

# Kimyasal Proseslerin Optimizasyonu ve Bir Örnek Olarak Etilbenzenin Dehidrojenasyonunun Gösterimi

Harun TAŞKIN <sup>(1)</sup>

Bu makalede bir üretim tipi ve sistemi olarak kimyasal proseslerin kısa bir tanımı yapıldıktan sonra bu proseslerin matematiksel modellerinin statik ve dinamik optimizasyon teknikleri ile gösterimi verilmiştir. Çözümü verilmeksizin plâstiklerin üretiminde kullanılan stiren ana maddesinin elde edilmesinde geliştirilen yöntemlerden biri olarak etilbenzenin dehidrojenasyonu yönteminin optimizasyonu anlatılmıştır.

## 1. GİRİŞ

«Kimyasal maddelerin değişmeler veya dönüşümler yoluyla daha kullanılabilir ve daha değerli ürünler haline gelmesi» şeklinde tanımlanan kimyasal prosesler bir üretim sistemi olarak proses üretimin ana konusudurlar<sup>(1)</sup>. Proses üretimi artan ihtiyaçlara ve gelişen teknolojilere bağlı olarak karmaşık bir yapıya dönüşmüştür. Özellikle petrol rafineri ve petro-kimya endüstrileri kimyasal proses endüstrisinin ana girdilerini oluşturmaları ve temeli olmaları bakımından önemlidirler.

1960'lı yıllardan itibaren kompüterlerin bir kontrol aracı olarak kullanılmaya başlanmaları yanında kimyasal problemlerin çözümü için geliştirilen matematiksel modellerde yararlanılan optimizasyon tekniklerinin kullanılmasında da yardımcı olmuşlardır.

Daha önceki yıllarda matematiksel modeller ancak küçük ölçekli sistemler için kullanılıyordu. Ele alınan problemde değişen iç ve dış şartların göz önüne alınması ve izlenmesi veya ek şartların sisteme dahil edilmesi zordu. Bundan başka modelde yer alan değişkenlerin limitlerini de değerlendirmek güçtü. Zamanla geliştirilen optimizasyon teknikleri bu güçlükleri ortadan kaldırmaya yardımcı oldular.

---

(1) Asistan, S.D.M.M.A. İşletme Müh. Böl. İktisadi Matematik ve İstatistik Kürsüsü.

## 2. PROSES OPTİMİZASYONU

Proses optimizasyonu ile kimyasal bir prosesin belirli tahditleri (sınırlayıcı şartlar) altında amacını en iyi kılacak değişken değerlerinin belirlenmesi anlaşılır. Genellikle nonlineer yapıda olan bu proseslerin matematiksel ifadesi,

$$\text{Maks(min)} F(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1)$$

$$G_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad i=1, 2 \dots m \quad (2)$$

$$L_j \leq X_j \leq U_j, \quad j=1, 2 \dots n \quad (3)$$

ve

$$X_j \geq 0 \quad (4)$$

şeklindedir (2). Burada,

$F(X_j)$  en iyi yapılması istenen amaç fonksiyonu (kriter fonksiyonu)

$G_i(X_j)$  sınırlayıcı şartlar (madde ve enerji denklemleri, kinetik denklemler, tasarım denklemleri)

$L_j$  ve  $U_j$ ,  $X_j$  değişkeni üzerindeki alt ve üst limitler.

şeklinde tanımlanmaktadır. Bu tür gösterimde kimyasal proseslerin kararlı durumda (steady - state) olması gerekir. Eğer proses dinamik şartlar altında (kararsız veya unsteady - state) optimize edilmek istenirse yukarıdaki gösterim,

$$J = \left[ G(x, u, t) \right]_t^i + \int_{t_i}^{t_f} F(x, u; t) dt \quad (5)$$

$$x_i = g_i(x_i, u_j, t)$$

veya

$$\varphi_i = x_i - g_i(x_i, u_j, t) = 0 \quad (6)$$

$x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  durum vektörü  
(bağımlı değişkenler)

$u = \{u_1, u_2, \dots, u_r\}$  kontrol vektörü  
(bağımsız değişkenler)

$$\begin{aligned} a \leq x \leq b \\ c \leq u \leq d \end{aligned} \quad \text{limitler} \quad (7)$$

şeklinde olur. Burada J performans indeksi (amaç fonksiyonu)  $x_i$  veya  $\varphi_1$  sınırlayıcı şartlar  $a, b, c, d, x$  ve  $u$  değişkenleri üzerindeki alt ve üst limitlerdir (3).

### 3. OPTİMİZASYON TEKNİKLERİ

Kimyasal proseslerde kullanılan optimizasyon tekniklerini proseslerin kararlı ve kararsız oluşlarına göre iki bölümde toplanabilirler :

Kararlı durumda,

- a) Doğrusal programlama
- b) Doğrusal olmayan programlama
- c) Tepe tırmanma yöntemleri (arama ve gradyant yöntemleri)
- e) Klâsik programlama

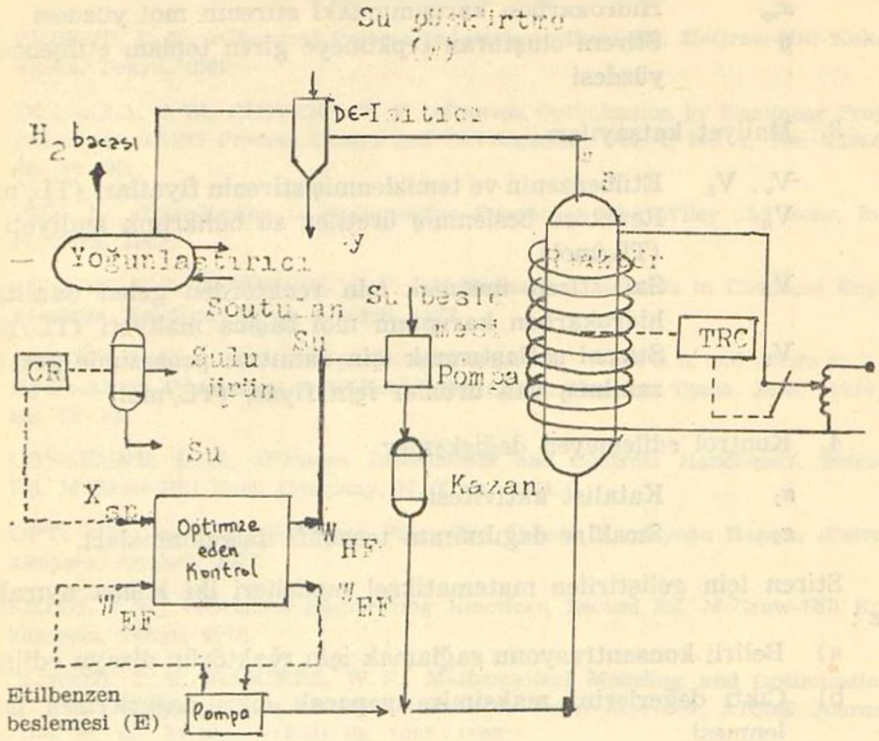
Kararsız durumda,

- a) Dinamik programlama
- b) Varyasyonlar hesabı
- c) Pontryagin'in Maksimum Prensibi
- d) Kalman filitreleri

kullanılır (4, 5, 6).

### 4. ETİLBENZEN'İN DEHİDROJENASYONUNUN OPTİMİZASYONU

Bir plastik hammaddesi olan polistiren, stirenin polimerizasyonu ile elde edilir. Stiren ise bir ara madde olup üretimi için bir çok prosesler geliştirilmiştir. Bunlardan 6 tanesi ticari üretim yöntemi olarak kabul edilmekte ve hepside etilbenzen'den başlamaktadır (7). Aşağıdaki şekilde etilbenzenin dehidrojenasyonunun optimize edilen durumu gösterilmektedir. (Şekil: 1) de görüldüğü gibi W su ve E etilbenzen akışları değişir hızda pozitif volumetrik pompalar vasıtasıyla dehidrejene edilmiş olarak, elektrikle ısıtılmış sabit yataklı katalitik reaktöre beslenirler. Su hidrokarbonla karışmadan önce çabuk istim üreten kazanda buharlaşır. Burada su reaktörde sulandırıcı olarak ve katalist üzerindeki karbon teşekkülünü önleyici olarak hizmet eder. Reaktörden gelen gazlaşmış karışım soğutulur ve yoğunlaştırılır, Sıvı kısım reaksiyona girmemiş etilbenzenle karışım halindeki stiren ve az bir miktar yan ürünün bulunduğu separatöre (ayırıştırıcı) gelir ve su halinde iken bir kaba boşaltılır.



Şekil: 1. Prosesdeki modelin performans indeksi.

$$F = V_s \cdot x_{sp} \cdot W_p - V_E \cdot x_{sp} \cdot W_p / y + V_c \cdot (1-y) \cdot x_{sp} \cdot W_p / y - V_{HF} \cdot W_{HF} - V_D \cdot W_p \quad (8)$$

dır.

Modelde kullanılan semboller :

1. Kontrol edilmiş değişkenler

P	Reaktördeki basınç
$T_p$	Reaksiyon sıcaklığı
$W_{EF}$	Etilbenzenin besleme hızı (mol/saat)
$W_{HF}$	Reaktöre verilen buharın akış hızı (mol/saat)

2. Aracı değişkenler

$W_p$	Reaktörü terkeden toplam hidrokarbonun akış hızı (mol/saat)
-------	---

$x_{sp}$	Hidrokarbon karışımındaki stirenin mol yüzdesi
$y$	Stireni oluşturan tepkimeye giren toplam etilbenzenin yüzdesi

### 3. Maliyet katsayıları

$V_s, V_E$	Etilbenzenin ve temizlenmiş stirenin fiyatları (TL/mol)
$V_H$	Reaktöre beslenmiş üretilen su buharının maliyeti (TL/mol)
$V_D$	Saf stiren üretmek için reaktörden gelen damıtılan hidrokarbon karışımının mol başına maliyeti (TL/mol)
$V_C$	Stireni saflaştırmak için damıtma prosesinde geri kazanılmış yan ürünler için fiyat, (TL/mol)

### 4. Kontrol edilemeyen değişkenler

$z_1$	Katalist aktivitesi
$z_2$	Sıcaklık dağılımının tesadüfi dalgalanmaları,

Stiren için geliştirilen matematiksel modelleri iki kısma ayırabiliriz :

- Belirli konsantrasyonu sağlamak için reaktörün dizayn edilmesi
- Çıktı değerlerini maksimize yapacak çıktı değerlerinin belirlenmesi

Birinci kısım için kinetik hız denklemlerinden hareketle optimum reaktör boyutlarını belirleyen çalışmalar yapılır. Bunun için oluşturulan diferansiyel denklemler Crank - Nicholson veya Runge - Kutta gibi nümerik yöntemlerle çözülür (4, 8). İkinci kısım için sistemin madde ve ısı dengeleriyle reaksiyon şartlarını ihtiva eden modellerden yararlanarak ekonomik performans indeksini ve optimal buhar/etilbenzen oranını belirleyecek çözümler ortaya konur. Bu çözümleri verecek yöntemler arama ve gradyant yöntemleri olabilir. Sistemdeki diferansiyel denge denklemleri için yine Runge - Kutta'dan yararlanılır (9).

Sistemi dinamik optimizasyon teknikleri ile özellikle Maksimum İlkesini kullanarak optimize etmek mümkündür.

Özetle kimyasal bir prosesi optimize etmek için kömpüter desteğinde statik ve/veya dinamik optimizasyon tekniklerinin mevcut veya geliştirilecek matematiksel modeline uygulamaları yapılır. Burada dikkat edilecek en önemli özellik amaç fonksiyonunun dolayısıyla bağımsız değişkenlerin iyi seçilmesidir.

## K A Y N A K L A R

- (1) SHREVE, R. N., «Chemical Process Industries», Third Ed. McGraw-Hill Kokakusha, Tokyo, 1967.
- (2) DI BELLA, C. W., STEVENS, W. F., «Process Optimization by Nonlinear Programming», I&EC Process Design and Development. Vol. 4, No. 1, Jan. (1965) Sh. 16 - 20.
- (3) PUN, L., «Introduction to Optimization Practice», John Wiley and Sons, Inc. N. York, 1969.
- (4) JENSON, V. G., JEFFREYS, G. V., «Mathematical Methods in Chemical Engineering», Academic Press, London, 1977.
- (5) LATOUR, P. R., «Online Computer Optimization 1 : What it is and where do it», Hydrocarbon Processing, Gulf Publishing Comp. Houston Texas, June (1979), Sh. 73 - 82.
- (6) CONSIDINE, D. M., «Process Instruments and Controls Handbook», Second Ed. McGraw-Hill Book Company, N. York, 1974.
- (7) DPT., «IV. Beş Yıllık Kalkınma Planı Özel İhtisas Komisyonu Raporu -Petrokimya-», Ankara, 1977.
- (8) SMITH, J. M., «Chemical Engineering Kinetics», Second Ed. McGraw-Hill Kokakusha, Tokyo, 1970.
- (9) CLOUGH, D. E., RAMIREZ, W. F., «Mathematical Modeling and Optimization of The Dehydrogenation of Ethylbenzene to Form Styrene», AIChE Journal (Vol. 22, No. 6) Nov. (1976) Sh. 1097 - 1105.