

ZKÜ Fen Bilimleri Enstitüsü – Makine Mühendisliđi Anabilim Dalı

MAK 744 KÜTLE TRANSFERİ

TERMODİNAMİK ve TRANSPORT BÜYÜKLÜKLERİNİN HESAPLANMASI İÇİN FORMÜLLER VE TABLOLAR

Mustafa EYRİBOYUN

ZONGULDAK - 2007

1. TERMODİNAMİK ÖZELLİK VERİLERİ

Her bir bileşen için, entalpi, entropi ve özgül ısı gibi termodinamiksel büyüklüklerin hesaplanmasını sağlayan katsayılardan oluşmaktadır. Her bir bileşen için dört satırdan ibarettir. İlk satırda, bileşen adı, katsayıların kullanılabileceği sıcaklık aralığı bilgileri bulunur. Bundan sonraki üç satırda 14 tane katsayı vardır. Bu katsayılar aşağıdaki formüllere göre, bileşenlerin termodinamiksel özelliklerinin hesaplanmasında kullanılır. Bunların ilk 7'si 1000-5000 K arasında, son 7'si de 300-1000 K arasında geçerlidir. Denklemlerde C_p ısınma ısısını, R_u evrensel gaz sabitini, h entalpiyi T sıcaklığı ve z 'ler de polinom uyum katsayılarını ifade etmektedir.

$$\frac{C_p}{R_u} = z_1 + z_2 T + z_3 T^2 + z_4 T^3 + z_5 T^4 \quad (1.1)$$

$$\frac{h}{R_u T} = z_1 + \frac{z_2 T}{2} + \frac{z_3 T^2}{3} + \frac{z_4 T^3}{4} + \frac{z_5 T^4}{5} + \frac{z_6}{T} \quad (1.2)$$

Buradan,

$$h = R_u T \left[z_1 + \frac{z_2 T}{2} + \frac{z_3 T^2}{3} + \frac{z_4 T^3}{4} + \frac{z_5 T^4}{5} + \frac{z_6}{T} \right] \quad (\text{J/kmol})$$

$$\frac{s^0}{R_u} = z_1 \log T + z_2 T + \frac{z_3 T^2}{2} + \frac{z_4 T^3}{3} + \frac{z_5 T^4}{4} + z_7 \quad (1.3)$$

$$R_u = 8.31434 \text{ kJ/kmol}\cdot\text{K}$$

$$R_u = 8.31434 \text{ kPa}\cdot\text{m}^3/\text{kmol}\cdot\text{K}$$

$$R_u = 0.0831434 \text{ bar}\cdot\text{m}^3/\text{kmol}\cdot\text{K}$$

$$R_u = 82.05 \text{ cm}^3\cdot\text{atm}/\text{mol}\cdot\text{K}$$

$$R = R_u/M$$

$$M : \text{kg/kmol}$$

$$\text{kJ/kg}\cdot\text{K} \equiv \text{kPa}\cdot\text{m}^3/(\text{kg}\cdot\text{K})$$

Tablo 1.
JANAF TABLOLARI TERMODİNAMİK VERİLER (z katsayıları):

THERMO							
CH4	C	1.H	4.	G	0300.00	5000.00	1
1.68347883E+00	1.02372356E-02	-3.87512864E-06	6.78558487E-10	-4.50342312E-14			2
-1.00807871E+04	9.62339497E+00	7.78741479E-01	1.74766835E-02	-2.78340904E-05			3
3.04970804E-08	-1.22393068E-11	-9.82522852E+03	1.37221947E+01				4
O2	O	2.	G	0300.00	5000.00		1
3.69757819E+00	6.13519689E-04	-1.25884199E-07	1.77528148E-11	-1.13643531E-15			2
-1.23393018E+03	3.18916559E+00	3.21293640E+00	1.12748635E-03	-5.75615047E-07			3
1.31387723E-09	-8.76855392E-13	-1.00524902E+03	6.03473759E+00				4
CO2	C	1.O	2.	G	0300.00	5000.00	1
4.45362282E+00	3.14016873E-03	-1.27841054E-06	2.39399667E-10	-1.66903319E-14			2
-4.89669609E+04	-9.55395877E-01	2.27572465E+00	9.92207229E-03	-1.04091132E-05			3
6.86668678E-09	-2.11728009E-12	-4.83731406E+04	1.01884880E+01				4
H2O	H	2.O	1.	G	0300.00	5000.00	1
2.67214561E+00	3.05629289E-03	-8.73026011E-07	1.20099639E-10	-6.39161787E-15			2
-2.98992090E+04	6.86281681E+00	3.38684249E+00	3.47498246E-03	-6.35469633E-06			3
6.96858127E-09	-2.50658847E-12	-3.02081133E+04	2.59023285E+00				4
CO	C	1.O	1.	G	0300.00	5000.00	1
3.02507806E+00	1.44268852E-03	-5.63082779E-07	1.01858133E-10	-6.91095156E-15			2
-1.42683496E+04	6.10821772E+00	3.26245165E+00	1.51194085E-03	-3.88175522E-06			3
5.58194424E-09	-2.47495123E-12	-1.43105391E+04	4.84889698E+00				4
H2	H	2.	G	0300.00	5000.00		1
2.99142337E+00	7.00064411E-04	-5.63382869E-08	-9.23157818E-12	1.58275179E-15			2
-8.35033997E+02	-1.35511017E+00	3.29812431E+00	8.24944174E-04	-8.14301529E-07			3
-9.47543433E-11	4.13487224E-13	-1.01252087E+03	-3.29409409E+00				4
OH	O	1.H	1.	G	0300.00	5000.00	1
2.88273048E+00	1.01397431E-03	-2.27687707E-07	2.17468370E-11	-5.12630534E-16			2
3.88688794E+03	5.59571219E+00	3.63726592E+00	1.85091049E-04	-1.67616463E-06			3
2.38720266E-09	-8.43144185E-13	3.60678174E+03	1.35886049E+00				4
C2H4	C	2.H	4.	G	0300.00	5000.00	1
3.52841878E+00	1.14851845E-02	-4.41838529E-06	7.84460053E-10	-5.26684849E-14			2
4.42828857E+03	2.23038912E+00	-8.61487985E-01	2.79616285E-02	-3.38867721E-05			3
2.78515220E-08	-9.73787891E-12	5.57304590E+03	2.42114868E+01				4
C2H6	C	2.H	6.	G	0300.00	4000.00	1
4.82593823E+00	1.38404286E-02	-4.55725876E-06	6.72496725E-10	-3.59816140E-14			2
-1.27177930E+04	-5.23950672E+00	1.46253872E+00	1.54946670E-02	5.78050731E-06			3
-1.25783188E-08	4.58626713E-12	-1.12391758E+04	1.44322949E+01				4
H	H	1.	G	0300.00	5000.00		1
2.50000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00			2
2.54716270E+04	-4.60117638E-01	2.50000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00			3
0.00000000E+00	0.00000000E+00	2.54716270E+04	-4.60117608E-01				4
O	O	1.	G	0300.00	5000.00		1
2.54205966E+00	-2.75506191E-05	-3.10280335E-09	4.55106742E-12	-4.36805150E-16			2
2.92308027E+04	4.92030811E+00	2.94642878E+00	-1.63816649E-03	2.42103170E-06			3
-1.60284319E-09	3.89069636E-13	2.91476445E+04	2.96399498E+00				4
N	J	3/61N	1.00	0.00	0.00	0.00	1
0.24502678E 01	0.10661458E-03	-0.74653315E-07	0.18796520E-10	-0.10259837E-14			2
0.56116035E 05	0.44487572E 01	0.25030699E 01	-0.21800181E-04	0.54205284E-07			3
-0.56475602E-10	0.20999038E-13	0.56098898E 05	0.41675479E 01				4
NO	J	6/63N	1.0	0.00	0.00	0.00	1
0.31889992E 01	0.13382279E-02	-0.52899316E-06	0.95919314E-10	-0.64847928E-14			2
0.98283242E 04	0.67458115E 01	0.40459509E 01	-0.34181783E-02	0.79819174E-05			3
-0.61139254E-08	0.15919072E-11	0.97453867E 04	0.29974976E 01				4
NO2	J	9/64N	1.0	2.00	0.00	0.00	1
0.46240759E 01	0.25260330E-02	-0.10609483E-05	0.19879239E-09	-0.13799380E-13			2
0.22899900E 04	0.13324137E 01	0.34589224E 01	0.20647063E-02	0.66866060E-05			3
-0.95556665E-08	0.36195873E-11	0.28152261E 04	0.83116980E 01				4
N2	J	9/65N	2.0	0.0	0.0	0.0	1
0.28963194E+01	0.15154863E-02	-0.57235275E-06	0.99807385E-10	-0.65223536E-14			2
-0.90586182E+03	0.61615143E+01	0.36748257E+01	-0.12081496E-02	0.23240100E-05			3
-0.63217520E-09	-0.22577253E-12	-0.10611587E+04	0.23580418E+01				4

2.1 ISI İLETİM KATSAYISI VE VİSKOZİTE HESABI İÇİN MATEMATİKSEL MODEL

Gazların kinetik teorisinden hareketle, Chapman-Eskog tarafından, monoatomik gazların ısı iletim katsayısını hesaplamak üzere geliştirilen ifade aşağıdaki şekildedir (Strehlow, 1985):

$$\lambda_{mono} = 2.6330 \times 10^{-5} \frac{\sqrt{T/W}}{\sigma_0^2 \Omega_\lambda} \quad [\text{J} / (\text{m} \cdot \text{s} \cdot \text{K})] \quad (2.1)$$

Burada, λ_{mono} tekatomlu gazın ısı iletim katsayısını, T mutlak sıcaklığı, W gazın molekül ağırlığını, σ_0 molekül çapını ve Ω_λ da çarpışma integralini ifade etmektedir.

Çokatomlu gazlar için ısı iletim katsayısı ifadesi, (2.1) ifadesinde düzeltmeler yapmak şeklinde, Eucken ve Hirschfelder tarafından ayrı ayrı verilmiştir. Eucken'in verdiği eşitlik,

$$\lambda_i = \lambda_{mono} \left[\frac{1}{3} + \frac{4}{15} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \right] \quad (2.2)$$

şeklinde (Strehlow, 1985). Burada, $\gamma = c_p / c_v$ olarak ısınma ısıları oranıdır. (2.1) ve (2.2) eşitlikleriyle beraber, karışım için ısı iletim katsayısı aşağıdaki denklem ile hesaplanabilir:

$$\lambda_{mix} = \sum_{i=1}^{NS} \frac{\lambda_i}{1 + \frac{1.065}{X_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{NS} X_j \chi_{ij}} \quad (2.3)$$

Mason ve Saxena (Strehlow, 1985) tarafından verilmiş olan bu eşitlikte, NS , karışımında bulunan bileşenlerin toplam sayısını; X_i ve X_j karışımı oluşturan her bir bileşenin mol oranını ifade etmektedir.

χ_{ij} terimi ise molekül ağırlıkları ve viskozitelere bağlı bir büyüklük olup değeri, aşağıda görüldüğü gibi belirlenmektedir:

$$\chi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_i}{W_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{W_j}{W_i} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (2.4)$$

Burada μ , herhangi bir bileşen için dinamik viskoziteyi ifade etmektedir. Kinetik teoriye göre herhangi bir gazın dinamik viskozitesi,

$$\mu = 8.4411 \times 10^{-7} \frac{\sqrt{WT}}{\sigma_0^2 \Omega_\mu} \quad [\text{kg} / (\text{m} \cdot \text{s})] \quad (2.5)$$

ifadesiyle tanımlanmıştır. Buradaki Ω_μ da çarpışma integralini ifade etmektedir. Viskozite ve ısı iletim katsayılarının hesaplanmasında kullanılan çarpışma integralleri birbirine eşittir ($\Omega_\lambda = \Omega_\mu$). İndirgenmiş sıcaklık ($T^* = \kappa T / \varepsilon$) değerlerine bağlı olarak Ω değerleri ile κ / ε ve σ_0 değerleri literatürde bulunmaktadır. Burada kullanılan değerler, Göğüş (1990)'ten düzenlenerek alınmışlardır.

Karışımın viskozitesi de Wilke (Strehlow, 1985) tarafından verilen yarı-ampirik bir formülle aşağıdaki şekilde tanımlanmıştır:

$$\mu_{mix} = \sum_{i=1}^{NS} \frac{\mu_i}{1 + \frac{1}{X_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{NS} X_j \chi_{ij}} \quad (2.6)$$

2.2 DİFÜZYON KATSAYISI HESABINA AİT MATEMATİKSEL MODEL

Chapman-Enskog teorisine göre, Lennard-Jones parametreleri kullanılarak, ikili difüzyon katsayısı aşağıdaki ifade yardımıyla hesaplanabilir.

$$D_{ij} = 5.9543 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{T^3 \left[(1/M_i) + (1/M_j) \right]}}{P(\sigma_0)_{ij}^2 \Omega_{D_{ij}}} \quad \text{m}^2/\text{s} \quad (2.7)$$

Burada,

P	Pa
T	K
M	kg/mol
σ_0	nm (= 10^{-9} m)

birimlerinde alındığında D_{ij} m^2/s olarak bulunur.

Ω_D difüzyon için çarpışma integralini ifade etmekte olup düzeltme faktörü olarak da adlandırılır. Ω_D Boyutsuzdur ve $(\kappa T / \varepsilon)_{ij}$ 'ye bağlı olarak hesaplanabilir. $(\kappa / \varepsilon)_{ij}$ ve $(\sigma_0)_{ij}$ aşağıdaki şekilde hesaplanabilir:

$$(\sigma_o)_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_{o_i} + \sigma_{o_j}) \quad (2.8)$$

ve

$$\left(\frac{\varepsilon}{\kappa}\right)_{ij} = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon}{\kappa}\right)_i \cdot \left(\frac{\varepsilon}{\kappa}\right)_j} \quad (2.9)$$

Denklem (2.7)'de $W_i=W_j$ alınarak self difüzyon katsayısı da hesaplanabilir.

Herhangi bir i bileşenin, bir karışımın içine difüzyonu ise,

$$D_{i,m} = \frac{1 - Y_i}{\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}} \frac{X_i}{D_{ij}}} \quad (2.10)$$

eşitliği ile hesaplanabilir.

Viskozite ve Isı İletim Katsayısı Hesabı için İşlem Sırası:

- Bileşenler için ε/κ ve σ değerleri bulunur,
- Her bir bileşene ait C_p , C_v ve γ değerleri hesaplanır,
- Karışım sıcaklığına bağlı olarak, indirgenmiş sıcaklık ve buna bağlı olarak da çarpışma integralleri (Ω_λ) bulunur,
- Her bir bileşen için viskozite ve ısı iletim katsayıları hesaplanır,
- Karışım için viskozite ve ısı iletim katsayıları hesaplanır.

Kütle Yayınım Katsayısı Hesabı için İşlem Sırası:

- Bileşenler için ε/κ ve σ değerlerinin ataması yapılır,
- Karışım sıcaklığına bağlı olarak, indirgenmiş sıcaklık ve buna bağlı olarak da çarpışma integralleri (Ω_D) bulunur.
- Karışım difüzyon katsayısı istenen bileşen ile diğer bileşenlerin ikili difüzyon katsayıları, teker teker hesaplanır.
- İstenen bileşen için karışım difüzyon katsayısı hesaplanır.

Tablo 2

Moleküller arası kuvvet parametreleri (Göğüş, 1992'den alınmıştır.)

BİLEŞEN	ϵ/k [K]	σ [nm]	μ	α	Zort
Ar	136.5000	0.3330	0.0000	0.0000	0.0000
C2H	209.0000	0.4100	0.0000	0.0000	2.5000
C2H2	209.0000	0.4100	0.0000	0.0000	2.5000
C2H6	252.3000	0.4302	0.0000	0.0000	1.5000
C2N2	349.0000	0.4361	0.0000	0.0000	1.0000
CH	80.0000	0.2750	0.0000	0.0000	0.0000
CH2	144.0000	0.3800	0.0000	0.0000	0.0000
CO	98.1000	0.3650	0.0000	1.9500	1.8000
CO2	244.0000	0.3763	0.0000	2.6500	2.1000
H	145.0000	0.2050	0.0000	0.0000	0.0000
H2	38.0000	0.2920	0.0000	0.7900	280.0000
H2O	572.4000	0.2605	1.8440	0.0000	4.0000
H2O2	107.4000	0.3458	0.0000	0.0000	3.8000
He	10.2000	0.2576	0.0000	0.0000	0.0000
N	71.4000	0.3298	0.0000	0.0000	0.0000
N2	97.5300	0.3621	0.0000	1.7600	4.0000
N2O	232.4000	0.3828	0.0000	0.0000	1.0000
NH3	481.0000	0.2920	1.4700	0.0000	10.0000
NO	97.5300	0.3621	0.0000	1.7600	4.0000
NO2	200.0000	0.2500	0.0000	0.0000	1.0000
O	80.0000	0.2750	0.0000	0.0000	0.0000
O2	107.4000	0.3458	0.0000	1.6000	3.8000
OH	80.0000	0.2750	0.0000	0.0000	0.0000

- Göğüş, A. Y., 1990, Computer Aided Combustion Modeling for Comprehensive Kinetics and Transport in The Gas Phase, Msc. Thesis, METU, Ankara.

Tablo 3.

Çarpışma İntegralleri (Göğüş, 1992'den alınmıştır):

$Y_a da$ kT/ϵ_{AB}	$\Omega_{\mu}=\Omega_k$	$\Omega_{D,AB}$	kT/ϵ $ya da$ kT/ϵ_{AB}	$\Omega_{\mu}=\Omega_k$	$\Omega_{D,AB}$
	Viskozite ve ısı iletim katsayısı için	Kütle yayılım katsayısı için		Viskozite ve ısı iletim katsayısı için	Kütle yayılım katsayısı için
0.3	27.850	2.662	2.7	10.690	0.977
0.35	26.280	2.476	2.8	10.580	0.9672
0.4	24.920	2.318	2.9	10.480	0.9576
0.45	23.680	2.184	3	10.390	0.949
0.5	22.570	2.066	3.1	10.300	0.9406
0.55	21.560	1.966	3.2	10.220	0.9328
0.6	20.650	1.887	3.3	10.140	0.9256
0.65	19.820	1.798	3.4	10.070	0.9186
0.7	19.080	1.729	3.5	0.9999	0.9120
0.75	18.410	1.667	3.6	0.9932	0.9058
0.8	17.800	1.612	3.7	0.9870	0.8998
0.85	17.250	1.562	3.8	0.9811	0.8942
0.9	16.750	1.517	3.9	0.9755	0.8888
0.95	16.290	1.476	4	0.9700	0.8836
1	15.870	1.439	4.1	0.9649	0.8788
1.05	15.490	1.406	4.2	0.9600	0.8740

Tablo 3. (Devamı)
Çarpışma İntegralleri (Göğüş, 1992'den alınmıştır):

KT/ε	Ωμ=Ωk	ΩD,AB	KT/ε	Ωμ=Ωk	ΩD,AB
ya da KT/εAB	Viskozite ve ısı iletim katsayısı için	Kütle yayınım katsayısı için	ya da KT/εAB	Viskozite ve ısı iletim katsayısı için	Kütle yayınım katsayısı için
1.1	15.140	1.375	4.3	0.9553	0.8694
1.15	14.820	1.346	4.4	0.9507	0.8652
1.2	14.520	1.320	4.5	0.9464	0.8610
1.25	14.240	1.296	4.6	0.9422	0.8568
1.3	13.990	1.273	4.7	0.9382	0.8530
1.35	13.750	1.253	4.8	0.9343	0.8492
1.4	13.530	1.233	4.9	0.9305	0.8456
1.45	13.330	1.215	5	0.9269	0.8422
1.5	13.140	1.198	6	0.8963	0.8124
1.55	12.960	1.182	7	0.8727	0.7896
1.6	12.790	1.167	8	0.8538	0.7712
1.65	12.640	1.153	9	0.8379	0.7556
1.7	12.480	1.140	10	0.8242	0.7424
1.75	12.340	1.128	20	0.7432	0.6640
1.8	12.210	1.116	30	0.7005	0.6232
1.85	12.090	1.105	40	0.6718	0.5960
1.9	11.970	1.094	50	0.6504	0.5756
1.95	11.860	1.084	60	0.6335	0.5596
2	11.750	1.075	70	0.6194	0.5464
2.1	11.560	1.057	80	0.6076	0.5352
2.2	11.380	1.041	90	0.5973	0.5256
2.3	11.220	1.026	100	0.5882	0.5170
2.4	11.070	1.012	200	0.5320	0.4644
2.5	10.930	0.9996	300	0.5016	0.4360
2.6	10.810	0.9878	400	0.4811	0.4170

Hesaplanan Değerlerin Karşılaştırılması

Yanma olaylarında karşılaşılan başlıca bileşenlerin ısı iletim katsayıları ve viskozite değerleri, sıcaklığa bağlı olarak hesaplanmış ve literatürde verilen değerlerle karşılaştırılmıştır (Tablo 4). Tablo 1'den görüldüğü gibi; CH₄, CO₂, C₂H₆ ve H₂ için sıcaklık yükseldikçe hata oranı artmaktadır. H₂O'da ise durum tersinedir. Bu da sıcaklık yükseldikçe su buharının, gaz davranışına daha iyi uyduğunun bir göstergesidir. Diğer gazlara ait hata oranları sıcaklıkla fazla değişmemektedirler. Sonuçların, mühendislik hesaplamaları için yeterli hassasiyette oldukları söylenebilir. İki den fazla bileşen içeren karışımlara ait deneysel veriler, doğrudan bulunamamıştır. Ancak gaz-hava karışımı olarak deneysel değerler mevcuttur. Hava O₂ ve N₂ karışımı olarak ele alınıp, gaz-O₂-N₂ üçlü gaz karışımı olarak hesap yapılarak deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır (Tablo 5).

Tablo 4

Geliştirilen CONDVISC alt programı ile hesaplanan, bazı gazlara ait ısı iletim katsayılarının (λ), değişik sıcaklıklar için, literatürde bulunan değerlerle karşılaştırılması.

Gaz adı (Sembölü)	Sıcaklık (K)	Literatür* $\lambda \times 10^{-3}$ W/(m.K)	CONDVISC $\lambda \times 10^{-3}$ W/(m.K)	% HATA
Metan (CH4)	300.00	34.20	32.63	-4.80
	600.00	85.20	75.84	-12.34
Karbondioksit (CO2)	300.00	16.60	16.36	-1.45
	600.00	40.70	36.63	-11.10
Oksijen (O2)	300.00	26.60	25.68	-3.60
	600.00	47.30	45.17	-4.71
Hidrojen (H2)	300.00	183.00	175.06	-4.54
	600.00	305.00	280.89	-8.58
Su buharı (H2O)	400.00	26.60	35.62	25.33
	600.00	46.30	55.70	16.87
Azot (N2)	300.00	25.90	25.47	-1.69
	600.00	44.60	42.67	-4.52

* : CO'a ait değerler, Incropera and De Witt (1990)'dan, diğer gazlar için değerler de Perry and Chilton (1973)'dan alınmıştır.

Tablo 5

Bazı üç bileşenli gaz karışımları için ısı iletim katsayılarının CONDVISC alt programı ile hesaplanan değerlerinin deneysel değerlerle karşılaştırılması

Karışımı oluşturan gazlar (Sıcaklık) T (K)	İlk bileşenin % Oranı	Karışım içinde havadan gelen bileşenlerin % oranları		Isı iletim katsayısı (λ) W/(m.K)		% HATA
		O ₂	N ₂	Deneysel değerler (1)	CONDVISC ile hesaplanan	
H ₂ O-Air (353)	0.1970	0.1687	0.6343	0.02992	0.02850	-4.73
	0.3060	0.1458	0.5482	0.02961	0.02869	-3.12
	0.4440	0.1168	0.4392	0.02885	0.02902	0.60
	0.5190	0.1011	0.3799	0.02814	0.02924	3.92
CH ₄ -Air (295)	0.0760	0.1941	0.7299	0.02563	0.02506	-2.21
	0.3900	0.1282	0.4818	0.02717	0.02695	-0.82
	0.7000	0.0630	0.2370	0.02874	0.02926	1.80
	0.8800	0.0252	0.0948	0.02961	0.03081	4.04

(1) : Tsederberg (1965).

Tablo 1 ve Tablo 2'deki yüzde hata değerleri,

$$\%HATA = \frac{\lambda_{hesap} - \lambda_{deney}}{\lambda_{hesap}} \times 100$$

İkili gaz karışımları için difüzyon katsayılarının hesaplanan ve literatürde bulunan deneysel değerleri Tablo 6'de verilmiştir. Tablo 3'den görüldüğü gibi sonuçlar mühendislik hesaplamaları için yeterli hassasiyettedirler.

Tablo 6

Gaz çiftlerinin ikili difüzyon katsayısını (D_{ij}) hesaplamak amacıyla geliştirilen DIFFCOEF alt programının verdiği sonuçların deneysel verilerle kıyaslanması.

Gaz çifti	T (K)	D_{ij} Deneysel değerler (cm^2/s)	D_{ij} TRC- DIFF sonucu (cm^2/s)	% HATA**	Deney Ref.
A - CO2	276.20	0.133	0.124	-7.26	2
A - He	298.00	0.729	0.811	10.11	2
CO2 - H2O	307.20	0.198	0.174	-13.79	2
CO2 - O2	293.20	0.153	0.149	-2.68	2
He - H2O	307.10	0.902	0.938	3.84	2
H2 - H2O	328.50	1.121	1.043	-7.48	2
H2 - N2	273.15	0.674	0.665	-1.35	1
H2 - N2	573.00	2.147	2.319	7.42	2
H2 - O2	273.15	0.697	0.693	-0.58	1
H2 - O2	773.15	4.200	4.000	-5.00	1
H2O - CO2	273.15	0.138	0.137	-0.73	1
H2O - O2	723.15	1.300	1.212	-7.26	1
N2 - CO2	298.15	0.165	0.156	-5.77	1
N2 - H2O	352.10	0.256	0.317	19.24	2

$$** : \%HATA = \frac{D_{hesap} - D_{deney}}{D_{hesap}} \times 100$$

Ref. : 1) Perry and Chilton (1973).
2) Ekinçi (1983).

İKİLİ DİFÜZYON KATSAYISI HESABINA AİT ÖRNEK:

İlgili ifadeler:

$$D_{ij} = 5.9543 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{T^3 \left[(1/M_i) + (1/M_j) \right]}}{P(\sigma_o)_{ij}^2 \Omega_{D_{ij}}} \quad \text{m}^2/\text{s} \quad (2.7)$$

$$(\sigma_o)_{ij} = \frac{1}{2} (\sigma_{o_i} + \sigma_{o_j}) \quad (2.8)$$

$$\left(\frac{\varepsilon}{\kappa} \right)_{ij} = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon}{\kappa} \right)_i \cdot \left(\frac{\varepsilon}{\kappa} \right)_j} \quad (2.9)$$

Burada,

 P Pa T K M kg/mol σ_o nm (= 10^{-9} m)birimlerinde alındığında D_{ij} m²/s olarak bulunur.**Örnek:**Atmosferik basınç ve 273 K'de H₂ ve N₂ arasındaki kütle yayılım katsayısının hesabı:**Çözüm:**Basınç, $P=10^5$ PaH₂ için $\varepsilon/k = 38.0$ (Tablo 2)N₂ için $\varepsilon/k = 97.53$ (Tablo 2)

$$\left(\frac{\varepsilon}{\kappa} \right)_{H_2-N_2} = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon}{\kappa} \right)_{H_2} \cdot \left(\frac{\varepsilon}{\kappa} \right)_{N_2}} = \sqrt{(38.00)_{H_2} \cdot (97.53)_{N_2}} = 60.87807$$

$$\kappa \cdot T / \varepsilon = 273 / 60.87807 = 4.4844 \cong 4.5 \quad \text{için} \quad \Omega_{D,AB} = 0.8610 \quad (\text{Tablo 3})$$

$$(\sigma_o)_{ij} = (\sigma_o)_{H_2-N_2} = \frac{1}{2} (\sigma_{o_{H_2}} + \sigma_{o_{N_2}}) = \frac{1}{2} (0.2920 + 0.3621) = 0.32705$$

$$M_{H_2} = 2.016 \text{ kg/kmol} = 2.016 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$$

$$M_{N_2} = 28.013 \text{ kg/kmol} = 28.013 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$$

$$D_{ij} = 5.9543 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{T^3 \left[(1/M_i) + (1/M_j) \right]}}{P(\sigma_o)_{ij}^2 \Omega_{D_{ij}}}$$

$$D_{H_2-N_2} = 5.9543 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{273^3 \left[(1000/2.016) + (1000/28.013) \right]}}{10^5 (0.32705)_{H_2-N_2}^2 \cdot 0.8610_{D_{H_2-N_2}}}$$

$$D_{H_2-N_2} = 5.9543 \times 10^{-6} \frac{104013.4091}{9209.4026} = 6.7249 \times 10^{-5} \text{ m}^2 / \text{s}$$

$$D_{H_2-N_2} = 0.6725 \text{ cm}^2 / \text{s}$$