşım yurdumuzda henüz tam olarak gelişme eğilimine girmemiştir. Şu anda kimyasal maddeler hakkında çeşitli dizayn bilgilerini içeren ve bu bilgileri proses tasarımcılarının kullandıkları çeşitli bilgisayar paketlerine direk olarak entegre edilebilen ve içeriği kullanıcıya açık olan yazılımlar hemen hemen yok denecek kadar azdır.

2.1. Amaç

Bu çalışmada, kimya mühendisliği proses tasarımında kullanılabilecek proses dizayn, proses simülasyon, proses kontrol, ve proses optimizasyon paketlere kolayca entegre edilebilen ve yurdumuz petrol rafineri ve petrokimya sanayinde kullanılan çok çeşitli kimyasal maddeler için elektronik bir veri tabanının ön bilgileri oluşturulmuştur. Bu sayede, bu sahada yavaş yavaş da olsa faaliyet gösteren proses tasarım grupları için bir elektronik veri tabanı el kitabı hazırlanma sürecine girilmiştir.

2.2. Elektronik El Kitabının Sağlayacağı Katkılar

Bu çalışmada geliştirilen entegre yazılım paketi şu katkıları sağlamaya yönelik olarak tasarlanmış ve programlanmıştır.

- Hızlı ve hatasız hesaplama. Araştırmacı yaptığı tasarımın sonucunu çok çabuk bir biçimde görebilir ve gerekli değişiklikleri yazılım üzerinde anında yapabilir.
- Kullanılacak veri tabanı yazılımı ile tasarım için gerekli olan termodinamik ve diğer proses bilgileri anında yukarıda söz edilen hesapların içine taşınabilir.
- Bilgisayarlar arasındaki yerel ağ kullanılarak mevcut tasarım, şirketteki başka kişiler tarafından da aynı anda kullanılabilir ve mevcut 3-boyutlu grafik paketleri ile

entegrasyon sağlanır. Dolayısı ile tasarım klasik rakamsal çizgiden uzaklaşarak grafik ve şekillere yönelik modern bir hüviyet kazanır.

- Proses iş yöntemi sorularına, örneğin, maliyeti kısıtlayıcı ve kapasiteyi artırıcı mühendislik yaklaşımlarında ne gibi değişiklikler gerektiği veya besleme hattında yeni kompozisyon düzenlemeleri gibi, oldukça pratik cevaplar tasarım mühendisi tarafından el kitabının yardımı ile kolayca cevap verilebilir (UOP, 1993).

Bu araştırmada geliştirilmeye gayret edilen Elektronik El Kitabı' nın sağlayacağı katkılar en rasyonel bir biçimde zaman içinde değerlendirilmelidir. Şu ana kadar yapılanlar ileride son şeklini alacak olan yazılım paketinin (Biegler, 1997) sadece küçük bir protipidir. Bu araştırmada şu ana kadar Tablo 1c 'de işaretlenen kısım yapılabilmektedir. Önümüzdeki yıllarda diğer kısımlara da bölüm bölüm girilecektir.

2.3. Simülasyon Yöntemi

Çalışmanın ilk etabında basit simülasyon uygulamaları içeren ön bir yazılım hazırlanmıştır. İkinci etabında bu yazılıma kimyasal maddelerin dizayn özellikleri bir veri tabanı biçiminde eklenmiştir. Son etapta ise bu sahada mevcut olan diğer yardımcı simülasyon paketlerinin mevcut pakete optimal bir biçimde entegrasyonu için ön bulgular programının yazılımı gerçekleştirilmiştir. İleride yapılması planlanan son etapta ise proses tasarımında gerekli olan,

- Yeni teknolojilere yönelik ve optimizasyonu içeren (ASPEN, 1994),
- Değişik dizayn alternatiflerini anında kullanıcıya verebilen (Cooper, 1997),
- Fabrikanın değişik koşullarda çalışmasını inceleyen,
- Enerji tasarrufu ile ekonomik şartları getiren, ve,
- Kalite ve ürün miktarını arttıran,

faktörler hazırlanacak paketin kapsamı içine alınacaktır. Bu faktörlerin gerçekleşmesi için tasarımda şu mühendislik hesaplarına öncelik verilecektir.

- Fiziksel parametre hesapları ve modifikasyonları (Perris, 1973),
- Temel işlemler tasarımı (Franks, 1994),

- Yatışkın-durum ve dinamik-durum benzetişimleri,
- Proses modelleme ve kontrol,
- 3-boyutlu grafik gösterimi.

Mühendislik hesaplarında Fortran yazılım dili kullanılmıştır. Proje yöneticisinin bu konuda 30 seneyi aşkın derin bir programlama tecrübesi vardır. Ayrıca mikro bilgisayarlar için geçerli olan veri tabanı yaratma ve kullanma programları direk olarak yazılımın içine entegre edilmiş ve makro modüller yardımı ile Fortran programı ile paralel kullanılır hale getirilmiştir. Bu yaklaşım bu sahada ilk olarak denenmektedir.

Fortran yazılımda tasarlanan yaklaşım şöyle özetlenir.

- Proses seçimi,
- Ön kütle-denge hesapları,
- Ayrıntılı ısı- ve kütle-denge hesapları,
- Doğrusal olmayan denklemler için çözüm önerileri,
- Karışımların termodinamik özelliklerini veri tabanı biçiminde depolama,
- Özelliği bilinmeyen maddeler için varsayım metodları kullanma, ve,
- Optimizasyon.

Isı ve kütle-denge hesapları iki etapta yapılmalıdır. Birinci etapta, tek bir ünite için denge hesapları elde edilmeli ve tasarım bilgi akım şeması yaratılmalıdır. İkinci etapta ise, ayrıntılı hesaplamalara girilecek ve icab eden durumlarda da kısa hesaplama yöntemi kullanılacaktır.

2.4. Termodinamik Veri Tabanı

Termodinamik veri tabanının yaratılmasında;

- Molekül ağırlıklar
- Kritik özellikler
- Chao-Seader verileri
- API ideal gaz entalpi verileri
- Antoine katsayıları
- Cubic entalpi katsayıları.

kullanılmıştır (ASPEN, 1994). Gereken durumlarda,

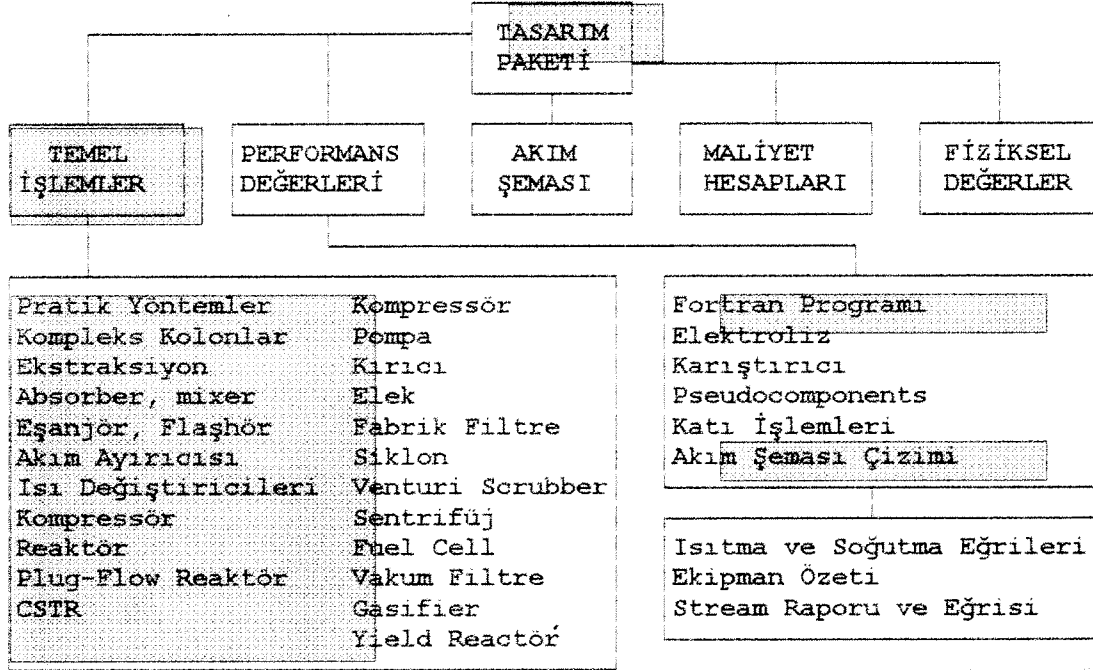
- yoğunluk
- viskosite
- yüzey gerilimi
- ısı kapasitesi, ve
- termal kondaktivite

değerleri elektronik el kitabının veri tabanına kolayca eklenebilir. Termodinamik Verilere ait sonuçlar tablolar halinde Bölüm 3' de ayrıntılı olarak verilmiştir.

2.5. Temel İşlemler Veri Tabanı

Proses tasarım paketinin en önemli elemanı olan temel işlemler kısmı modüler bir biçimde Fortran yazılımı ile yapılmış ve pakete entegrasyonu sağlanmıştır. Veri tabanının akım şeması Tablo 2' de gösterilmiştir. Mavi mürekkepli kısımlar şu ana kadar gerçekleşen modülleri simgelemektedir. Diğer kısımlar ileride programlanacaktır. Yazılan modüller diskette 'Dyflo.f90' adlı dosyada verilmiştir. Proses tasarımda sık sık kullanılan sıvı-gaz faz dengesi hızlı ve kesin sonuca ulaşan hesaplama yöntemine ait basit bir örnek program Tablo 3 de gösterilmiştir. Diğer yazılımların listesi Ek. 1 de özetlenmiştir.

TABLO 2. Temel İşlemler Modülü.



TABLO 3. Sıvı-Gaz Faz Denge Hesaplama Modülü.

Subroutine EQUIL(IL,IV)
Vapor/Liquid Equilibrium
Boiling point temperature and Vapor compositions are calculated
Initial estimates should be given in liquid line
IL : Liquid stream ; IV : Vapor stream

logical LSTR
common/CDYF/STR(500,34),DAT(31,10),RCT(32),NCF,NCL,LSTR,IDL

Vapor compositions

```

iter=0; 10 SUM=0.0; SDY=0.0; call ACTY(IL)
do n=NCF,NCL; PN=PVAP(n,IL); STR(IV,n)=PN*DAT(n,9)*STR(IL,n)/STR(IL,34)
DY=-STR(IV,n)*DAT(n,2)/(STR(IL,32)+DAT(n,3))**2
if(DAT(31,1).eq.4.0) then; DY=DAT(n,3)-DAT(n,1)/(STR(IL,32))**2
endif; SUM=SUM+STR(IV,n); SDY=SDY+DY; enddo

```

Convergence on y=1

```

YER=1.0-SUM; if(iter.gt.200) goto 98
if(SDY.eq.0.0) SDY=1.0E-06; iter=iter+1; STR(IL,32)=STR(IL,32)+YER/SDY
if(abs(YER).ge.0.001) goto 10; STR(IV,32)=STR(IL,32)
call ENTHL(IL); call ENTHV(IV); return

```

98 write(6,*) ' Slow Convergence in EQUIL.'
return; end

Subroutine DEWPT(IV,IL)

Dew Point Calculation

Initial estimates should be given in liquid line

logical LSTR

common/CDYF/STR(500,34),DAT(31,10),RCT(32),NCF,NCL,LSTR,IDL

Liquid compositions

```
iter=0; 10 SUM=0.0; SDX=0.0; call ACTY(IL)
do n=NCF,NCL; PN=PVP(n,IL); STR(IL,n)=STR(IV,n)*STR(IL,34)/DAT(n,9)/PN
DX=STR(IL,n)*DAT(n,2)/(STR(IL,32)+DAT(n,3))**2
SUM=SUM+STR(IL,n); SDX=SDX+DX; enddo
```

Convergence on X

```
XER=1.0-SUM; if(iter.gt.50) goto 98; if(SDX.eq.0.0) SDX=1.0e-06
iter=iter+1; STR(IL,32)=STR(IL,32)+XER/SDX
if(abs(XER).ge.0.001) goto 10; return
```

```
98 write(6,*) ' Slow convergence in DEWPT.'
return; end
```

Subroutine DEWPT(IV,IL)

Dew Point Calculation

Initial estimates should be given in liquid line

logical LSTR

common/CDYF/STR(500,34),DAT(31,10),RCT(32),NCF,NCL,LSTR,IDL

Liquid compositions

iter=0; 10 SUM=0.0; SDX=0.0; call ACTY(IL)

do n=NCF,NCL; PN=PVP(n,IL); STR(IL,n)=STR(IV,n)*STR(IL,34)/DAT(n,9)/PN

DX=STR(IL,n)*DAT(n,2)/(STR(IL,32)+DAT(n,3))**2

SUM=SUM+STR(IL,n); SDX=SDX+DX; enddo

Convergence on X

XER=1.0-SUM; if(iter.gt.50) goto 98; if(SDX.eq.0.0) SDX=1.0e-06

iter=iter+1; STR(IL,32)=STR(IL,32)+XER/SDX

if(abs(XER).ge.0.001) goto 10; return

98 write(6,*) ' Slow convergence in DEWPT.'

return; end

3. BÖLÜM

ENDÜSTRİYEL KOMPONENT DATABANK VERİLERİ

Daha önceki bölümde de belirtildiği gibi, Temel İşlemler Modülleri' nin çok hızlı ve sonuca ulaşabilir bir biçimde çalışması gerektiği belirtilmişti. Bunu sağlamak için modüllerde kullanılan komponentlerin termodinamik değerlerinin metodik bir biçimde veri bankasında saklanması ve kullanıcı öüne istenildiği anda çıkarılması gerekir.

Yurdumuzda şu ana kadar, kimyasal maddeler hakkında çeşitli dizayn bilgilerini içeren ve bu bilgileri proses tasarımcılarının kullandıkları bilgisayar paketlerine direk olarak entegre edilebilen, kullanıcıya açık olan yazılımlara pek rastlanmamıştır. Bu bölümde ayrıntılı dokümü verilen termodinamik databank verileri herhangi bir veri tabanı makrosu ile anında işleme dahil edilebilir. Kullanıcıya kolaylık sağlaması açısından veriler Microsoft Excel tablolama paketi halinde verilmiştir. Veriler text moduna kolayca dönüşebilecek biçimde hazırlanmıştır. Bu veriler, kimya mühendisliğinde kullanılacak petrol rafineri ve petrokimya endüstrisindeki proses dizayn, proses kontrol ve optimizasyon mühendislik hesaplamalarına kolayca entegre edilebilir.

3.1. Komponent Databank Veri Tabanı

Proses tasarım paketinin düzgün çalışması ve sonuçların güvenilirliği açısından termodinamik verilerin de güvenliğini gerektirir. Veri tabanı çeşitli tablolardan oluşur. Hazırlanan tablolar iki grup altında organize edilmiştir. Birinci grupta Tablo 4,5,6 bulunur, Tablo 4' te komponent madde özellikleri özetlenmiştir. Tablo 5' te ise petrokimya sanayinde kullanılan organik bazlı 420 komponentin listesi takdim edilmiştir. Bu listenin elde edilmesi için kullanılan yazılım diskette 'Chem.exe', 'Chem.F90', 'Chema.dat' ve 'Chemb.dat' dosyaları adı altında saklanmıştır. 'Chem.exe' programını çalıştırarak istenilen komponente ait veriler elde edilebilir. Kısa bir örnek çıktısı Tablo 6' da verilmiştir.

Yukarıdaki sonuç değerleri 500 sayfalık ayrıntılı 'Chem2.dat' dosyasından 1 saniye gibi çok kısa bir zamanda ayıklanmıştır. Burada M_w molekül ağırlığı, T_b bileşenin kaynama noktasını, c_1, c_2, c_3 Antoine katsayılarını, A_v, B_v, A_L, B_L spesifik ısı değerlerini simgeler.

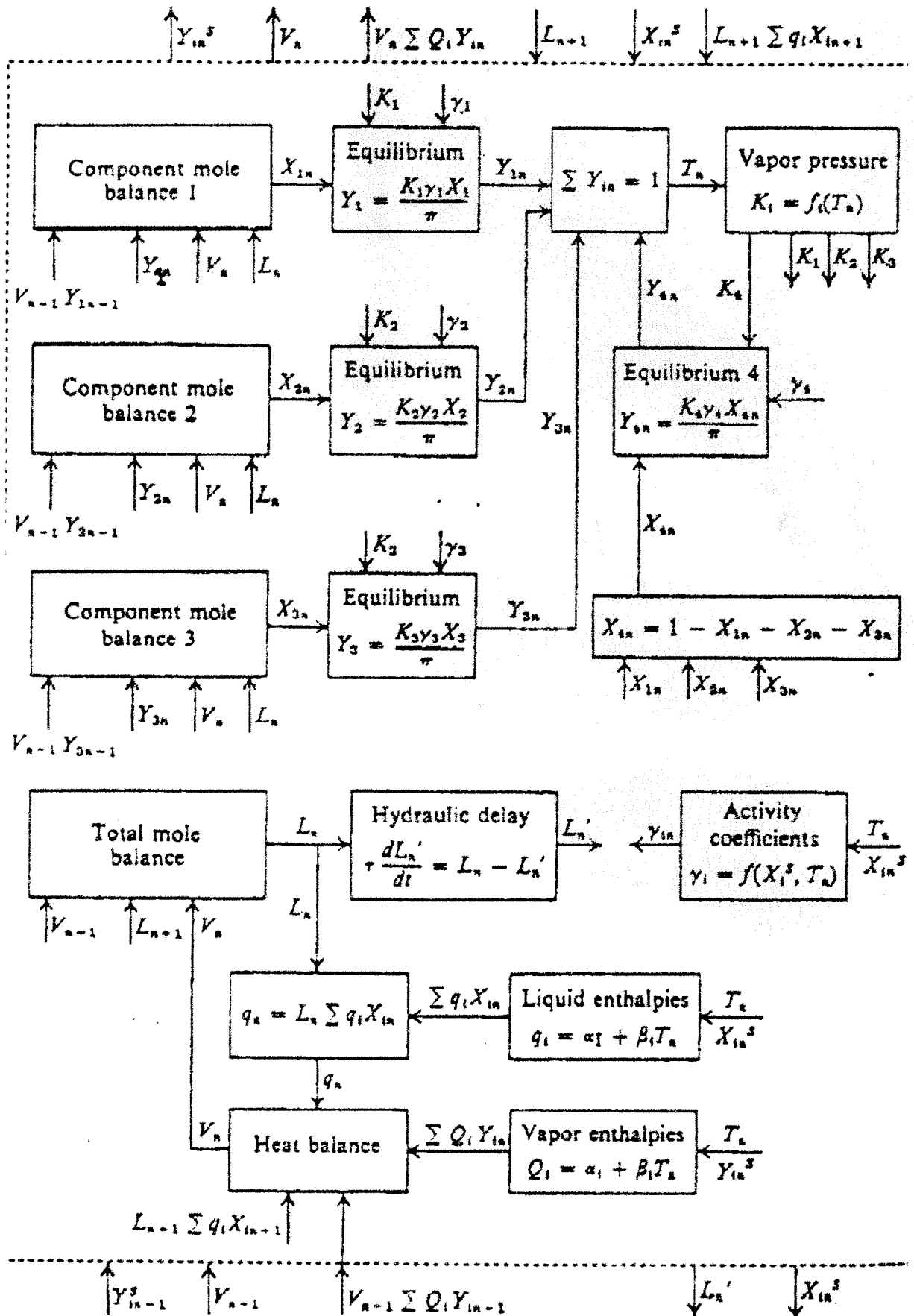
3.2. Veri Tabanı Kullanımı

Temel İşlemler Modül programları için yukarıda özetlenen termodinamik verilerden sadece Antoine katsayıları ile sıvı ve gaz fazındaki özgül ağırlıkları ısı değerleri gereklidir. Program, tasarım hesaplarının ayrıntılarına girmeden önce, mevcut sistemin kaynama noktasını hesaplar. Hesaplanan bu değer, veri tabanındaki bileşenlerin kaynama noktalarını doğrulamıyorsa kullanıcıya uyarı mesajı verir.

Veri tabanının ikinci grubunda ise Tablo 7-11 bulunur. Bu gruptaki tablolar Microsoft Excel formatında verilmiştir. Disketteki dosya ismi ise 'VeriBank.xls' tir. Makro programın yardımı ile buradaki veriler istenilen biçimde Temel İşlemler Modül programının kullanımına açılır. İlgili veri tabanı çağırma programı diskette 'Dbase.prg', 'Dbase_Find.prg', ve 'Dbase_Print.prg' dosyalarında saklıdır. Programın dökümü ise Ek 3' de gösterilmiştir. Temel İşlemler Modül programı için çok kısa bir sürede ana databank dosyasından ayıklanan, örneğin 4-bileşenli bir sistem için, gerekli bilgiler yukarıda anlatılmıştır.

Ek 1' de özetlenen Fortran yazılımının 'Equil' modülü bu bilgileri kullanarak tasarımcının yapmak istediği proses tasarım, kontrol, veya optimizasyon analizlerine çok hızlı ve ayrıntılı bir biçimde olanak verir. 'Equil' modülünün distilasyon kolonu tasarımı yapan bir mühendis için kolonun herhangi bir noktasında oluşan akışkan, ısı, ve kütle transferi olaylarının bloke diagram biçimindeki proses akım şeması Şekil 1' de gösterilmiştir. Örnek 4-bileşenli bir sistem için çizilmesine rağmen programlama modüler bir düzende çalıştığı için bileşen sayısının 50 ye kadar çıkarılması hesaplara herhangi bir açıdan fazla yük getirmez.

Şekil 1. Distilasyon Kolon Sıvı-Gaz Denge Akım Şeması.



4. BÖLÜM

SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bölüm 1' de belirtildiği gibi proses tasarım akım şemasının çok karmaşık ve geniş kapsamlı tüm bilgileri bünyesinde bulundurması tasarım mühendisinin en arzuladığı olaydır. Böyle kapsamlı bir şemanın ne gibi parametreleri ihtiva ettiği Tablo 1' de gösterilmişti. Yapılan çalışmada bu karmaşık durum daima göz önünde bulundurulmuş ve yazılan tasarım modülleri ileriye açık olarak ve mevcut paketler ile koordineli bir biçimde entegre olacak şekilde tasarlanmıştır. Sisteme ait ön proses akımı elde edildikten sonra ısı ve kütle denge hesaplamalarına geçileceği aşıkardır. Bu etapta hesapların kapsamlı, düzgün, hızlı, ve sonuca yönelik olabilmesi için komponentlerin fiziksel veri tabanı ile program çerçevesinde ilişki kurulmalıdır. Ek' lerde ayrıntıları verilen diskette takdim edilen yardımcı yazılımlar (Simpson, 1985) ile Elektronik El Kitabı' nın tasarım mühendisinin kendisine özgü programı ile entegrasyonu sağlanır.

Temel İşlemler Modüllerinin özeti Bölüm 2' de verilmiştir. Tablo 2' den de kolayca gözlemlendiği gibi, tasarım paketinin,

- Temel işlemler,
- Performans değerleri,
- Akım şeması,
- Maliyet hesapları, ve
- Fiziksel değerler

den oluşması gerekir.

4.1. Tamamlanan Fortan Modülleri

Bu çalışmada zaman sınırı nedeni ile sadece temel işlemler ve termodinamik değerler konusunda araştırma yapılmıştır. Temel işlemler modülleri ayrıntılı bir biçimde geliştirilmiş, yazılımlar değişik proses şartlarında denenmiş, ve elde edilen sonuçların mevcut fiziki modele tam uyum sağladığı gözlenmiştir.

Tablo 3' de verilen ve sadece sıvı-gaz faz denge hesapları için kullanılan Fortran modülü 50 komponentli sistemlere kadar çok başarılı sonuçlar vermiştir.

Diğer taraftan endüstriyel komponent databank verileri için çok uzun bir zaman harcaması yapılmıştır. Bölüm 3' te de belirtildiği gibi, petrol rafineri ve petrokimya tesisleri ile ilgili proses tasarımlarında rahatlıkla kullanılacak 420 nin üstünde komponente ait literatür-den (DataBook, 1972; UOP, 1994) elde edilen ve genellikle grafik biçiminde verilmiş olan veriler regresiyon tekniği ile tek tek incelenmiş ve komponent fiziksel verileri Elektronik El Kitabı' nın formatına uyum sağlayacak bir biçime dönüştürülmüştür.

4.2. Tamamlanan Databank Fiziksel Veri Modülleri

Tablo 4' de ayrıntılı bir komponent fiziksel verilerinin ne türde olması hususunda bilgiler mevcuttur. Bu çalışmada, fiziksel değerler termodinamik veri tablolarından ve regresiyon modellerinden elde edilmiştir. Daha sonraki çalışmalarda diğer modellerin de sisteme katkısına gayret edilecektir.

Tablo 5' te genel endüstriyel maddelerin listesi çıkarılmıştır. Daha önce de belirtildiği gibi, bu maddelerin listeye alınmasının nedeni bunların petrol rafineri ve petrokimya sahasındaki tasarım hesaplarında çok sık olarak kullanılması olmuştur. Komponentler karbon sayısına ve hidrojen miktarına göre bir sıralamaya tabi tutulmuştur.

Diskette verilen 'Chem.exe' programını çalıştırarak bu listeden istenilen madde seçilir ve bu maddenin tüm özellikleri veri tabanından ayıklanarak Tablo 6' da gösterilen biçime döndürülür. Yer kısıtlaması nedeni ile bu tabloda sadece gelişigüzel seçilmiş 7 komponentin özellikleri verilmiştir. Diğer maddelerin ayrıntılı özellikleri 'Chem2.dat' dosyasında verilmiştir.

Çeşitli literatürden ve ilgili ders kitap kaynaklarından elde edilmiş komponentlerin termodinamik özelliklerinin sıcaklık ve basınç ile değişimini gösteren veri tabanı bilgileri Elektronik El Kitabı' nın en kullanılan unsuru olan termodinamik veriler tablolarıdır. Bu verilere ait ayrıntılı bilgiler Tablo 7-11 de verilmiştir.

Organik gruplaşmaya göre hazırlanan veriler Tablo 7' de özetlenmiştir. Benzen, toluen, ksilen gibi çok sık kullanılan aromatlara ait bilgiler Tablo 8' de klasifiye edilmiştir.

Tablo 9 benzen, keton, ether, amin, aldehid, ve asit gruplarına göre organize olmuştur. Bu maddelerin fiziksel değerleri bilhassa sıcaklıktan çok etkilendiği için tabloda her madde için ayrı ayrı sıcaklık değişme değerleride verilmiştir. Bu bilgileri yeniden derleme için kullanıcının mevcut ayıklama programına daha fazla ilave talimat vermesini gerekir.

Tablo 10' da Tablo 9' nun paralelindedir. Burada alkenler, mono olefinler, alkinler, değişik alkoller, glikoller, ve dallı diğer hidrokarbonlar hakkında bilgi verir.

4.3. Modüllerin Entegrasyonu

Proses tasarımcısının hesaplarında en çok kullanılan veri komponentlerin Antoine katsayıları ile spesifik ısı değer katsayılarıdır. Tablo 11 bu bilgileri bulunduracak biçimde dizayn edilmiştir. Bu bilgiler önceki tablolarda da görüldüğü gibi çeşitli referanslardan uzun süreli bir çalışma sonucu elde edilmiş olan endüstriyel madde verilerinin bu tabloda daha rasyonel bir biçime dönüştürülmesidir. Bu tabloda özetlenen veriler elektronik kütük formatına dönüştürüldüğü için artık istenilen maddenin bulunduğu dosyanın tesbiti çok kolaydır.

Maddelerin çok fazlalığı nedeni ile veri tabanı girişi karbon/hidrojen sayı ilişkisine göre yapılmıştır. Bu nedenle Ek 3' te verilen database programı ve diskette sunulan 'DyfBank.dat' ve 'DyfBank.txt' dosyalarının da yardımı ile bu veri bankasından istenilen biçimde ayıklama yapılabilir. Ayıklama programı Ek 2' de takdim edilmiştir. Örnek olarak 4 komponentli bir sistem için yapılan ayıklama 14.üncü sayfada gösterilmiştir.

4.4. Bir Rafineri Tasarım Uygulaması

Sistemin uygulaması Kırıkkale Rafinerisinin en önemli ünitelerinden biri olan 'Hidrokraker Prosesi Debütanizer Kolonu' nun tasarımı ve yeniden optimizasyonunda yapılmıştır. Eldeki mevcut tüm veriler Elektronik El Kitabı'nın içinden bu çalışma için geliştirilen yazılım programlarının yardımı ile ayrılmış ve entegre pakete veri olarak girilmiştir. Uygulamanın kısa bir özeti Ek 4' te takdim edilmiştir.

4.5. Öneriler

Uygulamadan da görüldüğü gibi tasarım mühendisine artık kendi özel problemlerini çözmek için gerekli olan hemen hemen tüm verilerin sağlanmış olmasıdır. Tasarım mühendisi bu veriler yardımı ile problemini daha hızlı bir biçimde çözecektir. Sistemin daha randımanlı bir hale dönüştürülebilmesi için aşağıdaki çalışmaların yapılması önerilir.

- Daha önceden de belirtildiği gibi bu proje çok kapsamlıdır ve çok uzun yıllar üzerinde çalışılması gerekir.
- Şu ana kadar yapılan kısımlar kanımca projenin en karmaşık kısmı olan Elektronik Veri Tabanı Oluşturma bölümünün artık oldukça kullanılabilir bir duruma dönüştürülmesidir.
- Organik bazlı rafineri ürün yelpazesine açık komponent fiziksel verilerine diğer anorganik maddelerinde eklenmesi gerekir.
- Ayıklama programı Fortran ve Database lisanında yazılmıştır. Windows ortamında çalışmasında bazı zorluklar yaratıyor. Bu yazılımın Visual Basic lisanına dönüştürülmesi çalışmaları yapılmalıdır.

Tablo 5. Endüstriyel Genel Maddelerin Kısa Dökümü.

1. Hydrogen	21. n-Heptadecane	41. Toluene	61. Isoprene
2. Methane	22. Ethylene	42. o-Xylene	62. Water
3. Ethane	23. Propylene	43. m-Xylene	63. Ammonia
4. Propane	24. 1-Butene	44. p-Xylene	64. Acetylene
5. i-Butane	25. cis-2-Butene	45. Ethylbenzene	65. Propyne
6. n-Butane	26. trans-2-Butene	46. Nitrogen	66. 1-Butyne
7. i-Pentane	27. i-Butene	47. Oxygen	67. 2-Methylpropene
8. n-Pentane	28. 1,3-Butadiene	48. Carbon-Monoxide	68. Cyclopentene
9. neo-Pentane	29. 1-Pentene	49. Carbon-dioxide	69. n-Propylbenzene
10. n-Hexane	30. cis-2-Pentene	50. Hydrogen-Sulfide	70. i-Propylbenzene
11. n-Heptane	31. trans-2-Pentene	51. Sulfur-Dioxide	71. 1-C2-2-C1-Benzne
12. n-Octane	32. 2-C1-1-Butene	52. 2-Methylpentane	72. 1-C1-3-C2-Benzne
13. n-Nonane	33. 3-C1-1-Butene	53. 3-Methylpentane	73. 1-C1-4-C2-Benzne
14. n-Decane	34. 2-C1-2-Butene	54. 2,2-Di-C1-Butane	74. 1,2,3-Mesitylene
15. n-Undecane	35. 1-Hexene	55. 2,3-Di-C1-Butane	75. 1,2,4-Mesitylene
16. n-Dodecane	36. Cyclopentane	56. 1-Heptene	76. 1,3,5-Mesitylene
17. n-Tridecane	37. C1-Cyclopentane	57. Propadiene	77. n-Butylbenzene
18. n-Tetradecane	38. Cyclohexane	58. 1,2-Butadiene	78. 2-Methylhexane
19. n-Pentadecane	39. C1-Cyclohexane	59. C2-Cyclopentane	79. 3-Methylhexane
20. n-Hexadecane	40. Benzene	60. Ethylcyclohexane	80. 2-Methylheptane
81. 2,2,4-Tri-C1-C5	101. Carbon-Disulfide	121. Vinyl-Chloride	141. Methyl-Acetate
82. 1-Octene	102. Tri-C1-acetyl-C1	122. Acetyl-Chloride	142. Propionic-Acid
83. ts-1,3-DiC1-CyC6	103. Hydrogen-Chloride	123. 1,1,2-Tri-C1-C2	143. Di-C1-Formamide
84. cs-1,4-DiC1-CyC6	104. Chlorine	124. Acetonitrile	144. Isopropanol
85. ts-1,4-DiC1-CyC6	105. Hydrogen-Iodide	125. 1,1-Di-C1-Ethane	145. n-Propanol
86. 1,1-Di-C1-CyC6	106. Neon	126. 1,2-Di-C1-Ethane	146. Trimethylamine
87. cs-1,2-DiC1-CyC6	107. Nitric-Oxide	127. Acetaldehyde	147. Vinylacetylene
88. cs-1,3-DiC1-CyC6	108. Nitrogen-Dioxide	128. Ethylene-Oxide	149. Thiophene
89. n-Octadecane	109. Nitrous-Oxide	129. Acetic-Acid	149. Methacrylonitrile
90. n-Nonadecane	110. Sulfur-Trioxide	130. Methyl-Formate	150. Dimethylacetylene
91. n-Eicosane	111. Chloroform	131. Ethyl-Chloride	151. Isobutylaldehyde
92. 1,1-Di-C1-CyC5	112. Hydrogen-Cyanide	132. Dimethyl-Ether	152. Mtl-Ethyl-Ketone
93. cs-1,2-DiC1-CyC5	113. Formaldehyde	133. Ethanol	153. n-Butyric-Acid
94. ts-1,2-DiC1-CyC5	114. Methyl-Chloride	134. Ethylene-Glycol	154. Ethyl-Acetate
95. cs-1,3-DiC1-CyC5	115. Methyl-Iodide	135. Dimethyl-Sulfide	155. Mtl-Propionate
96. ts-1,3-DiC1-CyC5	116. Methanol	136. Ethyl-Mercaptan	156. Propyl-Formate
97. Argon	117. Methylamine	137. Ethylamine	157. Di-C1-acetamide
98. Bromine	118. Tri-C1-ethylene	138. Acrylonitrile	158. Isobutanol
99. Carbon-Tetra-Cl	119. Di-C1-acetyl-C1	139. Acetone	159. n-Butanol
100. Phosgene	120. Chl-acetyl-Chl	140. Ethyl-formate	160. t-Butyl-Alcohol
161. Diethyl-Ether	181. Indene	201. 1-Phenylindene	221. Dibromomethane
162. Diethylene-Glycol	182. Indan	202. 2-Ethylfluorene	222. Dichloromethane
163. Furfural	183. Methylstyrene	203. Fluoranthene	223. FormicAcid
164. Diethyl-Ketone	184. n-Propyl-Cy-C6	204. Pyrene	224. MethylBromide
165. n-Propyl-Acetate	185. Naphthalene	205. 1-Phenylinaphtline	225. MethylFluoride
166. 1,2,4-Tri-C1-Eze	186. 1-Methylindene	206. Chrysene	226. Nitromethane
167. m-Dichlorobenzene	187. 2-Methylindene	207. NitrosylChloride	227. MethylMercaptan
168. o-Dichlorobenzene	188. Di-Cy-pentadiene	208. Fluorine	228. MethylMercaptan
169. p-Dichlorobenzene	189. 1,2-DiC1-3-C2-Ez	209. HydrogenBromide	229. Cl-5F-ethane
170. Bromobenzene	190. n-C4-Cyclohexane	210. HydrogenFluoride	230. 11-2Cl-1222-4FC2
171. Chlorobenzene	191. 1-C1-Napthalene	211. Hydrazine	231. 12-2Cl-1122-4FC2
172. Chlorobenzene	192. 2-C1-Napthalene	212. Helium-4	232. 122-3Cl-112-3FC2
173. Iodobenzene	193. Acenapthalene	213. Iodine	233. 4Cl-ethylene
174. Phenol	194. Diphenyl	214. Ozone	234. 1122-4Cl-12-FC2
175. Aniline	195. 2,7-DiC1-Naphtine	215. Cl-3F-methane	235. Perfluoroethene
176. Tri-C2H4-Glycol	196. 1,2,3-3Cl-Indene	216. 2Cl-2F-methane	236. Perfluoroethane
177. o-Cresol	197. Fluorene	217. 3Cl-F-methane	237. Cyanogen
178. Styrene	198. 1-C1-C2-Naphtline	218. Carbon-tetra-F	238. 3F-aceticAcid
179. n-Propyl-Cy-C5	199. 2,3,5-3Cl-Nphtln	219. CarbonylSulfide	239. 1,1-2F-ethylene
180. TetraC2H4-Glycol	200. Phenanthrene	220. Cl-2F-methane	240. Ketene
241. 1-C1-1,1-2FC2	261. VinylMethylEther	281. 1,4-Dioxane	301. Cyclopentanone
242. VinylFluoride	262. PropylChloride	282. IsobutyricAcid	302. EthylAcrylate
243. 1,1,1-3F-ethane	263. IsopropylChlorid	283. 1-Chlorobutane	303. Valeraldehyde
244. MethylIsocyanate	264. Methylal	284. 2-Chlorobutane	304. Cl-nC3-Ketone
245. 1,1-2F-ethane	265. 12PrpyleneGlycol	285. TertButylChloride	305. Cl-1C3-Ketone
246. EthylBromide	266. 13PrpyleneGlycol	286. Pyrrolidine	306. N-ValericAcid
247. EthylFluoride	267. Glycerol	287. Morpholine	307. IsobutylFormate
248. DimethylAmine	268. MthylEthylSulfid	288. 1,2-DimethoxyC2	308. N-PropylAcetate
249. Monoethanolamine	269. N-PropylAmine	289. DiethylSulfide	309. EthylPropionate
250. Ethylenediamine	270. IsopropylAmine	290. DiethylDisulfide	310. MethylButyrate
251. Acrolein	271. MaleicAnhydride	291. N-ButylAmine	311. Mthyl-i-butyrate
252. AcrylicAcid	272. Furan	292. N-ButylAmine	312. Piperidine
253. VinylFormate	273. AllylCyanide	293. IsobutylAmine	313. 1-Pentanol
254. AllylChloride	274. Pyrrole	294. DiethylAmine	314. 2Mthyl-1Butanol
255. 1,2,3-3Cl-propan	275. DimethylOxalate	295. Pyridine	315. 3Mthyl-1Butanol
256. Propionitrile	276. SuccinicAcid	296. 1,2-Pentadiene	316. 2Mthyl-2Butanol
257. Cyclopropane	277. Butyronitrile	297. 1Trans-3Pntadien	317. 22Cl-1Propanol
258. 1,2-2Cl-propane	278. MethylAcrylate	298. 1,4-Pentadiene	318. EthylPropiEther
259. AllylAlcohol	279. VinylEthylEther	299. 1-Pentyne	319. Perfluorobenzene
260. Propionaldehyde	280. Tetrahydrofuran	300. 3Mthyl-12Butadie	320. PerfluoroCycC6
321. Perfluoro-nC6	341. Benzonitrile	361. 2-Octanol	381. 1-C1-3-iC3-Benze

2. Methane

321.	Perfluoro-nC6	341.	Benzonitrile	361.	2-Octanol	381.	1-C1-3-iC3-Benze
322.	Fluorobenzene	342.	Benzaldehyde	362.	2-Ethylhexanol	382.	1-C1-4-iC3-Benze
323.	4-Methylpyridine	343.	Benzoic Acid	363.	Butyl Ether	383.	1,4-Diethylbenze
324.	1,5-Hexadiene	344.	MthylPhenylEther	364.	Dibutylamine	384.	1,2,4,5-4C1-Benz
325.	Cyclohexene	345.	BenzylAlcohol	365.	EthylBenzoate	385.	n-Butylaniline
326.	Perfluoro-nC7	346.	m-Cresol	366.	iC3-cyclo-C6	386.	Cis-Decalin
327.	Cyclohexanone	347.	p-Cresol	367.	1-Nonene	387.	Trans-Decalin
328.	Cyclohexanol	348.	2,3-DiCl1-Pyridin	368.	2,2,3-3C1-Hexane	388.	Caprylonitrile
329.	MIBKetone	349.	2,5-DiCl1-Pyridin	369.	2,2,4-3C1-Hexane	389.	iC4-cyclo-C6
330.	n-ButylAcetate	350.	3,4-DiCl1-Pyridin	370.	2,2,5-3C1-Hexane	390.	sec-C4-cyclo-C6
331.	IsobutylAcetate	351.	3,5-DiCl1-Pyridin	371.	3,3-2C2-Pentane	391.	t-Butyl-cyc-C6
332.	EthylButyrate	352.	Mthylphenylamine	372.	2,2,3,3-4C1-C5	392.	1-Decene
333.	Ethylisobutyrate	353.	o-Toluidine	373.	2,2,3,4-4C1-C5	393.	3,3,5-3C1-C7
334.	nC3-Propionate	354.	m-Toluidine	374.	2,2,4,4-4C1-C5	394.	2,2,3,3-4C1-C6
335.	1-Hexanol	355.	p-Toluidine	375.	2,3,3,4-4C1-C5	395.	2,2,5,5-4C1-C6
336.	EthylButylEther	356.	Cycloheptane	376.	Tetralin	396.	1-Decanol
337.	DiisopropylEther	357.	1-Heptanol	377.	Isobutylbenzene	397.	ButylBenzoate
338.	Dipropylamine	358.	PhthlicAnhydride	378.	Sec-Butylbenzene	398.	nC6-cyclopentane
339.	Triethylamine	359.	MthylPhnylKetone	379.	Tert-Butylbenzen	399.	1-Undecene
340.	(14F)-C1-cycC6	360.	1-Octanol	380.	1-C1-2-iC3-Benze	400.	DiphenylEther
401.	nC7-cyclopentane	421.	nC13-cyclopentan				
402.	1-Dodecene	422.	1-Octadecanol				
403.	DihexylEther	423.	nC14-cyclopentan				
404.	Dodecanol	424.	nC15-cyclopentan				
405.	Tributylamine	425.	1-Eicosanol				
406.	Diphenylmethane	426.	nC16-cyclopentan				
407.	nC8-cyclopentane	427.	VinylAcetate				
408.	1-Tridecene						
409.	Anthracene						
410.	nC9-cyclopentane						
411.	1-Tetradecene						
412.	nC10-cyclopentan						
413.	1-Pentadecene						
414.	nC10-cyclohexane						
415.	1-Hexadecene						
416.	nC12-cyclopentan						
417.	Heptadecanol						
418.	o-Terphenyl						
419.	m-Terphenyl						
420.	1-Octadecene						

Tablo 6. Endüstriyel Genel Maddelerin Ayrıntılı Dökümü.

1. Hydrogen					
MolWt =	2.016	Tboil =	20.4	Hvap =	216.000
AntA =	14.7996	AntB =	232.321	AntC =	8.080
CpA =	0.6090E+01	CpB =	-0.4445E-02	CpC =	0.3905E-04
CpD =	-0.7705E-07	CpE =	0.5895E-10	CpF =	-0.1555E-13
CpLA =	0.2256E+05	CpLB =	-0.1986E+04	CpLC =	0.1155E+03
CpLD =	-0.1260E+01	CpLE =	0.0000E+00		
HvA =	0.1517E+07	HvB =	0.2222E+01		
HvC =	-0.4187E+01	HvD =	0.2411E+01		
DenA =	0.4960E+01	DenB =	0.3320E+00		
DenC =	0.3325E+02	DenD =	0.2720E+00		
VisA =	0.1382E+02	VisB =	0.5390E+01		
STnA =	0.5363E-02	STnB =	0.1074E+01		
Hform =	0.0000E+00	HGibbs =	0.0000E+00	VolCon =	0.9550E+00
Tcrit =	0.3327E+02	Pcrit =	0.1279E+02	Vcrit =	0.6500E+02
AcFact =	-0.2200E+00	BPM =	0.0000E+00	API =	0.0000E+00
SG =	0.0000E+00	Zra =	0.3140E+00	SolPar =	0.3250E+01
DipolM =	0.0000E+00	StielF =	0.0000E+00	PolarF =	0.0000E+00
Eps/K =	0.0000E+00	MolDia =	0.0000E+00	WatsnF =	0.4748E+02

2. Methane

MolWt = 16.042	Tboil = 111.7	Hvap = 1955.000
AntA = 15.5990	AntB = 968.132	AntC = -3.720
CpA = 0.8142E+01	CpB = -0.7645E-02	CpC = 0.3971E-04
CpD = -0.2806E-07	CpE = 0.4143E-11	CpF = 0.1190E-14
CpLA = 0.6071E+06	CpLE = -0.1895E+05	CpLC = 0.2384E+03
CpLD = -0.1311E+01	CpLE = 0.2684E-02	
HvA = 0.1033E+08	HvB = 0.3138E+00	
HvC = -0.2318E+00	HvD = 0.2575E+00	
DenA = 0.2873E+01	DenB = 0.2881E+00	
DenC = 0.1906E+03	DenD = 0.2770E+00	
VisA = 0.1141E+03	VisB = 0.5760E+02	
STnA = 0.3568E-01	STnB = 0.1092E+01	
Hform = -0.1789E+02	HGibbs = -0.1215E+02	VolCon = 0.5000E+01
Tcrit = 0.1906E+03	Pcrit = 0.4557E+02	Vcrit = 0.9942E+02
AcFact = 0.1000E-01	BPM = 0.0000E+00	APi = 0.3400E+03
SG = 0.3000E+00	Zra = 0.2880E+00	SolPar = 0.5660E+01
DipolM = 0.0000E+00	StielF = 0.0000E+00	PolarP = 0.0000E+00
Eps/K = 0.0000E+00	Moldia = 0.0000E+00	WatsnF = 0.1954E+02

3. Ethane

MolWt = 30.068	Tboil = 184.9	Hvap = 3515.000
AntA = 15.3946	AntB = 1582.180	AntC = -13.762
CpA = 0.8016E+01	CpB = 0.5695E-02	CpC = 0.1073E-03
CpD = -0.1438E-06	CpE = 0.8004E-10	CpF = -0.1660E-13
CpLA = 0.1831E+06	CpLE = -0.3083E+04	CpLC = 0.2961E+02
CpLD = -0.1213E+00	CpLE = 0.1843E-03	
HvA = 0.2090E+08	HvB = 0.5720E+00	
HvC = -0.5061E+00	HvD = 0.3133E+00	
DenA = 0.1826E+01	DenB = 0.2733E+00	
DenC = 0.3054E+03	DenD = 0.2833E+00	
VisA = 0.1566E+03	VisB = 0.9557E+02	
STnA = 0.3819E-01	STnB = 0.9854E+00	
Hform = -0.2084E+02	HGibbs = -0.7870E+01	VolCon = 0.7880E+01
Tcrit = 0.3054E+03	Pcrit = 0.4820E+02	Vcrit = 0.1467E+03
AcFact = 0.9900E-01	BPM = 0.0000E+00	APi = 0.2655E+03
SG = 0.3560E+00	Zra = 0.2790E+00	SolPar = 0.6030E+01
DipolM = 0.0000E+00	StielF = 0.0000E+00	PolarP = 0.0000E+00
Eps/K = 0.0000E+00	Moldia = 0.0000E+00	WatsnF = 0.1838E+02

4. Propane

MolWt = 44.094	Tboil = 231.1	Hvap = 4487.000
AntA = 15.7247	AntB = 1872.820	AntC = -25.101
CpA = 0.7782E+01	CpB = 0.8488E-02	CpC = 0.1330E-03
CpD = -0.2022E-06	CpE = 0.1211E-09	CpF = -0.2652E-13
CpLA = 0.1222E+06	CpLE = -0.9943E+03	CpLC = 0.9081E+01
CpLD = -0.3355E-01	CpLE = 0.4738E-04	
HvA = 0.2672E+08	HvB = 0.3855E+00	
HvC = -0.8600E-01	HvD = 0.6860E-01	
DenA = 0.1394E+01	DenB = 0.2774E+00	
DenC = 0.3698E+03	DenD = 0.2870E+00	
VisA = 0.2227E+03	VisB = 0.1334E+03	
STnA = 0.4962E-01	STnB = 0.1192E+01	
Hform = 0.2000E+01	HGibbs = -0.5610E+01	VolCon = 0.1035E+02
Tcrit = 0.3698E+03	Pcrit = 0.4194E+02	Vcrit = 0.2008E+03
AcFact = 0.1520E+00	BPM = 0.0000E+00	APi = 0.1472E+03
SG = 0.5080E+00	Zra = 0.2760E+00	SolPar = 0.6400E+01
DipolM = 0.0000E+00	StielF = 0.0000E+00	PolarP = 0.0000E+00
Eps/K = 0.0000E+00	Moldia = 0.0000E+00	WatsnF = 0.1471E+02

425. 1-Eicosanol

MolWt =	298.555	Tboil =	629.0	Hvap =	15600.000
AntA =	15.8233	AntB =	3912.100	AntC =	-203.100
CpA =	-0.3005E+01	CpE =	0.4657E+00	CpC =	-0.2871E-03
CpD =	0.6009E-07	CpF =	0.0000E+00	CpF =	0.0000E+00
CpLA =	0.0000E+00	CpLB =	0.0000E+00	CpLC =	0.0000E+00
CpLD =	0.0000E+00	CpLE =	0.0000E+00		
HvA =	0.0000E+00	HvB =	0.0000E+00		
HvC =	0.0000E+00	HvD =	0.0000E+00		
DenA =	0.0000E+00	DenE =	0.0000E+00		
DenC =	0.0000E+00	DenD =	0.0000E+00		
VisA =	0.0000E+00	VisB =	0.0000E+00		
STnA =	0.0000E+00	STnB =	0.0000E+00		
Hform =	-0.1453E+03	HGibbs =	-0.4640E+01	VolCon =	0.0000E+00
Tcrit =	0.7700E+03	Pcrit =	0.1200E+02	Vcrit =	0.1158E+04
AcFact =	0.1126E+01	BPM =	0.0000E+00	API =	0.0000E+00
SG =	0.0000E+00	Zra =	0.0000E+00	SolPar =	0.0000E+00
DipolM =	0.0000E+00	StielF =	0.0000E+00	PolarP =	0.0000E+00
Eps/K =	0.0000E+00	Moldia =	0.0000E+00	WatsnF =	0.0000E+00

426. nC16-cyclopentan

MolWt =	294.567	Tboil =	637.0	Hvap =	14180.000
AntA =	16.3553	AntB =	4715.690	AntC =	-152.100
CpA =	-0.1593E+02	CpE =	0.4954E+00	CpC =	-0.2851E-03
CpD =	0.6373E-07	CpF =	0.0000E+00	CpF =	0.0000E+00
CpLA =	0.0000E+00	CpLB =	0.0000E+00	CpLC =	0.0000E+00
CpLD =	0.0000E+00	CpLE =	0.0000E+00		
HvA =	0.0000E+00	HvB =	0.0000E+00		
HvC =	0.0000E+00	HvD =	0.0000E+00		
DenA =	0.0000E+00	DenE =	0.0000E+00		
DenC =	0.0000E+00	DenD =	0.0000E+00		
VisA =	0.9774E+03	VisB =	0.4123E+03		
STnA =	0.0000E+00	STnB =	0.0000E+00		
Hform =	-0.9933E+02	HGibbs =	0.3879E+02	VolCon =	0.0000E+00
Tcrit =	0.7910E+03	Pcrit =	0.9600E+01	Vcrit =	0.1144E+04
AcFact =	0.8610E+00	BPM =	0.0000E+00	API =	0.0000E+00
SG =	0.0000E+00	Zra =	0.0000E+00	SolPar =	0.0000E+00
DipolM =	0.0000E+00	StielF =	0.0000E+00	PolarP =	0.0000E+00
Eps/K =	0.0000E+00	Moldia =	0.0000E+00	WatsnF =	0.0000E+00

427. VinylAcetate

MolWt =	96.091	Tboil =	346.0	Hvap =	0.000
AntA =	16.1003	AntB =	2744.680	AntC =	-56.150
CpA =	0.3621E+01	CpE =	0.6676E-01	CpC =	-0.2103E-04
CpD =	-0.3965E-08	CpF =	0.0000E+00	CpF =	0.0000E+00
CpLA =	0.6830E+05	CpLB =	0.3080E+03	CpLC =	0.0000E+00
CpLD =	0.0000E+00	CpLE =	0.0000E+00		
HvA =	0.4590E+08	HvB =	0.3526E+00		
HvC =	0.0000E+00	HvD =	0.0000E+00		
DenA =	0.9544E+00	DenE =	0.2580E+00		
DenC =	0.5240E+03	DenD =	0.2857E+00		
VisA =	0.4579E+03	VisB =	0.2353E+03		
STnA =	0.6869E-01	STnB =	0.1250E+01		
Hform =	-0.7550E+02	HGibbs =	0.0000E+00	VolCon =	0.1253E+02
Tcrit =	0.5250E+03	Pcrit =	0.4300E+02	Vcrit =	0.2650E+03
AcFact =	0.3400E+00	BPM =	0.0000E+00	API =	0.0000E+00
SG =	0.0000E+00	Zra =	0.0000E+00	SolPar =	0.0000E+00
DipolM =	0.1700E+01	StielF =	0.0000E+00	PolarP =	0.0000E+00
Eps/K =	0.0000E+00	Moldia =	0.0000E+00	WatsnF =	0.0000E+00

Tablo 7. Elektronik Komponent Verileri . Grup 1.

Sheet1	Sheet2	Sheet3	Sheet3
Benzene	Benzene Compounds	Alkenes	Chlorinated Ethylenes
n-Butanol	Benzene	Methane	Vinyl Chloride
i-Butanol	Ethyl Benzene	Ethane	Vinylidene Chloride
t-Butanol	Propyl Benzene	Propane	Trichloro Ethylene
Ethanol	Toluene	Butane	Perchloro Ethylene
CCL4	m-Xylene	Heptane	Chlorinated Aliphatics
Ethyl Benzene	o-Xylene	C2 to C4 Monoolefins	Ethyl Chloride
Methanol	p-Xylene	Ethylene	Propyl Chloride
i-Pentanol	Ketones	Propylene	Ethylene Dichloride
n-Propanol	Acetone	1-Butene	Propylene Dichloride
i-Propanol	Methyl Ethyl Ketone	C2 to C4 Alkynes	Propylene Glycols
Toluene	Diethyl Ketone	Acetylene	Propylene Glycol
o-Xylene	Methyl Isobutyl Ketone	Methylacetylene	Dipropylene Glycol
m-Xylene	Ethers	1-Butyne	Glycerine
p-Xylene	Methyl Ether	Primary Alcohols	C5 to C8 Alkenes
Water	Ethyl Ether	Ethanol	1-Pentene
	Propyl Ether	Methanol	1-Hexene
	Butyl Ether	Propanol	1-Heptene
	Amines	Butanol	1-Octene
	Methylamine	C2 to C4 Alcohols	C4 to C5 Branched Hydrocarbons
	Dimethylamine	Isopropyl Alcohol	Isobutane
	Trimethylamine	Isobutyl Alcohol	Isopentane
	Ethylamine		Halogenated Hydrocarbons
	Diethylamine		Fluorocarbon22
	Triethylamine		Fluorocarbon21
	Ethylendiamine		Brominated Hydrocarbons
	C1 to C4 Aldehydes		Methyl Bromide
	Formaldehyde		Ethyl Bromide
	Acetaldehyde		
	Propionaldehyde		
	Butyraldehyde		
	C1 to C4 Acids		
	Formic Acid		
	Acetic Acid		
	Propionic Acid		
	Butyric Acid		

Tablo 8. Elektronik Komponent Verileri . Grup 2.

Name	Antoine Constants							Cpecific Heats			
	Mw	Tfp	Tbp	c1	c2	c3	Hvap	a	b	c	d
Benzene	78.11	5.5	80.1	15.90	2788.51	-52.36	30781	-33.92	0.47	-3.02e-4	7.13e-8
n-Butanol	74.12	-89.3	117.7	17.22	3137.02	-94.43	43124	3.27	0.42	2.24e-4	4.69e-8
i-Butanol	74.12	-108.0	107.8	16.87	2874.73	-100.30	42077	-7.71	0.47	2.88e-4	7.23e-8
t-Butanol	74.12	25.6	82.4	16.85	2658.29	-95.50	39063	-48.61	0.72	-7.08e-4	2.92e-7
Ethanol	46.07	-114.1	78.3	18.91	3803.98	-41.68	38770	9.01	0.21	8.39e-5	1.37e-9
CCL4	153.82	-23.2	76.5	15.87	2808.19	-45.99	30019	40.72	0.20	-2.27e-4	8.84e-8
Ethyl Benzene	106.17	-95.0	136.1	16.02	3272.47	-59.95	35588	-43.10	0.71	-4.81e-4	1.30e-7
Methanol	32.04	-97.7	64.6	18.59	3626.55	-34.29	35278	21.15	0.07	2.59e-5	-2.85e-8
i-Pentanol	88.15	-78.2	137.8	16.53	3026.89	-105.00	44380	3.87	0.50	-2.64e-4	5.12e-8
n-Propanol	60.10	-126.3	97.2	17.54	3166.38	-80.15	41784	2.47	0.33	-1.86e-4	4.30e-8
i-Propanol	80.01	-88.5	82.2	18.69	3640.20	-53.54	39858	32.43	0.19	6.41e-5	-9.26e-8
Toluene	92.14	-95.2	110.6	16.01	3096.52	-53.67	33201	-24.36	0.51	-2.77e-4	4.91e-8
o-Xylene	106.17	-25.2	144.4	16.12	3395.57	-59.46	36844	-15.85	0.60	-3.44e-4	7.53e-8
m-Xylene	106.17	-47.9	139.1	16.14	3366.99	-58.04	36383	-29.17	0.63	-3.75e-4	8.48e-8
p-Xylene	106.17	-13.2	138.3	19.10	3346.65	-57.84	36006	-25.09	0.60	-3.37e-4	6.82e-8
Water	18.02	0.0	100.0	18.30	3816.44	-46.13	40683	32.24	0.00	1.06e-5	-3.60e-9

Name	Critical Points								
	T	P	V	dHF	dGF	TMN	TMX	LDEN	TDEN
Benzene	562.1	48.9	0.259	82.98	129.75	7	104	885	20
n-Butanol	562.9	44.2	0.274	-274.86	-150.89	15	131	810	20
i-Butanol	547.7	43.0	0.273	-283.40	-167.43	20	115	802	20
t-Butanol	506.2	39.7	0.275	-312.63	-177.77	20	103	787	16
Ethanol	516.2	33.8	0.167	-234.96	-168.39	-3	96	789	20
CCL4	556.4	45.6	0.276	-100.48	-58.28	20	101	1584	25
Ethyl Benzene	617.1	36.1	0.374	29.81	130.67	27	177	867	20
Methanol	512.6	81.0	0.118	-201.30	-162.62	-16	91	791	20
i-Pentanol	586.0	38.5	0.326	-298.94	-146.12	37	138	815	20
n-Propanol	536.7	51.7	0.218	-256.57	-161.90	12	127	804	20
i-Propanol	588.8	17.6	0.228	-272.60	-173.50	0	111	786	20
Toluene	591.7	41.1	0.316	50.03	122.09	7	137	867	20
o-Xylene	630.2	37.3	0.369	19.01	122.17	32	172	880	20
m-Xylene	617.0	35.5	0.376	17.25	118.95	27	167	864	20
p-Xylene	616.2	35.2	0.379	17.96	121.21	27	167	861	20
Water	647.3	220.5	0.056	-242.00	-228.77	11	168	998	20

Tablo 9. Elektronik Komponent Verileri . Grup 3.

MW	Tb °C	Tf °C	Tc °C	Pc psia	Denc g/ml	$\lambda=AT+B, \text{ cal/g}$			T, °C	λ
						T, °C	A	B		
Benzene Compounds										
Benzene	78.11	80.1	5.5	289	714	0.304	140---250	-0.31	127.5	
Ethyl Benzene	106.2	136.2	-95	344	536	0.284	190---300	-0.25	122.5	
Propyl Benzene	120.2	159.3	-100	366	473	0.286	190---310	-0.21	113	
Toluene	92.13	110.6	-95	320.6	610	0.291	150---270	-0.25	120	320 0
m-xylene	106.2	139.3	-48	343.6	526	0.282	180---290	-0.25	121.5	344 0
o-xylene	106.2	144.4	-25	358	540	0.288	180---290	-0.21	116	
p-xylene	106.2	138.4	13.2	342.8	513	0.281	180---290	-0.25	121.5	344 0
Ketones										
Acetone	58.08	56.2	-95	235	690	0.268	20---160	-0.25	137	200 70
Diethyl Ketone	86.13	102	-40	287.8	542	0.256	0---190	-0.17	107	
Methyl Ethyl Ketone	72.1	79.6	-87	262.5	602	0.27	20---170	-0.22	120.5	
Methyl Isobutyl Ketone	100.2	116.2	-84	298.3	475	0.262	80---200	-0.19	102.5	
Ethers										
Butyl Ether	130.2	142.4	-98	307	345	0.255	0---180	-0.13	85	
Ethyl Ether	74.12	34.6	-116	193.8	522	0.263	20---130	-0.25	92.5	150/180 50.5/30
Methyl Ether	46.07	-24.9	-141	126.9	763	0.271				40/100/128 91/60/0
Propyl Ether	102.2	90	-122	254	414	0.258	50---180	-0.19	90.5	
Amines										
Diethyl Amine	73.14	55.9	-50	223.5	536	0.246				120/200/224 80/40/0
Dimethyl Amine	45.09	6.88	-92	164.5	760	0.256	50---130	-0.57	158	
Ethyl Amine	45.08	16.6	-81	183.3	814	0.253				120/184 102/0
Ethylene Diamine	60.1	117.2	8.5	318	915	0.287	140---260	-0.50	220	
Methyl Amine	31.06	-6.45	-93	156.9	1080	0.216	(-10)---90	-0.50	196	
Triethyl Amine	101.2	88.8	-115	262	440	0.252	140---240	-0.33	125	
Trimethyl Amine	59.11	2.87	-117	160.2	591	0.233	(-10)---110	-0.33	96	
C1 to C4 Aldehydes										
Acetaldehyde	44.05	20.2	-123	188	803	0.263	20---140	-0.60	147	
Butyraldehyde	72.11	74.8	-96	248	580	0.259	(-80)---160	-0.20	114	
Formaldehyde	30.02	-19.2	-92	137	984	0.266	20---90	-0.67	183	120/137 80/0
Propionaldehyde	58.08	48	-80	220	674	0.261	(-80)---130	-0.23	126	
C1 to C4 Acids										
Acetic Acid	60.05	118.1	16.6	321.6	840	0.351	120---240	-0.20	120	
Butyric Acid	88.11	163.5	-5.2	355	764	0.302				120/180/300/350 135/120/80/20
Formic Acid	46.02	100.6	8.2	308	1055	0.392	0---190	-0.21	138	
Propionic Acid	74.08	141.1	-21	339.5	778	0.315	110---230	-0.21	134	

(Cp)liq=AT+B, cal/g°C			(Cv)=CT+D			(Vis)liq=ET+F, mcp			(Vis)vap		
T, °C	A	B	T, °C	C	D	T, °C	E	F	T, °C	e	l
0--140	0.00080	0.400	350--800	0.00038	0.370	100--170	-0.00143	0.390	0--500	0.27	71
70--150	0.00067	0.380	350--800	0.00040	0.405	90--165	-0.00167	0.470	0--500	0.22	62
0--200	0.00071	0.410	350--800	0.00042	0.425	90--160	-0.0025	0.590	0--500	0.21	58
60--200	0.00067	0.386	500--900	0.00030	0.450	90--180	-0.00167	0.400	0--500	0.23	64
80--200	0.00075	-0.370	400--850	0.00036	0.440	90--180	-0.00125	0.440	0--500	0.22	60
0--140	0.00050	-0.412	400--850	0.00036	0.440	110--200	-0.00167	0.500	0--500	0.22	60
70--200	0.00100	-0.372	400--850	0.00036	0.440	90--180	-0.00125	0.440	0--500	0.22	60
0--80	0.00083	0.502	400--825	0.00038	0.410	10--80	-0.00182	0.350	0--500	0.24	72
20--110	0.00075	0.496	400--750	0.00042	0.435	40--120	-0.002	0.450	0--500	0.20	62
0--70	0.00055	0.514	400--750	0.00040	0.415	40--100	-0.0025	0.405	0--500	0.23	67
30--110	0.00067	0.436	400--750	0.00040	0.465	40--120	-0.0025	0.600	0--500	0.20	62
10--140	0.00075	0.490	350--675	0.00040	0.475	40--90	-0.00429	0.690	50--500	0.20	59
80--160	0.00330	0.400	350--700	0.00050	0.425	30--100	-0.00125	0.240	175--500	0.23	78
60--120	0.00091	0.565	400--750	0.00044	0.420	(-35)--20	-0.00143	0.200	150--350	0.27	91
20--110	0.00083	0.500	350--675	0.00040	0.475	30--100	-0.0025	0.440	100--500	0.20	66
0--105	0.00125	0.575	300--750	0.00050	0.480				100--500	0.20	70
10--80	0.00170	0.705	300--700	0.00060	0.435				225--450	0.24	86.5
50--120	0.00190	0.625	400--750	0.00040	0.570				200--500	0.23	85
40--150	0.00091	0.665	450--700	0.00033	0.540				100--500	0.23	74
(-20)--80	0.00170	0.815	350--750	0.00050	0.460				200--500	0.27	88.5
20--115	0.00077	0.540	300--750	0.00050	0.480	80--160	-0.000833	0.265	125--500	0.20	66
(-5)--80	0.00140	0.515	350--750	0.00050	0.500				150--425	0.24	79
80--120	0.00033	0.320	350--650	0.00035	0.355	(-40)--20	-0.0036	0.285	0--500	0.27	79
(-20)--55	0.00071	0.510	300--700	0.00074	0.425	10--80	-0.00313	0.485	0--500	0.24	66
(-30)--20	0.00133	0.700	0--600	0.00033	0.275	(-50)--0	-0.0025	0.200	0--500	0.30	93
(-40)--50	0.00063	0.520	300--700	0.00038	0.385	10--50	-0.00333	0.455	0--500	0.27	71
0--200	0.00083	0.467	400--900	0.00025	0.350	85--150	-0.00333	0.820	0--500	0.27	78
0--200	0.00071	0.455	350--750	0.00033	0.390	90--150	-0.00429	1.000	0--500	0.23	63
0--200	0.00050	0.505	350--1000	0.00020	0.285	95--150	-0.005	1.010	0--500	0.32	89
0--200	0.00071	0.545	300--700	0.00033	0.355	95--150	-0.0025	0.670	0--500	0.23	70

(Con)liq=GT+H, cal/cm.s.°C			(Con)vap=gT+h			Den=iT+j, g/h			
Con/100,000	G	H	Con/100,000=gT+h		T,°C	I	J	T,°C	
15--160	-0.080	36.6	150--400	0.267	6	120--230	-0.0015	0.960	
0--200	-0.073	33.4	125--350	0.240	10	140--280	-0.00125	0.940	
75--145	-0.075	33	100--375	0.229	10	130--260	-0.00107	0.920	
0--200	-0.033	34.4	175--325	0.267	8	100--250	-0.00125	0.935	
95--200	-0.060	30.3	125--325	0.229	11	100--250	-0.00125	0.915	
75--200	-0.069	33.6	125--325	0.229	11	100--240	-0.00125	0.900	25/45
50--200	-0.060	32	125--325	0.229	11	120--250	-0.00125	0.945	
(-80)--120	-0.067	37.3	150--375	0.229	17	40--130	-0.00125	0.825	
(-80)--120	-0.050	35	50--350	0.200	19	60--180	-0.00114	0.845	
(-80)--120	-0.067	35.7	150--375	0.229	17	60--190	-0.00125	0.840	
(-80)--120	-0.053	34.2	125--400	0.200	13.5	60--200	-0.00114	0.840	
(-60)--140	-0.033	29	125--425	0.229	14	80--190	-0.00107	0.810	
(-60)--140	-0.067	31.5	175--500	0.343	6				10/110/180
(-60)--140	-0.100	30.3	125--400	0.373	25				10/70/120
(-60)--140	-0.050	30.7	125--350	0.246	18	60--170	-0.00125	0.780	
45--160	-0.083	35	100--350	0.320	23				80/120/160/180
(-40)--60	0.182	42	200--500	0.375	6.25	(-40)--105	-0.00125	0.690	60/125/140
45--160	-0.104	41	100--350	0.356	23				50/70/120/160
45--160	-0.136	57.5	125--350	0.250	16	30--160	-0.001	0.930	
(-40)--60	0.188	51	225--500	0.409	6.25	(-40)--95	-0.00125	0.690	90/135/150
30--160	-0.075	30	125--350	0.267	17	40--180	-0.00107	0.760	
(-40)--60	0.118	29.5	200--500	0.375	6.25	(-40)--110	-0.00133	0.655	100/135/160
(-80)--20	-0.125	44	125--375	0.200	16	(-60)--100	-0.00133	0.795	130/160
(-80)--80	-0.063	35.5	50--350	0.150	15	60--180	-0.00133	0.840	200/240
(-20)--20	-0.214	52.5	175--500	0.277	10	0--80	-0.00125	0.760	90/100/130
(-80)--60	-0.100	40.5	75--350	0.171	16	70--170	-0.00167	0.850	0/20/200/220
0--200	-0.050	39.4	150--350	0.222	14.5	0--230	-0.00125	1.075	300/320
0--200	-0.400	36	175--400	0.233	13	0--270	-0.00107	0.980	
0--200	-0.120	56.4	150--375	0.246	15	0--170	-0.00125	1.250	220/300
0--200	-0.400	36	150--350	0.222	14.5	0--240	-0.00118	1.020	320/340

Tablo10. Elektronik Komponent Verileri . Grup 4.

	Tb °C	MW	$\lambda=AT+B$ T=°C $\lambda=cal/g$		$(Cp)_{liq}=a+bT$ T=°C Cp=cal/g°C		$(Cp)_{vap}=A+BT$		$\log P=log a+b \cdot \log T$ T=°K P=psia	
			T	λ	T	Cp	A	B	a	b
ALKANES										
Methane	-161.5		-190	133	-171	0.81	0.5726	0.000586	1.53E-14	7.358
			-180	131	-166	0.82				
			-170	128	-158	0.84				
			-160	124	-150	0.85				
			-150	120	-142	0.87				
			-140	115	-134	0.89				
			-130	109	-126	0.93				
			-120	102	-118	0.97				
			-110	94	-110	1.03				
			-100	83	-102	1.12				
			-90	65	-94	1.24				
Ethane	-88.6		-136	132	30	1.3	0.4458	0.000785	1.27E-21	9.630
Propane	-42.1		-80	112	90	1.07	0.4275	0.0006678	2.42E-21	9.200
Butane	-0.5		-74	108	140	0.97	0.4745	0.000578	2.08E-24	10.166
Heptane	98.4		-40	98	0.57	0.001	0.4469	0.000638	2.48E-26	10.385
C2-C4 MONOOLEFINS										
Ethylene	-103.7		10	20	10	1	0.4375	0.000545	2.22E-21	9.75
Propylene	-47.7		90	10	80	0.97	0.394	0.00057	1.97E-32	10.08
1-Butene	-6.3		140	12	140	1.1	0.406	0.00054	1.07E-23	9.91
C2-C4 ALKYNES										
Acetylene	-84		30	43	30	1	0.44	0.000235	1.92E-20	9.185
Methylacetylene	-23.3		120	30	100	0.91	0.39	0.0004	8.65E-21	8.85
1-Butyne	8.7		180	34	180	0.93	0.36	0.00048	2.35E-21	8.88
PRIMARY ALCOHOLS										
Ethanol	78.4		-60	245	-30	0.485	100	0.43	3.415E-31	12.45
Propanol	97.8		-60	210	-30	0.48	100	0.44	4.34E-35	13.87
C2-C4 ALCOHOLS										
CHLORINATED ETHYLENES										
CHLORINATED ALIPHATICS										
Propyl Chloride	46.5		-60	100	0.453	6E-04	100	0.35	1.82E-14	5.818
Propylene Dichloride	96.4		-60	84	0.347	3E-04	100	0.28	9.148E-16	6.125
PROPYLENE GLYCOLS										
Propylene Glycol	187.3		100	196	0.563	0.001	0.4375	0.00035	7.5E-47	17.82
Dipropylene Glycol	231		100	120	0.556	0.001	0.327	0.000396	3.56E-47	17.66
Glycerine	290		100	220	0.62	0.001	0.375	0.00045	2.75E-50	18.49
C5-C8 ALKENES										
1-Pentene	-30		0	90	-20	0.49	0.4135	0.000606	4.957E-20	8.28
1-Hexene	63.5		0	88	0.4992	9E-04	0.46	0.000516	9.99E-24	9.5671
1-Heptene	93.6		0	88	0.465	0.001	0.446	0.00056	4.388E-27	10.72
1-Octene	121.3		40	85	0.48	9E-04	0.446	0.00056	8.74E-32	12.3977
C4-C5 BRANC. HYDROCARBONS										
i-butane	-11.7		-40	93	-20	0.535	0	0.37	8.06E-12	5.22
i-pentane	27.8		-40	92	-20	0.51	0	0.37	1.57E-24	10.06

Tablo 11. Elektronik Komponent Verileri . Grup 5.

		Antoine			Tmin	Tmax
		c1	c2	c3		
CarbonTetrachloride	CCL4	6.8941	1219.58	227.17	-20	101
Trichlorofluoromethane	CCL3F	6.8843	1043.01	236.86	-33	27
Dichlorodifluoromethane	CCL2F2	6.6862	782.07	235.38	-119	-30
Chlorotrifluoromethane	CCLF3	6.3511	522.06	231.68	-150	-81
Carbon-Tetrafluoride	CF4	6.9723	540.50	260.10	-180	-125
Carbon-Monoxide	CO	6.2402	230.27	260.01	-210	-165
Carbon-Dioxide	CO2	9.8106	1347.79	273.00	-119	-69
Carbonyl-Sulfide	COS	6.9072	804.48	250.00	-111	-49
Carbon-Disulfide	CS2	6.9419	1168.62	241.54	-45	69
Chloroform	CHCL3	6.9371	1171.20	227.00	-13	97
Dichlorofluoromethane	CHCL2F	6.9758	996.27	234.17	-91	9
Chlorodifluoromethane	CHCLF2	6.7577	740.39	231.86	-48	-33
Trifluoromethane	CHF3	7.0886	705.33	249.78	-128	-82
Triiodomethane	CHI3	6.5960	1567.80	204.00	138	254
Isothiocyanic-Acid	CHNS					
Dichloromethane	CH2CL2	7.0803	1138.91	231.46	-44	59
Chlorofluoromethane	CH2CLF	6.2045	740.39	231.86	-55	12
Difluoromethane	CH2F2	7.1389	821.70	244.70	-82	-32
Diiodomethane	CH2I2	6.9425	1567.80	204.00	83	232
Formaldehyde	CH2O	7.1561	957.24	243.01	-88	-2
Formic-Acid	CH2O2	7.3779	1563.28	247.07	-2	136
Bromomethane	CH3BR	6.9597	986.59	238.33	-58	53
Chloromethane	CH3CL	6.9944	902.45	243.61	-93	-7
Fluoromethane	CH3F	7.0976	740.22	253.89	-132	-64
Iodomethane	CH3I	6.9880	1146.34	236.66	-13	52
Nitromethane	CH3NO2	7.0440	1291.00	209.01	5	136
Methyl-Nitrite	CH3NO2					
Methyl-Nitrate	CH3NO3					
Methane	CH4	6.6956	405.42	267.78	-181	-152
Methanol	CH4O	8.0724	1574.99	238.87	-16	91
Methanethiol	CH4S	7.0316	1015.55	238.71	-70	25
Methylamine	CH5N	7.4969	1079.15	240.24	-61	38
Tetrachloroethene	C2CL4	7.0200	1415.49	221.01	34	187
Hexachloroethane	C2CL6	7.0863	1626.96	197.05	33	186
1,1,2-Trichlorotrifluoroethane	C2CL3F3	6.8803	1099.90	227.50	-25	83
1,2-Dichlorotetrafluoroethane	C2CL2F4	6.8708	942.34	232.63	-95	4
Chloropentafluoroethane	C2CLF5	6.8333	802.97	242.28	-98	-43
Tetrafluoroethene	C2F4	6.8966	683.84	245.94	-133	-63
Hexafluoroethane	C2F6	6.7933	657.06	246.22	-103	-73
Cyanogen	C2N2	6.4363	576.58	182.31	-77	-4
Trichloroethene	C2HCL3	7.0281	1315.10	230.01	-13	127
Pentachloroethane	C2HCL5	6.7400	1378.00	197.00	25	162
Trifluoroethene	C2HF3	5.6872	491.36	227.23	-93	-31
Acetylene (Ethyne)	C2H2	9.1402	1232.60	280.90	-129	-83
1,1-Dichloroethene	C2H2CL2	6.9722	1099.40	237.20	-28	32
Cis-1,2-Dichloroethene	C2H2CL2	7.0223	1205.40	230.60	0	84
Trans-1,2-Dichloroethene	C2H2CL2	6.9651	1141.90	231.00	-38	85
1,1,2,2-Tetrachloroethane	C2H2CL4	6.6317	1228.10	179.90	25	130
1,1-Difluoroethene	C2H2F2	6.3492	491.36	227.24	-140	-86
Cis-1,2-Difluoroethene	C2H2F2	5.3140	491.36	227.23	-78	3
Trans-1,2-Difluoroethene	C2H2F2	5.3140	491.40	227.23	-78	3

		Antoine			Tmin	Tmax
		c1	c2	c3		
Pyridine	C5H5N	6.9882	1344.20	212.01	12	152
2-Methylthiophene	C5H6S	6.9390	1326.48	214.31	9	138
3-Methylthiophene	C5H6S	6.9861	1363.84	216.78	11	141
1,2-Pentadiene	C5H8	6.9182	1104.99	228.85	-20	66
1,3-Pentadiene, Cis	C5H8	6.9109	1101.92	229.37	-17	65
1,3-Pentadiene, Trans	C5H8	6.9132	1103.84	231.72	-16	63
1,4-Pentadiene	C5H8	6.8354	1018.00	231.46	-33	46
2,3-Pentadiene	C5H8	6.9622	1126.84	227.84	-13	69
3-Methyl-1,2-Butadiene	C5H8	6.9435	1103.90	230.89	-20	62
2-Methyl-1,3-butadiene	C5H8	6.8856	1071.58	233.51	-18	55
1-Pentyne	C5H8	6.9673	1092.52	227.19	-43	62
2-Pentyne	C5H8	7.0461	1189.87	229.60	-33	78
3-Methyl-1-Butyne	C5H8	6.8846	1014.81	227.11	-55	47
Cyclopentene	C5H8	6.9207	1121.81	233.46	-29	105
Spiropentane	C5H8	6.9170	1090.08	231.10	3	71
1-Pentene	C5H10	6.8465	1044.90	233.52	-55	51
2-Pentene, Cis	C5H10	6.8727	1067.95	230.59	-49	58
2-Pentene, Trans	C5H10	6.9058	1083.99	232.97	-49	58
2-Methyl-1-Butene	C5H10	6.8731	1053.78	232.79	-53	52
3-Methyl-1-Butene	C5H10	6.8262	1013.47	236.62	-63	41
2-Methyl-2-Butene	C5H10	6.9156	1095.09	232.84	-48	60
Cyclopentane	C5H10	6.8868	1124.16	231.36	-40	71
2,3-Dibromo-2-Methylbutane	C5H10BR2	7.3674	1695.90	207.00	81	211
Valeraldehyde	C5H10O	7.0192	1316.00	215.01	4	139
2-Pentanone	C5H10O	6.9500	1274.60	210.91	2	137
Thiacyclohexane	C5H10S	6.9052	1422.47	211.72	29	170
Cyclopentanethiol	C5H10S	6.9150	1388.63	212.05	81	173
1-Bromopentane	C5H11BR	6.9558	1401.63	214.38	41	173
1-Chloropentane	C5H11CL	6.9662	1332.89	218.50	24	148
1-Chloro-3-Methylbutane	C5H11CL	6.7953	1258.50	223.00	39	124
2-Chloro-2-Methylbutane	C5H11CL	6.9590	1258.50	223.00	7	123
Pentane	C5H12	6.8763	1075.78	233.21	-50	58
2-Methylbutane (Isopentane)	C5H12	6.8332	1040.73	235.45	-57	49
2,2-Dimethylpropane	C5H12	6.6043	883.42	227.78	-13	29
Methyl-Tert-Butyl-Ether	C5H12O	5.8960	708.69	179.90	2	80
Pentyl-Alcohol	C5H12O	7.1776	1314.56	168.16	37	138
Tert-Pentyl-Alcohol	C5H12O	7.8753	1604.70	208.16	55	133
Butyl-Methyl-Sulfide	C5H12S	6.9458	1363.808	212.07	17	150
Ethyl-Propyl-Sulfide	C5H12S	6.9338	1341.57	212.51	14	145
2-Methyl-2-Butanethiol	C5H12S	6.8284	1254.89	218.76	-3	129
1-Pentanethiol	C5H12S	6.9331	1369.48	211.31	20	113
Hexachlorobenzene	C6CL6	9.7860	4597.57	355.96	114	
Hexafluorobenzene	C6F6	7.0330	1227.98	215.50	-3	117
o-Dichlorobenzene	C6H4CL2	7.0703	1649.55	213.32	58	210
m-Dichlorobenzene	C6H4CL2	7.3037	1782.40	230.01	53	202
p-Dichlorobenzene	C6H4CL2	6.9980	1575.11	208.52	54	204
m-Difluorobenzene	C6H4F2	7.0658	1310.27	222.58	36	114
o-Difluorobenzene	C6H4F2	7.0203	1310.27	222.58	31	130
p-Difluorobenzene	C6H4F2	7.0881	1310.27	222.58	34	112
Bromobenzene	C6H5BR	6.8606	1438.82	205.45	47	117
Chlorobenzene	C6H5CL	6.9781	1431.05	217.56	47	147

Ketene	C2H2O	6.9573	803.10	238.01	-103	-18
Bromoethylene	C2H3BR	7.2438	1219.31	264.02	-88	16
Chloroethylene	C2H3CL	6.4971	783.40	230.01	-88	17
1,1,2-Trichloroethene	C2H3CL3	6.9653	1351.00	217.00	29	155
Acetyl-Chloride	C2H3CLO	6.8407	1062.86	217.63	-36	82
Fluoroethylene	C2H3F	6.3395	593.55	243.11	-149	-72
1,1,1-Trifluoroethane	C2H3F3	6.9038	788.21	243.24	-3	27
Acetonitrile	C2H3N	7.0735	1279.20	224.01	-13	117
Ethylene	C2H4	6.7476	585.00	255.00	-153	-91
1,2-Dibromoethane	C2H4BR2	6.7215	1290.82	201.75	52	131
1,1-Dichloroethane	C2H4CL2	6.9653	1171.42	228.13	-31	79
1,2-Dichloroethane	C2H4CL2	7.0253	1271.25	222.94	-33	100
1,2-Difluoroethane	C2H4F2	7.0300	910.00	244.00	-35	0
1,2-Diodoethane	C2H4I2	6.9883	1647.10	201.00	98	253
Ethylene-Oxide	C2H4O	7.2701	1115.10	244.15	-73	37
Acetaldehyde	C2H4O	7.0565	1070.60	236.01	-63	47
Acetic-Acid	C2H4O2	7.2996	1479.02	216.82	17	157
Methyl-Formate	C2H4O2	7.1704	1125.20	230.56	-48	51
Thioacetic-Acid	C2H4OS	7.7489	1479.02	216.82	40	106
Thiacyclopropane	C2H4S	7.0373	1194.37	232.42	-35	77
Bromoethane	C2H5BR	6.9200	1090.81	231.72	-47	60
Chloroethane	C2H5CL	6.9400	1012.78	236.68	-73	37
Fluoroethane	C2H5F	6.9785	854.21	246.16	-103	-21
Iodoethane	C2H5I	6.9590	1232.00	229.00	30	60
Ethylenimine	C2H5N	7.1323	1133.70	210.01	-25	86
Nitroethane	C2H5NO2	7.5878	1671.27	241.19	-21	114
Ethyl-Nitrate	C2H5NO3	7.1637	1336.80	224.90	0	60
Ethane	C2H6	6.8345	663.70	256.47	-143	-75
Methyl-Ether	C2H6O	7.3164	1025.56	256.06	-94	-8
Ethyl-Alcohol	C2H6O	8.2133	1652.05	231.48	-3	96
Ethylene-Glycol	C2H6O2	8.7945	2615.40	244.91	91	221
Methyl-Sulfide	C2H6S	6.9488	1090.76	230.80	-47	58
Ethanethiol	C2H6S	6.9521	1084.53	231.39	-49	56
Methyl-Disulfide	C2H6S2	6.9779	1346.34	218.86	6	135
Ethylamine	C2H7N	7.3862	1137.30	235.86	-58	43
Dimethylamine	C2H7N	7.0639	1024.40	238.01	-55	37
Acrylonitrile	C3H3N	6.9163	1208.30	222.01	-18	112
Allene(Propadiene)	C3H4	5.7137	458.06	196.07	-99	-16
Propyne(Methylacetylene)	C3H4	6.7849	803.73	229.08	-90	-6
Acrylic-Acid	C3H4O2	7.1926	1441.50	193.01	42	177
3-Bromo-1-Propene	C3H5BR	7.0519	1259.83	232.04	17	93
3-Chloro-1-Propene	C3H5CL	6.9388	1099.60	226.01	-43	77
1,2,3-Trichloropropane	C3H5CL3	7.0028	1484.10	204.01	42	197
3-Iodo-1-Propene	C3H5I	6.9693	1316.50	220.00	20	142
Propionitrile	C3H5N	6.9301	1277.20	218.01	-3	132
Propene	C3H6	6.8196	785.00	247.00	-112	-32
Cyclopropane	C3H6	6.8879	856.01	246.51	-93	-28
1,2-Dibromopropane	C3H6BR2	6.8911	1419.60	212.00	50	250
1,2-Dichloropropane	C3H6CL2	6.9654	1296.40	221.00	15	135
1,3-Dichloropropane	CH3H6CL	6.9719	1376.20	216.00	34	162
2,2-Dichloropropane	C3H6CL2	6.9482	1201.10	226.00	-6	105

Fluorobenzene	C6H5F	7.1870	1381.83	235.57	-23	97
Iodobenzene	C6H5I	7.0119	1640.13	208.78	17	197
benzene	C6H6	6.9057	1211.03	220.79	-16	104
Phenol	C6H6O	7.1345	1516.07	174.57	72	208
Benzenethiol	C6H6S	6.9902	1529.45	203.05	52	198
2-Picoline	C6H7N	7.0324	1415.73	211.56	79	169
3-Picoline	C6H7N	7.0502	1481.77	211.21	74	185
Aniline	C6H7N	7.2418	1675.30	200.01	67	227
1-Hexyne	C6H10	6.9121	1194.60	225.00	-8	118
Cyclohexene	C6H10	6.8724	1221.90	223.18	27	87
1-Methylcyclopentene	C6H10	6.8688	1199.60	225.00	-5	130
3-Methylcyclopentene	C6H10	6.8726	1165.60	227.00	-10	119
4-Methylcyclopentene	C6H10	6.8702	1197.60	225.00	-2	130
Cyclohexanone	C6H10O	6.9766	1495.58	209.56	90	166
1-Hexene	C6H12	6.8657	1152.97	225.85	-29	87
2-Hexene, cis	C6H12	7.0381	1258.57	233.85	-25	92
2-Hexene, Trans	C6H12	6.8934	1173.34	224.53	-25	91
3-Hexene, Cis	C6H12					90
3-Hexene, Trans	C6H12					
2-Methyl-1-Pentene	C6H12					
3-Methyl-1-Pentene	C6H12					
4-Methyl-1-Pentene	C6H12					
2-Methyl-2-Pentene	C6H12					
3-Methyl-2-Pentene, Cis	C6H12					
3-Methyl-2-Pentene, Trans	C6H12					
4-Methyl-2-Pentene, cis	C6H12					
4-Methyl-2-Pentene, Trans	C6H12					
2-Ethyl-1-Butene	C6H12					
2,3-Dimethyl-1-Butene	C6H12					
3,3-Dimethyl-1-Butene	C6H12					
2,3-Dimethyl-2-bUTENE	C6H12					
Cyclohexane	C6H12					
Methylcyclopentane	C6H12					
Cyclohexanol	C6H12O					
Hexanal	C6H12O					
Thiacycloheptane	C6H12S					
Hexane	C6H14					
2-Methylpentane	C6H14					
3-Methylpentane	C6H14					
2,2-Dimethylbutane	C6H14					
2,3-Dimethylbutane	C6H14					
Propyl-Ether	C6H14O					
Isopropyl-Ether	C6H14O					
Hexyl-Alcohol	C6H14O					
Butyl-Ethyl-Sulfide	C6H14S					
Isopropyl-Sulfide	C6H14S					
Methyl-Pentyl-Sulfide	C6H14S					
Propyl-Sulfide	C6H14S					
1-Hexanethiol	C6H14S					
Propyl-Disulfide	C6H14S2					
Triethylamine	C6H15N					

1,2-Diiodopropane	C3H6I2	6.0765	1507.41	244.70	125	275
Propylene-Oxide	C3H6O	6.6546	915.31	208.29	-48	67
Allyl-Alcohol	C3H6O	7.3424	1271.70	188.01	13	127
Propionaldehyde	C3H6O	7.0493	1154.80	229.01	-38	77
Acetone	C3H6O	7.2316	1277.03	238.22	-32	77
Thiacyclobutane	C3H6S	7.0167	1321.33	224.51	-5	120
1-Bromopropane	C3H7BR	7.0377	1259.84	232.04	-53	71
2-Bromopropane	C3H7BR	7.0046	1223.48	236.51	-62	60
1-Chloropropane	C3H7CL	6.9311	1121.12	230.21	-43	77
2-Chloropropane	C3H7CL	6.9654	1081.60	230.01	-48	67
1-Fluoropropane	C3H7F	6.9533	965.18	239.50	-70	30
2-Fluoropropane	C3H7F	7.0745	965.18	239.50	-49	8
1-Iodopropane	C3H7I	7.2212	1508.41	244.70	-36	103
2-Iodopropane	C3H7I	7.0167	1340.45	234.37	-43	90
1-Nitropropane	C3H7NO2	7.1146	1487.45	215.23	59	131
2-Nitropropane	C3H7NO2	7.4865	1664.04	241.00	-19	120
Propyl-Nitrate	C3H7NO3	7.7372	1721.72	245.49	0	70
Isopropyl-Nitrate	C3H7NO3	6.4201	1018.57	183.53	0	70
Propane	C3H8	6.8040	803.81	246.99	-108	-25
Ethyl-Methyl-Ether	C3H8O	5.8319	504.49	160.76	-68	37
Propyl-Alcohol	C3H8O	7.6192	1375.14	193.01	12	127
isopropyl-Alcohol	C3H8O	8.1182	1580.92	219.62	0	101
Ethyl-Methyl-Sulfide	C3H8S	6.9385	1182.56	224.78	-26	90
1-Propanethiol	C3H8S	6.9285	1183.31	224.62	-25	91
2-Propanethiol	C3H8S	6.8773	1113.90	226.16	-37	75
Propylamine	C3H9N	6.9468	1108.20	224.01	-38	77
Trimethylamine	C3H9N	6.9704	968.70	234.01	-58	32
Octafluorocyclobutane	C4F8	6.8153	862.49	225.15	-32	1
Butadiene(Biacetylene)	C4H2	5.5192	460.68	164.59	-78	0
1-Buten-3-Yne(Vinylacetylene)	C4H4	6.9530	957.00	230.01	-73	32
Furan	C4H4O	6.9753	1060.85	227.75	-35	90
Thiophene	C4H4S	6.9593	1246.02	221.35	-12	108
1,2-Butadiene	C4H6	6.9938	1041.12	243.27	-26	30
1,3-Butadiene	C4H6	6.8500	930.55	238.85	-58	14
1-Butyne(Ethylacetylene)	C4H6	6.9820	988.75	233.01	-68	27
2-Butyne(Dimethylacetylene)	C4H6	7.0734	1101.71	235.81	-30	47
Cyclobutene	C4H6	6.9577	1009.32	244.99	-77	2
Acetic-Anhydride	C4H6O3	7.1216	1427.77	198.05	35	164
Butyronitrile	C4H7N	7.0396	1390.70	217.00	34	160
Isobutyronitrile	C4H7N	7.2159	1390.70	217.00	49	120
1-Butene	C4H8	6.8429	926.10	240.00	-81	13
2-Butene,cis	C4H8	6.8693	960.10	237.00	-73	23
2-Butene,Trans	C4H8	6.8695	960.80	240.00	-76	20
2-Methylpropene	C4H8	6.8413	923.20	240.00	-82	12
Cyclobutane	C4H8	6.9163	1024.54	241.38	-73	17
1,2-Dibromobutane	C4H8BR2	7.2570	1759.08	235.01	8	166
2,3-Dibromobutane	C4H8BR2	7.2002	1691.48	230.22	5	161
1,2-Diiodobutane	C4H8I2	6.2433	1507.41	244.70	110	246
Butyraldehyde	C4H8O	7.0212	1233.00	223.01	-18	107
2-Butanone	C4H8O	7.2087	1368.21	236.51	-16	103
P-Dioxane	C4H8O2	7.0063	1288.50	211.01	2	137
Ethyl-Acetate	C4H8O2	7.0146	1211.90	216.01	-13	112
Thiacyclopentane	C4H8S	6.9954	1401.94	219.61	14	147
1-Bromobutane	C4H9BR	6.9225	1298.61	219.70	19	141
2-Bromobutane	C4H9BR	6.8272	1229.08	220.00	10	146
2-Bromo-2-Methylpropane	C4H9BR	6.6685	1129.70	225.00	-7	110
1-Chlorobutane	C4H9CL	6.9379	1227.43	224.11	-18	112
2-Chlorobutane	C4H9CL	6.9447	1195.80	226.01	-23	102
1-Chloro-2-Methylpropane	C4H9CL	6.9530	1205.08	227.05	-54	69
2-Chloro-2-Methylpropane	C4H9CL	6.8671	1114.90	229.01	-38	87
2-Iodo-2-Methylpropane	C4H9I	7.2539	1507.41	244.70	42	124

REFERANSLAR

ASPEN/SP. *The Process Simulator with the Power to Perform, from Mainframe to Personal Computer*. JSD Simulation Service Company. Colorado, 1994.

Biegler, L.T., I.E. Grossman, W.W. Westerberg. *Systematic Methods of Chemical Process Design*. Prentice-Hall International Series. New Jersey, 1997.

Cooper, D., M. Sinha. *Picles+Digest: Control Station for Windows*. Cache News Program Bulletin. Cache Series. Spring 1997.

Engineering Data Book. Natural Gas Processors Supplier Association, Boston, 1972.

Engineering Design Seminar: Energy Balances. UOP Design Manuals. 31st Session. Boston, 1993.

Franks, M. *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineering*. 2nd ed. Wiley, New York, 1994.

Perris, F.A., M.L. Preston, W.H. Swann. *A Computer Program Package for the Flowsheeting and Evaluation of Chemical Processes*. Report No. R/73/1. Imperial Chemical Industries Limited, 1973.

Simpson, A. *Understanding DbaseIII*. Sybex, Berkeley, 1985.

Turton, R., R.C. Bailie, W.B. Whiting, J.A. Shaeiwitz. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. Prentice-Hall International Series. New Jersey, 1998.

EKLER

Ek 1

TEMEL İŞLEM MODÜLLERİ

Bölüm 2' de belirtilen Elektronik El Kitabı Temel İşlemler Modülleri aşağıda verilmiştir. Buna ilaveten bu modüller diskette Dyflo.F90 dosyası adı altında saklanmıştır. Hazırlanan bu modüller (Franks, 1994) proje yöneticisi tarafından uzun yıllar çeşitli tasarım problemlerinin çözümünde denenmiş ve fevkalade başarılı sonuçlar elde edilmiştir. Örneğin 50 komponentli bir sıvı-faz denge hesabının yapılması, kaynama noktasının tesbiti ve fazlardaki kompozisyon dağılımının bulunması bir saniyede gerçekleşen bir hesaplama olayıdır.

Tablo E1. TEMEL İŞLEM MODÜL TANIMLARI

```
! DYFLO Package - Prof.Dr. Bilgin Kısakürek
! Stream number = 500      Component number = 50
! Equilibrium Subroutines
!   EQUIL      VVBOIL      PRNTLS
!   CONV, CPS  DEWPT      HLDP
!   ENTHL      HTEXCH     SUM
!   ENTHV      FLASH      SPLIT
!   TEMP       CVBOIL     PRNTL
!   ACTY       PCON       PVAP

! common/CPLOT/LN1, LN2, PTIT, YTIT, XTIT
! common/CINT/T, DT, IOD, JS, JS4, JN, DXA(100), XA(100)
! common/CPRNT/JCOL, TPR, LI, PP, QP, RP, SP
! character PTIT*40, YTIT*20, XTIT*20
! logical LSTR
! common/CDYF/STR(500,34), DAT(31,10), RCT(32), NCF, NCL, LSTR, IDL
! common/DPRNT/NPR, NCP, LL(56,9), STP(9,34), Var(10)
! common/CRCT/AR, BR, AF, BF, KCN, DCX(30), DCY(30)

! Argument List
! NFIN : Finish index, 1-finish, 2-no finish
! L : Stream numbers to be printed. Put 0 for empty streams
! LN1 : Print to table. 6=monitor, 7=(Dyflo.txt)
! LN2 : Print to excel. 6=no table, 11=Excel tables
! LN1=7 -> 'Dyflo.txt' will be generated
! LN2=11 -> 'Dyf_X1..Dyf_X5.txt' //O=11-15
! 'Dyf_Flow.txt' =21
! 'Dyf_Temp.txt' =22
! 'Dyf_Var.txt' =23
! Var : Extra variables

! Subroutine CONV(X, XC, NR, NC)
! Subroutine CPS(X, XC, R, NC)
! NC : Convergence index
! 2-not converged ; 1-converged
! Set NC=0 in main program
```

Subroutine ENTHL(I)
 | Liquid Enthalpy
 | I : Stream number, should contain all information

Subroutine ENTHV(I)
 | Vapor Enthalpy

Subroutine TEMP(I,L)
 | Temperature for given enthalpy
 | Initial estimate should be given in liquid line
 | I : Stream number
 | L : Phase index. 0-vapor, 3-liquid

Subroutine ACTY(N)
 | Liquid Activity for Ternary Systems
 | Liquid stream should contain all information
 | IDL : Ideality index. 1 - ideal, 0 - real

Function PVAP(N,IL)
 | Vapor Pressure
 | N : Component number
 | IL : Liquid stream number
 | FCOD : Formula code = DAT(31,1) = 1:Ln 3:Polynomial
 | 2:Log 4:Other
 | TCOD : Temp. code = DAT(31,2) = 1:C 2:K 3:R

Subroutine EQUIL(IL,IV)
 | Vapor/Liquid Equilibrium
 | Boiling point temperature and Vapor compositions are calculated
 | Initial estimates should be given in liquid line
 | IL : Liquid stream ; IV : Vapor stream

Subroutine DEWPT(IV,IL)
 | Dew Point Calculation
 | Initial estimates should be given in liquid line

Subroutine HTEXCH(Jin,Jout,HT,L)
 | Single Stream Heat Exchange
 | I : Input Jout: Output
 | HT : Heat load IL : Stream phase. 0-vapor, 3-liquid

Subroutine CVBOIL(Jin,Jout,HT)
 | Constant Volume Boiler
 | Boiling point temperature, Enthalpy and Boilup rates
 | Jin : Input stream number Jout: Output vapor stream
 | HT : Heat flux

Subroutine FLASH(Jin,JV,JL,HT)
 | Flash into Vapor and Liquid
 | Total, component splits and equilibrium temperatures are
 | determined. Can be used for partial condenser, total condenser,
 | and superheater
 | Jin: Input stream, contains all information
 | JV : Output vapor stream number, contains vaporization ratio
 | JL : Output liquid stream number, contains all estimates
 | HT : Input heat load, Q*F

Subroutine VVBOIL(Jin,Jout,IHL,Q)
 | Variable Volume Boiler
 | Jin : Input stream number, should contain all information
 | Jout: Output vapor stream number, should contain estimates
 | IHL : Holdup node number Q: Heat flux to the boiler

```

Subroutine PCON(Jin,JV,JL,TC)
| Partial Condenser with given Exit Temperature
| Can also be used as Total Condenser
|   Tc : Specified condensate temperature
|   R  : Vaporization ratio
|   Teq: Equilibrium temperature

Subroutine HLDP(Jin,Jout,L,HL,Q)
| Generalized Holdup, Jacketed Vessel
|   Jin : Input stream number, contains all information
|   Jout: Output stream number, contains all estimates
|   HL  : Holdup   Q: Heat flux  M: Exit stream 2.  RKJ: Ratio K/J

Subroutine SPLIT(Jin,K,M,RKJ)
| Stream Splitter
|   Jin: Feed stream   K  : Exit stream 1
|
|   M  : Exit stream 2  RKJ: Ratio K/J

Subroutine SUM(Jin1,Jin2,K,L)
| Sum of two Streams

Subroutine PRNTL(PRI,TFIN,NFIN,L1,L2,L3,L4,L5,L6,L7,L8)
| Print Streams
|   LN1,LN2 : (6,6)monitor, (7,11)file
|   LN1=7 -> 'Dyflo.txt' will be genetaed
|   LN2=11 -> 'Dyf_X1..Dyf_X5.txt'. I/O=11-15
|           'Dyf_Flow.txt'      =21
|           'Dyf_Temp.txt'      =22
|           'Dyf_Var.txt'      =23
|   Var : Extra variables
|   LL  : Working matrix for STP array, dim=(56,9)
|   STP : Prntl and Prntls array storage, dim=(9,34)

Subroutine PRNTLS(L1,L2,L3,L4,L5,L6,L7,L8)
| Extra Printout for Streams

```


Ek 2

TEMEL İŞLEMLER MODÜLÜ İÇİN GEREKLİ DATABANK VERİ TARAMA PROGRAMI

Bölüm 3' de belirtilen Elektronik El Kitabı Termodinamik Veri Tabanında bulunan ve ayrıntıları Tablo 6-11' de verilen komponent özelliklerinin bazıları Temel İşlemler Modülleri tarafından kullanılmak istendiğinde 'Chem.F90' programı gereklidir. Bu programın yardımı ile uzun ve karmaşık tablolar içinde bulunan komponentlerin istenilen az miktardaki termodinamik özellikleri ayıklanır ve Fortran modül programının veri dosyasına direk olarak aktarılır.

Tablo E2. Databank Veri Tarama Programı

- c DataRead - Component Selection from Original Coade DataBank
- c and then generate standard Coade Databank,
- c Coade.org - Original
- c Coade.dat - Standard

program COADOKU

- c Argument List
- c Comp : Component
- c MolWt : Molecular weight
- c Tcrit : Critical temperature
- c Hvap : Lambda
- c CpA : Vapor heat capacity
- c AntA : Antoine
- c VisA : Viscosity
- c Hgibbs : Gibbs free energy
- lcod : Component code
- MolDia : Molecular diameter
- Tboil : Boiling point
- Hform : Heat of formation
- CpLA : Liquid heat capacity
- DenA : Density
- VolCon : Volumetric conductivity

```
real MolWt,MolDia
common/CDYF/STR(100,14),DAT(10,10),RCT(12),NCF,NCL,LSTR,IDL,MSG
common/DPRNT/NPR,NCPR,LL(10,11),STP(10,14),TPR,LN1,LN2,IP
dimension Tit(80)
```

c Initiation section

```
open(1,file='Coade.org')
LN1=7
9 read(1,100,end=99) Tit
write(6,100) Tit
if(icompt.gt.184) write(7,102) icomp,(Tit(i),i=10,80)
```

```
open(7,file='Coade.dat')
icompt=1
```

c Read from file

```
read(1,105) MolWt,AcFact,BPM,CpLD
read(1,110) Pcrit,STnB,HvA
read(1,120) Tboil,AntB,SG,HvC
read(1,130) SolPar,DenA
read(1,130) Hvap,DenC
read(1,140) Hform,VisA
read(1,110) Tcrit,STnA,CpLE
read(1,115) Vcrit,AntA,API,HvB
read(1,125) AntC,Zra,HvD
read(1,130) VolCon,DenB
read(1,135) DenD
read(1,145) HGibbs,VisB
```

```

                read (1,150) CpA,DipolM
read (1,155) CpC,PolarP
read (1,165) CpE,MolDia,CpLB

```

```

                read (1,155) CpB,StiefF
read (1,160) CpD,EpsK,CpLA
read (1,165) CpF,WatsnF,CpLC

```

c Write to a new file

```

write(LN1,205) MoMwt,Tboil,Hvap
write(LN1,220) CpA,CpB,CpC
write(LN1,225) CpLA,CpLB,CpLC
write(LN1,215) HvA,HvB
write(LN1,230) DenA,DenB
write(LN1,235) VisA,VisB
write(LN1,245) Hform,HGibbs,VolCon
write(LN1,255) AcFact,PBM,API
write(LN1,265) DipolM,StiefF,PolarP

```

```

write(LN1,210) AntA,AntB,AntC
write(LN1,221) CpD,CpE,CpF
write(LN1,226) CpLD,CpLE
write(LN1,216) HvC,HvD
write(LN1,231) DenC,DenD
write(LN1,240) STnA,STnB
write(LN1,250) Tcrit,Pcrit,Vcrit
write(LN1,260) SG,Zra,SolPar
write(LN1,270) EpsK,MolDia,WatsnF

```

```

icomp=icomp+1
goto 9

```

```

100 format(80A1)
102 format(/1x,i3,' ',71A1/1x,67('-'))
110 format(8x,f9.2,11x,e12.5,28x,e11.4)
120 format(8x,f9.2,11x,f10.3,15x,f6.3,8x,e12.4)
130 format(9x,f9.3,10x,e12.5)
140 format(8x,f10.3,11x,f11.4)
150 format(6x,e13.6,12x,f7.2)
160 format(6x,e13.6,11x,f8.2,11x,e11.4)

```

```

101 format(/1x,i3,' ',76A1/1x,67('-'))
105 format(8x,f11.4,11x,f9.4,8x,f11.2,10x,e11.4)
115 format(8x,f10.3,10x,f11.4,8x,f11.2,9x,e12.4)
125 format(28x,f10.3,9x,f12.3,8x,e12.4)
135 format(28x,e12.5)
145 format(9x, f9.3,11x,f11.4)
155 format(6x,e13.6,12x,f8.3)
165 format(6x,e13.6,12x,f8.3,10x,e11.4)

```

```

205 format(1x,MoMwt=' ',f12.3,5x,'Tboil=' ',f12.1,5x,'Hvap=' ',f12.3)
210 format(1x,'AntA=' ',f12.4,5x,'AntB=' ',f12.3,5x,'AntC=' ',f12.3)
215 format(/1x,'HvA=' ',e12.4,5x,'HvB=' ',e12.4)
216 format(1x,'HvC=' ',e12.4,5x,'HvD=' ',e12.4)
220 format(1x,'CpA=' ',e12.4,5x,'CpB=' ',e12.4,5x,'CpC=' ',e12.4)
221 format(1x,'CpD=' ',e12.4,5x,'CpE=' ',e12.4,5x,'CpF=' ',e12.4)
225 format(1x,'CpLA=' ',e12.4,5x,'CpLB=' ',e12.4,5x,'CpLC=' ',e12.4)
226 format(1x,'CpLD=' ',e12.4,5x,'CpLE=' ',e12.4)
230 format(1x,'DenA=' ',e12.4,5x,'DenB=' ',e12.4)
231 format(1x,'DenC=' ',e12.4,5x,'DenD=' ',e12.4)
235 format(1x,'VisA=' ',e12.4,5x,'VisB=' ',e12.4)
240 format(1x,'STnA=' ',e12.4,5x,'STnB=' ',e12.4)
245 format(/1x,'Hform=' ',e12.4,5x,'HGibbs=' ',e12.4,5x,'VolCon=' ',e12.4)
250 format(1x,'Tcrit=' ',e12.4,5x,'Pcrit=' ',e12.4,5x,'Vcrit=' ',e12.4)
255 format(1x,'AcFact=' ',e12.4,5x,'BPM=' ',e12.4,5x,'API=' ',e12.4)
260 format(1x,'SG=' ',e12.4,5x,'Zra=' ',e12.4,5x,'SolPar=' ',e12.4)
265 format(1x,'DipolM=' ',e12.4,5x,'StiefF=' ',e12.4,5x,'PolarP=' ',e12.4)
270 format(1x,'Eps/K=' ',e12.4,5x,'MolDia=' ',e12.4,5x,'WatsnF=' ',e12.4)
99 end

```

Ek 3

DATABANK VERİ SEÇİM PROGRAMI

Bölüm 3' de belirtilen Elektronik El Kitabı Termodinamik Veri Tabanında bulunan ve ayrıntıları Tablo 6-11' de verilen komponent özellikleri Temel İşlemier Modülleri tarafından kullanılmak istendiğinde 'Dbase.prg' programı gereklidir. Bu programın yardımı ile uzun ve karmaşık tablolar içinde bulunan komponentler ayıklanır ve istenilen özellikleri ile beraber Fortran modül programının veri dosyasına direk olarak aktarılır.

Tablo E3. TERMODİNAMİK DATABANK VERİ SEÇİM PROGRAMI

DBASE.PRG

```
set bell off
set talk off
use compdata index compon_name ,Group,Molweight,BoilPoint
store 0 to CHOICE

do while CHOICE < 6
  clear
  @ 4,10 to 16,65 double
  @ 4,35 clear to 4,42
  @ 3,35 to 5,42 double
  @ 4,37 say " Menu"
  @ 6,20 say " 1. ADD new components"
  @ 7,20 say " 2. SORT components with respect to Component Name"
  @ 14,20 say " 7. SORT components with respect to Component Group"
  @ 16,20 say " 8. SORT components with respect to Component Chemical Formula"
  @ 8,20 say " 3. FIND component"
  @ 9,20 say " 4. PRINT labels"
  @ 10,20 say " 5. EDIT data"
  @ 11,20 say " 6. Exit"
  @ 17,20 say " Your choice please ,(1,2,3,4,5,6,7,8), ? : " get CHOICE picture '9'
  READ
  clear

do case
  case CHOICE = 1
    set format to compdata
    append
    set format to
    clear

  case CHOICE = 2
    set talk on
    ? " Now sorting with respect to [CompName] ..."
    sort on Compname to temp
    use
    delete file compdata.dbf
    rena temp.dbf to compdata.dbf
    use compdata
```

```

? " Preparing the index COMP_NAME with respect to [CompName] ..."
index on CompName to comp_name

set talk off
clear

case CHOICE = 7
set talk on
? " Now sorting with respect to [CompGrp] ..."
sort on compgroup to temp
use
delete file compdata.dbf
rena temp.dbf to compdata.dbf
use compdata
? " Preparing the index COMP_GRP with respect to [CompGrp] ..."
index on CompGrp to comp_grp

set talk off
clear

case CHOICE = 8
set talk on
? " Now sorting with respect to [ChemForm] ..."
sort on chemform to temp
use
delete file compdata.dbf
rena temp.dbf to compdata.dbf
use compdata
? " Preparing the index CHEM_FORM with respect to [ChemForm] ..."
index on ChemForm to chem_form

set talk off
clear

case CHOICE = 3
do DBase_Find

case CHOICE = 4
do DBase_Print

case CHOICE = 5
input " Record No. to be corrected : " to RENO
set format to compdata
edit RENO
set format to
clear

case CHOICE = 6
close databases
return

ENDcase
ENDdo
return

*
DBASE_FIND.PRG

use compdata index compon_name
set talk on

tab=space(15)
CHOICE=0

```

```

do while CHOICE < 3
clear
@ 3,12 to 9,60 double
@ 3,32 clear to 3,42
@ 3,32 say " FIND MENU "
@ 5,20 say " 1. Component Name "
@ 6,20 say " 2. Component Antoine Constants "
@ 9,20 say " 3. Component Chemical Formula"
@ 7,20 say " 4. Exit "
@ 8,20 say " Seciminiz, (1,2,3,4) ? : " get CHOICE picture '9'
read

```

```
do case
```

```
case CHOICE = 1
```

```

Accept " Enter Component Name Please " to FNAME
go top
locate for COMPNAME='&FNAME'
if eof()
? " There is no such component in this database ! "
wait
clear
endif

```

```
do while .not. eof()
```

```

if compname<>' ' ?????????????????????????????????
?
? tab+trim(COMPNAME)+' '+trim(COMPGRP)
? tab+ANTCONST
? tab+CHEMFORM
?
wait
endif

```

```
continue
```

```
enddo
```

```
clear
```

```
case CHOICE = 2
```

```

accept " Enter Component Antoine Constants Please " to LNAME
go top
locate for ANTCONST='&LNAME'
if eof()
? " There is no component in this database having those Antoine Constants "
wait
clear
endif

```

```
do while .not. eof()
```

```

if COMPNAME<>' '
? tab+trim(COMPNAME)+" "+trim(COMPGROUP)
? tab+ANTCONST
? tab+CHEMFORM
?
wait
endif

```

```
continue
```

```
enddo
```

```
case CHOICE = 3
```

```
accept " Enter Component Chemical Formula Please " to TNAME
```

```

go top
locate for ANTCONST='&TNAME'
if eof()
  ? " There is no component in this database with this chemical formula "
  wait
  clear
endif

do while .not. eof()
  if COMPNAME<>' '
    ? tab+trim(COMPNAME)+" "+trim(COMPGROUP)
    ? tab+ANTCONST
    ? tab+CHEMFORM
    ?
    wait
  endif
continue
enddo

case CHOICE = 4
close databases
return

endcase
enddo
set talk on
return

```

* DBASE_PRINT.PRG

```

set talk off
CHOICE = 0

do while CHOICE < 4
  clear
  @ 3,15 TO 11,60 double
  @ 3,33 clear to 4,38
  @ 3,30 say ' Print-Out Men\81 '
  @ 5,20 say ' 1. List with respect to component name'
  @ 6,20 say ' 2. List with respect to component group'
  @ 7,20 say ' 3. COMPLETE List'
  @ 8,20 say ' 4. Exit'
  @ 10,20 say ' Your Choice Please : ' get CHOICE picture '9'
  read

  do case

  case CHOICE = 1
  accept ' Enter the first letter of the Component Name ? : ' to FNAME
  tab=space(15)
  accept ' PRINT (Y/N) ? ' to YN
  if upper(YN)='Y'
    set print on
    tab=space(1)
  endif

  use COMPDATA index comp_name
  go top

```

KIRIKKALE PETROL RAFİNERİSİ - UYGULAMA DENENİ.

Tablo E4. Debütanizer Kolonu. Besleme ve Alt Ürün Spesifikasyonu.

Component	Mw g/g-mol	Tbp Deg C	Lden g/ml	Antoine Constants			Spec. Heat of Vap		HVap cal/g-mol	Spec. Heat of Liq.	
				C1	C2	C3	Av	Bv		Al	Bl
Paraffins	16,043	-161.55	0.425	6.70	-711.7	267.8	6.061	0.0040		13.114	-0.0226
Methane	30,069	-88.55	0.548	6.83	-1145.7	256.5	1.955	0.0386	1206.5	15.856	-0.0050
Ethane	44,096	-42.05	0.582	6.80	-1393.0	247.0	-1.276	0.0741	3490.4	20.868	-0.0030
Propane	58,123	-0.15	0.579	6.81	-1622.1	238.7	-0.425	0.0925	4997.6	28.688	-0.2480
N-Butane	58,123	-11.65	0.557	6.91	-1624.2	246.7	-2.594	0.1029	4561.4	27.455	-0.0063
Iso-Butane	72,15	36.05	0.626	6.88	-1852.3	233.2	-0.822	0.1159	6317.6	34.324	-0.0346
N-Pentane	72,15	28.05	0.620	6.83	-1799.3	235.4	-2.698	0.1234	5941.7	31.635	-0.0228
Iso-Pentane	86,177	68.75	0.659	6.87	-2012.5	224.2	-1.132	0.1392	7537.5	43.444	-0.0515
N-Hexane	86,177	60.25	0.653	6.84	-1962.1	226.6	-3.050	0.1507	7146.5	38.874	-0.0280
2-Methylpentane	86,177	63.25	0.664	6.82	-1980.2	227.1	-1.137	0.1392	7253.1	40.543	-0.0377
3-Methylpentane	86,177	49.75	0.662	6.75	-1883.7	229.3	-5.045	0.1564	6628.8	40.117	-0.0479
2,2-Dimethylbutane	86,177	58.05	0.649	6.81	-1954.1	228.9	-3.925	0.1494	6977.1	38.413	-0.0333
2,3-Dimethylbutane	100,203	98.45	0.684	6.89	-2170.7	216.6	-1.343	0.1618	8301.6	47.326	-0.0420
N-Heptane	100,203	90.05	0.679	6.87	-2126.9	219.5	-1.343	0.1618	8345.8	43.430	-0.0203
2-Methylhexane	100,203	91.85	0.687	6.87	-2136.9	219.2	-1.343	0.1618	8391.7	47.122	-0.0381
3-Methylhexane	100,203	93.45	0.698	6.87	-2152.7	219.9	-1.343	0.1618	7751.0	46.814	-0.0400
3-Ethylpentane	100,203	79.25	0.674	6.81	-2060.4	223.3	-1.343	0.1618	8189.8	46.391	-0.0386
2,2-Dimethylpentane	100,203	89.95	0.695	6.85	-2135.5	221.8	-1.343	0.1618	7863.5	47.830	-0.0433
2,3-Dimethylpentane	100,203	80.65	0.673	6.83	-2064.4	221.6	-1.343	0.1618	7930.5	44.986	-0.0303
2,4-Dimethylpentane	100,203	86.05	0.693	6.83	-2126.5	225.3	-1.343	0.1618	7681.6	55.595	-0.0960
3,3-Dimethylpentane	100,203	80.85	0.690	6.79	-2083.5	226.0	-6.286	0.1838	7681.6	55.595	-0.0970
2,2,3-Trimethylbutane	114,23	125.65	0.703	6.91	-2315.5	209.4	-1.787	0.1858	9811.4	61.269	-0.0470
N-Octane	114,23	117.65	0.702	6.92	-2293.0	213.7	-1.787	0.1858	9533.9	55.096	-0.0470
2-Methylpentane	114,23	118.95	0.706	6.89	-2283.0	212.4	-1.787	0.1858	9558.1	53.774	-0.0427
3-Methylpentane	114,23	117.75	0.705	6.90	-2279.4	212.6	-1.787	0.1858	9547.8	54.044	-0.0414
4-Methylpentane	114,23	118.55	0.718	6.89	-2281.6	212.6	-1.787	0.1858	9456.7	53.585	-0.0419
3-Ethylhexane	114,23	106.85	0.695	6.84	-2202.2	215.1	-1.787	0.1858	8952.7	50.461	-0.0395
2,2-Dimethylhexane	114,23	115.65	0.712	6.87	-2266.1	214.2	-1.787	0.1858	9294.7	54.412	-0.0482
2,3-Dimethylhexane	114,23	109.65	0.700	6.85	-2222.5	214.8	-1.787	0.1858	9074.3	52.820	-0.0493
2,4-Dimethylhexane	114,23	108.65	0.693	6.86	-2216.1	214.4	-1.787	0.1858	9092.7	56.135	-0.0582
2,5-Dimethylhexane	114,23	111.95	0.710	6.85	-2256.1	217.4	-1.787	0.1858	9028.4	52.608	-0.0394
3,3-Dimethylhexane	114,23	118.75	0.719	6.88	-2294.8	214.8	-1.787	0.1858	9340.3	53.303	-0.0362
3,4-Dimethylhexane	114,23	115.65	0.718	6.86	-2270.3	215.3	-1.787	0.1858	9211.8	53.308	-0.0432
3-ethyl-2-Methylpentane	114,23	118.25	0.727	6.87	-2321.7	219.7	-1.787	0.1858	9152.7	55.982	-0.0501
3-ethyl-3-Methylpentane	114,23	110.15	0.716	6.83	-2244.0	218.4	-1.787	0.1858	8860.9	52.043	-0.0437
2,2,3-Trimethylpentane	114,23	99.25	0.692	6.81	-2090.3	207.7	-1.787	0.1858	8496.7	51.300	-0.0463
2,2,4-Trimethylpentane	114,23	114.75	0.726	6.84	-2292.4	220.4	-1.787	0.1858	8979.7	54.424	-0.0445
2,3,3-Trimethylpentane	114,23	113.45	0.719	6.85	-2267.0	217.5	-1.787	0.1858	9106.8	54.132	-0.0435
2,3,4-Trimethylpentane	114,23	106.45	0.692	6.88	-2290.0	226.4	-10.674	0.2340	8609.7	56.570	-0.0444
2,2,3,3-Tetramethylbutane	128,257	150.65	0.718	6.93	-2588.0	222.8	-2.004	0.2085	10877.6	69.025	-0.0824
N-Nonane	128,257	143.05	0.713	6.91	-2464.4	213.6	0.859	0.2010	10695.5	64.307	-0.0650
2-Methylheptane											

3-Methyloctane	128,257	144,25	0,717	6,90	-2469,9	213,7	-2,829	0,2136	107,30,9	61,888	-0,0486
4-Methyloctane	128,257	142,45	0,716	6,90	-2462,2	214,4	-2,829	0,2136	106,71,9	60,853	-0,0487
3-Ethylheptane	128,257	143,05	0,723	6,90	-2480,9	216,5	-6,518	0,2263	107,14,6	61,018	-0,0467
4-Ethylheptane	128,257	141,25	0,724	6,89	-2469,7	217,2	-6,518	0,2263	106,71,9	60,502	-0,0465
2,2-Dimethylheptane	128,257	132,75	0,711	6,19	-2172,4	218,2	-4,443	0,2285	100,05,3	58,095	-0,0457
2,3-Dimethylheptane	128,257	140,55	0,722	6,88	-2462,0	217,3	-5,089	0,2223	104,54,4	60,359	-0,0483
2,4-Dimethylheptane	128,257	132,95	0,712	6,90	-2417,4	217,4	-8,603	0,2340	101,78,3	58,172	-0,0471
2,5-Dimethylheptane	128,257	136,05	0,713	6,89	-2431,1	216,8	-8,603	0,2340	102,83,2	59,049	-0,0484
2,6-Dimethylheptane	128,257	135,25	0,705	6,89	-2418,0	215,7	-4,911	0,2213	102,69,8	59,720	-0,0516
3,3-Dimethylheptane	128,257	137,05	0,722	6,88	-2455,2	219,8	-8,127	0,2411	101,58,2	60,268	-0,0506
3,4-Dimethylheptane	128,257	140,65	0,728	6,88	-2401,4	208,4	-8,782	0,2350	105,08,8	61,298	-0,0508
3,5-Dimethylheptane	128,257	136,05	0,719	6,90	-2442,3	217,9	-12,291	0,2467	102,76,8	59,971	-0,0514
4,4-Dimethylheptane	128,257	135,25	0,722	6,87	-2443,3	220,4	-8,127	0,2411	101,56,1	59,761	-0,0514
3-Ethyl-2-Methylhexane	128,257	138,05	0,720	6,89	-2460,1	219,0	-8,782	0,2361	103,75,2	59,656	-0,0487
4-Ethyl-2-Methylhexane	128,257	133,85	0,720	6,90	-2431,9	218,6	-12,291	0,2467	102,55,3	58,442	-0,0469
3-Ethyl-3-Methylhexane	128,257	140,65	0,737	6,88	-2463,4	217,4	-11,818	0,2538	102,80,1	60,430	-0,0451
3-Ethyl-4-Methylhexane	128,257	140,45	0,736	6,89	-2480,0	219,5	-12,467	0,2477	105,01,0	60,359	-0,0461
2,2,3-Trimethylhexane	128,257	133,65	0,729	6,86	-2437,0	221,6	-10,389	0,2498	99,32,8	57,854	-0,0411
2,2,4-Trimethylhexane	128,257	126,55	0,720	6,85	-2384,1	221,5	-13,900	0,2615	96,83,1	55,827	-0,0425
2,2,5-Trimethylhexane	128,257	124,05	0,717	6,83	-2286,3	210,7	-10,211	0,2488	96,02,5	56,350	-0,0494
2,3,3-Trimethylhexane	128,257	137,65	0,735	6,85	-2443,7	219,1	-10,389	0,2498	100,15,1	59,288	-0,0421
2,3,4-Trimethylhexane	128,257	139,05	0,735	6,85	-2454,0	219,2	-11,034	0,2436	102,59,8	59,658	-0,0430
2,3,5-Trimethylhexane	128,257	131,35	0,718	6,87	-2408,9	219,3	-10,856	0,2426	99,67,5	56,565	-0,0387
2,4,4-Trimethylhexane	128,257	130,65	0,720	6,85	-2360,9	214,0	-13,900	0,2615	97,90,9	57,550	-0,0455
3,3,4-Trimethylhexane	128,257	140,45	0,741	6,86	-2421,9	212,6	-14,080	0,2625	100,71,0	61,401	-0,0485
3,3-Diethylpentane	128,257	146,15	0,752	6,89	-2492,5	215,6	-15,512	0,2665	103,67,1	70,000	-0,0893
3-Ethyl-2,2-Dimethylpentane	128,257	133,85	0,731	6,87	-2380,8	212,7	-13,095	0,2585	99,31,2	59,670	-0,0506
3-Ethyl-2,3-Dimethylpentane	128,257	144,75	0,751	6,84	-2447,0	213,0	-14,080	0,2625	101,70,2	62,787	-0,0495
3-Ethyl-2,4-Dimethylpentane	128,257	136,75	0,734	6,85	-2381,4	210,9	-11,034	0,2436	101,52,5	58,537	-0,0408
2,2,3,3-Tetramethylpentane	128,257	140,25	0,757	6,83	-2417,5	213,7	-14,708	0,2733	100,64,1	71,795	-0,1061
2,2,3,4-Tetramethylpentane	128,257	133,05	0,739	6,83	-2375,8	214,8	-12,576	0,2580	97,43,6	57,636	-0,0402
2,2,4,4-Tetramethylpentane	128,257	122,25	0,719	6,79	-2297,4	216,1	-15,507	0,2763	92,57,2	62,727	-0,0716
2,3,3,4-Tetramethylpentane	128,257	141,55	0,755	6,86	-2443,9	214,7	-12,848	0,2585	99,93,6	61,690	-0,0494
N-Decane	142,284	173,75	0,828	6,96	-2993,9	256,4	-2,222	0,2310	119,29,7	80,103	-0,1054
2-Methylnonane	142,284	167,05	0,730	6,93	-2893,0	250,4	2,118	0,2190	118,00,2	73,215	-0,0735
3-Methylnonane	142,284	167,85	0,723	6,93	-2899,1	250,5	-1,576	0,2318	117,58,8	71,054	-0,0659
4-Methylnonane	142,284	165,75	0,730	6,92	-2872,2	249,3	-1,576	0,2318	116,38,2	71,310	-0,0605
5-Methylnonane	142,284	165,15	0,728	6,92	-2866,6	248,5	-1,576	0,2318	116,08,0	71,883	-0,0669
3-Ethylloctane	142,284	166,55	0,729	6,92	-2878,4	249,4	-5,264	0,2445	115,97,8	70,700	-0,0650
4-Ethylloctane	142,284	163,65	0,736	6,91	-2861,1	250,4	-5,264	0,2445	114,45,8	69,890	-0,0668
2,2-Dimethyloctane	142,284	156,95	0,734	6,91	-2816,8	250,7	-3,184	0,2466	111,86,4	71,953	-0,0855
2,3-Dimethyloctane	142,284	164,35	0,721	6,89	-2848,0	249,0	-7,342	0,2521	113,97,5	74,304	-0,0861
2,4-Dimethyloctane	142,284	155,95	0,734	6,92	-2791,2	247,4	-3,832	0,2404	112,26,6	71,824	-0,0880
2,5-Dimethyloctane	142,284	158,55	0,723	6,90	-2751,4	240,2	-7,342	0,2521	112,52,4	72,572	-0,0873
2,6-Dimethyloctane	142,284	160,35	0,726	6,93	-2777,2	240,4	-7,342	0,2521	114,11,1	73,511	-0,0872
2,7-Dimethyloctane	142,284	159,85	0,724	6,91	-2765,0	240,3	-3,653	0,2394	114,13,0	72,937	-0,0967
3,3-Dimethyloctane	142,284	161,25	0,720	6,89	-2781,9	242,5	-6,877	0,2593	111,59,4	73,289	-0,0851
3,4-Dimethyloctane	142,284	163,45	0,735	6,88	-2789,4	241,4	-7,524	0,2531	113,16,9	74,013	-0,0858
3,5-Dimethyloctane	142,284	159,45	0,741	6,89	-2761,2	241,3	-11,035	0,2648	112,14,4	72,887	-0,0876

3,6-Dimethyloctane	142,284	160,85	0.733	6.91	-2773.3	240.5	-11.035	0.2648	11326.5	73.239	-0.0865
4,4-Dimethyloctane	142,284	157.55	0.732	6.88	-2759.2	243.5	-6.877	0.2593	11013.4	72.268	-0.0869
4,5-Dimethyloctane	142,284	162.15	0.731	6.89	-2784.0	241.9	-7.524	0.2531	11255.3	73.688	-0.0868
4-Propylheptane	142,284	157.55	0.743	6.95	-2771.3	241.2	-5.264	0.2445	11336.5	72.493	-0.0905
4-Isopropylheptane	142,284	158.95	0.732	6.88	-2764.7	242.9	-7.524	0.2531	11101.6	72.827	-0.0887
3-Ethyl-2-Methylheptane	142,284	161.25	0.735	6.89	-2779.8	242.2	-7.524	0.2531	11209.4	73.451	-0.0875
4-Ethyl-2-Methylheptane	142,284	156.25	0.740	6.89	-2746.0	242.3	-11.035	0.2648	11071.9	72.043	-0.0895
5-Ethyl-2-Methylheptane	142,284	159.75	0.732	6.89	-2783.9	244.3	-11.035	0.2648	11217.5	72.978	-0.0876
3-Ethyl-3-Methylheptane	142,284	163.85	0.732	6.88	-2795.7	242.5	-10.568	0.2720	11115.4	74.135	-0.0853
4-ethyl-3-Methylpentane	142,284	162.25	0.746	6.89	-2794.3	243.3	-11.216	0.2658	11173.0	73.772	-0.0874
3-Ethyl-5-methylheptane	142,284	158.25	0.747	6.89	-2772.5	242.4	-14.724	0.2775	11169.5	72.560	-0.0879
3-Ethyl-4-Methylpentane	142,284	163.05	0.737	6.89	-2797.7	243.0	-11.216	0.2658	11204.9	74.011	-0.0873
4-Ethyl-4-Methylheptane	142,284	160.85	0.747	6.88	-2793.7	245.2	-10.568	0.2720	11027.0	73.262	-0.0861
2,2,3-Trimethylheptane	142,284	157.65	0.747	6.87	-2762.1	244.4	-9.134	0.2679	10930.7	72.063	-0.0832
2,2,4-Trimethylheptane	142,284	148.35	0.739	6.87	-2698.9	244.5	-12.642	0.2796	10673.5	69.491	-0.0870
2,2,5-Trimethylheptane	142,284	150.85	0.724	6.88	-2715.2	243.8	-12.642	0.2796	10771.5	70.148	-0.0858
2,2,6-Trimethylheptane	142,284	148.95	0.724	6.89	-2697.8	242.6	-8.956	0.2669	10797.6	69.555	-0.0856
2,3,3-Trimethylheptane	142,284	160.25	0.720	6.87	-2784.1	245.0	-9.134	0.2679	10958.9	72.820	-0.0824
2,3,4-Trimethylheptane	142,284	159.95	0.745	6.87	-2772.4	243.6	-9.783	0.2618	11025.8	72.878	-0.0847
2,3,5-Trimethylheptane	142,284	160.75	0.745	6.84	-2761.7	243.0	-13.295	0.2735	11004.1	73.193	-0.0859
2,3,6-Trimethylheptane	142,284	156.15	0.741	6.88	-2738.6	241.9	-9.604	0.2608	11030.8	71.711	-0.0856
2,4,4-Trimethylheptane	142,284	151.05	0.731	6.86	-2719.7	245.4	-12.642	0.2796	10667.8	70.253	-0.0862
2,4,5-Trimethylheptane	142,284	156.55	0.731	6.87	-2747.0	243.3	-13.295	0.2735	10952.4	71.902	-0.0860
2,4,6-Trimethylheptane	142,284	147.65	0.737	6.91	-2694.6	242.3	-13.115	0.2725	10846.1	69.266	-0.0872
2,5,5-Trimethylheptane	142,284	152.85	0.719	6.88	-2733.1	244.4	-12.642	0.2796	10806.9	70.719	-0.0851
3,3,4-Trimethylheptane	142,284	161.95	0.736	6.87	-2802.0	245.9	-12.825	0.2806	10953.4	73.344	-0.0822
3,3,5-Trimethylheptane	142,284	155.75	0.753	6.86	-2752.6	245.5	-16.259	0.2918	10772.9	71.348	-0.0814
3,4,4-Trimethylheptane	142,284	161.15	0.739	6.87	-2798.5	246.2	-12.825	0.2806	10909.7	73.100	-0.0823
3,4,5-Trimethylheptane	142,284	162.55	0.754	6.87	-2794.4	244.2	-13.472	0.2745	11133.6	73.810	-0.0868
3-Isopropyl-2-Methylhexane	142,284	166.75	0.752	6.76	-2849.0	254.7	-9.783	0.2618	10875.0	75.172	-0.0871
3,3-Diethylhexane	142,284	166.35	0.744	6.88	-2838.4	246.2	-14.256	0.2847	11120.7	74.857	-0.0841
3,4-Diethylhexane	142,284	163.95	0.758	6.88	-2876.9	254.2	-14.905	0.2785	11167.1	74.307	-0.0873
3-Ethyl-2,2-Dimethylhexane	142,284	156.15	0.747	6.86	-2830.1	256.4	-12.825	0.2806	10773.9	71.716	-0.0846
4-Ethyl-2,2-Dimethylhexane	142,284	147.05	0.745	6.89	-2777.0	256.0	-16.336	0.2923	10593.2	69.058	-0.0863
3-Ethyl-2,3-Dimethylhexane	142,284	163.75	0.730	6.86	-2885.0	256.8	-12.825	0.2806	10949.3	73.860	-0.0815
4-Ethyl-2,3-Dimethylhexane	142,284	160.95	0.760	6.87	-2855.5	254.7	-13.472	0.2745	10989.0	73.188	-0.0846
3-Ethyl-2,4-Dimethylhexane	142,284	160.15	0.752	6.87	-2783.4	245.0	-13.472	0.2745	10957.7	72.947	-0.0847
4-Ethyl-2,4-Dimethylhexane	142,284	161.15	0.751	6.86	-2863.0	256.2	-16.336	0.2923	10909.7	73.095	-0.0823
3-Ethyl-2,5-Dimethylhexane	142,284	154.15	0.753	6.87	-2804.7	254.1	-13.322	0.2736	10843.7	71.240	-0.0868
3-Ethyl-3,4-Dimethylhexane	142,284	162.15	0.760	6.86	-2877.4	257.3	-16.515	0.2933	10874.0	73.446	-0.0826
2,2,3,3-Tetramethylhexane	142,284	160.35	0.760	6.84	-2869.1	259.1	-13.450	0.2914	10664.7	72.744	-0.0806
2,2,3,4-Tetramethylhexane	142,284	158.85	0.761	6.82	-2838.2	257.3	-15.084	0.2893	10667.5	72.337	-0.0814
2,2,3,5-Tetramethylhexane	142,284	147.85	0.751	6.87	-2776.5	256.3	-14.903	0.2883	10562.6	69.245	-0.0827
2,2,4,4-Tetramethylhexane	142,284	153.85	0.734	6.73	-2776.5	258.7	-32.849	0.3071	10258.8	71.052	-0.0851
2,2,4,5-Tetramethylhexane	142,284	147.85	0.742	6.83	-2760.4	256.3	-14.258	0.2883	10454.6	69.214	-0.0846
2,2,5,5-Tetramethylhexane	142,284	137.45	0.732	6.88	-2713.8	257.0	-15.084	0.2944	10217.0	72.433	-0.1151
2,3,3,4-Tetramethylhexane	142,284	164.65	0.715	6.84	-2888.9	257.7	-14.903	0.2893	10850.1	80.201	-0.1088
2,3,3,5-Tetramethylhexane	142,284	153.15	0.766	6.85	-2808.8	256.9	-15.084	0.2883	10599.2	77.156	-0.1145
2,3,4,4-Tetramethylhexane	142,284	161.65	0.745	6.83	-2863.6	257.6	-12.038	0.2893	10745.9	79.484	-0.1112

2,3,4,5-Tetramethylhexane	142,284	156,25	0.779	6.87	-2827.3	255.3	-17.169	0.2704	10811.0	78.131	-0.1147
3,3,4,4-Tetramethylhexane	142,284	170.05	0.746	6.81	-2926.6	259.7	-15.084	0.3042	10268.2	81.503	-0.1045
2,4-Dimethyl-3,1-Isopropylpentane	142,284	157.05	0.779	6.82	-2819.7	256.4	-16.515	0.2893	10671.4	68.475	-0.0660
3,3-Diethyl-2-Methylpentane	142,284	169.75	0.755	6.86	-2932.4	257.7	-17.137	0.2933	11057.6	72.280	-0.0627
3-Ethyl-2,2,3-Trimethylpentane	142,284	169.55	0.776	6.81	-2925.3	260.0	-15.084	0.3041	10693.4	72.127	-0.0602
3-Ethyl-2,2,4-Trimethylpentane	142,284	155.35	0.778	6.83	-2823.9	258.0	-15.084	0.2893	10564.1	67.904	-0.0647
3-Ethyl-2,3,4-Trimethylpentane	142,284	169.45	0.753	6.82	-2917.3	258.3	-13.745	0.2893	10883.1	72.141	-0.0612
2,2,3,4,4-Pentamethylpentane	142,284	159.35	0.774	6.73	-2824.9	260.4	-16.697	0.2919	10606.1	76.386	-0.0849
2,2,3,3,4-Pentamethylpentane	142,284	166.05	0.777	6.79	-2897.0	260.6	-16.697	0.3041	10300.7	74.462	-0.0896
Naphthenes											
Cyclopentane	70,134	49.25	0.764	6.88	-1930.9	231.4	-13.380	0.1319	6829.6	27.782	-0.0053
Cyclohexane	84,161	80.75	0.745	6.84	-2074.9	222.6	-13.219	0.1476	7862.3	42.777	-0.0769
Methylcyclopentane	84,161	71.85	0.779	6.86	-2043.3	226.0	-12.106	0.1528	7562.1	32.799	-0.0198
Cycloheptane	98,188	118.75	0.754	6.85	-2295.8	216.4	-18.203	0.1879	9224.2	54.379	-0.0734
Ethylcyclopentane	98,188	103.45	0.810	6.88	-2230.2	220.7	-15.119	0.1912	8783.2	39.142	-0.0219
1,1-Dimethylcyclopentane	98,188	87.85	0.771	6.81	-2109.4	221.9	-14.010	0.1837	8074.3	43.203	-0.0489
C-1,2-Dimethylcyclopentane	98,188	99.55	0.759	6.85	-2190.3	220.2	-13.695	0.1837	8580.1	45.007	-0.0536
T-1,2-Dimethylcyclopentane	98,188	91.85	0.777	6.84	-2144.7	221.7	-13.568	0.1839	8278.9	40.473	-0.0302
C-1,3-Dimethylcyclopentane	98,188	90.75	0.756	6.83	-2136.1	222.0	-13.568	0.1839	8147.2	39.737	-0.0254
T-1,3-Dimethylcyclopentane	98,188	91.75	0.740	6.83	-2140.2	221.6	-13.568	0.1839	8260.8	39.771	-0.0251
Methylcyclohexane	98,188	100.95	0.744	6.82	-2198.4	221.4	-13.876	0.1815	8415.6	38.994	-0.0252
Cyclooctane	112,214	151.15	0.774	6.86	-2682.6	239.9	-23.183	0.2282	10180.2	66.429	-0.0841
Propylcyclopentane	112,214	130.95	0.834	6.90	-2512.7	233.2	-15.441	0.2144	9588.0	48.788	-0.0335
Ethylcyclohexane	112,214	131.75	0.781	6.87	-2518.9	234.9	-14.360	0.2067	9622.1	49.407	-0.0309
1,1-Dimethylcyclohexane	112,214	119.55	0.788	6.79	-2426.4	237.8	-14.892	0.2005	9033.7	521.107	-0.0639
C-1,2-Dimethylcyclohexane	112,214	129.75	0.785	6.84	-2500.4	235.8	-15.062	0.2062	95459.1	53.406	-0.0551
T-1,2-Dimethylcyclohexane	112,214	123.55	0.796	6.83	-2435.9	233.1	-15.997	0.2153	9156.5	48.621	-0.0394
C-1,3-Dimethylcyclohexane	112,214	120.15	0.776	6.84	-2395.7	230.1	-14.073	0.2017	9101.6	48.590	-0.0445
T-1,3-Dimethylcyclohexane	112,214	124.45	0.766	6.83	-2457.8	235.4	-14.256	0.2039	9428.8	48.819	-0.0420
C-1,4-Dimethylcyclohexane	112,214	124.45	0.785	6.83	-2463.3	236.2	-14.256	0.2039	9404.6	48.898	-0.0395
T-1,4-Dimethylcyclohexane	112,214	119.35	0.783	6.82	-2441.2	238.6	-16.027	0.2130	9049.0	51.843	-0.0631
Butylcyclopentane	126,241	156.65	0.763	6.89	-2773.6	245.9	-27.898	0.3130	10569.1	56.802	-0.0382
Propylcyclohexane	126,241	156.75	0.669	6.88	-2784.0	247.9	-14.825	0.2347	10378.6	57.839	-0.0407
C-C-1,3,5-Trimethylcyclohexane	126,241	138.55	0.793	7.09	-2740.0	247.9	-14.276	0.2220	9523.4	56.695	-0.0658
C-T-1,3,5-Trimethylcyclohexane	126,241	150.65	0.771	7.07	-2817.8	247.9	-14.636	0.2264	10036.3	54.058	-0.0514
Naphthalene	128,173	217.95	0.722	7.01	-3797.6	323.8	-14.857	0.1948	54.163	54.163	-0.0250
Decahydronaphthalene, Cis	138,252	195.45	0.940	6.87	-3344.7	291.4	-26.228	0.2643	11576.0	56.056	-0.0465
Decahydronaphthalene, TransCis	138,252	187.25	0.897	6.86	-3282.9	291.3	-23.334	0.2495	11295.9	57.185	-0.0532
1-Cyclopentylpentane	140,268	180.65	0.870	6.94	-3466.2	318.8	-16.095	0.2610	11672.3	66.343	-0.0525
Butylcyclohexane	140,268	180.95	0.787	6.91	-3453.3	318.8	-14.418	0.2537	11336.5	67.005	-0.0502
1-Methylnaphthalene	142,2	244.65	0.796	7.03	-4327.3	370.9	-14.270	0.2190	13937.4	61.611	-0.0479
2-Methylnaphthalene	142,2	241.05	0.830	7.06	-4316.8	370.4	-12.431	0.2102	55.629	55.629	-0.0187
1-Cyclopentylhexane	154,295	203.15	1.020	6.95	-3918.1	360.6	-16.315	0.2837	12634.3	74.885	-0.0618
Pentylcyclohexane	154,295	203.75	0.990	6.95	-3921.5	360.5	-15.650	0.2822	12472.3	76.781	-0.0685
1-Ethylinaphthalene	156,227	258.35	0.793	7.03	-4546.0	388.3	-15.248	0.2483	14846.8	68.000	-0.0529
2-Ethylinaphthalene	156,227	258.35	0.800	7.07	-4565.5	387.4	-13.409	0.2395	14846.8	68.556	-0.0550
1,2-Dimethylnaphthalene	156,227	266.35	1.004	7.00	-4625.3	394.4	-14.212	0.2436	15684.0	73.028	-0.0645
1,3-Dimethylnaphthalene	156,227	265.25	0.988	7.27	-4894.5	408.0	-12.372	0.2348	15586.3	72.223	-0.0628
1,4-Dimethylnaphthalene	156,227	267.35	1.014	7.27	-4895.2	406.0	-14.212	0.2436	15662.1	74.367	-0.0684

YOGRAFİK BİLGİ FORMU

Proje No: KTÇAG-93-6-24

2- Rapor Tarihi: Haziran 1998

Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 1993-1995

Projenin Adı:

KİMYA MÜHENDİSLİĞİ PROSES TASARIMI ÖN BİLGİ TOPLAMA, DEPOLAMA VE KULLANIMINA
KULLANIMINA YÖNELİK VERİ TABANI (DATABANK) YAZILIM PAKETİ

Proje Yürütücüsü ve Yardımcı Araştırmacılar:

Prof. Dr. Bilgin Kısakürek
(ODTÜ)Dr. Alif Senelt (AÜFF)
Dr. Fuat İnalakdere (AÜFF)
Feriba Karbasi, Gülcin Kavutlu (ODTÜ) - 1995

Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:

ORTA DOĞU TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
KİMYA MÜHENDİSLİĞİ BÖLÜMÜ

Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:

TBTK
ODTÜ

Modern kimya mühendisliğinin en önemli dallarından biri olan proses tasarımı alanında son on yılda bilgisayar yardımı ile çok karmaşık ve değişik yönlü mühendislik hesaplarının çözümünde büyük ilerlemeler kaydedilmiş, yeni benzetişim yöntemleri geliştirilmiştir. Bu tür yeniliklerin daha verimli bir biçimde kullanılabilmesi için tasarım mühendisine her bakımdan kolaylık sağlayan düzgün yazılmış, modern proses tasarımı dönük ve bilgisayar dili açısından uygun bir biçimde programlanmış bilgisayar yardımı proses tasarımı ve benzetişim entegre paketlerine gereksinim vardır.

Proses tasarımı çok yönlü ve yaklaşımı bilinçli bir organizasyonu gerektirir. Memleketimizde bu türde bilgisayar destekli bir uygulamaya yeni yeni başlanmaktadır. Geliştirilmeye çalıştırılan bu entegre yazılımda; değişik proses seçimi yaklaşımları, ısı ve kütle denge hesapları, maliyet ve işletme analizleri ile yurdumuzdaki halen rafineri ve petrokimya tesislerinde kullanılan ve üretilen kimyasal maddelerin ve bu maddelerden elde edilebilecek yeni ürünlerin proses tasarımı için gerekli olan kimyasal özellikleri bir databank biçiminde sunulmaya çalışılmıştır.

Bu çalışma, bu tür bilgileri ve yaklaşım metodlarını bünyesinde bulunduran ve yurt dışımda son on sene için kullanılan diğer özel benzetişim programların da yardımı ile geliştirilen bu yazılım paketi kimya mühendisliği proses tasarımı bilgilerini ülkemizde yeni gelişmeye başlayan bilgisayar destekli mevcut tasarım gruplarının hizmetine sokan ön bir çalışma biçiminde değerlendirilmelidir.

Araştırmada bilgisayar destekli proses tasarımı için gerekli olan ve yepyeni bir yaklaşım olan 'Elektronik Kitap'ın ön bilgileri elde edilmiştir. Bu el kitabının hazırlanmasında, öncelikle bir işletmenin hayatı sürü olan ve sürekli gelişen çağdaş yöntemleri izlemek isteyen tüm Üst Düzey Yöneticilerinin gereksinimleri de mümkün olduğu biçimde dikkate alınmıştır.

Anahtar Kelimeler: Elektronik El Kitabı, Proses Tasarımı.

Proje ile ilgili Yayın/Tebliğlerle ilgili Bilgiler

ARKA SAYFADA TABDİM EDİLMİŞTİR

Bilim Dalı: KİMYA MÜH.

Doçentlik B. Dalı Kodu: TEMEL İŞTEKLER
Uzmanlık Alanı Kodu:

ISIC Kodu:

Dağıtım (*): Sınırlı Sınırsız

Raporun Gizlilik Durumu:

 Gizli Gizli Değil

Projenizin Sonuç Raporunun ulaştırılmasını istediğiniz kurum ve kuruluşları ayrıca belirtiniz

KİMYA MÜHENDİSLİĞİ PROSES TASARIMI ÖN BİLGİ TOPLAMA, DEPOLAMA VE KULLANIMINA YÖNELİK VERİ TABANI (DATABANK) YAZILIM PAKETİ

ÖZET

Modern kimya mühendisliğinin en önemli dallarından biri olan proses tasarımı alanında son on yılda bilgisayar yardımı ile çok karmaşık ve değişik yönlü mühendislik hesaplarının çözümünde büyük ilerlemeler kaydedilmiş, yeni benzetişim yöntemleri geliştirilmiştir. Bu tür yeniliklerin daha verimli bir biçimde kullanılabilmesi için tasarım mühendisine her bakımdan kolaylık sağlayan düzgün yazılmış, modern proses tasarımına dönük ve bilgisayar dili açısından uygun bir biçimde programlanmış bilgisayar yardımı proses tasarımı ve benzetişim entegre paketlerine gereksinim vardır.

Proses tasarımı çok yönlü ve yaklaşımı bilinçli bir organizasyonu gerektirir. Memleketimizde bu türde bir uygulamaya yeni yeni başlanmaktadır. Geliştirilmesi planlanan bu entegre yazılımda;

- değişik proses seçimi yaklaşımları,
- ısı ve kütle denge hesapları,
- maliyet ve işletme analizleri ile,
- yurdumuzdaki rafineri ve petrokimya tesislerinde kullanılan,
- üretilen kimyasal maddelerin, ve,
- bu maddelerden elde edilebilecek yeni ürünlerin,

proses tasarımı için gerekli olan kimyasal özellikleri bir databank biçiminde sunulması programlanmıştır. Bu databankın yardımı ile bunları bünyesinde bulunduran ve kullanabilen diğer özel benzetişim paketleri mevcut tasarım grubunun hizmetine daha rasyonel bir biçimde sunulabilecektir.

Bu araştırmada, bilgisayar destekli proses tasarımında gerekli olan ve yepyeni bir yaklaşım olan Elektronik El Kitabının ön bilgileri elde edilmiş, kimyasal databank oluşturulmuştur. Bu databankın hazırlanmasında, öncelikle bir işletmenin hayati unsuru olan ve sürekli gelişen çağdaş yöntemleri izlemek isteyen tüm üst düzey yöneticilerinin gereksinimleri dikkate alınmıştır.

YAYINLAR

Konu ile yapılan Yüksek Lisans Tezleri:

1. Adaptive-Predictive Control and Simulation Studies on Distillation Columns. Fariba Karbasi. M.Sc. Thesis. ODTÜ, 1994.
2. Control Parameter Estimation on Twin-Screw Extruders in Polymer Compounding Industry. Gita Taaf. M.Sc. Thesis. ODTÜ, 1995.

Konu ile yapılan Yayınlar:

1. Studies on an Adaptive-Predictive Control of a Distillation Column. 11th International Congress of Chemical Engineering, Chemical Equipment Design and Automation. August 29-September 3, Prague Czech Republic. 1994.
2. Control Parameter Estimation on Twin-Screw Extruders in Polymer Compounding Industry. 11th International Congress of Chemical Engineering, Chemical Equipment Design and Automation. August 29-September 3, Prague, Czech Republic. 1994.