

**T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**SÜPERKRİTİK AKIŞKAN EKSTRAKSİYONUN MATEMATİKSEL MODELİNİN
SONLU FARKLAR YÖNTEMİYLE ÇÖZÜMÜ**

ELVEDA GAMZE MEMİŞ

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
MATEMATİK ANABİLİM DALI
MATEMATİK PROGRAMI**

**DANIŞMAN
DR. ÖĞR. ÜYESİ ELİF TEKİN TARIM**

İSTANBUL, 2018

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**SÜPERKRİTİK AKIŞKAN EKSTRAKSİYONUN MATEMATİKSEL MODELİNİN
SONLU FARKLAR YÖNTEMİYLE ÇÖZÜMÜ**

Elveda Gamze MEMİŞ tarafından hazırlanan tez çalışması 18.10.2018 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı'nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı

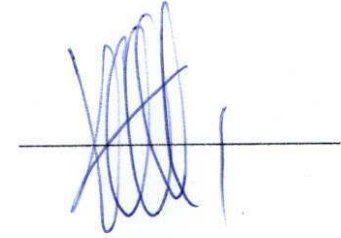
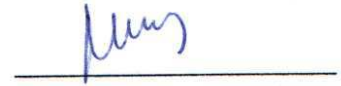
Dr. Öğretim Üyesi Elif TEKİN TARIM
Yıldız Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri

Dr. Öğr. Üyesi Elif TEKİN TARIM
Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Nuran GÜZEL
Yıldız Teknik Üniversitesi

Dr. Öğr. Üyesi S. Hikmet ÇAĞLAR
İstanbul Kültür Üniversitesi





Bu çalışma, Yıldız Teknik Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü' nün Yüksek Lisans Tez Projesi olan FYL-2018-3209 numaralı projesi ile desteklenmiştir.

ÖNSÖZ

Bilimin mühendislik alanlarında, kısmi diferansiyel denklemlerin kullanılmış olduğu örneklere çokça rastlanmaktadır. Özellikle deneysel sonuçlar için bir yaklaşım sağlaması açısından oldukça önemlidir. Bu çalışmada da kimya mühendisliğinin konularından biri olan süperkritik akışkan konusu üzerine çalışılmıştır. Çalışma Prof. Dr. Mesut AKGÜN'ün lavanta çiçeğinden esansiyel yağ elde etmek için kullandığı süperkritik akışkan ekstraksiyonunun matematiksel modeli temel alınarak, kısmi diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılan sonlu farklar yöntemi ile modellenerek sayısal sonuçların elde edilmesi ve bulunan sayısal sonuçların analizinin daha iyi yapılması için deneysel sonuçlar ile karşılaştırılması amaçlanmıştır.

Öncelikle beni bu çalışmaya yönlendiren, her konuda desteklerini esirgemeyen değerli tez danışmanım Dr. Öğretim Üyesi Elif TEKİN TARIM'a en içten teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca çalışmasını kullandığım ve bu çalışma için görüşlerini aldığım Prof. Dr. Mesut AKGÜN'e teşekkür ederim.

Bu tezi her daim yanımda olan ve desteklerini esirgemeyen başta değerli annem Tülin MEMİŞ olmak üzere tüm ailem ile hayatta olmasa da her zaman yanımda hissettiğim babam Resul MEMİŞ'e armağan ediyorum.

Ekim, 2018

Elveda Gamze MEMİŞ

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ	vii
KISALTMA LİSTESİ	viii
ŞEKİL LİSTESİ.....	ix
ÇİZELGE LİSTESİ.....	x
ÖZET.....	xi
ABSTRACT	xiii
BÖLÜM 1	
GİRİŞ.....	1
1.1 Literatür Özeti	1
1.2 Tezin Amacı	4
1.3 Hipotez	5
BÖLÜM 2	
SÜPERKRİTİK AKIŞKAN EKSTRAKSİYONUN MATEMATİKSEL MODELİ	6
2.1 Süperkritik Akışkan Ekstraksiyonu (SCFE)	6
2.2 Süperkritik Akışkanlarda Kütle Aktarımı	7
2.3 Denklemlerin Boyutsuzlaştırılması	9
BÖLÜM 3	
SÜPERKRİTİK AKIŞKAN EKSTRAKSİYONUN MATEMATİKSEL MODELİNİN SONLU FARKLAR YÖNTEMİ İLE MODELLENMESİ	11
3.1 Kapalı Crank-Nicolson Yöntemi [6]	12
3.2 Matematiksel Modelin Sonlu Farklar Yöntemi İle Modellenmesi	16
3.3 Sonlu Farklar Modelinin Çözüm Aşaması	21
BÖLÜM 4	


SAYISAL SONUÇLAR.....	31
4.1 Deneysel Sonuçlar.....	31
4.1.1 Sıcaklık Değişimlerine Göre Deneysel Sonuçlar [7]	32
4.1.2 Basınç Değişimlerine Göre Deneysel Sonuçlar [7].....	32
4.1.3 Çözücü Debisindeki Değişimlerine Göre Deneysel Sonuçlar [7]	33
4.1.4 Tanecik Boyutundaki Değişimlerine Göre Deneysel Sonuçlar [7]	34
4.2 Sayısal Sonuçlar.....	35
4.2.1 Sıcaklık Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar	36
4.2.2 Basınç Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar	36
4.2.3 Çözücü Debisindeki Değişimlere Göre Sayısal Sonuçlar	37
4.2.4 Tanecik Boyutundaki Değişimlere Göre Sayısal Sonuçlar.....	38
4.3 Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması	39
4.3.1 Sıcaklık Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması	39
4.3.2 Basınç Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması	40
4.3.3 Çözücü Debisindeki Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması	41
4.3.4 Tanecik Boyutundaki Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması	41
4.4 Katsayıların İncelenmesi	42
BÖLÜM 5	
SONUÇ VE ÖNERİLER	44
KAYNAKLAR.....	46
ÖZGEÇMİŞ.....	49

SİMGE LİSTESİ

a_s	Boyutsuz tanecikler arası akışkan hızı
Bi	Biot sayısı
C	Akışkan fazda çözünen derişimi, kg/m^3
C_i	Tanecik gözeneklerinde çözünen derişimi, kg/m^3
C_{doy}	Çözünen maddenin doyunluk derişimi (Çözünürlük), kg/m^3
D_e	Tanecik içi (Efektif) difüzyon katsayısı, m^2/s
D_L	Eksenel difüzyon katsayısı, m^2/s
d_i	Tanecik boyutu, mm
k_f	Kütle aktarım katsayısı, m/s
L	Ekstraktör uzunluğu, m
m	Ekstraktör parçacık sayısı
n	Tanecik yarıçapı parçacık sayısı
P	Basınç, Bar
Pe	Peclet sayısı
Q	Çözücü debisi, mL/dk
R_p	Tanecik yarıçapı, m
r	Yarıçap değişkeni
r_c	Tanecik kritik yarıçapı
T	Sıcaklık, K
t	Zaman, dk
X	Boyutsuz esansiyel yağ derişimi
X_i	Tanecik gözeneklerindeki boyutsuz derişim
v	Tanecikler arasındaki süperkritik akışkan hızı, m/s
Z_E	Boyutsuz ekstraktör uzunluk derişimi
z	Ekstraktör uzunluk değişkeni
ε	Ekstraktör boşluk oranı
θ	Boyutsuz zaman değişkeni
ξ	Boyutsuz yarıçap değişkeni
Δ	Komşu buluşma noktaları arasındaki mesafe

KISALTMA LİSTESİ

SCF Supercritical Fluid
SCFE Supercritical Fluid Extraction



ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 2. 1	SCFE işleminin temel kısımları 7
Şekil 3. 1	Crank-Nicolson yöntemi için sonlu farklar şeması 12
Şekil 3. 2	Örnek 3.1 için oluşturulan grid sistemi 14
Şekil 3. 3	Ekstraksiyon işleminin şematik gösterimi 18
Şekil 3. 4	Tanecik difüzyon işleminin şematik gösterimi 19
Şekil 3. 5	$n=10$ ve $m = 20$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 23
Şekil 3. 6	$n=10$ ve $m = 20$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 24
Şekil 3. 7	$n=10$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 24
Şekil 3. 8	$n=30$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 24
Şekil 3. 9	$n=15$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 25
Şekil 3. 10	$n=7$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 25
Şekil 3. 11	$n=6$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 25
Şekil 3. 12	$n=4$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 26
Şekil 3. 13	$n=6$ ve $m = 50$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 26
Şekil 3. 14	$n=6$ ve $m = 200$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları 26
Şekil 3. 15	Katı fazda $n=6$ için oluşturulan grid sistemi 28
Şekil 3. 16	Akışkan fazda $m = 30$ için oluşturulan grid sistemi 29
Şekil 3. 17	Problemin çözüm aşamalarını gösteren akış şeması 30
Şekil 4. 1	35°C , 40°C , 50°C ve 60°C için deneysel sonuçlar 32
Şekil 4. 2	80 Bar, 100 Bar, 120 Bar ve 140 Bar için deneysel sonuçlar 33
Şekil 4. 3	0.9 mL/dk, 1.2 mL/dk, 1.7 mL/dk ve 2.5 mL/dk için deneysel sonuçlar 34
Şekil 4. 4	0.8 mm, 1 mm ve 1.2 mm için deneysel sonuçlar 35
Şekil 4. 5	35°C , 40°C , 50°C ve 60°C için sayısal sonuçlar 36
Şekil 4. 6	80 Bar, 100 Bar, 120 Bar ve 140 Bar için sayısal sonuçlar 37
Şekil 4. 7	0.9 mL/dk, 1.2 mL/dk, 1.7 mL/dk ve 2.5 mL/dk için sayısal sonuçlar 38
Şekil 4. 8	0.8 mm, 1 mm ve 1.2 mm için sayısal sonuçlar 39
Şekil 4. 9	Sıcaklığa göre sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması 40
Şekil 4. 10	Basınca göre sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması 40
Şekil 4. 11	Çözücü debilerine göre sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması 41
Şekil 4. 12	Farklı tanecik boyutları için sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması 42

ÇİZELGE LİSTESİ

	Sayfa
Çizelge 3. 1 Örnek 3.1'in sonuçları	16
Çizelge 4. 1 Deney koşullarına göre optimum katsayı değerleri	43

SÜPERKRİTİK AKIŞKAN EKSTRAKSİYONUN MATEMATİKSEL MODELİNİN SONLU FARKLAR YÖNTEMİYLE ÇÖZÜMÜ

Elveda Gamze MEMİŞ

Matematik Anabilim Dalı

Yüksek Lisans Tezi

Tez Danışmanı: Dr. Öğr. Üyesi Elif TEKİN TARIM

Bilim ve mühendislik alanları için deneyler çok önemli bir yere sahiptir. Bazı deneyler ise hem uzun sürebilir hem de yüksek maliyetli olabilir. Fakat deneysel çalışmalar olmadan, ele alınan problemde deneyin başarılabilirliği ve bazı parametrelerin yaklaşık olarak elde edilmesi hakkında matematiksel modelin çözümü fikir verebilir. Matematiksel model karmaşık bir yapıya sahipse, analitik çözüm bulmak ya zor ya da imkansızdır. Bu aşamada uygulamalı matematikten yararlanılabilir. Uygulamalı matematiğin sayısal çözüm yöntemlerini bilim ve mühendislik alanlarında kullanmak kolaylık sağlayabilir.

Bu tezde de bir kimya mühendisliği konusu olan süperkritik akışkan ekstraksiyonu için sayısal çözüm sunmak amaçlanmıştır. Tezde deneysel sonuçları mevcut olan süperkritik akışkan ekstraksiyonunun çözümünde kullanılan matematiksel model bir kısmi diferansiyel denklem sistemine karşılık gelmektedir. Bu sistemin sonlu farklarla çözümü bulunup, var olan deney sonuçlarıyla karşılaştırılarak makul sonuçlara ulaşılmıştır. Çalışma dört bölümden oluşmuştur.

İlk bölüm literatür özeti, tezin amacı ve hipotezini kapsamaktadır. Bu bölüm tez çalışmasının başlangıcından sonuna kadar olan literatürlerin açıklanması niteliğindedir.

İkinci bölüm, "Süperkritik akışkan ekstraksiyonu nedir?" sorusuna yanıt vermektedir. Bu doğrultuda deney aşamalarından ve matematiksel modelden bahsedilmiştir. Bu

bölümün son kısmında ise sayısal çözüme başlayabilmek için matematiksel model boyutsuz hale getirilmiştir.

Üçüncü bölümde boyutsuz matematiksel modele karşılık gelen kısmi diferansiyel denklem sisteminin sayısal çözüm aşamalarına yer verilmiştir. Öncelikle çözüm yöntemi olan Crank-Nicolson yönteminden bahsedilmiş, daha sonra bu yöntemin yardımıyla kısmi diferansiyel denklem sisteminde türevler yerine sonlu fark ifadeleri yerlerine konularak denklemler yeniden düzenlenmiştir. Böylece cebirsel denklem sistemi elde edilmiş ve bu sistem Thomas algoritması yöntemi kullanılarak çözülmüştür.

Dördüncü bölüm sayısal sonuçların incelendiği kısımdır. Öncelikle sıcaklık, basınç, çözücü debisi ve tanecik boyutlarına göre deneysel ve sayısal sonuçlar grafiklerle verilmiştir. Daha sonra sayısal sonuçlar deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Sonuçlara ulaşıldıktan sonra katsayılar arasındaki ilişkiler incelenmiştir.

Son bölümde de tezden çıkan sonuçlar ve öneriler kısmına yer verilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Sonlu farklar yöntemi, kapalı Crank-Nicolson yöntemi, Thomas algoritması, süperkritik akışkan ekstraksiyonu, matematiksel model

**SOLUTION of MATHEMATICAL MODEL for SUPERCRITICAL FLUID
EXTRACTION with FINITE DIFFERENCE METHOD**

Elveda Gamze MEMİŞ

Department of Mathematics

MSc. Thesis

Adviser: Assist. Prof. Dr. Elif TEKİN TARIM

Experiments for science and engineering have a very important place. Some experiments can be very long and costly. But without the experimental studies of the problem, by solving the generated mathematical model it can be get some idea about the success of the experiment and the approximate obtaining of some parameters. If the mathematical has a complex structure, it is difficult or impossible to find an analytical solution. Applied mathematics is used at this stage. It can provide ease of use of numerical methods in science and engineering fields.

In this thesis, it is aimed to present a numerical solution for supercritical fluid extraction which is a chemical engineering subject. The mathematical model used in the solution of supercritical fluid extraction which has experimental results in the thesis corresponds to a system of partial differential equations. Reasonable results have been achieved by solving the system with finite differences and comparing with the existing experimental results. The study consists of four chapters.

The first chapter covers literature summary, the aim and hypothesis of the thesis. This chapter is an explanation of the literature from the beginning to the end of the thesis study.

The second chapter responds the question of “What is supercritical fluid extraction?”. Accordingly, experimental stages and mathematical model are mentioned. In the last part of this chapter, mathematical model has been dimensionless in order to start a numerical solution.

Numerical solution stages of the system of partial differential equations corresponding to dimensionless mathematical model are given in the third chapter. Firstly, Crank-Nicolson method which is the solution method has been mentioned then, the equations are replaced by finite difference expressions instead of derivatives in the system of partial differential equations with the help of this system. Thus, algebraic equation system has been obtained and this system is solved using the Thomas algorithm method.

The fourth chapter is section where numerical results are examined. Firstly, experimental and numerical results are given by using graphs according to temperature, pressure, solvent flow rate and partical size. Then, numerical results were compared with experimental results. After reaching the results, the relations between the coefficients were examined.

The results and recommendations section of the thesis are given in the last section.

Keywords: Finite difference method, implicit Crank-Nicolson method, Thomas algorithm, supercritical fluids extraction, mathematical modeling

1.1 Literatür Özeti

Kısmi diferansiyel denklemler, uygulamalı matematiğin önemli kollarından biridir. Birçok mühendislik, bilim uygulamalarının çözümü için bir araçtır. Kimya mühendisliğinde yer alan difüzyon, adveksiyon-difüzyon denklemleri de kısmi diferansiyel denklemler için verilecek örneklerdendir. Kenneth J. Beers [1] tarafından kaleme alınan Numerical Methods for Chemical Engineering Applications in MATLAB adlı kitapta difüzyon denklemleri için geniş yer ayrılmıştır. Adveksiyon-difüzyon denklemleri ise sonlu farklar yöntemi için çalışmalar yapmış olan Dehghan'ın [2] çalışmasında karşımıza çıkmıştır. Ayrıca araştırma aşamasında Karahan'ın [3], [4] ve [5] çalışmaları adveksiyon-difüzyon denklemleri üzerinedir.

Sayısal yöntemler, bu denklemler için bir çözüm yolu sunabilir. Bilim ve mühendislik uygulamaları geliştikçe, sayısal çözüm yöntemleri de gelişmektedir. Sonlu farklar yöntemi de bu yöntemlerden biridir. Bu yöntemin tekniği ayrıntılı olarak Chung-Yau Lam'ın [6] yazdığı Applied Numerical Method for Partial Differential Equations kitabında incelenmiştir. Kitapta, Crank-Nicolson yöntemi parabolik denklemlerin çözümü olarak yer almıştır. Crank-Nicolson yöntemi diğer parabolik denklemlerin çözüm yöntemleri arasında daha fazla avantaja sahip bir yöntemdir. Koşulsuz kararlı bir yöntem olması en önemli avantajlarından biridir. Bu yöntem kullanılarak yapılan birçok çalışma da vardır. Bu çalışma için bir yol göstermiş olan [3], [4] ve [5] çalışmaları adveksiyon-difüzyon denklemleri için örnek oluşturmaktadır.

Difüzyon ve adveksiyon-difüzyon denklemlerinin kullanım alanları araştırılırken süperkritik akışkan ekstraksiyonu konusuyla karşılaşılmıştır. Süperkritik akışkanlar, kimyasal özelliklerinde herhangi bir değişim olmadan sıcaklık ve basıncın etkisiyle fiziksel yapıları sıvı ile gaz arasında değişen akışkanlardır. Dolayısıyla akışkanların sahip olduğu kritik basınç ve sıcaklık değerlerinin üzerindeki değerlere çıkartılarak özelliklerinin ayarlanabildiği çözücüler olarak varsayılabilir. Süperkritik akışkan ekstraksiyonu işlemi de süperkritik akışkanlar yardımı ile maddeleri ayırma ve saflaştırma amacıyla kullanılan yöntemdir ve yöntem üzerine çok fazla çalışma yapılmıştır. Öncelikle bu tez için yapılan araştırmaların başında Akgün [7] çalışması dikkatle incelenmiştir. [7] çalışmasında süperkritik akışkan ekstraksiyonu kullanılarak lavanta çiçeğinden esansiyel yağ elde edilmiştir. Kütle aktarım mekanizması için Yarı-Kararlı Hal Modeli kullanılmıştır ve Basitleştirilmiş Büzülen Çekirdek Modeli (Simplified Shrinking Core Model) [7] olarak tanımlanmıştır. Bu modelde, eksenel dağılımı ihmal edilebilir derecede olduğundan eksenel dağılımı veren terim göz önüne alınmamıştır. Dolayısıyla matematiksel model de buna göre oluşturulmuştur. [7] çalışmasıyla Basitleştirilmiş Büzülen Çekirdek Modeli incelenmiş ve Büzülen Çekirdek Modeli'nin anlaşılması için basamak oluşturmuştur. Bu doğrultuda da bu çalışmanın oluşmasına katkı sağlamıştır. Tabiki tek bir çalışmadan Büzülen Çekirdek Modeli tam olarak anlaşılabilir. Bununla alakalı Goto vd. [8] çalışmasında süperkritik akışkanlar için Büzülen Çekirdek Modeli'nin teorik gelişimi incelenmiştir. Çalimli [9] proje çalışmasında susam yağının süperkritik akışkanlar ile ekstraksiyonundan bahsedilmiştir ve bu çalışmada da Büzülen Çekirdek Modeli seçilen matematik modellerinden biridir. Zondag ve Rindt [10] numaralı çalışmaları için de Büzülmüş Çekirdek Modeli kullanılmıştır. Fakat bu model termo-kimyasal ısı depolamada reaksiyon-yayıma problemleri için kullanılmıştır. Bu çalışmadaki problemle aynı olmasa da genel olarak Büzülmüş Çekirdek Modeli'nin işlenişi benzerdir. Bu model hem katı hem de akışkan fazın dahil olmasından dolayı iki farklı matematik eşitliği içermesi gerekir ve bu eşitlikler eş zamanlı olarak çözülmelidir.

Süperkritik akışkan ekstraksiyonu için çok fazla çalışma yapıldığından bahsedilmiştir. Bu çalışmalar hem genel hem de özel olarak yapılmıştır. Özel bir çalışma derken şundan bahsedilmektedir; süperkritik akışkan ekstraksiyonu kullanılarak üzüm çekirdeği yağı elde edilmesi gibi. Ama ilk olarak genel çalışmalar incelenmiştir. Bunlar arasındaki en

genel çalışmalar kuşkusuz Goodarznia ve Eikani'nin [11] çalışması ile Pereira vd. [12] çalışmasıdır. Özellikle [11] çalışmasında kullanılan modelin çözüm aşamaları tüm süperkritik akışkan ekstraksiyonu işlemleri için genel bir tanıma sahiptir. Bu tez için yapılan çalışmalarda da en çok yararlanılan kaynaklardan biri olmuştur. Bu çözüm aşamaları şu şekilde sıralanabilir; matematiksel modelin oluşturulması, boyutsuzlaştırma işlemleri ve seçilen sayısal çözüm yönteminin matematiksel modele uygulanması. Tabiki hem çok yeni bir çalışma olmaması ve bu alanın sürekli gelişmesi hem de her madde ya da her akışkan aynı özelliklere sahip olmadığından çözüm tekniği de düzenlenmeden kullanılamayacaktır.

Akgün [7] çalışmasında lavanta çiçeğinden esansiyel yağ üretilmesini incelemektedir. Bu nedenle bunun gibi başka çalışmalar araştırıldığında birçok çalışma bulunmuştur. Öncelikle Reis-Vasco vd. [13] çalışmasında yarpuz esansiyel yağının elde edilmesi incelenmiştir. Bu modelin çözümünde de Crank-Nicolson metodu seçilmiştir. Karius vd. [14] çalışmasında bitkisel materyallerden esansiyel yağ elde etmiştir. Fakat çözüm yolu olarak dördüncü mertebeden Runge-Kutta metodu kullanılmıştır. Germain vd. [15] çalışması sebze kullanıp hem yağ asidi hem de esansiyel yağ elde etmek üzerinedir. Bu çalışmada da Büzülmüş Çekirdek Modeli'nin yarı-kararlı hali kullanılmıştır. Sayısal çözüm kısmında ise sonlu farklar yönteminden faydalanılmıştır. Nobandegai vd. [16] çalışmasında tıbbi amaçlı da kullanılan ve esansiyel yağ içeren kır nanesi kullanmıştır. Aynı şekilde matematiksel modelin çözümünde sonlu farklar yöntemine başvurmuşlardır. Buraya kadar sadece esansiyel yağ üretilmesine yönelik çalışmalar incelenmiş olsa da araştırma genişledikçe diğer çalışmalarda incelenmiştir. Örneğin; Melreles vd. [17] çalışmasında vetiver bitkisinin köklerinden özütünü elde etmek için süperkritik akışkan ekstraksiyonundan yararlanmışlardır. Ayrıca sadece tek boyuttaki taneciğin üzerinde inceleme yapmamış hem küçük hem de büyük boyuttaki tanecikler için çözümün nasıl değiştiği incelenmiştir. Bu çalışma numerik çözüm için deneyin şematik gösterimi açısından da önemlidir. Bitkisel maddelerin tüm parçası içerdiği maddeler açısından önemlidir. Bu bağlamda Fiori'nin [18] çalışması üzüm çekirdeğindeki yağın ekstrakte edilmesi süperkritik akışkan ekstraksiyonu kullanılarak sağlanmıştır ve modelin çözümünde sonlu farklar yönteminden yararlanılmıştır. Honanvar vd. [19] çalışması kanola ve susam tohumundan çıkarılan yağ için çalışmalar yapmıştır. Sayısal

çözüm yöntemi olarak Method of Lines kullanılmıştır. Roy vd. [20] çalışması süperkritik akışkan ekstraksiyonunda zencefil kökleri kullanılarak zencefil yağı elde edilmiştir. Ayrıca Machmudah vd. [21] çalışmasında hindistancevizi yağı elde edilmiştir. Bu çalışmalarının diğerlerinden farkı Büzülmüş Çekirdek Modeli dışında Bozulmuş Çekirdek Modeli de incelenmiştir. Fakat her iki çalışmada da Büzülmüş Çekirdek Modeli Crank-Nicolson yöntemi kullanılarak sayısal sonuçlara ulaşılmıştır. Yukarıdaki tüm çalışmalar isimlerinden de anlaşılacağı gibi bitkisel maddelerdir. Nei Nei vd. [22] çalışmasında süperkritik akışkan ekstraksiyonunu alabalık tozundan yağ asidi elde etmek için kullanılmıştır. Böylece bu çalışmada hayvansal maddelerin kullanılabilir olduğu görülmüş oldu. Ayrıca sayısal olarak çözüm kapalı metod ile sağlanmıştır. Lin vd. [23] çalışmasında Saravak karabiberi kullanılmıştır. Bu çalışmada nümerik çözüm için sonlu farklar formu Crank-Nicolson yöntemine göre açıkça yazılmıştır.

Sayısal sonuçların bulunmasından sonra önemli bir kısım daha bulunmaktadır. Bu da katsayıların analizidir. Katsayılarla ilgili en önemli çalışma Lin vd. [23] çalışmasıdır. Bu çalışmada kütle aktarım katsayıları ve korelasyonu incelenmiştir. Katsayı analizi için ekta inceleme yapılan başka bir çalışmada Nei Nei vd. [22] çalışmasıdır. Burada katsayı korelasyonu için Nelder-Mead metodu kullanılmıştır.

1.2 Tezin Amacı

Bu tezin amacı, Akgün [7]'de süperkritik akışkan (SCF) ekstraksiyonu ile lavanta çiçeğinden ekstrakte edilerek çıkarılan esansiyel yağın yarı kararlı olan matematiksel modeli dinamik model haline getirmek ve sonlu farklar yöntemlerinden biri olan kapalı Crank-Nicolson yöntemi kullanılarak sonlu farklar modellemesi gerçekleştirilmesidir. Elde edilen denklem sistemleri matris sistemine çevrilecek ve böylece çalışmanın sayısal sonuçları bilgisayar kodları yardımıyla çözülecektir. Daha sonra bulunan sayısal sonuçlar deneysel sonuçlar ile karşılaştırılıp, bu doğrultuda sayısal sonuçların iyileştirilmesi için katsayılar analiz edilecektir.

1.3 Hipotez

Süperkritik akışkan kullanılarak ekstrakte edilen lavanta çiçeği esansiyel yağının yarı kararlı matematiksel modelden dinamik matematiksel modele dönüştürülerek, bu model üzerinde sonlu farklar yönteminin uygulanabilirliğidir.



SÜPERKRİTİK AKIŞKAN EKSTRAKSİYONUN MATEMATİKSEL MODELİ

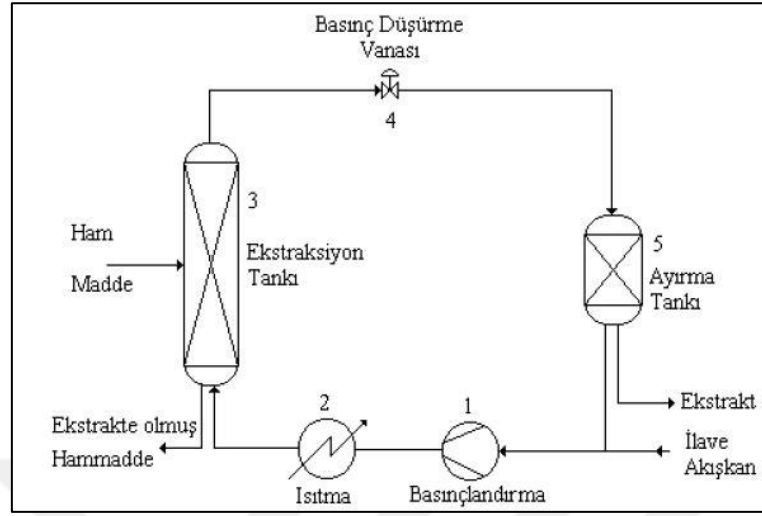
2.1 Süperkritik Akışkan Ekstraksiyonu (SCFE)

Basınç ve sıcaklığın, sahip olduğu kritik noktaların üzerindeki değişimleriyle kimyasal yapılarında değişim olmadan fiziksel yapıları sıvı ile gaz arasında değişen maddelere süperkritik akışkan denir [7]. Belirli bir aralıkta basınç ve sıcaklık değişimlerini sağlayarak süperkritik akışkanın çözme gücü artırılabilir. Süperkritik akışkan ekstraksiyonu işlemi ise bir maddenin süperkritik akışkan kullanılarak saflaştırma ve ayrıştırma işlemidir [24].

Farklı kritik özelliklere sahip süperkritik akışkanlar bulunmaktadır. Bu akışkanların bazıları insan sağlığı için uygun değildir [7]. Bazılarının ise SCFE uygulamasında kullanılması kısıtlıdır. Süperkritik akışkanlardan biri olan CO_2 çok fazla kullanılan çözücülerden biridir. Apolar bir madde olması, kolay temin edilmesi gibi özellikleri nedeniyle geniş çapta kullanılmaktadır. Bu çalışmada temel alınan SCFE işleminde de çözücü olarak CO_2 kullanılmıştır [7].

SCFE işleminin kısımları Şekil 2.1’de görülmektedir. Deney düzeneğinde farklı bölümler bulunmaktadır. Ekstraksiyon işlemi 3 numaralı bölümde gerçekleşmektedir. SCFE işlemi sermaye ve işletme maliyeti, işletme basıncı ve ekstrakte edilen maddenin miktarı gibi parametrelerle, ya da çözücü içinde ekstrakte olan maddenin çözünürlüğü ve dağılım katsayısı gibi ekstraksiyon parametrelerinden etkilenebilir [7]. SCFE işlemi gıda teknolojisinde çok geniş bir alana sahiptir. Esansiyel ve bitkisel yağların üretilmesi de bu çalışma alanlarından biridir. Anason, zencefil, defne yaprağı, limon kabuğu, domates çekirdeği gibi farklı maddeler esansiyel yağ üretiminde kullanılmaktadır [23]. Temel

olarak kullanılan deneyde [7] lavanta çiçeği esansiyel yağı süperkritik CO_2 kullanılarak ekstrakte edilmiştir.



Şekil 2.1 SCFE işleminin temel kısımları

2.2 Süperkritik Akışkanlarda Kütle Aktarımı

Birçok alanda kullanılan SCFE işlemi doğaya zarar vermemesi, kullanılan akışkanın geri kazanımının kolay olması gibi nedenlerden dolayı avantajlıdır. Fakat yüksek basınçta gerçekleşmesinden dolayı yatırım maliyeti ve enerji gereksinimi yüksektir. Dolayısıyla deney aşamasından önce detaylı bir şekilde ekonomik olarak yapılabilirliğinin incelenmesi gerekmektedir. Bu incelemenin sonuçlarını da oluşturulan matematiksel model kullanılarak anlayabiliriz.

Modellerin denge ve kütle denkliklerinin kurulması için bazı parametre verilerine gereksinim duyulur. Kütle aktarım ve difüzyon katsayısı kütle aktarım modellerindeki en önemli parametrelerdir. Temel olarak aldığımız deneyin matematiksel modelinde [7], kullanılan bu parametreler, düzenlenerek oluşturulan model için uygun olamamıştır. Bu nedenle Bölüm 2.1'de görüleceği gibi en uygun katsayı değerlerini bulmak için çalışmalar yapılmıştır.

Süperkritik fazdaki kütle aktarım mekanizması şu şekilde şu sırayla tanımlanır [7]:

1. Süperkritik akışkanın tanecik gözeneklerine difüzyonu,
2. Çözünen maddenin mikro gözeneklerden makro gözeneklere difüzyonu,

3. Çözünmüş maddenin taneciklerdeki makro gözeneklerden çözücü ortamına aktarımı.

Yukarıda belirtilen aşamalar doğrultusunda ekstraksiyon işleminin tersinmez olduğu anlaşılmaktadır.

[7] çalışmasında oluşturulan model yarı kararlı modeldir. Çünkü aksel dağılımın ihmal edilecek kadar az olduğu kabul edilmiştir. Ayrıca, çözücünün ekstraktör içinde kalma süresi boyunca taneciğin yağ içeren kısmının kritik yarıçapının değişmediği de kabul edilmiştir.

Tezde ele alınan model ise dinamik modeldir. Bu modelde tanecik içindeki difüzyonda (2.5) zamana göre değişim göz önüne alınmıştır. Bu durumda [7] deki kısmi denklem sistemi yeniden düzenlenirse,

Ekstraktörde gerçekleşen akışkan fazdaki kütle dengesi şu şekilde ifade edilir:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial z} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \frac{3k_f}{R_p} [C - C_i(R_p)] \quad (2.1)$$

Başlangıç ve sınır koşulları şu şekildedir:

$$t = 0 \quad , \quad 0 \leq z \leq L \quad , \quad C = 0 \quad (2.2)$$

$$t > 0 \quad , \quad z = 0 \quad , \quad vC - D_L \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (2.3)$$

$$t > 0 \quad , \quad z = L \quad , \quad \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (2.4)$$

(2.1-2.4)'te yer alan C , süperkritik akışkan içerisinde bulunan yağ derişimi; C_i , tanecik gözeneklerinde bulunan yağ derişimi; t , zaman; z , ekstraktör boyu değişkeni; k_f , kütle aktarım katsayısı; D_L , aksel difüzyon katsayısı; v , tanecikler arasındaki süperkritik akışkan hızı; ε , ekstraktör boşluk oranı; R_p , tanecik yarıçapı olarak ifade edilmektedir. Ayrıca burada L , ekstraktörün boyunu göstermektedir.

Akışkan faz ekstraktörün girişinden çıkışına doğru olup, katı faz ise taneciğin içinden dışına doğrudur [7] ve aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$\frac{D_e}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) = \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (2.5)$$

Başlangıç ve sınır koşulları şu şekildedir:

$$t = 0 \quad , \quad r_c = R_p \quad , \quad C_i = C_{doy} \quad (2.6)$$

$$t > 0 \quad , \quad r = 0 \quad , \quad \frac{\partial C_i}{\partial r} = 0 \quad (2.7)$$

$$t > 0 \quad , \quad r = R_p \quad , \quad D_e \frac{\partial C_i}{\partial r} = k_f [C - C_i(R_p)] \quad (2.8)$$

(2.5 – 2.8) de; D_e , tanecik içi difüzyon katsayısını; r , tanecik yarıçapı değişkenini; r_c , tanecik kritik yarıçapını; C_{doy} , esansiyel yağın SCFE içindeki doygunluk derişimini göstermektedir.

2.3 Denklemlerin Boyutsuzlaştırılması

Yukarda süperkritik akışkan ekstraksiyonunun matematiksel modeli oluşturulmuştur. Fakat oluşturulan denklemler nümerik olarak çözülebilmesi için boyutsuzlaştırılmalıdır.

(2.1) ve (2.5) denklemleri ile bu denklemlerin başlangıç ve sınır koşullarında yer alan tüm büyüklükler aşağıdaki eşitlikler ile boyutsuzlaştırılabilir:

$$X = \frac{C}{C_{doy}} ; X_i = \frac{C_i}{C_{doy}} ; \xi = \frac{r}{R_p} ; Z_e = \frac{z}{L} ; a_s = \frac{vR_p^2}{D_e L} ;$$

$$\theta = \left(\frac{D_e}{R_p^2} \right) t ; Pe = \frac{Lv}{D_L} ; Bi = \frac{k_f R_p}{D_e}$$

Burada; X , boyutsuz esansiyel yağ derişimi; X_i , taneciğin gözeneklerindeki boyutsuz esansiyel yağ derişimi; ξ , boyutsuz tanecik yarıçap değişkeni; Z_e , boyutsuz ekstraktör uzunluk değişkeni; a_s , boyutsuz tanecikler arası akışkan hızı; θ , boyutsuz zaman; Pe , Peclet sayısını; Bi , Biot sayısını ifade etmektedir. Buradaki boyutsuz ifadelerle göre denklemler, başlangıç ve sınır koşulları yeniden düzenlenirse aşağıdaki eşitlikler elde edilir.

Katı faz:

$$\frac{\partial X_i}{\partial \theta} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial X_i}{\partial \xi} \right) \quad (2.9)$$

Başlangıç ve sınır koşulları:

$$\theta = 0 \quad , \quad \xi_c = 1 \quad , \quad X_i = 1 \quad (2.10)$$

$$\theta > 0 \quad , \quad \xi = 0 \quad , \quad \frac{\partial X_i}{\partial \xi} = 0 \quad (2.11)$$

$$\theta > 0 \quad , \quad \xi = 1 \quad , \quad \frac{\partial X_i}{\partial \xi} = Bi[X - X_i(1)] \quad (2.12)$$

Akışkan faz:

$$\frac{\partial X}{\partial \theta} + a_s \frac{\partial X}{\partial Z_E} = \frac{a_s}{Pe} \frac{\partial^2 X}{\partial Z_E^2} - \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} 3Bi[X - X_i(1)] \quad (2.13)$$

Başlangıç ve sınır koşulları:

$$\theta = 0 \quad , \quad 0 \leq Z_E \leq 1 \quad , \quad X = 0 \quad (2.14)$$

$$\theta > 0 \quad , \quad Z_E = 0 \quad , \quad X - \frac{1}{Pe} \frac{\partial X}{\partial Z_E} = 0 \quad (2.15)$$

$$\theta > 0 \quad , \quad Z_E = 1 \quad , \quad \frac{\partial X_i}{\partial Z_E} = 0 \quad (2.16)$$

Denklemlerin boyutsuzlaştırılmasından sonra problemin çözüm aşamasına geçilmiştir.

**SÜPERKRİTİK AKIŞKAN EKSTRAKSİYONUN MATEMATİKSEL MODELİNİN
SONLU FARKLAR YÖNTEMİ İLE MODELLENMESİ**

Kısmi diferansiyel denklemler içindeki parabolik karakterli denklemlerin çözümü için birçok yöntem kullanılmaktadır. Sonlu farklar yöntemi başlığı altındaki FTCS, Crank-Nicolson ve Teta yöntemi bunlardan birkaçıdır. Bu çalışmada kapalı Crank-Nicolson yöntemi ele aldığımız matematiksel modele uygulanmıştır. Öncelikle türev ifadeleri için sonlu fark formülleri aşağıda verilmiştir. Bu fark formülleri kullanılarak Crank-Nicolson yönteminde kullanılacak formüller elde edilir [6].

İleri fark formülleri:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_i^n = \frac{U_{i+1}^n - U_i^n}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_i^n = \frac{-U_{i+2}^n + 4U_{i+1}^n - 3U_i^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

Geri fark formülleri:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_i^n = \frac{U_i^n - U_{i-1}^n}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_i^n = \frac{3U_i^n - 4U_{i-1}^n + U_{i-2}^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

Merkezi fark formülleri:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_i^n = \frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right|_i^n = \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

3.1 Kapalı Crank-Nicolson Yöntemi [6]

Parabolik denklemlerin çözümünde kullanılan yöntemler incelendiğinde bazı yöntemler için kararlılık şartının var olduğu görülmüştür. Örneğin FTCS yöntemi kararlılık şartı olan yöntemlerden biridir. Zamana bağlı bir boyutlu ısı denklemini

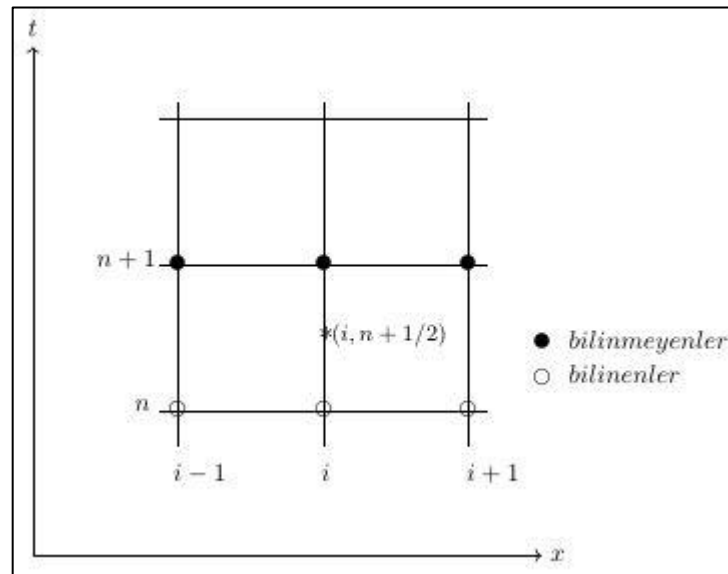
$$\frac{\partial U}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (3.1)$$

ele alalım. FTCS yöntemi için kararlılık şartı

$$F = \frac{c^2 \Delta t}{(\Delta x)^2} > 0$$

dır. Burada c ısı yayılım katsayısıdır.

John Crank ve Phyllis Nicolson tarafından geliştirilmiş olan Crank-Nicolson yöntemi ise F 'in tüm değerleri için kararlı olan ve bundan dolayı kısıtlama olmayan bir yöntemdir. Dolayısıyla Crank-Nicolson yöntemi koşulsuz kararlı [6], [2]. Bu yöntemin temel prensibi n 'den $n + 1$ 'e ilerlemek için Şekil 3.1 gösterildiği gibi yarı-zaman adımlarında $t^{n+1/2}$ karşılık gelen sonlu fark formüllerinin ortalamaları alınarak yazılır.



Şekil 3.1 Crank-Nicolson yöntemi için sonlu farklar şeması

Şekil 3.1'de yer alan * da zamana göre merkezi fark kullanılır ve aşağıdaki gibidir.

$$\left. \frac{\partial U}{\partial t} \right|_i^{n+1/2} = \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{2 \frac{\Delta x}{2}} = \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta x}$$

*'daki konuma göre konumsal türevler için ise merkezi farkların ortalaması alınır ve aşağıdaki gibidir:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_i^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[\frac{U_{i+1}^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}}{2\Delta t} + \frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta t} \right],$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right|_i^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[\frac{U_{i+1}^{n+1} - 2U_i^{n+1} + U_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right]$$

Yukarıdaki türev ifadelerinin sonlu fark temsilleri (3.1) denkleminde yerine koyulup düzenlenirse (3.2) eşitliği elde edilir.

$$-FU_{i-1}^{n+1} + (2 + 2F)U_i^{n+1} - FU_{i+1}^{n+1} = FU_{i-1}^n + (2 - 2F)U_i^n + FU_{i+1}^n \quad (3.2)$$

(3.2) eşitliğinde sağ taraf bilinenler, sol taraf ise bilinmeyenlerdir. Merkezi fark kullanıldığından kesme hatası $O[(\Delta t)^2] + O[(\Delta x)^2]$ ya da $O[(\Delta t)^2 + (\Delta x)^2]$ dir. $F = 1$ olarak alınırsa (3.2) eşitliği (3.3) şekline gelir.

$$-U_{i-1}^{n+1} + 4U_i^{n+1} - U_{i+1}^{n+1} = U_{i-1}^n + U_{i+1}^n \quad (3.3)$$

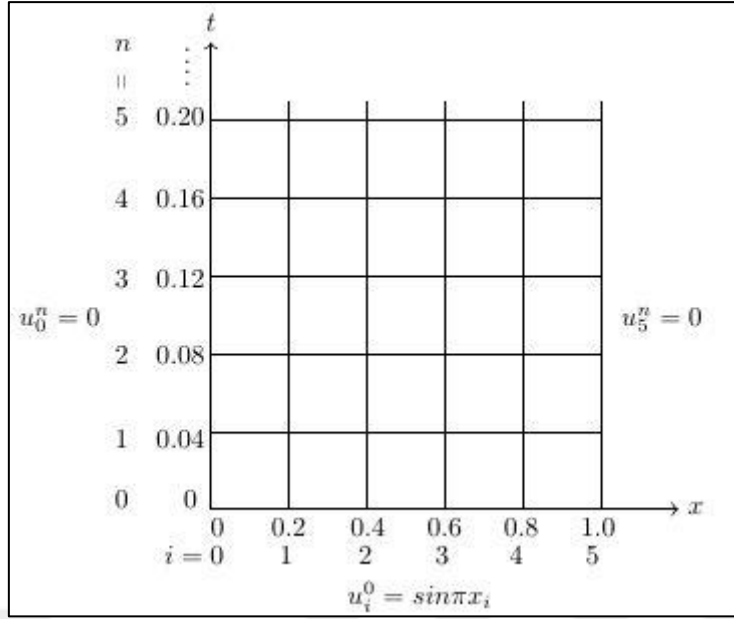
Örnek 3.1

$\Delta x = 0.2 \text{ m}$ ve $F = 1$ olmak üzere Crank-Nicolson yöntemi kullanarak uçlarındaki sıcaklığı 0°C olan çubuğun sıcaklık dağılımını hesaplayın. $c = 1 \text{ m/s}^{0.5}$ ve başlangıç sıcaklığı $u(x, 0) = \sin\pi x$ olarak kabul edilsin.

Çözüm

$$F = \frac{c^2 \Delta t}{(\Delta x)^2} \text{ den, } \Delta t = \frac{1}{c^2} F (\Delta x)^2 = 0.2^2 = 0.04 \text{ s bulunur.}$$

Yer-zaman grid sistemi şu şekildedir:



Şekil 3.2 Örnek 3.1 için oluşturulan grid sistemi

$n = 0$ için: Başlangıç ve sınır koşullarını da ekleyerek (3.3) eşitliğini kullandığımızda

$$i = 1: \quad -u_0^1 + 4u_1^1 - u_1^1 = u_0^0 + u_2^0$$

$$4u_1^1 - u_2^1 = 0.9511$$

$$i = 2: \quad -u_1^1 + 4u_2^1 - u_3^1 = u_1^0 + u_3^0$$

$$= 1.5388$$

$$i = 3: \quad -u_2^1 + 4u_3^1 - u_4^1 = u_2^0 + u_4^0$$

$$= 1.5388$$

$$i = 4: \quad -u_3^1 + 4u_4^1 - u_5^1 = u_3^0 + u_5^0$$

$$4u_4^1 - u_3^1 = 0.9511$$

elde edilir.

Matris formu aşağıdaki şekildedir.

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^1 \\ u_2^1 \\ u_3^1 \\ u_4^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.9511 \\ 1.5388 \\ 1.5388 \\ 0.9511 \end{bmatrix}$$

Denklem sistemi çözüldüğünde,

$$\begin{bmatrix} u_1^1 \\ u_2^1 \\ u_3^1 \\ u_4^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.3993 \\ 0.6460 \\ 0.6460 \\ 0.3993 \end{bmatrix}$$

elde edilir.

Benzer şekilde $n = 1$ için de matris formu aşağıdaki gibidir.

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^2 \\ u_2^2 \\ u_3^2 \\ u_4^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6460 \\ 1.0453 \\ 1.0453 \\ 0.6460 \end{bmatrix}$$

Sistem çözüldüğünde

$$\begin{bmatrix} u_1^2 \\ u_2^2 \\ u_3^2 \\ u_4^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.2712 \\ 0.4388 \\ 0.4388 \\ 0.2712 \end{bmatrix}$$

elde edilir.

Bu şekilde 12 zaman adımı süresinde işlem devam etmiştir ve sonuçlar Çizelge 3.1 de gösterilmiştir. Burada simetri söz konusu olduğundan çözüm bölgesinin yarısını hesaplamak yeterlidir. Örnek olarak simetriden dolayı $i = 2$ için $u_3^{n+1} = u_2^{n+1}$ kullanılarak (3.3) denklemi

$$-u_1^{n+1} + 3u_2^{n+1} = u_1^n + u_3^n$$

şeklinde yazılır. $i = 1$ için yazılan sistem iki bilinmeyenlidir. Öncelikle bu bilinmeyenler sistemin çözümü ile elde edilecektir. Diğerleri ise simetriden bulunabilir. Bu yaklaşımla üçlü bant yapısı korunmasına rağmen katsayılar matrisinin simetrisi yok olur.

Çizelge 3.1 Örnek 3.1'in sonuçları

n	t	u_i^n					
		$i = 0$	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
		$x = 0$	$x = 0.2$	$x = 0.4$	$x = 0.6$	$x = 0.8$	$x = 1.0$
0	0.00	0	0.5878	0.9511	0.9511	0.5878	0
1	0.04	0	0.3993	0.6460	0.6460	0.3993	0
2	0.08	0	0.2712	0.4388	0.4388	0.2712	0
3	0.12	0	0.1842	0.2981	0.2981	0.1842	0
4	0.16	0	0.1251	0.2025	0.2025	0.1251	0
5	0.20	0	0.0850	0.1376	0.1376	0.0850	0
6	0.24	0	0.0577	0.0934	0.0934	0.0577	0
7	0.28	0	0.0392	0.0635	0.0635	0.0392	0
8	0.32	0	0.0266	0.0431	0.0431	0.0266	0
9	0.36	0	0.0181	0.0293	0.0293	0.0181	0
10	0.40	0	0.0123	0.0199	0.0199	0.0123	0
11	0.44	0	0.0084	0.0135	0.0135	0.0084	0
12	0.48	0	0.0057	0.0092	0.0092	0.0057	0

Yukarıda verilen türevler (2.9-2.16) denklemlerinde kullanılıp, düzenlenmiştir. Daha sonra elde edilen cebirsel sistemlerinin matris formlarıyla gösterilimi elde edilmiştir ve Thomas algoritması kullanılarak çözülmüştür.

Kapalı Crank-Nicolson yönteminin seçiminde hem koşulsuz kararlı hem de tüm türevlerin aynı mertebeden kesme hatasına sahip olması etkili olmuştur [6]. Bu sayede kararlılık analizine ihtiyaç ortadan kalkmış aynı zamanda tüm türevlerin aynı mertebeden kesme hatasına sahip olması nedeniyle de daha fazla doğruluğa sahip olmuştur.

3.2 Matematiksel Modelin Sonlu Farklar Yöntemi İle Modellenmesi

Model ilk olarak ele alındığında Basitleştirilmiş Büzülmüş Çekirdek Modeli (Simplified Shrinking Core Model) kullanılmış olup [7], daha sonra denklemler dinamik model olarak düzenlenmiştir.

Ekstraksiyon işlemi boyunca geçerli olan kabuller şunlardır [7]:

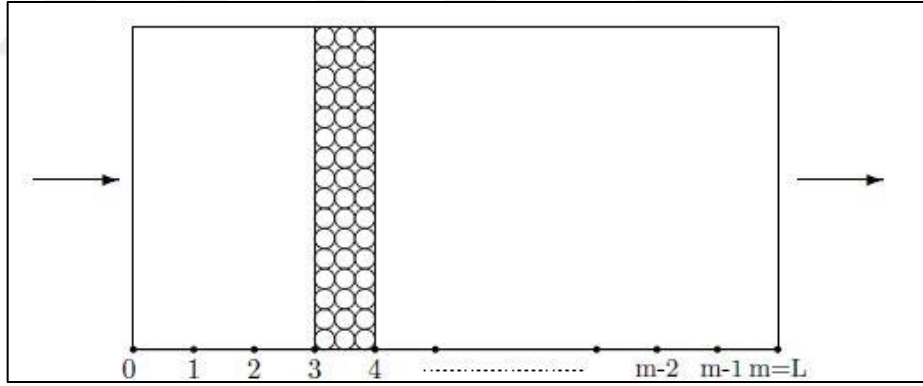
- Sistem eş sıcaklıktadır.
- Ekstraksiyon işlemi tersinmez bir desorpsiyon işlemidir.
- Lavanta çiçeği, tanecik boyunca düzenli bir şekilde lavanta yağının dağıldığı gözenekli bir yapıdadır.
- İşlem boyunca akışkanın fiziksel özellikleri sabittir.

Yukarıda yer alan kabuller ile tanımlanan modelin çözüm aşamasına geçilebilir. Bu aşamada bir önceki bölümde yer alan boyutsuz denklemler, başlangıç ve sınır koşullarının sonlu farklar yöntemi ile modellenmesini içermektedir. Çözüm algoritması şu şekildedir:

Öncelikle kapalı Crank-Nicolson yöntemini kullanmak için tanecik yarıçapı ve ekstraktör kabı düzgün parçalara bölünmesi gerekmektedir. Böylece düzgün bir grid sistemi elde edilebilir. Tanecik yarıçapı n , ekstraktör kabı ise m parçaya bölünsün.

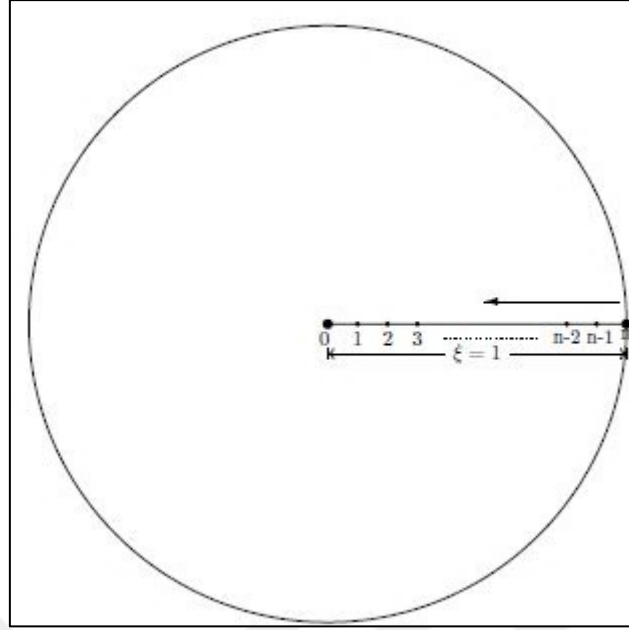
1. İlk aşamada ekstraktör kabında çözünen madde miktarı sıfırdır [7]. Dolayısıyla her bir zaman adımı için öncelikle katı faz denklemini çözülür ve katı taneciğin konsantrasyon profili bulunur.
2. Katı tanecik yüzeyindeki çözünen konsantrasyonu ve bu konsantrasyon akışkan faz denklemlerinin çözümü için kullanılır. Taneciğin yüzeyindeki konsantrasyonu katı fazın sınır koşulu (2.12) denklemleriyle elde edilir.
3. Genellikle süperkritik akışkan ekstraksiyonu ile ilgili çalışmalarda deneyin her zaman adımının sonunda yakınsaklık kriteri kontrol edilir. Buna göre bir sonraki zaman adımına geçilir. Fakat bu çalışmada ele alınan modelin deneysel sonuçları belli zaman aralıkları için mevcut olduğundan ve bu çalışmada da sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların [7] karşılaştırılması gerekliliğinden yakınsaklık kriteri adımı uygulanmamıştır. Deneysel çalışma süreleri dikkate alınıp bu süre sonunda program akışı sonlanmıştır. Bu süre de 15 dakika aralıklarla olmak üzere toplamda 270 dakika sürmüştür.

Katı faz ve akışkan faz aşamaları eş zamanlı olarak çözülür. Çözüm algoritmasına göre boyutsuz (2.9) ve (2.13) yönetici denklemlerine kapalı Crank-Nicolson metodu uygulanır. Denklemlerde her bir türev ifadesine sonlu farklar temsilleri yerleştirilir. Konumsal ve zamansal türevlerde merkezi fark yaklaşımları kullanılmış olup kesme hatası $O(\xi^2)$, $O(Z_E^2)$ ve $O\left(\left(\frac{\theta}{2}\right)^2\right)$ dir. Sonlu farklar yaklaşımları sadece yönetici denklemlere uygulanmaz, bu denklemlerin başlangıç ve sınır koşullarına da uygulanır. Katı fazın sınır koşullarını incelediğimizde difüzyon taneciğın yüzeyinden merkezine doğrudur. Bu nedenle (2.11) sınır koşulunda ileri fark denklemleri kullanılırken (2.12) sınır koşulunda yüzeyi belirttiğinden dolayı geri fark denklemleri kullanılmıştır. Akışkan fazın sınır koşulunu incelediğimizde ise ekstraksiyon işlemi kabın girişinden sonuna doğru ilerlediği için (2.15) sınır koşulunda ileri fark denklemleri, (2.16) sınır koşulunda ise geri fark denklemleri kullanılmıştır. Bunun nedeni aşağıda yer alan Şekil 3.1 ve 3.2'de görülmektedir. Sınır koşullarında kullanılan ileri ve geri fark denklemleri üç noktalı olarak kullanılmıştır. Böylece sınır koşullarının kesme hataları da $O(\xi^2)$ ve $O(Z_E^2)$ olup iki noktalı ileri ve geri fark denklemlerine göre daha doğru yaklaşımlar elde edilebilir [6].



Şekil 3.3 Ekstraksiyon işleminin şematik gösterimi

Ekstraksiyon kabının içindeki her bir tanecik için geçerli olan difüzyon işlemi aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.4 Tanecikteki difüzyon işleminin şematik gösterimi

Yukarıdaki bilgiler doğrultusunda denklemlerin sonlu fark formları aşağıdaki gibidir:

Katı faz:

$$\begin{aligned}
 -\left(\frac{F_1}{\xi_j} + F_2\right)X_{i_{j+1}}^{k+1} + (2 + 2F_2)X_{i_j}^{k+1} - \left(-\frac{F_1}{\xi_j} + F_2\right)X_{i_{j-1}}^{k+1} \\
 = \left(\frac{F_1}{\xi_j} + F_2\right)X_{i_{j+1}}^k + (2 - 2F_2)X_{i_j}^k + \left(-\frac{F_1}{\xi_j} + F_2\right)X_{i_{j-1}}^k
 \end{aligned} \quad (3.4)$$

Başlangıç ve sınır koşulları:

$$k = 0 \quad , \quad 0 \leq j \leq n \quad , \quad X_{i_j}^0 = 1 \quad (3.5)$$

$$k \geq 0 \quad , \quad j = 0 \quad , \quad X_{i_0}^k = \frac{4X_{i_1}^k - X_{i_2}^k}{3} \quad (3.6)$$

$$k \geq 0 \quad , \quad j = n \quad , \quad X_{i_n}^k = \frac{4X_{i_{n-1}}^k - X_{i_{n-2}}^k + 2\Delta\xi Bi X_{i_l}^k}{3 + 2\Delta\xi Bi} \quad (3.7)$$

Akışkan faz:

$$\begin{aligned}
 (F_3 - F_4)X_{l+1}^{k+1} + \left(2 + 2F_4 + \frac{F_5}{2}\right)X_l^{k+1} - (F_3 + F_4)X_{l-1}^{k+1} \\
 = -(F_3 - F_4)X_{l+1}^k + \left(2 - 2F_4 - \frac{F_5}{2}\right)X_l^k + (F_3 + F_4)X_{l-1}^k + F_5 X_{i_n}^k
 \end{aligned} \quad (3.8)$$

Başlangıç ve sınır koşulları:

$$k = 0 \quad , \quad 0 \leq l \leq m \quad , \quad X_l^0 = 0 \quad (3.9)$$

$$k \geq 0 \quad , \quad l = 0 \quad , \quad X_0^k = \frac{4X_1^k - X_2^k}{2Pe\Delta Z_E + 3} \quad (3.10)$$

$$k \geq 0 \quad , \quad l = m \quad , \quad X_m^k = \frac{4X_{m-1}^k - X_{m-2}^k}{3} \quad (3.11)$$

Böylece (2.9) denklemi (3.4) denklemine, (2.13) denklemi ise (3.8) denklemine dönüşmüştür.

(3.4) ve (3.8) denklemlerinde kullanılmış olan parametreler aşağıdaki şekilde kısaltılmış olarak denklemde yer almıştır:

$$F_1 = \frac{\Delta\theta}{\Delta\xi} \quad , \quad F_2 = \frac{\Delta\theta}{(\Delta\xi)^2} \quad , \quad F_3 = a_s \frac{\Delta\theta}{2\Delta Z_E} \quad , \quad F_4 = \frac{a_s}{Pe} \frac{\Delta\theta}{\Delta Z_E^2} \quad , \quad F_5 = 6 \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} Bi\Delta\theta$$

Denklemlerin daha sade hale gelmesi için yeni parametreler kullanılmıştır. Bunlar:

Katı faz için:

$$s_1 = \frac{F_1}{\xi_j} + F_2 \quad , \quad s_2 = 2 + 2F_2 \quad , \quad s_3 = -\frac{F_1}{\xi_j} + F_2 \quad , \quad s_4 = 2 - 2F_2$$

Akışkan faz için:

$$p_1 = F_3 - F_4 \quad , \quad p_2 = \left(2 + 2F_4 + \frac{F_5}{2}\right) \quad , \quad p_3 = F_3 + F_4 \quad , \quad p_4 = \left(2 - 2F_4 - \frac{F_5}{2}\right)$$

dır. Bu parametrelere göre yönetici denklemler tekrar düzenlendiğinde şu şekle gelir:

Katı faz:

$$-s_1(j)X_{j+1}^{k+1} + s_2X_j^{k+1} - s_3(j)X_{j-1}^{k+1} = s_1(j)X_{j+1}^k + s_4X_j^k + s_3(j)X_{j-1}^k \quad (3.12)$$

Akışkan faz:

$$p_1X_{l+1}^{k+1} + p_2X_l^{k+1} - p_3X_{l-1}^{k+1} = -p_1X_{l+1}^k + p_4X_l^k + p_3X_{l-1}^k + F_5X_n^k \quad (3.13)$$

Bu denklemlerin başlangıç ve sınır koşullarının tekrar düzenlenmesine gerek yoktur.

Sonlu farklar yöntemi kullanıldığında problemin daha kolay anlaşılabilmesi için grid sistemi oluşturulur. Bu çalışmada da hem katı faz hem de akışkan faz için grid sistemi oluşturulmuştur. Şekil 3.13 ve 3.14'te grid sistemleri görülebilir.

3.3 Sonlu Farklar Modelinin Çözüm Aşaması

Denklemlerin sonlu farklar formunda yazılmasından sonra, deney çalışmasında kullanılan efektif difüzyon katsayısı, aksenal difüzyon katsayısı ve kütle aktarım katsayısında herhangi bir değişiklik yapmadan sistemin çözümüne başlanmıştır. Hem katı faz hem de akışkan faz için oluşturulan denklem sisteminin matris formuna aşağıda yer verilmiştir.

Katı faz $A_{KF}X_{KF} = B_{KF}$ şeklindeki matris formu:

$$A_{KF} = \begin{bmatrix} \frac{-4s_1(n-1)}{3+2\Delta\xi Bi} + s_2 & \frac{s_1(n-1)}{3+2\Delta\xi Bi} - s_3(n-1) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -s_1(n-2) & s_2 & -s_3(n-2) & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -s_1(n-3) & s_2 & -s_3(n-3) & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -s_1(2) & s_2 & -s_3(2) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -s_1(1) + \frac{s_3(1)}{3} & s_2 - \frac{4s_3(1)}{3} \end{bmatrix}$$

$$X_{KF} = \begin{bmatrix} X_{i_{n-1}}^{k+1} \\ X_{i_{n-2}}^{k+1} \\ X_{i_{n-3}}^{k+1} \\ \vdots \\ X_{i_2}^{k+1} \\ X_{i_1}^{k+1} \end{bmatrix}$$

$$B_{KF} = \begin{bmatrix} s_1(n-1)X_{i_n}^k + s_4X_{i_{n-1}}^k + s_3(n-1)X_{i_{n-2}}^k + s_1(n)\frac{2\Delta\xi Bi X_{m+1}^{k-1}}{3+2\Delta\xi Bi} \\ s_1(n-2)X_{i_{n-1}}^k + s_4X_{i_{n-2}}^k + s_3(n-2)X_{i_{n-3}}^k \\ s_1(n-3)X_{i_{n-2}}^k + s_4X_{i_{n-3}}^k + s_3(n-3)X_{i_{n-4}}^k \\ \vdots \\ s_1(2)X_{i_3}^k + s_4X_{i_2}^k + s_3(2)X_{i_1}^k \\ s_1(1)X_{i_2}^k + s_4X_{i_1}^k + s_3(1)X_{i_0}^k \end{bmatrix}$$

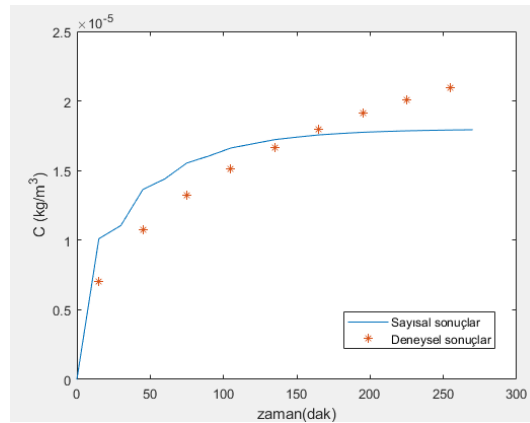
Akışkan faz $A_{AF}X_{AF} = B_{AF}$ şeklindeki matris formu:

$$A_{AF} = \begin{bmatrix} p_2 - \frac{4p_3}{2Pe\Delta Z_E + 3} & p_1 + \frac{p_3}{2Pe\Delta Z_E + 3} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -p_3 & p_2 & p_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -p_3 & p_2 & p_1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -p_3 & p_2 & p_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -p_3 - \frac{p_1}{3} & p_2 + \frac{4p_1}{3} \end{bmatrix}$$

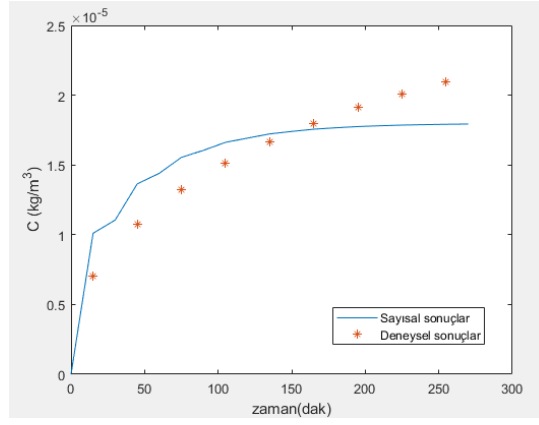
$$X_{AF} = \begin{bmatrix} X_1^{k+1} \\ X_2^{k+1} \\ X_3^{k+1} \\ \vdots \\ X_{m-2}^{k+1} \\ X_{m-1}^{k+1} \end{bmatrix}$$

$$B_{AF} = \begin{bmatrix} -p_1 X_2^k + p_4 X_1^k + p_3 X_0^k + F_5 X_i^k & (1) \\ -p_1 X_3^k + p_4 X_2^k + p_3 X_1^k + F_5 X_i^k & (1) \\ -p_1 X_4^k + p_4 X_3^k + p_3 X_2^k + F_5 X_i^k & (1) \\ \vdots & \\ -p_1 X_{m-1}^k + p_4 X_{m-2}^k + p_3 X_{m-3}^k + F_5 X_i^k & (1) \\ -p_1 X_m^k + p_4 X_{m-1}^k + p_3 X_{m-2}^k + F_5 X_i^k & (1) \end{bmatrix}$$

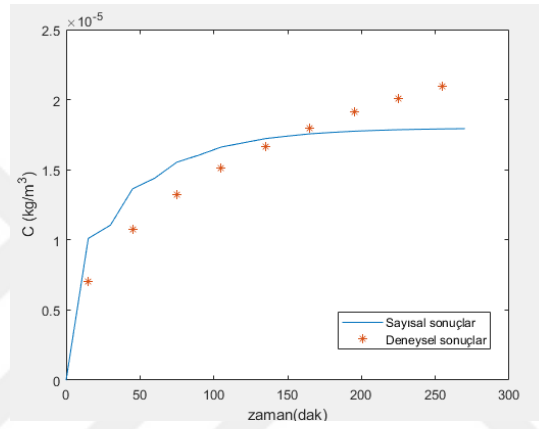
Yukarıda verilen denklem sisteminin matris formu bilgisayar koduna çevrilmiştir ve Thomas algoritması yardımı ile çözülmüştür. Bilgisayar yazılımı olarak MATLABR2018a yazılımı kullanılmıştır. Bunun gibi çalışmaların sonuçlarını bulmak için yapılan çözümlerdeki en önemli aşamalardan biri kuşkusuz kaç eşit parçaya bölünmesidir. Ele alınan çalışmada da parçalara bölünecek iki farklı yapı olduğundan daha önemli hale gelmektedir. Tanecik yarıçapı n ve ekstraktör boyu ise m aralık olmak üzere uygun ve değeri program üzerinde çeşitli denemelerden sonra elde edilmiş sayılar bulunmuştur. Bu aşamanın daha iyi anlaşılması adına akışkan fazdaki yağ derişimi için yapılan denemelerin örneklerinden bazıları aşağıda gösterilmektedir. Bu grafiklerin tümü 50°C sıcaklık, 100 Bar basınç ve 1.7 mL/dak çözücü debisine sahip 1.2 mm boyutundaki lavanta çiçekleri için yapılmıştır.



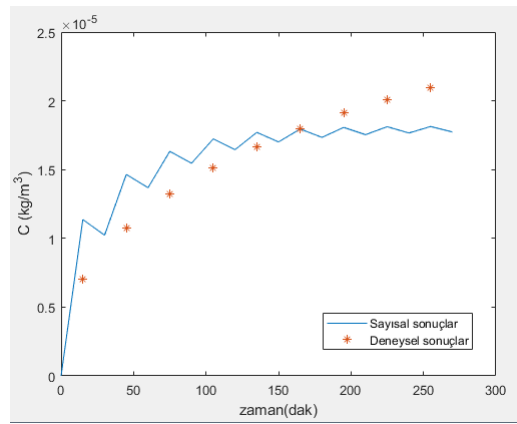
Şekil 3.5 $n = 10$ ve $m = 10$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları



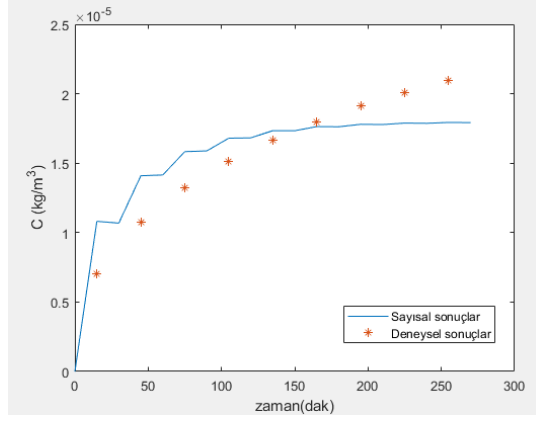
Şekil 3.6 $n = 10$ ve $m = 20$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları



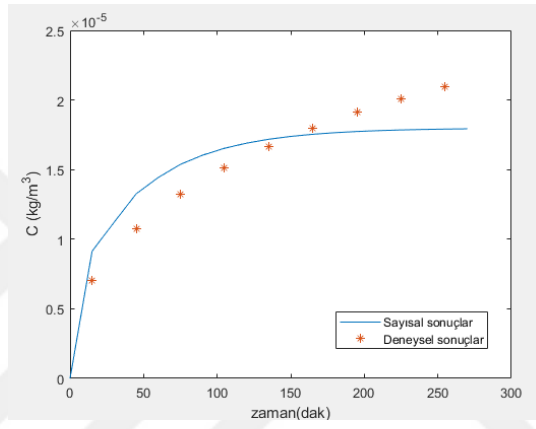
Şekil 3.7 $n = 10$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları



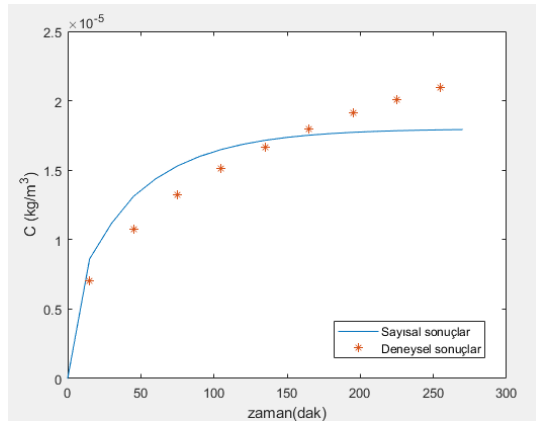
Şekil 3.8 $n = 30$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları



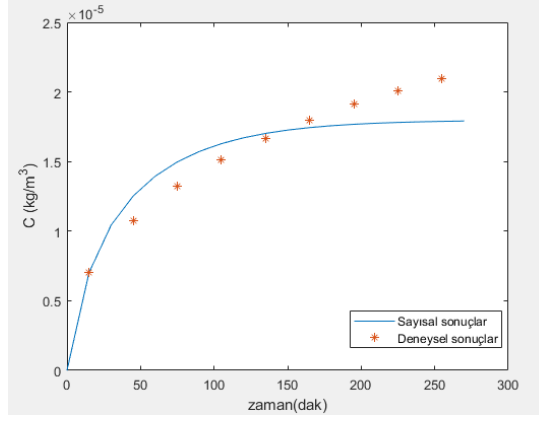
Şekil 3.9 $n = 15$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişimin nümerik sonuçları



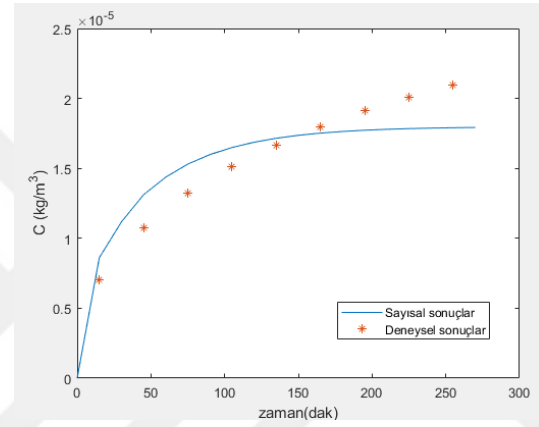
Şelik 3.10 $n = 7$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları



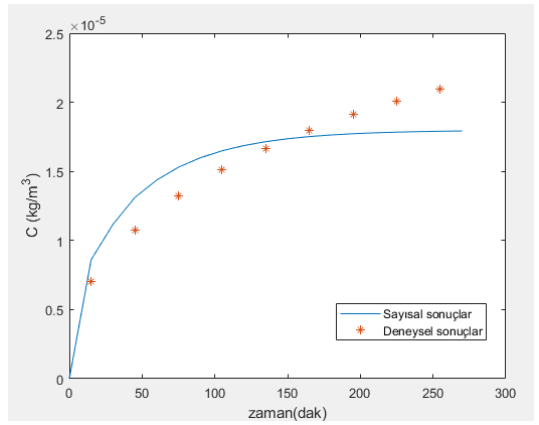
Şekil 3.11 $n = 6$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları



Şekil 3.12 $n = 4$ ve $m = 30$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları



Şekil 3.13 $n = 6$ ve $m = 50$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları

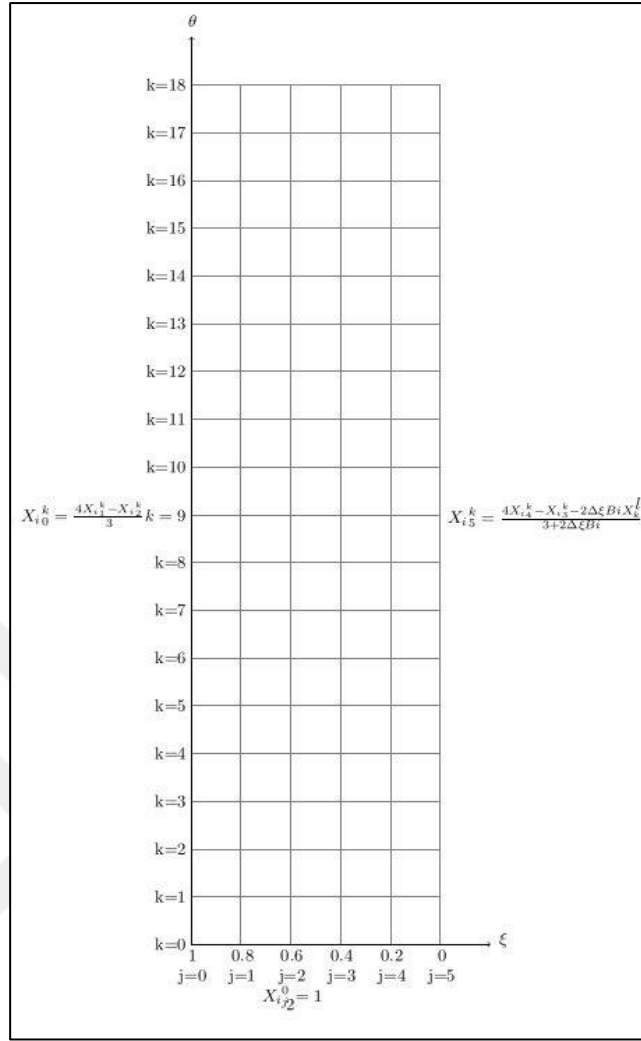


Şekil 3.14 $n = 6$ ve $m = 200$ için akışkan faz yağ derişiminin nümerik sonuçları

Yukarıda farklı n ve m değerleri için bulunan sonuçlar gösterilmektedir. Bu sonuçlar içinde en iyi aralık sayısının belirlenmesi için incelemeler yapıldığında taneciğin yarıçapının aralık sayısının belirlenmesi üzerine ekstraktör kabının aralık sayısının belirlenmesinden daha fazla durulmuştur. Çünkü ekstraktör aralık sayısını artırdığımızda

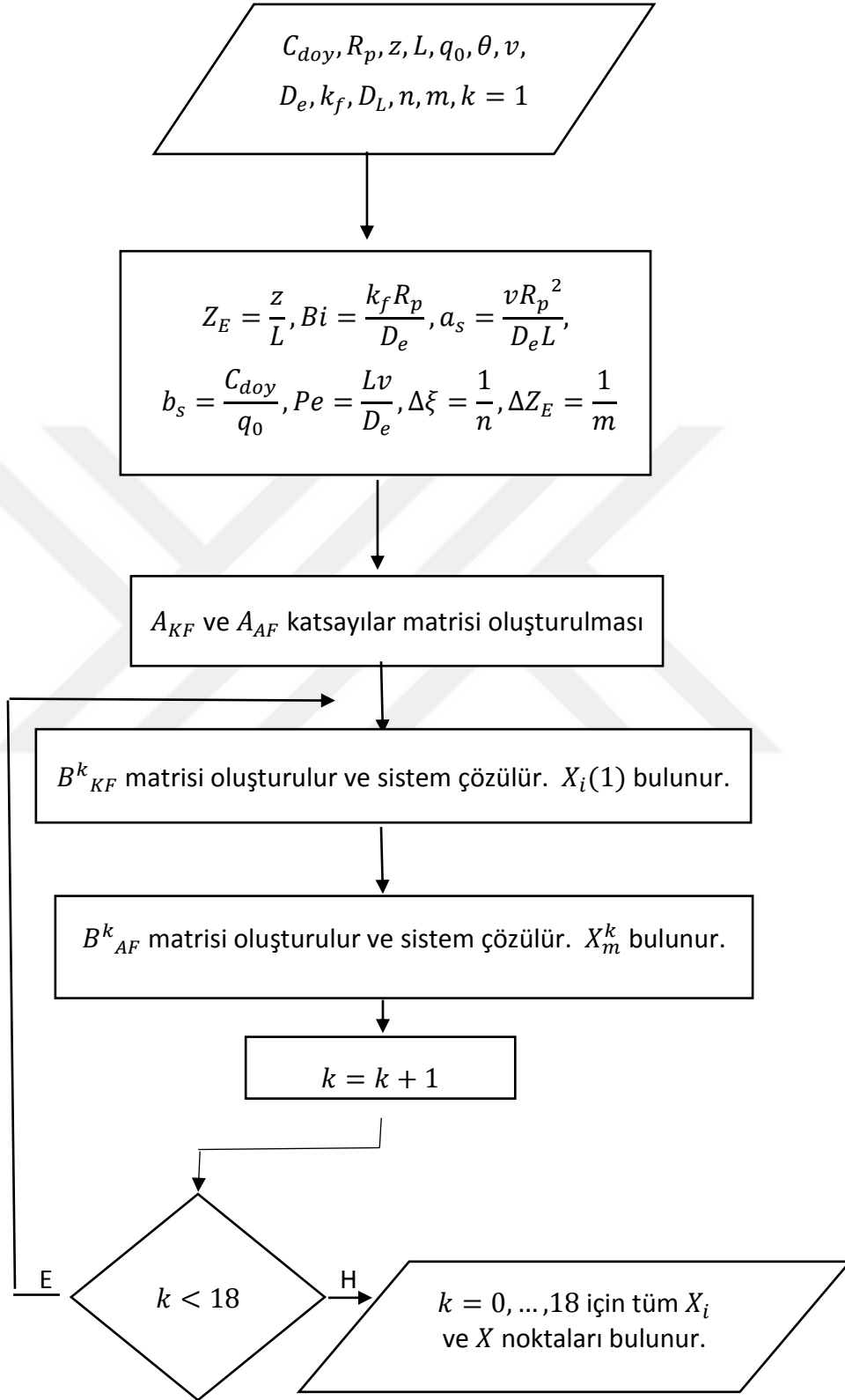
çok fazla deęişim olmamıştır. m sayısı sabit tutulup n sayısı artırıldığında bozulmalar oluştuęu görölmektedir. Bu durum Şekil 3.5-3.10'da daha kolay görölmektedir. Fakat n sayısı sabit tutulup m sayısı artırıldığında sonuçta ufak deęişimler olsa da çok büyük bozulmalar olmadığı görölmektedir. Şekil 3.3 ve 3.4 ile Şekil 3.11 ve 3.12'de de incelenebilir. Bu durum sadece tek koşul için incelenmemiştir. Tüm sıcaklık ve basınç deęerleri için incelendikten sonra n ve m deęerlerine karar verilmiştir. Karar verilen n ve m sayıları sırasıyla 6 ve 30'dur. Öncelikle n sayısı için şunu söyleyebiliriz; grafikte en iyi aralık sayısı 4 olarak gözükmemektedir. Fakat aralık sayısı 7 ve daha üzeri için çok belirgin kırılmalar olduęu görölmüştür ve aralık sayısı 4 olduğunda aralık büyüklükleri fazla olmaktadır. Bu nedenle maksimum aralık sayısı olarak 6 seçilmiştir. Ekstraktör kabının aralık sayısı da 30 olarak belirlenmiştir. Daha önce de bahsedildięi gibi ekstraktör kabının aralık sayısı deęerleri çok deęiştirmemekte ve aralık sayısı ne kadar çok olursa sonlu farklar denklemleri de bununla orantılı olarak artacaktır. Bu doğrultuda matrislerin de boyutu artacak, problemin çözüm süresi uzayacaktır. Ayrıca aralık sayıları arasındaki fark kabın uzunluęu ve tanecik yarıçapı uzunluęu arasındaki farktan kaynaklandığı açıkça görülebilir.

Sonlu farklar yöntemiyle çözümün daha kolay anlaşılması için genellikle grid sistemi oluşturulur. Böylece başlangıç, sınır deęerleri ve iç noktalar daha iyi anlaşılır. Çalışmanın bu aşamasında da grid sistemi hazırlanmıştır. Grid sistemi $n = 6$ ve $m = 30$ için oluşturulmuş olup her ne kadar katı faz ve akışkan faz için ayrı olarak oluşturulmuş olsa da zaman adımları ile eş zamanlı çözülmektedir.



Şekil 3.15 Katı fazda $n = 6$ için oluşturulan grid sistemi

Problemin çözüm aşamalarını gösteren akış şeması aşağıda gösterilmiştir.



Şekil 3.17 Problemin çözüm aşamalarını gösteren akış şeması

SAYISAL SONUÇLAR

Süperkritik akışkan ekstraksiyonu işlemi kimyasal bir deney olması nedeniyle etkilendiği koşullar olmaktadır. Daha önceki bölümlerde yapılan tanımlarda bunlardan bahsedilmiştir. Sıcaklık ve basınç en önemli etkenlerdir. Fakat deney sonucunu etkileyen koşullardan bahsederken sadece sıcaklık ve basınçtan söz edilemez. Ayrıştırma veya saflaştırma yapılacak maddenin türü yani maddenin boyutu ve çözücü debisi de bu etkenler arasındadır. Dolayısıyla sayısal sonuçlardan bahsederken de tek bir sonuçtan bahsetmek yanlıştır. Koşullar değiştikçe sonuçlar da bununla birlikte değişmektedir. Sonuçların incelenmesi noktasında da önce deney sonuçlarından bahsedilmelidir.

4.1 Deneysel Sonuçlar

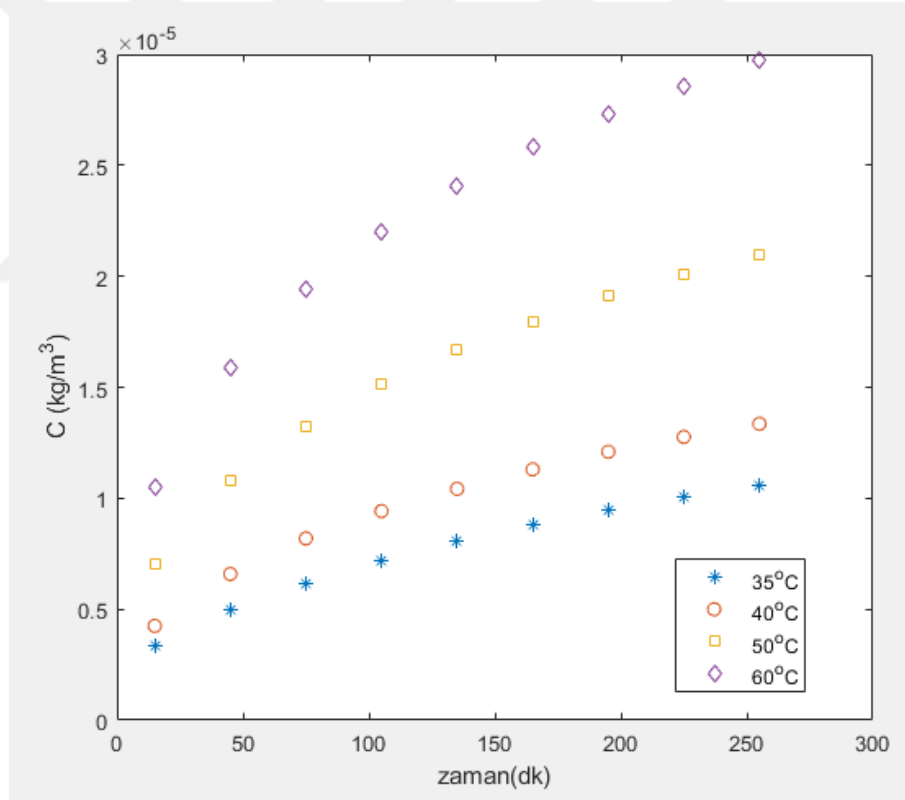
Kullanılan deneysel sonuçlar, bu çalışmanın da temelini oluşturmuş olan Akgün [7] çalışmasında yer almaktadır. Bu çalışmada süperkritik CO_2 yardımıyla lavanta çiçeğinden esansiyel yağ elde edilmiştir. Süperkritik akışkan ekstraksiyonu çok geniş alana sahip olduğundan farklı maddeler üzerinde de çalışmalar yapılmıştır. Örneğin; Goto vd. [20] zencefil yağı ekstraksiyonu, Fiori [18] üzüm çekirdeği yağı ekstraksiyonu, Saptoro vd. [23] Saravak karabiber ekstraksiyonu üzerine çalışmıştır. Bu çalışmalar isimlerinden de anlaşılacağı üzere bitkisel maddeler kullanılarak yapılmış çalışmalardır. Fakat Nei Nei vd. [22] alabalık tozundan yağ asidi elde etmek için yaptığı ekstraksiyon işlemi deneyi hayvansal ürünler için de kullanıldığının bir göstergesidir. Yukarıda geçen çalışmaların deneysel sonuçlarını incelediğimizde genellikle benzer grafikler elde edildiği görülmüştür tıpkı bu çalışmada elde edilen grafikler gibi.

DeneySEL sonuçların daha kolay incelenmesi için sonuçlara gruplandırılarak yer verilmiştir.

4.1.1 Sıcaklık Değişimlerine Göre DeneySEL Sonuçlar [7]

Esansiyel yağların uçucu olmasından dolayı buhar basınçları yüksektir. Süperkritik akışkan ekstraksiyonu işleminde de buhar basıncının rolü büyüktür. Basıncın sabit kalıp sıcaklığın artması ile esansiyel yağın buhar basıncının artması ekstraksiyon hızını artırır. Yani sıcaklığı artırdığımızda esansiyel yağın ekstraksiyon hızı da artmaktadır.

Sıcaklık değişimleri 100 Bar basınç, 1.7 mL/dak çözücü debisi ve 1.2 mm tanecik boyutundaki maddeler için gerçekleştirilmiştir. Sıcaklık değerleri ise 35°C, 40°C, 50°C ve 60°C olarak alınmıştır. DeneySEL sonuçların grafiği Şekil 4.1'de görülmektedir.



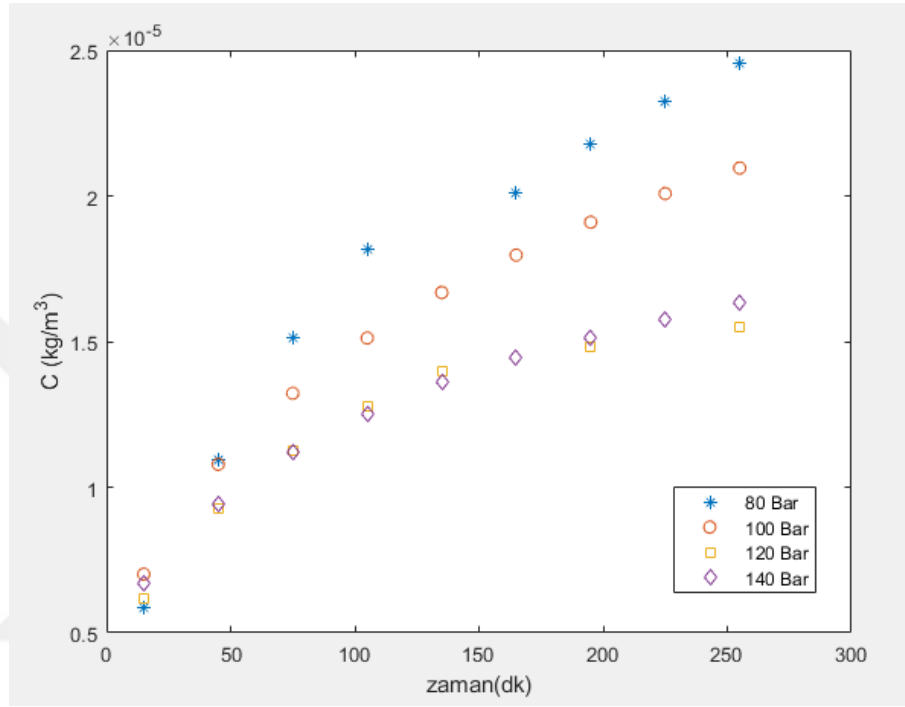
Şekil 4.1 35°C, 40°C, 50°C ve 60°C için deneySEL sonuçlar

4.1.2 Basınç Değişimlerine Göre DeneySEL Sonuçlar [7]

Basınç değeri arttıkça süperkritik CO_2 yoğunluğu artmaktadır. Buna bağlı olarak ekstraksiyon hızı da artmaktadır. Çözücünün yoğunluğunun artmasıyla ekstrakte edilen

yağın çözünürlüğü de artmış olur. Bu durum deneysel sonuçların yer aldığı Şekil 4.2’de görülebilir.

Basınç değışimleri 50°C sıcaklık, 1.7 mL/dak ve 1.2 mm tanecik boyutundaki lavanta çiçekleri için gerçekleştirilmiştir. Basınç değerleri 80 Bar, 100 Bar, 120 Bar ve 140 Bar olarak alınmıştır.

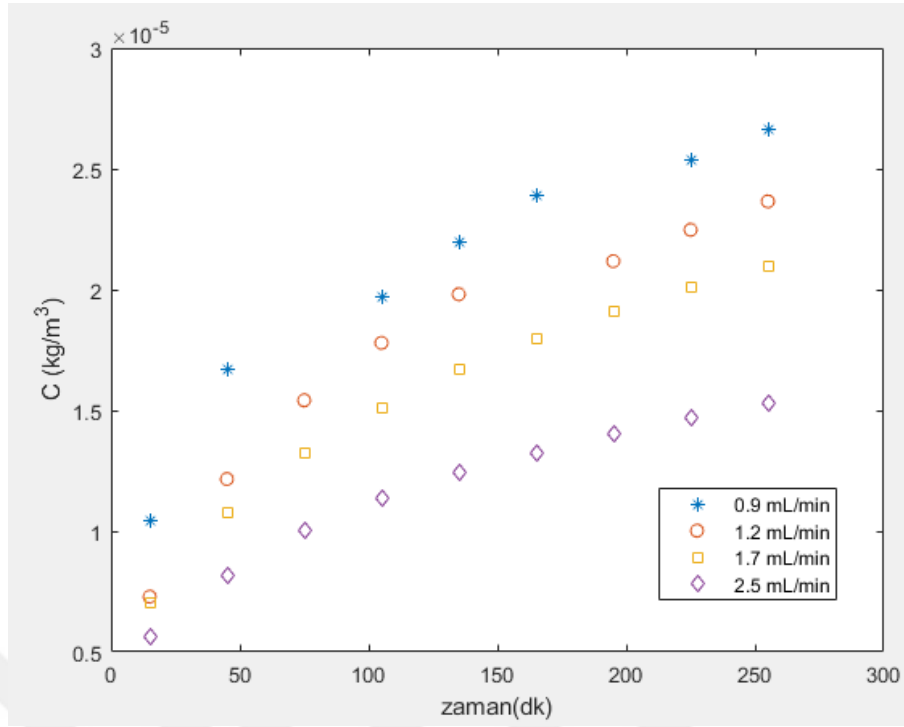


Şekil 4.2 80 Bar, 100 Bar, 120 Bar ve 140 Bar için deneysel sonuçlar

4.1.3 Çözücü Debisindeki Değişimlerine Göre Deneysel Sonuçlar [7]

Çözücü debisinin ekstraksiyon hızına pek katkısı olmasa da ekstraksiyon işlemini kontrol eden parametrelerden tanecik içi difüzyondan ziyade çözünen maddenin çözünürlüğünün, dolayısıyla işlemin tüm kütle aktarım katsayısına etkisi olduğu anlamına gelmektedir [7].

Çözücü debisi değışimleri 100 Bar sabit basınç ve 50°C sabit sıcaklıkta 1.2 mm boyutuna sahip lavanta çiçekleri için bakılmıştır. Çözücü debisi değerleri 0.9 mL/dk, 1.2 mL/dk, 1.7 mL/dk ve 2.5 mL/dk olarak alınmıştır. Deneysel sonuçların grafiğı Şekil 4.3’te daha iyi incelenebilir.

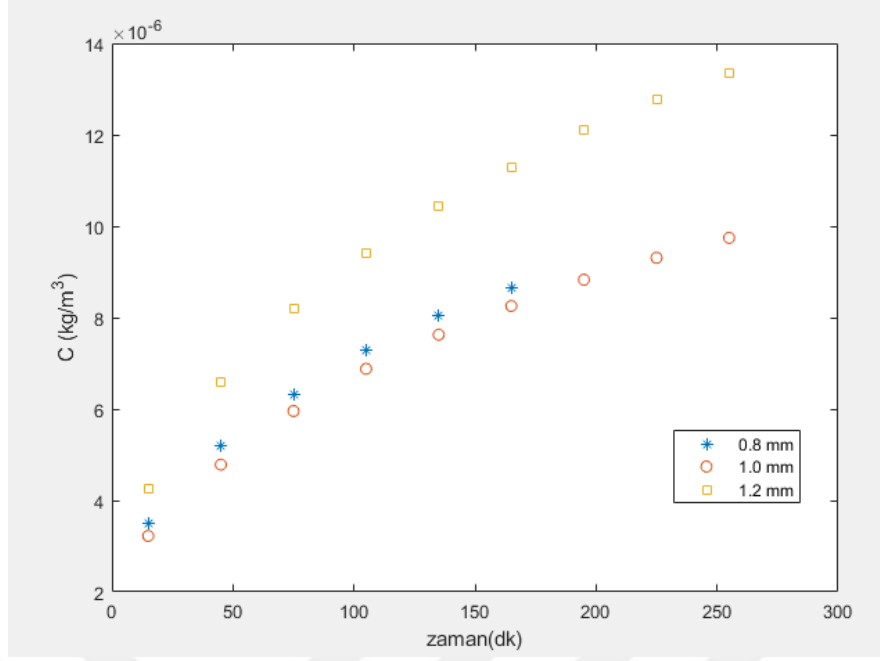


Şekil 4.3 0.9 mL/dk, 1.2 mL/dk, 1.7 mL/dk ve 2.5 mL/dk için deneysel sonuçlar

4.1.4 Tanecik Boyutundaki Değişimlerine Göre Deneysel Sonuçlar [7]

Tanecik boyutu da ekstraksiyon işlemi için önemlidir. Tanecik boyutları büyüdükçe ekstraksiyon hızı da artmaktadır.

Tanecik boyutundaki değişimler 100 Bar sabit basınç, 40°C sabit sıcaklık ve 1.7 mL/dak çözücü debisine sahip lavanta çiçekleri için incelenmiştir. Tanecik boyutları ise 0.8 mm, 1 mm ve 1.2 mm olarak belirlenmiştir. Deneysel sonuçların grafiği Şekil 4.4'te daha iyi görülmektedir.



Şekil 4.4 0.8 mm, 1 mm ve 1.2 mm göre deneysel sonuçlar

4.2 Sayısal Sonuçlar

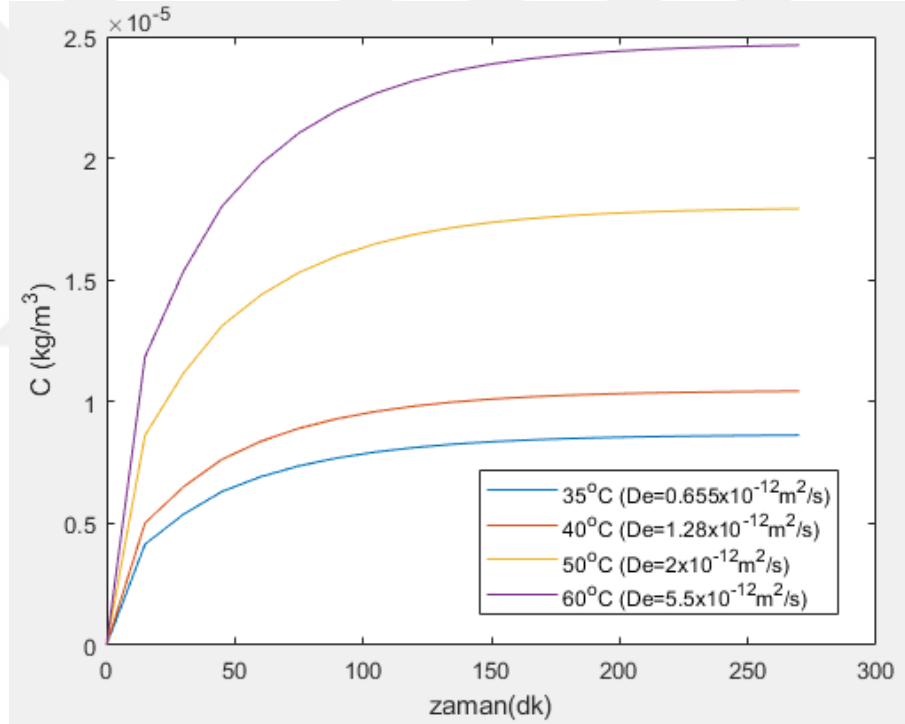
Yukarıda Akgün [1] çalışmasından alınan farklı deney koşullarına sahip deneysel sonuçlar bulunmaktadır. Bu çalışmada ise [7] çalışması temel olarak kabul edilmiş olsa da tamamen aynı çalışmanın devamı değildir. Daha önceki bölümlerde de bahsedildiği gibi bu çalışmada kullanılan model dinamik modeldir. Fakat deney koşulları yarı kararlı model için geçerli olduğundan bazı katsayı değerlerinde değişimler olmuştur. Yani deney koşulları içinde kütle aktarım katsayısı (k_f) ve tanecik içi difüzyon (efektif difüzyon) katsayısı (D_e) aynı kullanılmamıştır. Katsayılar için ekstra çalışmalar yapılmıştır. Katsayılar ile ilgili incelemeler daha sonra anlatılacaktır. Fakat öncelikle sıcaklık, basınç, çözücü debisi ve tanecik boyutlarına göre olan sayısal sonuçların grafiği, bu yapılan çalışmalar doğrultusunda elde edilen k_f ve D_e değerleri kullanılarak gösterilmiştir.

Çözüm adımları Bölüm 3'te daha ayrıntılı olarak ele alınmıştır. Tekrar özetlenirse ilk olarak difüzyon ve adveksiyon-difüzyon denklemleri boyutsuz hale getirilmiştir. Daha sonra sonlu farklar denklemleri formuna çevrilmiştir. Oluşan cebirsel denklem sistemi bilgisayar programı yardımıyla çözülmüştür.

4.2.1 Sıcaklık Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar

Süperkritik akışkan ekstraksiyonunda sıcaklığı arttırdığımızda sonuçların nasıl değiştiği deneysel sonuçlarda bahsedilmiştir ve Şekil 4.1'den de çok kolayca görülmektedir. Bu çalışmada elde edilen sayısal çözümün sonunda da aynı doğrultuda sonuçlar elde edilmiştir. Sıcaklığı arttırdığımızda C (kg/m^3) değeri yani akışkan fazda çözünen derişimi artmıştır (Şekil 4.5).

Sıcaklık değişimlerinden en çok etkilenen katsayı D_e 'dir. Şekil 4.5'te grafik üzerinde D_e değerleri yazmaktadır ve grafikten de anlaşılacağı gibi sıcaklık arttıkça D_e değeri artmaktadır. Zaten sıcaklık arttıkça akışkan içinde çözünen derişim de artacağından tanecik içi difüzyon katsayısı da artması gayet olağandır.

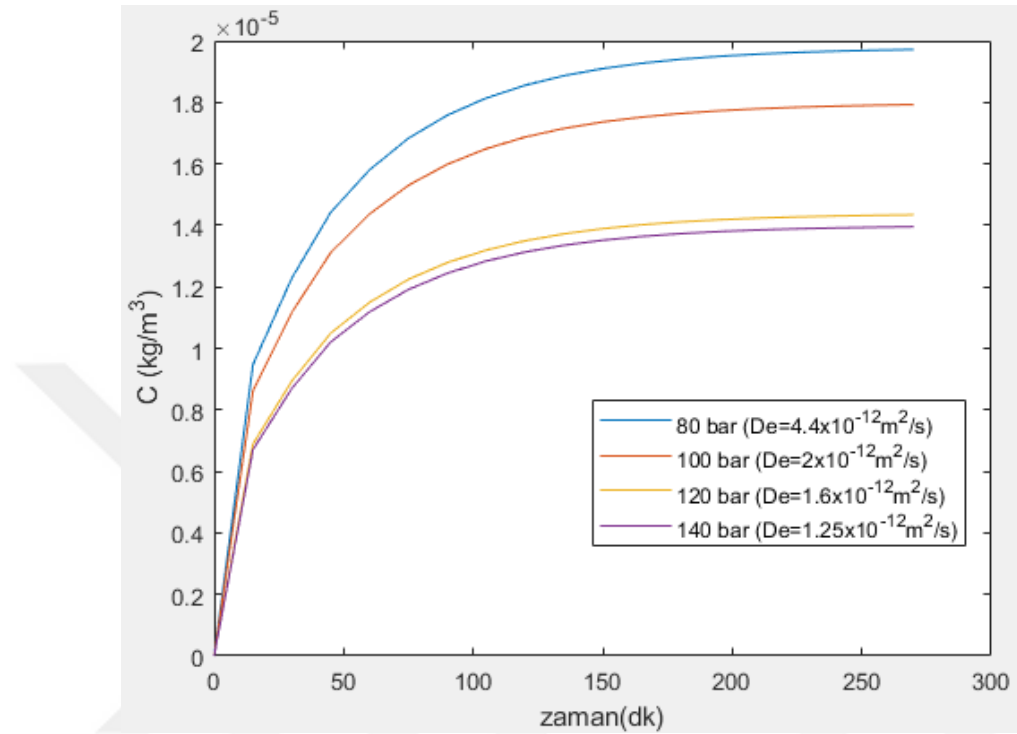


Şekil 4.5 35°C, 40°C, 50°C ve 60°C için sayısal sonuçlar

4.2.2 Basınç Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar

Sıcaklık arttıkça akışkan fazdaki çözünen derişimi de artmaktadır. Fakat aynı durum basınç için söylenilememektedir. Çünkü basınç değeri arttıkça çözünen derişimi azalmaktadır. Bu durumda şu söylenebilir: Süperkritik akışkanlar üzerinde basınç ve sıcaklık ters etkilere sahiptir.

Nasıl ki sıcaklık için D_e katsayısı çok etkiliyse basınç için de etkilidir. Şekil 4.6'da katsayı değerleri görülmektedir. Grafikteki değerlere dikkat edilirse basınç arttıkça D_e değeri azalmıştır. Zaten basınç ve sıcaklığın bu işlemde ters etkilere sahip olduğu düşünülürse D_e değeri için de aynı etki söz konusu olur.

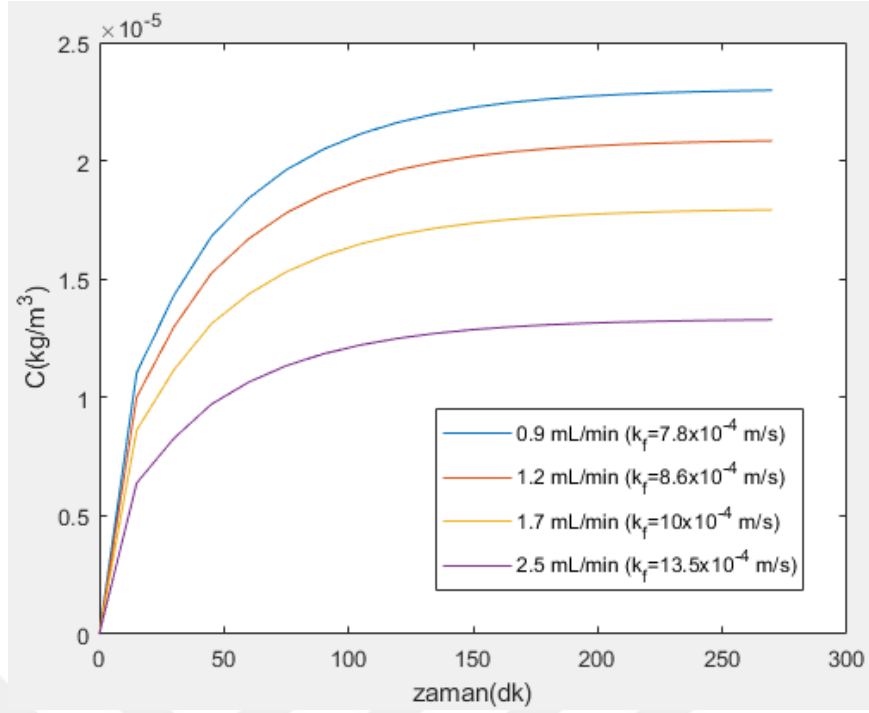


Şekil 4.6 80 Bar, 100 Bar, 120 Bar ve 140 Bar için sayısal sonuçlar

4.2.3 Çözücü Debisindeki Değişimlere Göre Sayısal Sonuçlar

Çözücü debisinin ekstraksiyon işlemine sıcaklık ve basınç gibi doğrudan etkisi yoktur. Fakat çözücü debisi dediğimizde çözücü akış hızından bahsetmiş olduğumuz için bu da çözünen derişimi miktarını etkilemektedir. Dört farklı çözücü debisi için sonuçlar incelendiğinde şu anlaşılmıştır: Çözücü debisi azaldıkça C (kg/m^3) değeri artmaktadır.

Tüm koşullarda katsayıların etkisi incelenmiştir. Fakat her katsayı her durum için aynı etkiye sahip değildir. Sıcaklık ve basınçta D_e çok önemli bir etkiye sahipken çözücü debisinde kütle aktarım katsayısı (k_f) daha etkilidir. Ayrıca her çözücü debisi için D_e ve D_L değerleri sabittir. Şekil 4.7'de farklı çözücü debileri için kullanılan k_f değerleri görülmektedir. Çözücü debisi arttıkça k_f katsayısının değeri de artmaktadır. Yani çözücü debisi arttıkça akışkan fazda çözünen derişimi azalmakta, kütle aktarım katsayısının değeri artmaktadır.

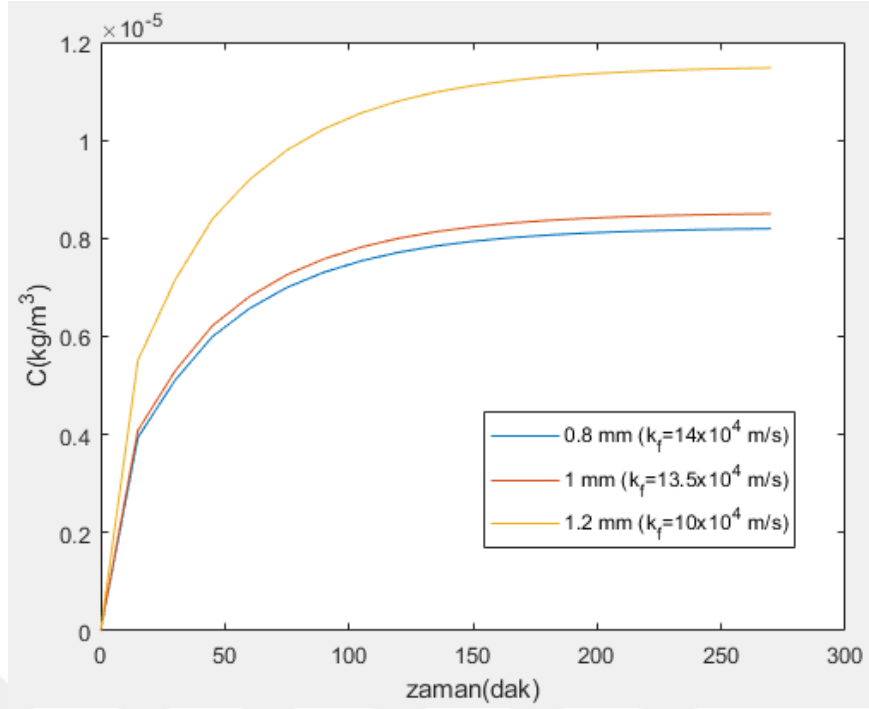


Şekil 4.7 0.9 mL/dk, 1.2 mL/dk, 1.7 mL/dk ve 2.5 mL/dk için sayısal sonuçlar

4.2.4 Tanecik Boyutundaki Değişimlere Göre Sayısal Sonuçlar

Süperkritik akışkan işleminin bir maddenin ayrıştırma ve saflaştırma işlemi olduğu daha önceki bölümlerde bahsedilmiştir. Bu maddelerin türü, yapısı gibi durumlar da işlem üzerinde etkilidir. Bu durum tek bir madde üzerinden düşünüldüğünde, her madde aynı büyüklükte olmayabilir. Dolayısıyla bu durumu da incelenmek önemlidir. Bu incelemede de farklı tanecik boyutlarına sahip lavanta çiçekleri için sayısal sonuçlar elde edilmiştir. Bu sonuçlar doğrultusunda tanecik boyutu büyüdükçe akışkan fazdaki çözünen derişim de artmaktadır.

Tanecik boyutu ile katsayılar arasındaki ilişki incelendiğinde D_e , D_L ve v değerlerinin sabit olduğu görülmüştür. Sadece k_f değeri farklı tanecik boyutları ile farklı değerlere sahiptir. Bu nedenle bu kısımda sadece k_f katsayısı incelenmiştir. Elde edilen değerler Şekil 4.8'de görülmektedir ve grafikten de anlaşılacağı gibi tanecik boyutu arttıkça k_f katsayısının değeri azalmaktadır.



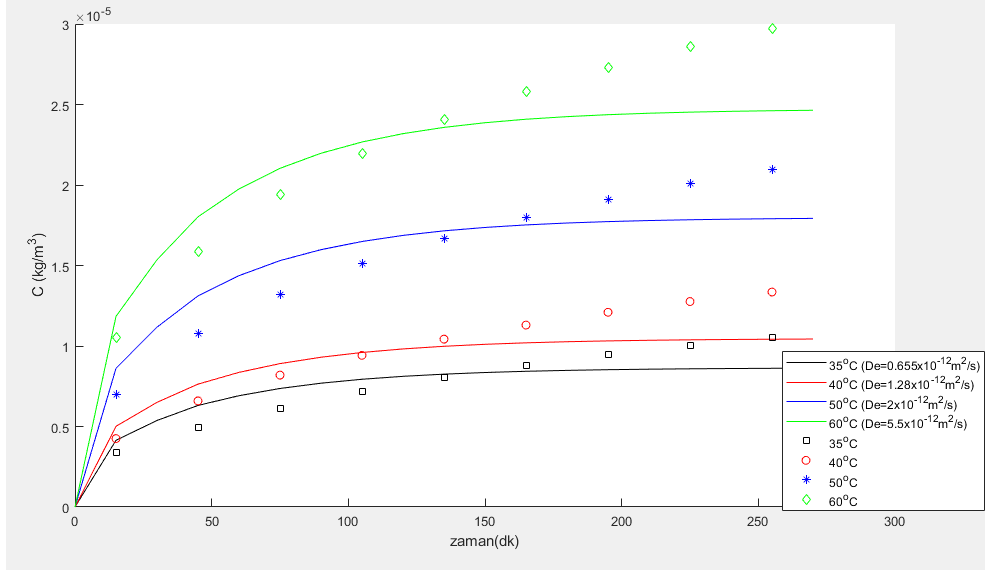
Şekil 4.8 0.8 mm, 1 mm ve 1.2 mm için sayısal sonuçlar

4.3 Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması

Yukarıdaki bölümlerde sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçlar ayrı ayrı incelenmiştir. Fakat bunun gibi çalışmalarda önemli kısım sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılmasıdır. Böylece sayısal yöntemle bulunan yaklaşık sonuçların ne kadar doğru olduğu anlaşılmaktadır. Tabiki yaklaşık sonuçların deneysel sonuçlar ile en az hata ile karşılaştırılmasını sağlamak için katsayıların analizinden yararlandık. Sayısal sonuçların incelendiği Bölüm 4.2’de katsayılardan bahsedilmiştir.

4.3.1 Sıcaklık Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması

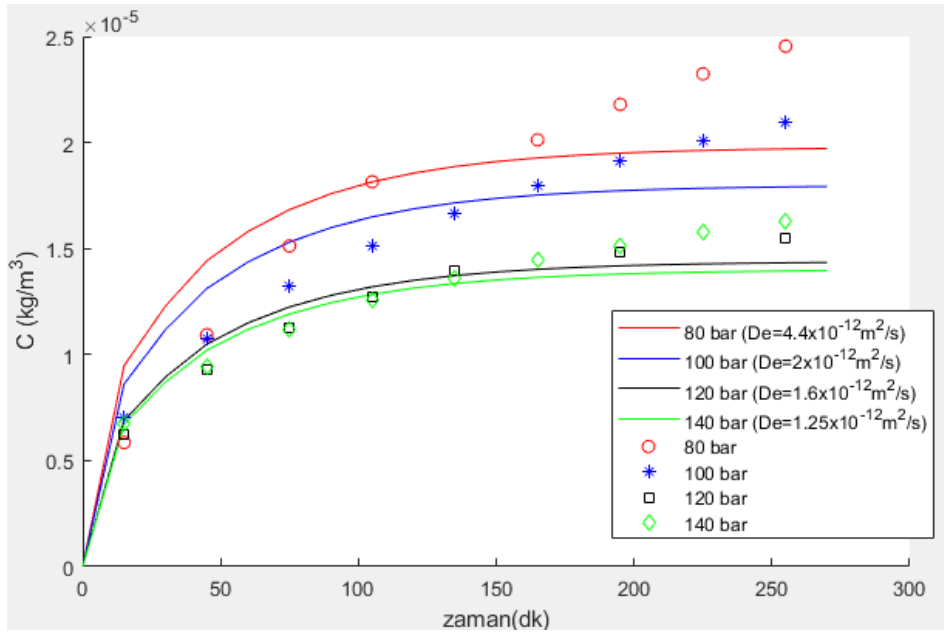
Daha önce sıcaklık değişimlerine göre süperkritik akışkan ekstraksiyonunun nasıl değişim gösterdiği konusunda bahsedilmiştir. Bu nedenle burada sadece sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılmasına yer verilecektir. Şekil 4.9’da bu karşılaştırılma görülebilir.



Şekil 4.9 Sıcaklığa göre sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması

4.3.2 Basınç Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması

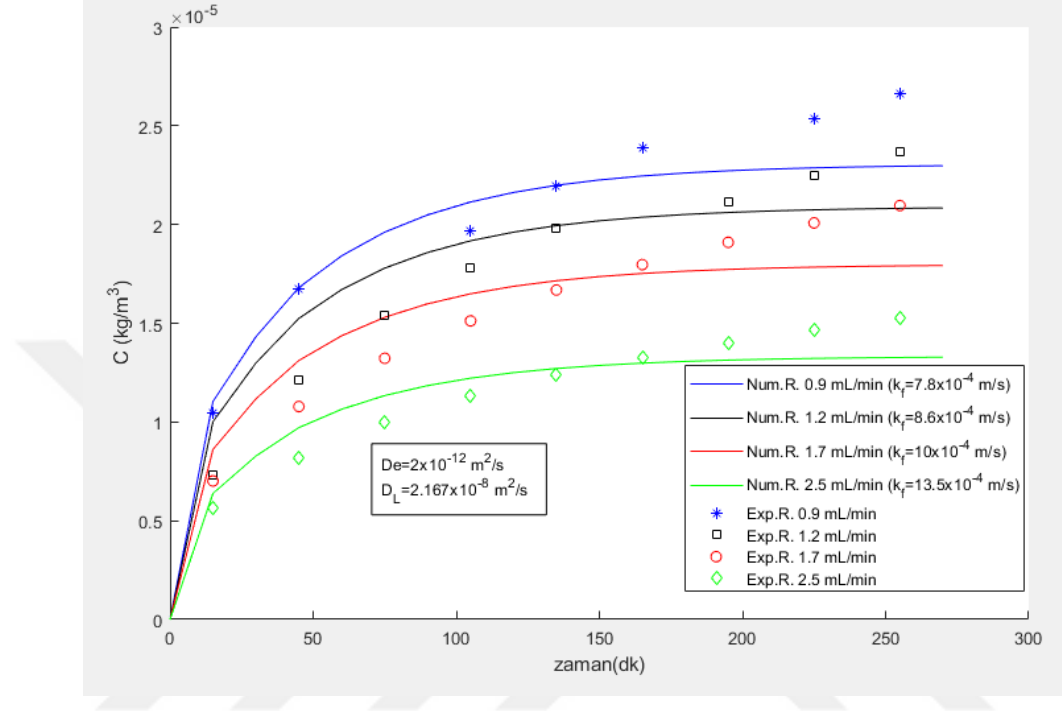
Farklı basınç değerleri için bulunan sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması Şekil 4.10'da incelenebilir. Her nokta için aynı hata oranına sahip olmadığı görülebilir. Fakat sayısal sonuçlar, deneysel sonuçlar ile aynı doğrultuda bulunmuştur.



Şekil 4.10 Basınca göre sayısal sonuçlarla deneysel sonuçların karşılaştırılması

4.3.3 Çözücü Debisindeki Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması

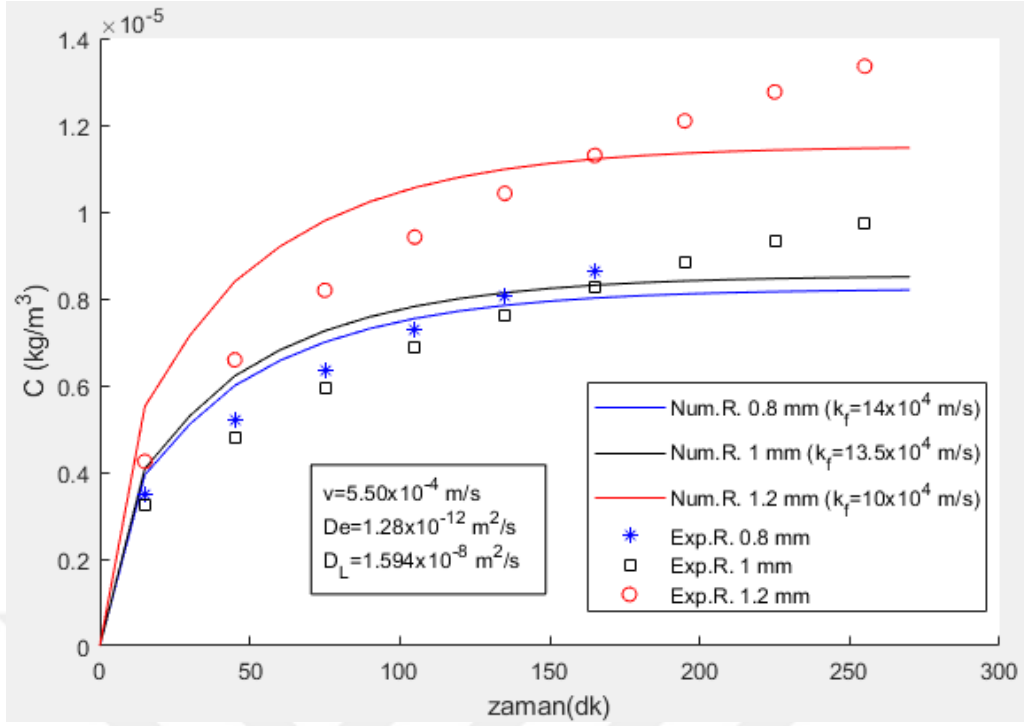
Farklı çözücü debileri için sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılmasını içeren grafik Şekil 4.11’de incelenebilir.



Şekil 4.11 Çözücü debilerine göre sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması

4.3.4 Tanecik Boyutundaki Değişimlerine Göre Sayısal Sonuçlar ile Deneysel Sonuçların Karşılaştırılması

Farklı tanecik boyutuna sahip lavanta çiçekleri için elde edilen sayısal sonuçların deneysel sonuçlar ile karşılaştırılması Şekil 4.12’de görülmektedir.



Şekil 4.12 Farklı tanecik boyutları için sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması

4.4 Katsayıların İncelenmesi

Daha önceki bölümlerde süperkritik akışkan ekstraksiyonu işlemini doğrudan etkileyen koşullar üzerinde durulmuştur. Fakat bu koşulların etkiledikleri durumlardan söz ederken katsayılardan da bahsedilmiştir. Yukarıda adı geçen dört katsayısı da tanecik arası akışkan hızı (v), kütle aktarım katsayısı (k_f), tanecik içi difüzyon katsayısı (D_e) ve eksenel difüzyon katsayısı (D_L) işlemin çözümünde önemli bir yere sahiptir [7]. Bu çalışma süresi içinde k_f ve D_e katsayıları üzerine ayrıntılı bir çalışma yapılmıştır. Ayrıca tüm çözücü debileri ve tanecik boyutlarında D_e ve D_L değerleri sabittir. Farklı tanecik boyutlarında bu katsayılara ek olarak v değeri de sabittir.

Sıcaklık ve basıncın etkileri incelenirken D_e katsayısı üzerinde durulmuştur. Bunun nedeni sıcaklık ve basıncın süperkritik akışkan ekstraksiyonunun nasıl etkilediğinin anlatıldığı kısımda anlaşılabilir. Çözücü debisi ve tanecik boyutunun etkileri incelenirken de k_f katsayısı ayrıntılı olarak analiz edilmiştir.

Çözümlerde kullanılan katsayı değerlerinin optimum hale gelmesi için eğri uydurma (curve fitting) yöntemi kullanılmıştır. Bunun için tahmini bulunan yaklaşık katsayı

değerleri kullanılarak, oluşturulan MATLAB2018a bilgisayar yazılımındaki bilgisayar kodları yardımıyla bulunmuştur. Aşağıdaki Çizelge 4.1’de katsayı değerleri verilmiştir.

Çizelge 4.1 Deney koşullarına göre optimum katsayı değerleri

$T(^{\circ}\text{C})$	$P(\text{Bar})$	$Q(\text{mL/dk})$	$d_i(\text{mm})$	$v(\text{m/s})$	$D_e(\text{m}^2/\text{s})$	$D_L(\text{m}^2/\text{s})$	$k_f(\text{m/s})$
35	100	1.7	1.2	4.62×10^{-4}	0.6244×10^{-12}	1.407×10^{-8}	6.81×10^{-4}
40	100	1.7	1.2	5.50×10^{-4}	0.9626×10^{-12}	1.594×10^{-8}	11×10^{-4}
40	100	1.7	0.8	5.50×10^{-4}	0.9626×10^{-12}	1.594×10^{-8}	14×10^{-4}
40	100	1.7	1.0	5.50×10^{-4}	0.9626×10^{-12}	1.594×10^{-8}	12×10^{-4}
50	100	1.7	1.2	8.22×10^{-4}	2.1386×10^{-12}	2.167×10^{-8}	10×10^{-4}
50	100	0.9	1.2	4.37×10^{-4}	2.1386×10^{-12}	2.167×10^{-8}	7.8167×10^{-4}
50	100	1.2	1.2	5.82×10^{-4}	2.1386×10^{-12}	2.167×10^{-8}	8.5757×10^{-4}
50	100	2.5	1.2	12.1×10^{-4}	2.1386×10^{-12}	2.167×10^{-8}	13×10^{-4}
50	80	1.7	1.2	14×10^{-4}	2.1416×10^{-12}	3.084×10^{-8}	20×10^{-4}
50	120	1.7	1.2	6.44×10^{-4}	2.1356×10^{-12}	1.824×10^{-8}	10×10^{-4}
50	140	1.7	1.2	5.22×10^{-4}	2.1326×10^{-12}	1.565×10^{-8}	8.03×10^{-4}
60	100	1.7	1.2	11.1×10^{-4}	5.4364×10^{-12}	2.679×10^{-8}	20×10^{-4}

SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada süperkritik akışkan ekstraksiyonu kullanılarak elde edilen lavanta çiçeği esansiyel yağının matematiksel modeli yarı kararlı modelden dinamik model haline getirilerek sonlu farklar yöntemiyle sayısal olarak çözülmüştür.

Birinci bölüm literatür taramasında ele alınan çalışmaları içermektedir.

İkinci bölümde ise süperkritik akışkan ekstraksiyonun ne olduğu, bu işlemi temsil eden kısmi diferansiyel denklem sistemi yani ele alınan matematiksel model ve bu sistemin sayısal çözüm için boyutsuzlaştırılması ele alınmıştır.

Üçüncü bölümde sayısal çözüm için sonlu farklar yöntemi olarak kapalı Crank-Nicolson yöntemi seçilmiştir. Böylece kararlılık koşuluna bakılmasına gerek kalmamıştır. Daha sonra sonlu farklar formundaki denklemlerin cebirsel denklem sistemi oluşturulmuş ve bu sistem tridiagonal bir sistem olduğundan dolayı Thomas algoritması yardımı ile çözülmüştür. Çözüm aşamasında bilgisayar yazılımı kullanılmıştır. MATLAB kodları MATLABR2018a kullanılarak tarafımızdan oluşturulmuştur.

Son olarak da dördüncü bölümde sayısal sonuçlar grafikleri çizilerek analiz edilmiştir. Ayrıca bulunan sonuçların optimum hale getirilebilmesi için katsayılar incelenmiş ve bu doğrultuda katsayılar üzerinde korelasyon yapılmıştır. Bu bölümün sonuç kısmında da sayısal sonuçlar deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır.

Bu yapılan çalışma daha iyileştirilebilir ve sonuçların daha fazla doğruluğa sahip olması için çalışmalara devam edilebilir. Ayrıca,

- Öncelikle kullanılan matematiksel model denklemi bir boyutludur. Denklemler iki boyutlu hale getirilip buna göre sonlu farklar yöntemi ile modellenebilir.
- Sonlu farklar modellemesinde kullanılan türev deklemleri daha fazla noktalı olarak ele alınabilir. Böylece kesme hatasının mertebesi daha büyüyecektir ve bunun sonuçlar üzerindeki doğruluğu nasıl etkilediği araştırılmalıdır.
- Tezde lavanta çiçeğinden esansiyel yağ elde edilmesinde süperkritik akışkanlardan yararlanılmıştır. Fakat süperkritik akışkan ekstraksiyonu işlemi farklı maddeler için de genel hatları ile benzer aşamalara sahiptir. Bu nedenle bu çalışmadan yararlanılarak farklı maddeler için de süperkritik akışkan ekstraksiyonu işleminin sayısal sonuçlarına ulaşılmasında kullanılabilir.
- Ekstraksiyon işleminde birçok katsayının rolü büyüktür. Çalışma süresince D_e ve k_f katsayılarının etkileri üzerinde durulmuştur. Korelasyonda bu katsayılara yapılmıştır. Fakat çok yaklaşık değerler bulunamamıştır. Bu nedenle hem katsayıların değerleri daha iyileştirilmesi üzerine hem de incelenmemiş diğer katsayıların incelenmesi üzerine çalışmalar yapılabilir.
- Kısmi difernasiyel denklemlerin çözümü için kullanılan birden fazla sayısal yöntem bulunmaktadır. Burada sonlu farklar yöntemi kullanılmıştır. Aynı çalışma farklı sayısal yöntem kullanılarak da sonuçlara ulaşıp ulaşılamayacağı araştırılabilir.

KAYNAKLAR

- [1] Beers, K.J., (2007). Numerical Methods for Chemical Engineering Applications in MATLAB, Cambridge University Press, New York.
- [2] Dehghan, M., (2004). "Weighted Finite Difference Techniques for the One-Dimensional Advection-Diffusion Equation", Applied Mathematics and Computation, 147:307-319.
- [3] Karahan, H., (2006). "Implicit Finite Difference Techniques for the Advection-Diffusion Equation Using Spreadsheets", Advances in Engineering Software, 37:601-608.
- [4] Gurarslan, G., Karahan, H., Alkaya, D., Sarı, M. ve Yaşar, M., (2013). "Numerical Solution of Advection-Diffusion Equation Using a Sixth-Order Compact Finite Difference Method", Hindawi Publishing Corporation Mathematical Problems in Engineering, 2013:1-7.
- [5] Karahan, H., (2006). "A third-order Upwind Scheme for the Advection-Diffusion Equation Using spreadsheets", Advances in Engineering Software, 38:688-697.
- [6] Chung-Yau Lam, (1994). Applied Numerical Methods for Partial Differential Equations: An Introduction with Spreadsheet Programs, Prentice Hall, Singapur.
- [7] Akgün, M., Akgün, N.A. ve Dinçer, S., (2000). "Extraction and Modeling of Lavender Flower Essential Oil Using Supercritical Carbon Dioxide", Ind. Eng. Chem. Res., 39:473-477.
- [8] Goto, M., Roy, B.C. ve Hirose, T., (1996). "Shrinking-Core Leaching Model for Supercritical-Fluids Extraction", The Journal of Supercritical Fluids, 9:128-133.
- [9] Çalimli, A., (2007). Susam Yağının Süperkritik Akışkanlar ile Ekstraksiyonu ve Matematik Modelleme Ankara Üniversitesi Bilimsel Araştırma Raporu, <http://acikarsiv.ankara.edu.tr/browse/2066/2737.pdf>, 5 Haziran 2018.
- [10] Lan, S., Zondag, H.A. ve Rindt, C.C.M., (2015). "Shrinking Core Model for the Reaction-Diffusion Problem in Thermo-Chemical Heat Storage", Proceedings of 13th International Conference on Energy Storage, 19–21 Mayıs 2015, Pekin.
- [11] Goodarznia, I. ve Eikani, M., (1998). "Supercritical Carbon Dioxide Extraction of Essential Oils: Modeling and Simulation", 53:1387-1395.

- [12] Pereira, T.J., Ferreira, J.L., Macedo, E.N. ve Machado, L.F.G., (2014). "Mathematical Modeling of Supercritical Extraction: Model of Two Phases with Linear Equilibrium", *International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry*, 8:9-15.
- [13] Reis-Vasco, E.M.C., Coelho, J.A.P., Palavra, A.M.F., Marrone, C. ve Reverchon, E., (2000). "Mathematical modeling and Simulation of Pennyroyal Essential Oil Supercritical Extraction", *Chemical Engineer Science*, 55:2917-2922.
- [14] Araus, K., Uquiche, E. ve del Valle, J., (2009). "Matrix effects in Supercritical CO_2 Extraction of Essential Oils from Plants Material", *Journal of Food Engineering*, 92:438-447.
- [15] Germain, J.C., del Valle, J. ve de la Fuente, J.C., (2005). "Natural Convection Retards Supercritical CO_2 Extraction of Essential Oils and Lipids from Vegetable Substrates", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44:2879-2886.
- [16] Nobandegani, M.S., Darbandi, T., Honanvar, B. ve Sarafraz, M.M., (2015). "Mathematical Modeling and Simulation of Supercritical CO_2 Extraction of Ziziphora Tenuior Volatiles", *Anadolu Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Dergisi A-Uygulamalı Bilimler ve Mühendislik*, 17:1-11.
- [17] Melreles, M.A.A., Zahedi, G. ve Hatami, T. (2009). "Mathematical Modeling of Supercritical Fluid Extraction for Obtaining Extracts from Vetiver Root", *J. of Supercritical Fluids*, 49:23-31.
- [18] Fiori, L., (2010). "Supercritical Extraction of Grape Seed Oil at Industrail-scale: Plant and Process Design, Modeling, Economic Feasibility", *Chemical Engineering and Processing*, 49: 866–872.
- [19] Honarvar, B., Sajadian, S.A., Khorram, M. ve Samimi, A., (2013). "Mathematical Modeling of Supercritical Fluid Extraction of Oil from Canola and Sesame Seeds", 30:159-166 .
- [20] Roy, B.C., Goto, M. ve Hirose, T., (1996). "Extraction of Ginger Oil with Supercritical Carbon Dioxide: Experiments and Modeling", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 35:607-612.
- [21] Machmudah, S., Sulaswatty, A., Sasaki, M., Goto, M. ve Hirose, T., (2006). "Supercritical CO_2 Extraction of Nutmeg Oil: Experiments and Modeling", *J. of Supercritical Fluids*, 39:30-39.
- [22] Nei Nei, H.Z., Fatemi, S., Mehrnia, M. ve Salimi, A., (2008). "Mathematical Modeling and Study of Mass Transfer Parameters in Supercritical Fluid Extraction of Fatty Acids from Trout Powder", *Biochemical Engineering Journal*,40:72-78.
- [23] Lin, T.M., Ping, T.S., Saptoro, A. ve Freddie, P., (2013). "Mass Transfer Coefficients and Correlation of Supercritical Carbon Dioxide Extraction of Sarawak Black Pepper", *International Journal of Food Engineering*, 10:1515
- [24] Encyclopedia Britannica, Seperation and Purification, <https://www.britannica.com/science/separation-and-purification/Exclusion-and-clathration#ref619630>, 28 Nisan 2018.

- [25] Núñez, G.A., Gelmi, C.A. ve del Valle, J.M., (2011). "Simulation of a Supercritical Carbon Dioxide Extraction Plant with Three Extraction Vessels", *Computers and Chemical Engineering*, 35:2687-2695.
- [26] Reverchon, E., Kaziunas, A. ve Marrone, C., (2000). "Supercritical CO_2 Extraction of Hiprose Seed Oil: Experiments and Mathematical Modelling", *Chemical Engineering Science*, 55:2195-2201.
- [27] Nelder, J.A. ve Mead, R., (1965). "A Simplex Method for Function Minimization", *Comput. J.*, 7:308-313.
- [28] Supercritical Fluids, Supercritical Fluids.
<http://www.supercriticalfluid.org/Supercritical-fluids.146.0.html>, 3 Mayıs 2018.
- [29] Sapkale, G.N., Patil, S.M., Surwase, U.S. ve Bhatbhage, P.K., (2010). "Supercritical Fluids Extraction", *Int. J. Chem. Sci.*, 8:729-743.
- [30] Dehghan, M., (2006). "Finite Difference Procedures for Solving a Problem Arising in Modeling and Design of Certain Optoelectronic Devices", *Mathematics and Computers in Simulation*, 71:16-30.
- [31] Mathews, J.H. ve Fink, K.K., (1999). *Numerical Methods Using MATLAB Third Edition*, Prentice Hall College, New Jersey.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Elveda Gamze MEMİŞ
Doğum Tarihi ve Yeri : 13.04.1992 / Ordu
Yabancı Dili : İngilizce
E-posta : elveda1992@gmail.com

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Alan	Okul/Üniversite	Mezuniyet Yılı
Y. Lisans	Matematik	Yıldız Teknik Üniversitesi	Devam ediyor.
Lisans	Matematik	Yıldız Teknik Üniversitesi	2018
Lise	Matematik/Fen	Perşembe Anadolu Lisesi	2010

YAYINLARI

Bildiri

1. Memiř, E.G., Tarm, E., (2018). "Solution of Mathematical Model for Supercritical Fluid Extraction of Lavender Flower Essential Oil with Finite Difference Method", International Conference on Mathematical Advences and Applications, 11-13 Mayıs 2018, İstanbul.

Proje

1. YTÜ-BAP Tez Projesi

