

รายการอ้างอิง



ภาษาไทย

- กาญจนา บุญเกียรติ. การคำนวณขั้นต้นในวิชาวิศวกรรมเคมี. กรุงเทพมหานคร. จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2531.
- เกริกชัย สุกาญจน์จที. คุณพลศาสตร์ สำหรับอุตสาหกรรมปิโตร. กรุงเทพมหานคร: ภาควิชาวิศวกรรมเคมี จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2538.
- นฤต กระจาย. การเขียนโปรแกรมและการประมวลผลข้อมูลด้วยเทอร์โมพลาสติก. ซีเอ็ดบูเคชั่น, 2537.
- ภัทรพรรณ ประศาสน์สารกิจ. เทอร์โมไดนามิกส์ วิศวกรรมเคมี. กรุงเทพมหานคร. ภาควิชาเคมีเทคนิค จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2538.

ภาษาอังกฤษ

- Chang, T., Rousseau, R. W., and Ferrell, J. K. Use of the Soave modification of the Redlich-Kwong equation of state for phase equilibrium calculations. Systems containing methanol. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. 22 No.3 (1983): 462-468
- Edgar, T. F., and Himmelblau, D. M. Optimization of chemical processes. New York: McGraw-Hill, 1989.
- Edmister, W. C., and Lee, B. I. Applied hydrocarbon thermodynamics. Volume1. Houston: Gulf Publishing, 1984.
- Gultekin, N. Vapor-liquid equilibria at 1 atm for binary and ternary systems composed of benzene, toluene, and m-xylene. J. Chem. Eng. Data. 35 No.2 (1990): 130-132.
- Klara, S. M., Mohamed, R. S., Dempsey, D. M., and Holder, G. D. Vapor-liquid equilibria for the binary systems of benzene/toluene, diphenylmethane/toluene, m-Cresol /1,2,3,4-tetrahydronaphthalene, and quinoline/benzene. J. Chem. Eng. Data. 32 No.2 (1987): 143-147.
- Kurihara, K., Uchiyama, M. and Kojima, K. Isothermal Vapor-Liquid Equilibria for Benzene + Cyclohexene + 1-Propanol and for Three Constituent Binary Systems J. Chem. Eng. Data. 42 No. 1, (1997) : 149-154.

- Lee, C. H., and Holder, G. D. Vapor-liquid equilibria in the systems toluene/naphthalene and cyclohexane/naphthalene. J. Chem. Eng. Data. 38 No.2 (1993): 320-323.
- Nagata, I., Tamura, K., and Ksiazczak, A. Ternary vapor-liquid equilibria of 2-propanol + cyclohexane + toluene at 318.15 K. J. Chem. Eng. Data. 41 No.6 (1996): 1355-1357.
- Riggs, J. B. An introduction to numerical methods for chemical engineers. Texas: Texas Tech University, 1988.
- Perry, R. H., and Green, D. W. Chemical engineers' handbook. 7th ed. New York: McGraw-Hill, 1997.
- PVT (Pressure Volume Temperature) system user manual.
- Ruska, U.S.A.Reid, R. C., Prausnitz, J. M., and Poling, B. E. The properties of gases and liquids. Singapore: McGraw-Hill, 1988.
- Sanchez, F. G., Laugier, S., and Richon, D. Vapor-liquid equilibrium data for the methane-dimethyl ether and methane-diethyl ether systems between 282 and 344 K. J. Chem. Eng. Data. 32 No.2 (1987): 211-215.
- Sandler, S. I. Chemical and engineering thermodynamic. 2nd ed. Singapore: John Wiley, 1989.
- Van Ness, H. C., and Abbott, M. Classical thermodynamics of nonelectrolyte solutions. New York: McGraw-Hill, 1982.
- Weng, W. L., Chen, J. T., and Lee, M. J. High-pressure vapor-liquid equilibria for mixtures containing a supercritical fluid. Ind. Eng. Chem. Res. 33 No.8 (1994): 1955-1961.
- Willman, B., and Teja, A. S. Vapor-liquid equilibria in toluene + m-xylene, toluene + n-decane, and n-decane + m-xylene mixtures. J. Chem. Eng. Data. 30 No.1 (1985): 116-119.



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตาราง ก.1 ข้อมูลพื้นฐานของเบนซีน, โทลูอินและเมตาไซลีน, (Reid และคณะ(1988))

ข้อมูลพื้นฐาน	เบนซีน	โทลูอิน	เมตาไซลีน
มวลโมเลกุล (Mw)	78.114	92.141	106.168
ความดันวิกฤต (P_c , บาร์)	48.9	41.0	35.4
อุณหภูมิวิกฤต (T_c , องศาเซลเซียส)	562.2	591.8	617.1
ปริมาตรวิกฤต (V_c , ลูกบาศก์เซนติเมตร/โมล)	259	316	376
Compressibility factor (Z_c)	0.271	0.263	0.259
อุณหภูมิจุดเดือด (T_b , องศาเซลเซียส) (ที่ 1 บรรยากาศ)	353.2	383.8	412.3
อะเซนทริกแฟกเตอร์ (ω)	0.212	0.263	0.325
ความหนาแน่นที่ 20 °ซ (กรัม/ลูกบาศก์เซนติเมตร)	0.885	0.867	0.864

ตารางที่ ก.2 ค่าคงที่ A, B และ C ของสมการแอนโทนี (Antoine equation)

สาร	A	B	C
เบนซีน	14.1603	2948.78	-44.5633
โทลูอิน	14.2515	3242.38	-47.1806
เมตาไซลีน	14.1146	3360.81	-58.3463

ตารางที่ ก.3 ค่าคงที่ C_1 , C_2 , C_3 , C_4 และ C_5 ของสมการที่ 3.5

สาร	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	ช่วงอุณหภูมิการ คำนวณ
เบนซีน	83.918	-6517.7	-9.3453	7.1182×10^{-6}	2	278.68-562.16
โทลูอิน	80.877	-6902.4	-8.7761	5.8034×10^{-6}	2	178.18-591.80
เมตาไซลีน	84.782	-7598.3	-9.2612	5.5445×10^{-6}	2	225.30-617.05



ภาคผนวก ข.

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ผลการทดลองและการสร้างกราฟมาตรฐาน

1 ผลการสร้างกราฟมาตรฐานของเหลว

การสร้างกราฟมาตรฐานของเหลวจะชั่งน้ำหนักสารทั้งสามจำนวน 10 ขวด โดยมีองค์ประกอบใกล้เคียงกับการทดลอง น้ำหนักที่ได้แต่ละขวดจะคำนวณหาปริมาณน้ำหนักสารแต่ละชนิดในขวดโดยคิดปริมาณของสารไม่บริสุทธิ์(องค์ประกอบของสารอื่นที่เจือปนในขวดเบนซีน,ขวดโทลูอินและขวดเมตาไซลีน เช่น พวกโลหะต่างๆ เป็นต้น) และคำนวณเป็นหน่วยสัดส่วนโดยมวลดังตารางที่ ข.1

เมื่อทดสอบกับเครื่องก๊าซโครมาโตกราฟี จะได้กราฟดังตัวอย่างรูปที่ ข.1 ซึ่งจะได้พื้นที่ใต้กราฟ โดยจะทดสอบทั้งหมด10 ขวดและทดสอบกับสารบริสุทธิ์อีก 3 ขวด รวมเป็น 13 ขวดนำค่าพื้นที่ใต้กราฟและองค์ประกอบในตารางที่ ข.1 ไปใส่ในโปรแกรม Chem Station จะได้กราฟมาตรฐาน(Standard curve หรือ Calibration curve) และสมการที่มีความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่ใต้กราฟกับความเข้มข้นของสารดังรูปที่ ข.2.1, ข.2.2 และ ข.2.3 สมการที่ได้เป็นสมการเส้นตรงดังนี้

$$\text{เบนซีน} \quad : y = 116232.06411x$$

$$\text{โทลูอิน} \quad : y = 109428.81679x$$

$$\text{เมตาไซลีน} \quad : y = 109649.80599x$$

เมื่อ y คือ พื้นที่ใต้กราฟ

x คือ ความเข้มข้นที่เทียบเป็นความเข้มข้นมาตรฐานหน่วยเป็นสัดส่วนโดยมวล

เมื่อได้สมการข้างต้น ก็สามารถคำนวณหาองค์ประกอบเป็นสัดส่วนโดยมวลได้ จากนั้นก็จะทำเป็นสัดส่วนโดยโมล เนื่องจากหน่วยที่เป็นสัดส่วนโดยโมลเป็นที่นิยมใช้กัน และง่ายต่อการวิเคราะห์

2 ผลการสร้างกราฟมาตรฐานของไอ

ในการเตรียมสารมาตรฐานจะเตรียมในรูปของเหลวโดยจะรู้ความเข้มข้นของสารนั้นและรู้ปริมาณโมลในสารต่อ 1 ไมโครลิตร จะเตรียมทั้งหมด 15 ขวด (รวมสารบริสุทธิ์อีก 3 ขวด) เมื่อทดสอบกับเครื่อง GC จะพื้นที่ใต้กราฟของแต่ละสารในขวดมาตรฐานดังในตารางที่ ข.2 และสร้างกราฟที่มีความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่ใต้กราฟกับปริมาณโมล ซึ่งจะมีทั้งหมด 3 กราฟ ดังรูปที่ ข.3.1, ข.3.2 และ ข.3.3 กราฟที่ได้จะเป็นเส้นโค้ง ดังนั้นจึงได้สมการเส้นโค้งเป็นสมการกำลังสองที่มีความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณโมลกับพื้นที่ใต้กราฟดังนี้

$$\text{เบนซีน} \quad : x = -9.6457222792 \times 10^{-18} y^2 + 2.1738606183 \times 10^{-11} y$$

$$\text{โทลูอิน} \quad : x = -7.4646065856 \times 10^{-18} y^2 + 2.0830971689 \times 10^{-11} y$$

เมตาโซลิน : $x = -5.3248784647 \times 10^{-18} y^2 + 1.9116116980 \times 10^{-11} y$

เมื่อ y คือ พื้นที่ใต้กราฟ

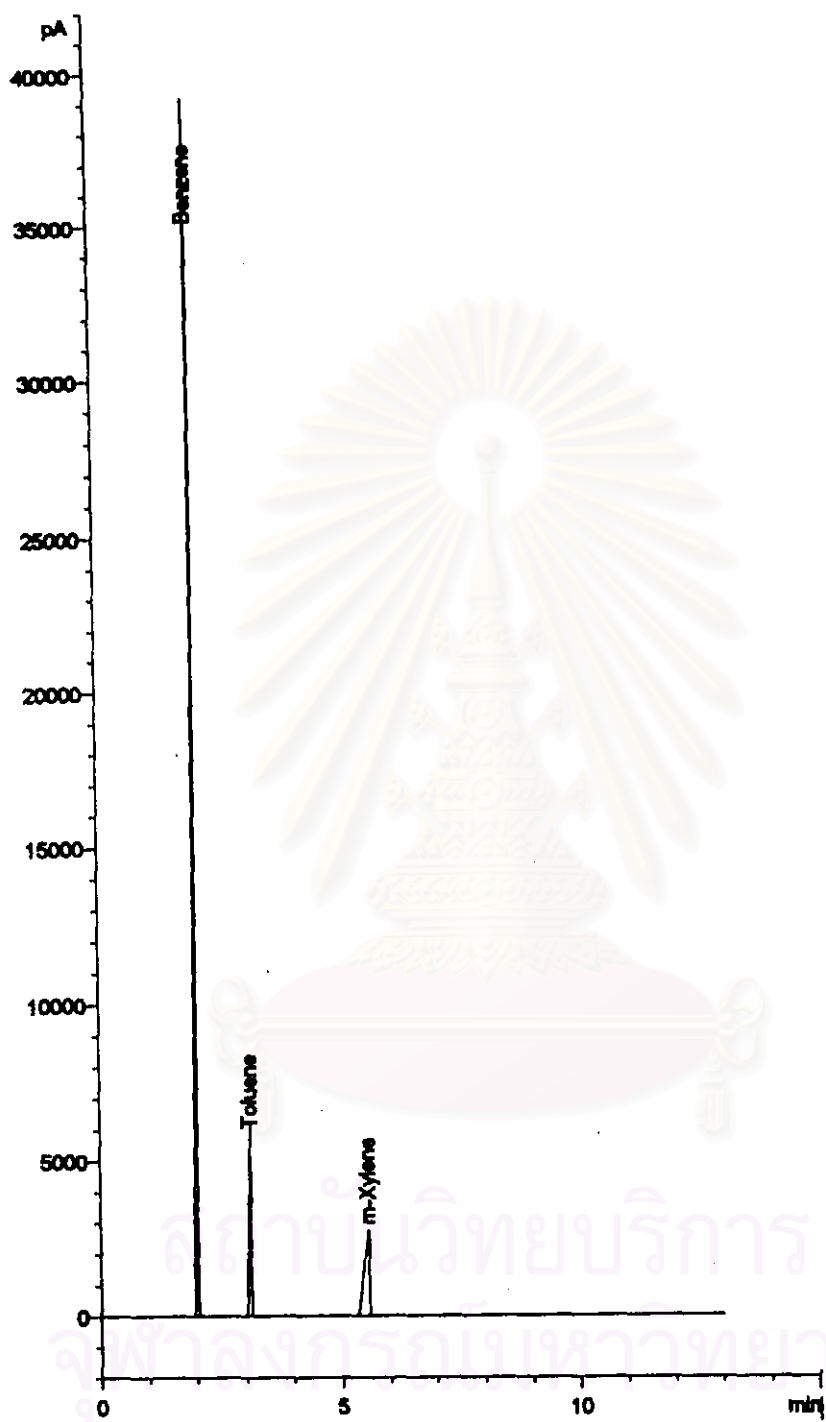
x คือ ปริมาณโมลของสาร (mol)

ในการคำนวณหาความเข้มข้นจะได้ปริมาณโมลของสาร จากนั้นจึงคำนวณเป็นสัดส่วนโดยโมลได้

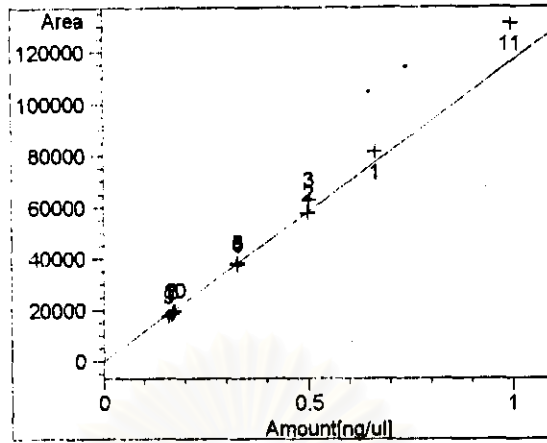
ตารางที่ ข.1 องค์ประกอบของสารในขวดมาตรฐานของเหลว

ขวดที่	เบนซีน	โทลูอิน	เมตาโซลิน	สารเจือปน
1	0.6654	0.1585	0.1709	0.0051
2	0.5005	0.1718	0.3198	0.0079
3	0.5017	0.3292	0.1641	0.0050
4	0.3281	0.3339	0.3299	0.0081
5	0.3289	0.4958	0.1702	0.0051
6	0.3291	0.1581	0.5016	0.0112
7	0.1683	0.1700	0.6478	0.0139
8	0.1715	0.3240	0.4934	0.0111
9	0.1604	0.5038	0.3277	0.0080
10	0.1759	0.6525	0.1666	0.0051
11	0.998	0	0	0.002
12	0	0	0.98	0.02
13	0	0.998	0	0.002

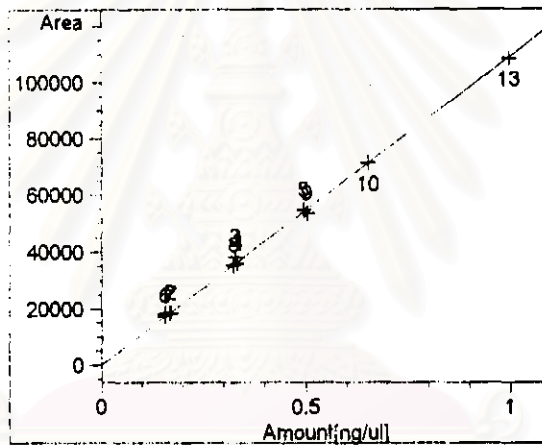
หมายเหตุ ความเข้มข้นจะเป็นสัดส่วนโดยมวล



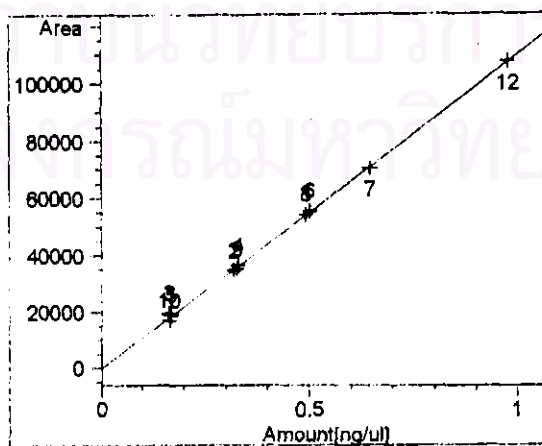
รูปที่ ข.1 ตัวอย่างกราฟโครมาโตแกรม



รูปที่ ข.2.1 กราฟมาตรฐานของของเหลวของเบนซีน



รูปที่ ข.2.2 กราฟมาตรฐานของของเหลวของโทลูอีน

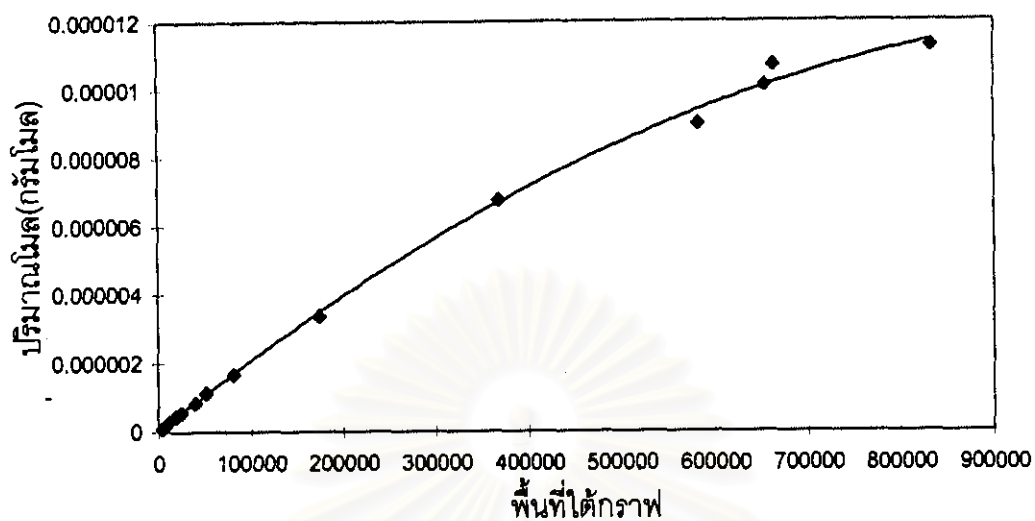


รูปที่ ข.2.3 กราฟมาตรฐานของของเหลวของเมตาไซลีน

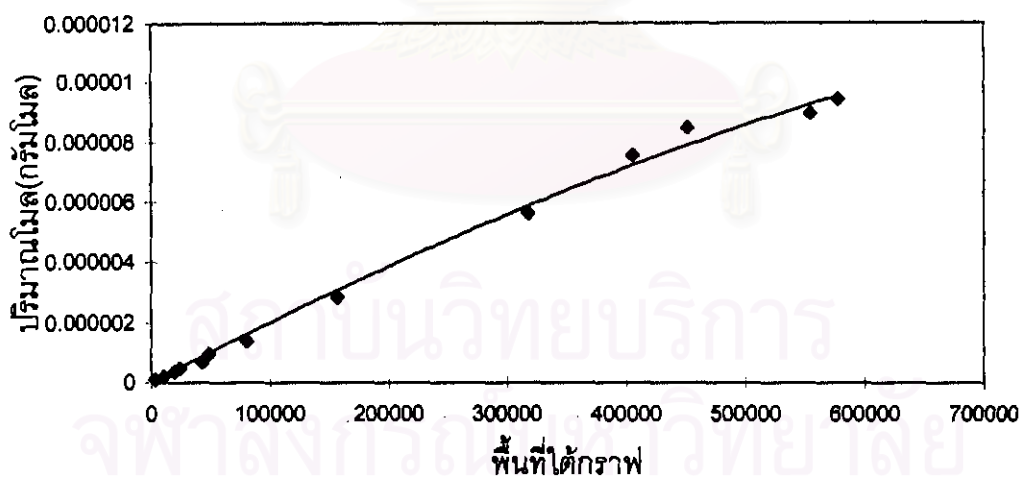
ตารางที่ ข.2 แสดงปริมาณโมลที่จัดใน GC กับพื้นที่ใต้กราฟ

ชนิดที่	ปริมาณโมลที่จัด(กรัมโมล)			พื้นที่ใต้กราฟ		
	เบนซีน	โทลูอิน	เมตาไซลีน	เบนซีน	โทลูอิน	เมตาไซลีน
1	1.12528E-05	0	0	833330.00	0	0
2	0	9.40959E-06	0	0	577537.00	0.00
3	0	0	8.13789E-06	0	0	513456.00
4	1.01275E-05	7.05720E-07	2.03447E-07	654102.00	43248.10	13495.50
5	8.43959E-07	2.35240E-07	7.32410E-06	39839.20	11108.30	427428.00
6	2.81320E-07	8.46863E-06	6.10342E-07	11974.50	451418.00	33389.50
7	9.00223E-06	1.41144E-06	4.06895E-07	582179.00	80603.10	24890.20
8	1.68792E-06	4.70480E-07	6.51031E-06	82277.60	24060.30	374504.00
9	5.62639E-07	7.52768E-06	1.22068E-06	25346.50	405749.00	67314.70
10	1.06901E-05	3.76384E-07	8.13789E-08	663340.00	20237.60	5115.06
11	4.50111E-07	9.40959E-08	7.73100E-06	19551.20	3174.58	451808.00
12	1.12528E-07	8.93911E-06	3.25516E-07	5163.71	554045.00	20668.90
13	6.75167E-06	2.82288E-06	8.13789E-07	368449.00	157007.90	47317.30
14	3.37584E-06	9.40959E-07	4.88274E-06	174718.00	48717.70	273436.00
15	1.12528E-06	5.64576E-06	2.44137E-06	51450.60	317640.00	146419.00

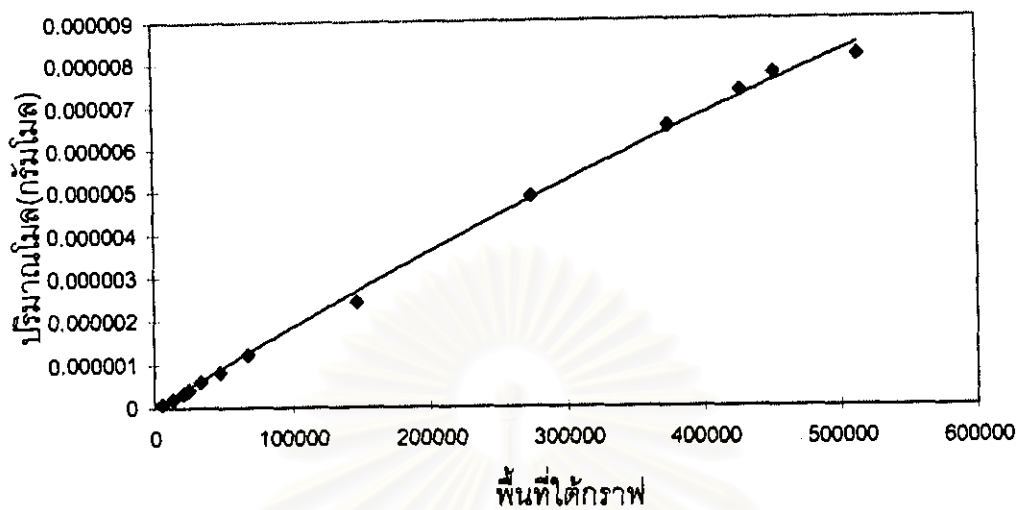
สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



รูปที่ ข.3.1 กราฟมาตรฐานของโบนซีน



รูปที่ ข.3.1 กราฟมาตรฐานของโบนซีน



รูปที่ ข.3.1 กราฟมาตรฐานของไอของเมตาโซลิน

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



ภาคผนวก ค.

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ผลการทดลองสมดุไล-ของเหลวของระบบสององค์ประกอบและสามองค์ประกอบ

ผลการทดลองที่ได้จะเป็นดังตารางที่ ค.1, ค.2, ค.3, ค.4.1, ค.4.2, ค.4.3 และ ค.4.4 ความดันที่วัดได้จะมีความหยابในการอ่าน จะสังเกตได้จากคุณสมบัติของอุปกรณ์ที่แสดงในบทที่ 4 โดยจะมีความผิดพลาดจากการอ่านประมาณ 0.05 % ของสเกลเต็ม หรือประมาณ 5 ปอนด์ต่อตารางนิ้วและอุณหภูมิจะมีผลต่อตัววัดความดัน (pressure transducer) ดังนั้นจึงควรมีการปรับค่าชดเชย จะทำให้่านค่าถูกต้องมากขึ้น

ตารางที่ ค.1 ผลการทดลองสมดุไล-ของเหลวของระบบเบนซินกับโทลูอิน

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)				ความดัน (กิโลปาสกาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	
	x		y			เดาอบ	กระบอกแรงดัน
	เบนซิน	โทลูอิน	เบนซิน	โทลูอิน			
1	0.3933	0.6067	0.5811	0.4189	348	137	136.0
	0.3986	0.6014	0.5611	0.4389	460	150	148.7
	0.3989	0.6011	0.5121	0.4879	550	160	158.6
	0.3973	0.6027	0.5091	0.4909	660	170	168.5
	0.3967	0.6034	0.4721	0.5279	783	180	178.4
2	0.5410	0.4590	0.7044	0.2956	392	137	136.1
	0.5382	0.4619	0.6984	0.3016	507	150	148.8
	0.5391	0.4609	0.6886	0.3114	607	160	158.5
	0.5376	0.4624	0.6810	0.3189	721	170	168.6
	0.5357	0.4643	0.6772	0.3228	861	180	178.4
3	0.7135	0.2866	0.8240	0.1761	435	137	136.0
	0.7087	0.2913	0.8108	0.1892	555	150	148.9
	0.7078	0.2922	0.8005	0.1995	664	160	158.7
	0.7080	0.2920	0.7970	0.2030	791	170	168.5
	0.7068	0.2932	0.7879	0.2122	940	180	178.4

ตารางที่ ค.2 ผลการทดลองสมมูลไอ-ของเหลวของระบบเบนซีนกับเมตาไซลีน

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)				ความดัน (กิโลปาสกาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	
	x		y			เตาอบ	กระบอกแรงดัน
	เบนซีน	เมตาไซลีน	เบนซีน	เมตาไซลีน			
1	0.4489	0.5511	0.7747	0.2253	381	150	148.7
	0.4473	0.5527	0.7685	0.2315	467	160	158.5
	0.4456	0.5544	0.7683	0.2317	564	170	168.5
	0.4447	0.5553	0.7355	0.2645	661	180	178.4
2	0.5845	0.4156	0.8636	0.1364	458	150	148.8
	0.5836	0.4165	0.8348	0.1652	539	160	158.7
	0.5822	0.4178	0.8226	0.1774	637	170	168.5
	0.5814	0.4186	0.8073	0.1927	764	180	178.4
3	0.7473	0.2527	0.9342	0.0658	528	150	148.9
	0.7469	0.2531	0.9278	0.0722	631	160	158.6
	0.7469	0.2531	0.9256	0.0741	751	170	168.5
	0.7459	0.2542	0.9022	0.0978	895	180	178.4

ตารางที่ ค.3 ผลการทดลองสมมูลไอ-ของเหลวของระบบโทลูอินกับเมตาไซลีน

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)				ความดัน (กิโลปาสกาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	
	x		y			เตาอบ	กระบอกแรงดัน
	โทลูอิน	เมตาไซลีน	โทลูอิน	เมตาไซลีน			
1	0.4171	0.5829	0.5956	0.4044	279	150	148.7
	0.4170	0.5830	0.5884	0.4116	330	160	158.5

ตารางที่ ค.4.1 ผลการทดลองสมมูลไอ-ของเหลวของระบบเบนซีน,โทลูอีนกับเมตาไธลิน ที่
อุณหภูมิห้อง 150 °ซ

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)			ความดัน (กิโลปาสคาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)		
	เบนซีน	โทลูอีน	เมตาไธลิน		เดาอบ	กระบอกแรงดัน	
1	x	0.7049	0.1579	0.1373	520	150	148.7
	y	0.8755	0.0941	0.0304			
2	x	0.5659	0.2936	0.1405	490	150	148.8
	y	0.7676	0.1912	0.0412			
3	x	0.5835	0.1633	0.2533	459	150	148.8
	y	0.8651	0.0883	0.0466			
4	x	0.3519	0.5308	0.1173	421	150	148.9
	y	0.5173	0.4160	0.0667			
5	x	0.3729	0.3600	0.2671	415	150	148.9
	y	0.5817	0.3115	0.1069			
6	x	0.3971	0.1932	0.4098	382	150	148.9
	y	0.6576	0.1745	0.1679			
7	x	0.2078	0.6294	0.1628	363	150	148.8
	y	0.3794	0.5377	0.0830			
8	x	0.1877	0.5108	0.3016	350	150	148.8
	y	0.3270	0.4967	0.1763			
9	x	0.2014	0.3767	0.4219	342	150	148.8
	y	0.4013	0.3775	0.2212			
10	x	0.2143	0.1977	0.5880	324	150	148.8
	y	0.4649	0.2465	0.2885			

ตารางที่ ค.4.2 ผลการทดลองสมมูลไอ-ของเหลวของระบบเบนซิน,โทลูอีนกับเมตาไซลีน ที่
อุณหภูมิห้อง 160 °ซ

ตัวอย่างที่		ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)			ความดัน (กิโลปาสคาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	
		เบนซิน	โทลูอีน	เมตาไซลีน		เตาอบ	กระบอกแรงดัน
1	x	0.7031	0.1584	0.1385	624	160	158.6
	y	0.8739	0.0872	0.0389			
2	x	0.5661	0.2930	0.1409	563	160	158.6
	y	0.7519	0.1733	0.0748			
3	x	0.5843	0.1639	0.2518	550	160	158.6
	y	0.8030	0.1069	0.0902			
4	x	0.3507	0.5300	0.1193	511	160	158.7
	y	0.4995	0.3997	0.1007			
5	x	0.3733	0.3609	0.2658	502	160	158.6
	y	0.5720	0.3123	0.1157			
6	x	0.3958	0.1935	0.4107	463	160	158.6
	y	0.6290	0.1787	0.1923			
7	x	0.2092	0.6266	0.1642	432	160	158.8
	y	0.3488	0.5496	0.1016			
8	x	0.1858	0.5106	0.3037	428	160	158.7
	y	0.3208	0.4824	0.1968			
9	x	0.1988	0.3746	0.4266	410	160	158.7
	y	0.3616	0.4037	0.2347			
10	x	0.2135	0.1985	0.5881	389	160	158.7
	y	0.4501	0.2296	0.3203			

ตารางที่ ค.4.3 ผลการทดลองสมดุไอ-ของเหลวของระบบเบนซิน,โทลูอินกับเมตาไซลีน ที่
อุณหภูมิห้อง 170 °ซ

ตัวอย่างที่		ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)			ความดัน (กิโลปาสคาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	
		เบนซิน	โทลูอิน	เมตาไซลีน		เตาอบ	กระบอกแรงดัน
1	x	0.7035	0.1582	0.1382	747	170	168.5
	y	0.8585	0.0999	0.0417			
2	x	0.5661	0.2926	0.1414	673	170	168.5
	y	0.7240	0.2100	0.0660			
3	x	0.5816	0.1644	0.2541	681	170	168.5
	y	0.7981	0.1100	0.0920			
4	x	0.3522	0.5292	0.1186	599	170	168.7
	y	0.4722	0.4438	0.0839			
5	x	0.3717	0.3605	0.2679	568	170	168.5
	y	0.5627	0.3172	0.1201			
6	x	0.3971	0.1940	0.4089	564	170	168.6
	y	0.6280	0.1753	0.1968			
7	x	0.2068	0.6267	0.1665	520	170	168.6
	y	0.3258	0.5564	0.1178			
8	x	0.1867	0.5112	0.3021	512	170	168.7
	y	0.3122	0.4873	0.2006			
9	x	0.2013	0.3781	0.4206	498	170	168.6
	y	0.3473	0.4064	0.2463			
10	x	0.2127	0.1991	0.5882	463	170	168.7
	y	0.3989	0.2321	0.3691			

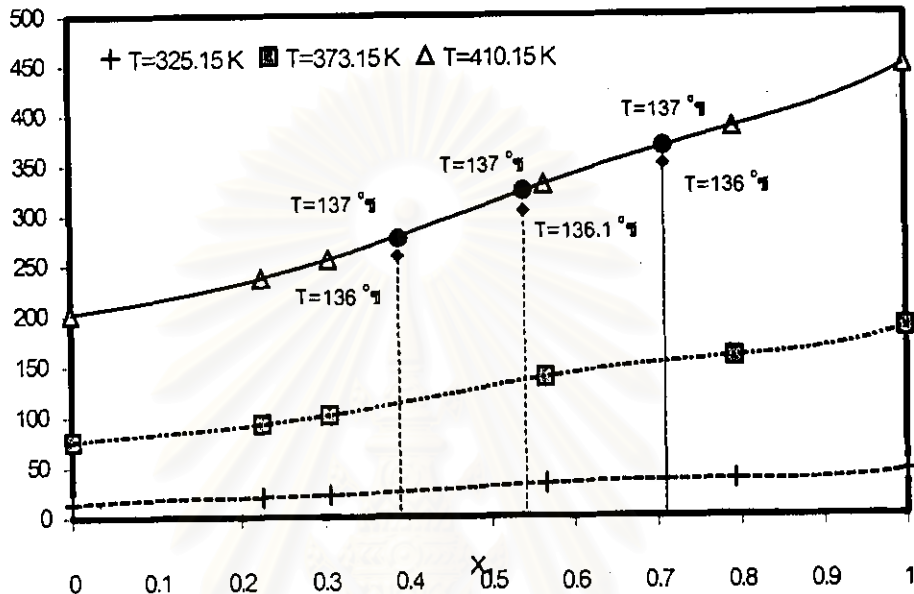
ตารางที่ ค.4.4 ผลการทดลองสมมูลไอ-ของเหลวของระบบเบนซีน,โทลูอีนกับเมตาไซลีน ที่
อุณหภูมิห้อง 180 °ซ

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)			ความดัน (กิโลปาสคาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	
	เบนซีน	โทลูอีน	เมตาไซลีน		เตาอบ	กระบอกแรงดัน
1	x	0.7042	0.1580	892	180	178.3
	y	0.8427	0.1024			
2	x	0.5640	0.2933	805	180	178.4
	y	0.7171	0.2151			
3	x	0.5808	0.1644	809	180	178.4
	y	0.7764	0.1247			
4	x	0.3508	0.5292	731	180	178.5
	y	0.4658	0.4328			
5	x	0.3682	0.3615	683	180	178.5
	y	0.5442	0.3236			
6	x	0.3992	0.1945	673	180	178.3
	y	0.6172	0.1885			
7	x	0.2058	0.6264	639	180	178.4
	y	0.3165	0.5610			
8	x	0.1886	0.5113	609	180	178.5
	y	0.3025	0.4883			
9	x	0.2011	0.3782	587	180	178.5
	y	0.3355	0.4131			
10	x	0.2168	0.1830	551	180	178.5
	y	0.3626	0.2177			

แนวทางการในการหาค่าชดเชยความดันจะใช้การทดลองที่อุณหภูมิ 325.15-410.15 องศาเซลเซียส($^{\circ}\text{C}$) ของการทดลองคู่เบนซีนกับโทลูอีนของ Klara และคณะ(1985) จากตารางที่ 2.2 โดยการเขียนกราฟความสัมพันธ์ระหว่างองค์ประกอบของของเหลวกับความดันดังรูปที่ ค.1



P(กิโลปาสกาล)



รูปที่ 5.5 กราฟ P-x ของระบบเบนซีนกับโทลูอีนของ Klara และคณะ(1985) ที่อุณหภูมิ 325.15, 373.15 และ 410.15 $^{\circ}\text{C}$

ใช้ชุดข้อมูลความเข้มข้นของของเหลวของเบนซีนกับโทลูอีนที่อุณหภูมิกระบอกแรงดันประมาณ 136 $^{\circ}\text{C}$ หาความดันจากกราฟรูปที่ ค.1 จะมีทั้งหมดสามจุดดังรูป ดังนั้นเราจะได้ความดันทั้งหมดสามจุดดังตารางที่ ค.5 นำค่าความดันที่ได้ไปลบกับค่าความดันที่วัดได้ที่อุณหภูมินั้นและเฉลี่ยค่า เราจะได้ค่าที่สามารถนำไปปรับค่าความดันของทุกจุด ดังในตารางที่ ค.6, ค.7, ค.8 และ ค.9

ตารางที่ ค.5 ค่าชดเชยความดัน

x_1	ความดันในเอกสารของ Scott $P_{T=T_{\text{cell}}}$	ความดันที่ทดลอง(P_{exp})	ค่าชดเชยความดันที่ใช้ อุณหภูมิ ($P_{\text{exp}} - P_T$)
0.3933	275	348	73
0.5410	318	392	74
0.7135	362	435	73
		เฉลี่ย	73

ตารางที่ ค.6 ผลการทดลองสมมูลไอ-ของเหลวของระบบเบนซีนกับโทลูอีนที่ปรับค่าขดเชย

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)				ความดัน (กิโลปาสกาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)
	x		y			
	เบนซีน	โทลูอีน	เบนซีน	โทลูอีน		
1	0.3933	0.6067	0.5811	0.4189	275	136.0
	0.3986	0.6014	0.5611	0.4389	387	148.7
	0.3989	0.6011	0.5121	0.4879	477	158.6
	0.3973	0.6027	0.5091	0.4909	587	168.5
	0.3967	0.6034	0.4721	0.5279	710	178.4
2	0.5410	0.4590	0.7044	0.2956	319	136.1
	0.5382	0.4619	0.6984	0.3016	434	148.8
	0.5391	0.4609	0.6886	0.3114	534	158.5
	0.5376	0.4624	0.6810	0.3189	648	168.6
	0.5357	0.4643	0.6772	0.3228	788	178.4
3	0.7135	0.2866	0.8240	0.1761	362	136.0
	0.7087	0.2913	0.8108	0.1892	482	148.9
	0.7078	0.2922	0.8005	0.1995	591	158.7
	0.7080	0.2920	0.7970	0.2030	718	168.5
	0.7068	0.2932	0.7879	0.2122	867	178.4

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตารางที่ ค.7 ผลการทดลองสมมูลไอ-ของเหลวของระบบเบนซินกับเมตาไซลีนที่ปรับค่าชดเชย

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)				ความดัน (กิโลปาสกาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)
	x		y			
	เบนซิน	เมตาไซลีน	เบนซิน	เมตาไซลีน		
1	0.4489	0.5511	0.7747	0.2253	308	148.7
	0.4473	0.5527	0.7685	0.2315	394	158.5
	0.4456	0.5544	0.7683	0.2317	473	168.5
	0.4447	0.5553	0.7355	0.2645	588	178.4
2	0.5845	0.4156	0.8636	0.1364	385	148.8
	0.5836	0.4165	0.8348	0.1652	466	158.7
	0.5822	0.4178	0.8226	0.1774	564	168.5
	0.5814	0.4186	0.8073	0.1927	691	178.4
3	0.7473	0.2527	0.9342	0.0658	455	148.9
	0.7469	0.2531	0.9278	0.0722	558	158.6
	0.7469	0.2531	0.9256	0.0741	678	168.5
	0.7459	0.2542	0.9022	0.0978	822	178.4

ตารางที่ ค.8 ผลการทดลองสมมูลไอ-ของเหลวของระบบโทลูอีนกับเมตาไซลีนที่ปรับค่าชดเชย

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)				ความดัน (กิโลปาสกาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)
	x		y			
	โทลูอีน	เมตาไซลีน	โทลูอีน	เมตาไซลีน		
1	0.4171	0.5829	0.5956	0.4044	206	148.7
	0.4170	0.5830	0.5884	0.4116	257	158.5

ตารางที่ ค.9 ผลการทดลองสมมูลไอ-ของเหลวของระบบเบนซิน,โทลูอีนกับเมตาไซลีน ที่ปรับค่า

ชดเชย

ตัวอย่างที่		ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)			ความดัน (กิโลปาสคาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)
		เบนซิน	โทลูอีน	เมตาไซลีน		
1	x	0.7049	0.1579	0.1373	447	148.7
	y	0.8755	0.0941	0.0304		
2	x	0.5659	0.2936	0.1405	417	148.8
	y	0.7676	0.1912	0.0412		
3	x	0.5835	0.1633	0.2533	386	148.8
	y	0.8651	0.0883	0.0466		
4	x	0.3519	0.5308	0.1173	348	148.9
	y	0.5173	0.4160	0.0667		
5	x	0.3729	0.3600	0.2671	342	148.9
	y	0.5817	0.3115	0.1069		
6	x	0.3971	0.1932	0.4098	309	148.9
	y	0.6576	0.1745	0.1679		
7	x	0.2078	0.6294	0.1628	290	148.8
	y	0.3794	0.5377	0.0830		
8	x	0.1877	0.5108	0.3016	277	148.8
	y	0.3270	0.4967	0.1763		
9	x	0.2014	0.3767	0.4219	269	148.8
	y	0.4013	0.3775	0.2212		
10	x	0.2143	0.1977	0.5880	251	148.8
	y	0.4649	0.2465	0.2885		

ตารางที่ ค.9 (ต่อ)

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)			ความดัน (กิโลปาสคาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	
	เบนซีน	โทลูอีน	เมตาไซลีน			
1	x	0.7031	0.1584	0.1385	551	158.6
	y	0.8739	0.0872	0.0389		
2	x	0.5661	0.2930	0.1409	490	158.6
	y	0.7519	0.1733	0.0748		
3	x	0.5843	0.1639	0.2518	477	158.6
	y	0.8030	0.1069	0.0902		
4	x	0.3507	0.5300	0.1193	438	158.7
	y	0.4995	0.3997	0.1007		
5	x	0.3733	0.3609	0.2658	429	158.6
	y	0.5720	0.3123	0.1157		
6	x	0.3958	0.1935	0.4107	390	158.6
	y	0.6290	0.1787	0.1923		
7	x	0.2092	0.6266	0.1642	359	158.8
	y	0.3488	0.5496	0.1016		
8	x	0.1858	0.5106	0.3037	355	158.7
	y	0.3208	0.4824	0.1968		
9	x	0.1988	0.3746	0.4266	337	158.7
	y	0.3616	0.4037	0.2347		
10	x	0.2135	0.1985	0.5881	316	158.7
	y	0.4501	0.2296	0.3203		

ตารางที่ ค.9 (ต่อ)

ตัวอย่างที่		ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)			ความดัน (กิโลปาสคาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)
		เบนซีน	โทลูอีน	เมตาไซลีน		
1	x	0.7035	0.1582	0.1382	674	168.5
	y	0.8585	0.0999	0.0417		
2	x	0.5661	0.2926	0.1414	600	168.5
	y	0.7240	0.2100	0.0660		
3	x	0.5816	0.1644	0.2541	608	168.5
	y	0.7981	0.1100	0.0920		
4	x	0.3522	0.5292	0.1186	526	168.7
	y	0.4722	0.4438	0.0839		
5	x	0.3717	0.3605	0.2679	495	168.5
	y	0.5627	0.3172	0.1201		
6	x	0.3971	0.1940	0.4089	491	168.6
	y	0.6280	0.1753	0.1968		
7	x	0.2068	0.6267	0.1665	447	168.6
	y	0.3258	0.5564	0.1178		
8	x	0.1867	0.5112	0.3021	439	168.7
	y	0.3122	0.4873	0.2006		
9	x	0.2013	0.3781	0.4206	425	168.6
	y	0.3473	0.4064	0.2463		
10	x	0.2127	0.1991	0.5882	390	168.7
	y	0.3989	0.2321	0.3691		

ตารางที่ ค.9 (ต่อ)

ตัวอย่างที่	ความเข้มข้น(สัดส่วนโดยโมล)			ความดัน (กิโลปาสคาล)	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	
	เบนซีน	โทลูอีน	เมตาไซลีน			
1	x	0.7042	0.1580	0.1378	819	178.3
	y	0.8427	0.1024	0.0549		
2	x	0.5640	0.2933	0.1427	732	178.4
	y	0.7171	0.2151	0.0678		
3	x	0.5808	0.1644	0.2547	736	178.4
	y	0.7764	0.1247	0.0989		
4	x	0.3508	0.5292	0.1200	658	178.5
	y	0.4658	0.4328	0.1015		
5	x	0.3682	0.3615	0.2703	610	178.5
	y	0.5442	0.3236	0.1323		
6	x	0.3992	0.1945	0.4063	600	178.3
	y	0.6172	0.1885	0.1978		
7	x	0.2058	0.6264	0.1678	566	178.4
	y	0.3165	0.5610	0.1225		
8	x	0.1886	0.5113	0.3023	536	178.5
	y	0.3025	0.4883	0.2092		
9	x	0.2011	0.3782	0.4207	514	178.5
	y	0.3355	0.4131	0.2515		
10	x	0.2168	0.1830	0.6002	478	178.5
	y	0.3626	0.2177	0.4197		



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ผลการทดลองโปรแกรมกับระบบสององค์ประกอบและสามองค์ประกอบ

ตารางที่ ง.1 ถึง ง.4

T คือ อุณหภูมิหน่วยเป็น °C

P คือ ความดันหน่วยเป็น กิโลปาสคาล(kPa)

y_1, y_2 คือ องค์ประกอบของเฟสไอหน่วยเป็น สัดส่วนโดยโมล

x_1, x_2 คือ องค์ประกอบของเฟสของเหลวหน่วยเป็น สัดส่วนโดยโมล

ตารางที่ ง.1 ผลการทดสอบโปรแกรมกับระบบ เบนซีน(1)+โทลูอิน(2)

x_1	T	ผลการทดลอง		ผลการคำนวณจากโปรแกรม	
		y_1	P	y_1	P
0.3986	148.7	0.5611	387	0.5695	388.5
0.5382	148.8	0.6984	434	0.6940	430.0
0.7087	148.9	0.8108	482	0.8207	479.5
0.3989	158.6	0.5121	477	0.5616	477.4
0.5391	158.5	0.6886	534	0.6879	525.2
0.7078	158.7	0.8005	591	0.8156	584.8
0.3973	168.5	0.5091	587	0.5519	580.1
0.5376	168.6	0.6810	648	0.6797	639.3
0.7080	168.5	0.7970	718	0.8111	707.2
0.3967	178.4	0.4721	710	0.5433	699.2
0.5357	178.4	0.6772	788	0.6712	766.8
0.7068	178.4	0.7878	867	0.8056	848.6

ตารางที่ ง.2 ผลการทดสอบโปรแกรมกับระบบ เบนซิน(1)+เมตาไธลิน(2)

x_1	T	ผลการทดลอง		ผลการคำนวณจากโปรแกรม	
		y_1	P	y_1	P
0.4489	148.7	0.7747	308	0.7576	316.6
0.5845	148.8	0.8636	385	0.8416	375.4
0.7473	148.9	0.9342	455	0.9162	447.1
0.4473	158.5	0.7685	394	0.7460	393.1
0.5836	158.7	0.8348	466	0.8317	464.5
0.7469	158.6	0.9278	558	0.9093	547.4
0.4456	168.5	0.7683	473	0.7339	484.9
0.5822	168.5	0.8226	564	0.8214	567.5
0.7469	168.5	0.9256	678	0.9023	666.9
0.4447	178.4	0.7355	588	0.7223	591.5
0.5814	178.4	0.8073	691	0.8111	688.7
0.7459	178.4	0.9022	822	0.8946	804.4

ตารางที่ ง.3 ผลการทดสอบโปรแกรมกับระบบ โทลูอิน(1)+เมตาไธลิน(2)

x_1	T	ผลการทดลอง		ผลการคำนวณจากโปรแกรม	
		y_1	P	y_1	P
0.4171	148.7	0.5956	206	0.6006	205.5
0.4170	158.5	0.5884	257	0.5918	256.6

ตารางที่ ๓.4 ผลการทดสอบโปรแกรมกับระบบ เบนซิน(1)+โทลูอิน(2)+เมตาไครลีน(3)

x_1	x_2	T	ผลการทดลอง			ผลการคำนวณจากโปรแกรม		
			y_1	y_2	P	y_1	y_2	P
0.7049	0.1579	148.7	0.8755	0.0941	447	0.8512	0.1044	450.3
0.5659	0.2936	148.8	0.7676	0.1912	417	0.7349	0.2169	412.8
0.5835	0.1633	148.8	0.8651	0.0883	386	0.7892	0.1201	398.7
0.3519	0.5308	148.9	0.5173	0.4160	348	0.5004	0.4565	364.7
0.3729	0.3600	148.9	0.5817	0.3115	342	0.5753	0.3176	342.1
0.3970	0.1932	148.9	0.6576	0.1745	309	0.6523	0.1719	323.9
0.2078	0.6294	148.8	0.3794	0.5377	290	0.3265	0.6084	323.0
0.1877	0.5108	148.8	0.3270	0.4967	277	0.3314	0.5325	291.2
0.2014	0.3767	148.8	0.4013	0.3775	269	0.3851	0.4078	271.9
0.2143	0.1977	148.8	0.4649	0.2465	251	0.4545	0.2245	246.8
0.7031	0.1584	158.6	0.8739	0.0872	551	0.8434	0.1095	552.7
0.5661	0.2930	158.6	0.7519	0.1733	490	0.7277	0.2219	509.1
0.5843	0.1639	158.6	0.8030	0.1069	477	0.7810	0.1245	490.5
0.3507	0.5300	158.7	0.4995	0.3997	438	0.4958	0.4587	451.8
0.3733	0.3609	158.6	0.5720	0.3123	429	0.5680	0.3215	423.1
0.3958	0.1935	158.6	0.6290	0.1787	390	0.6409	0.1756	398.2
0.2092	0.6266	158.8	0.3488	0.5496	359	0.3274	0.6043	403.0
0.1858	0.5106	158.7	0.3208	0.4824	355	0.3254	0.5324	361.7
0.1988	0.3746	158.7	0.3616	0.4037	337	0.3755	0.4071	336.9
0.2135	0.1985	158.7	0.4501	0.2296	316	0.4422	0.2263	307.0

ตารางที่ ง.4 (ต่อ)

x ₁	x ₂	T	ผลการทดลอง			ผลการคำนวณจากโปรแกรม		
			y ₁	y ₂	P	y ₁	y ₂	P
0.7035	0.1582	168.5	0.8585	0.0999	674	0.8368	0.1138	673.0
0.5661	0.2926	168.5	0.7240	0.2100	600	0.7203	0.2270	622.8
0.5816	0.1644	168.5	0.7981	0.1100	608	0.7708	0.1292	596.4
0.3522	0.5292	168.7	0.4722	0.4438	526	0.4933	0.4598	557.8
0.3717	0.3605	168.5	0.5627	0.3172	495	0.5592	0.3250	518.4
0.3971	0.1940	168.6	0.6280	0.1753	491	0.6313	0.1789	489.4
0.2068	0.6267	168.6	0.3258	0.5564	447	0.3229	0.6051	493.6
0.1867	0.5112	168.7	0.3122	0.4873	439	0.3225	0.5312	447.2
0.2013	0.3781	168.6	0.3473	0.4064	425	0.3713	0.4087	417.6
0.2127	0.1991	168.7	0.3989	0.2321	390	0.4300	0.2277	378.4
0.7042	0.1580	178.3	0.8427	0.1024	819	0.8304	0.1178	810.9
0.5640	0.2933	178.4	0.7171	0.2151	732	0.7113	0.2330	753.5
0.5808	0.1644	178.4	0.7764	0.1247	736	0.7618	0.1331	719.8
0.3508	0.5292	178.5	0.4658	0.4328	658	0.4878	0.4629	677.1
0.3682	0.3615	178.5	0.5442	0.3236	610	0.5482	0.3301	629.2
0.3992	0.1945	178.3	0.6172	0.1885	600	0.6228	0.1817	592.8
0.2058	0.6264	178.4	0.3165	0.5610	566	0.3196	0.6050	599.7
0.1887	0.5112	178.5	0.3025	0.4883	536	0.3210	0.5291	545.7
0.2011	0.3782	178.5	0.3355	0.4131	514	0.3642	0.4086	509.2
0.2167	0.1830	178.5	0.3626	0.2177	478	0.4288	0.2098	458.5



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

การเขียนโปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณโดยใช้สมการเปง-โรบินสัน

การเขียนโปรแกรมจะแบ่งออกเป็นสองส่วน คือ ส่วนการคำนวณหาค่าความดันกับองค์ประกอบของเฟสไอ และส่วนการหาค่า k_{ij}

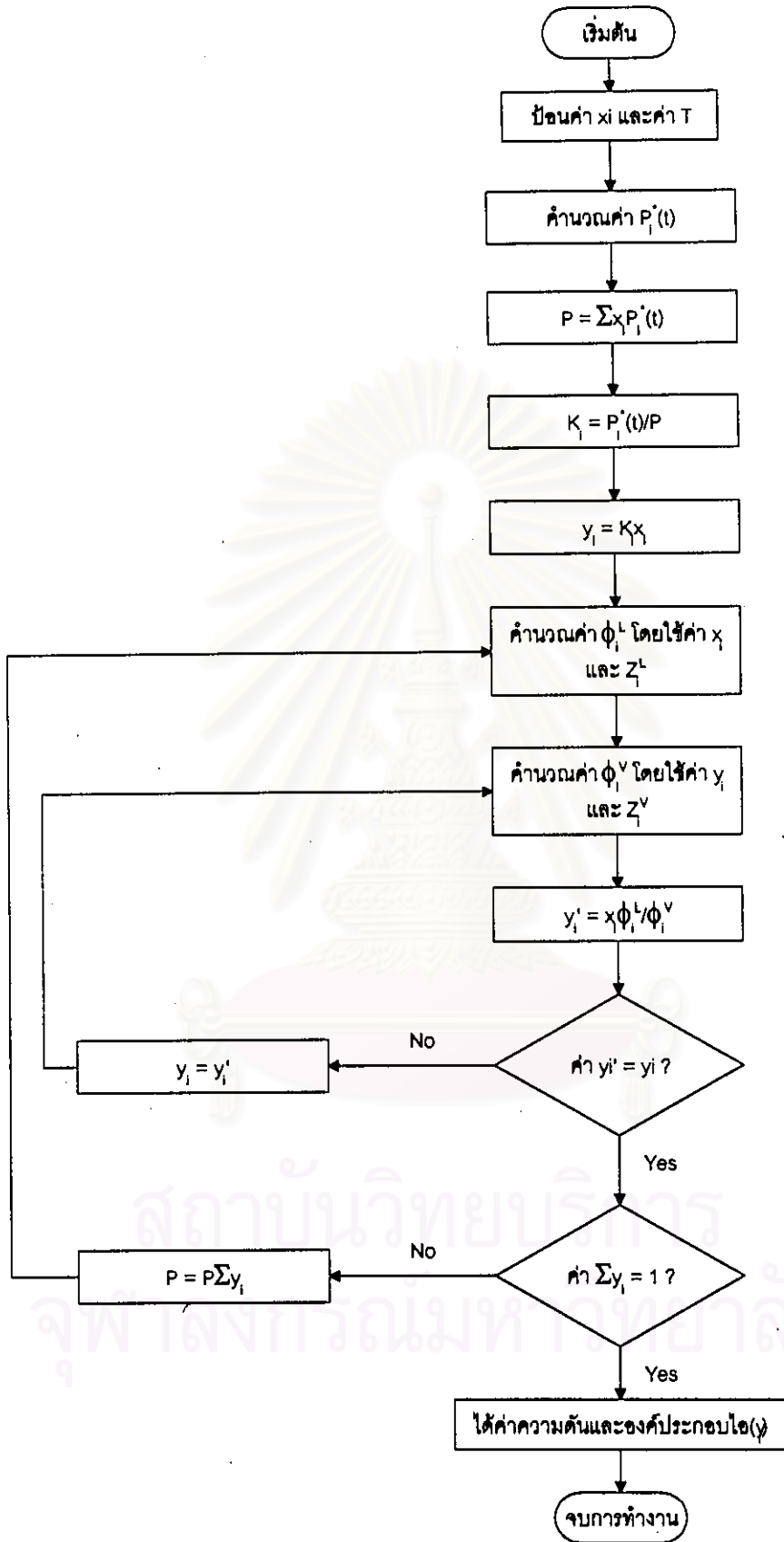
การคำนวณหาค่าความดันและองค์ประกอบของเฟสไอจะใช้วิธีการคำนวณตามรูปที่ ๑.1 โดยเริ่มจะมีการรับข้อมูลของอุณหภูมิกับองค์ประกอบของเฟสของเหลว จากนั้นคำนวณค่าความดันไอของสารบริสุทธิ์ทั้งสามสารเพื่อคำนวณค่าเริ่มต้นของความดันไอรวม การคำนวณค่าความดันไอของสารบริสุทธิ์จะใช้สมการจากหนังสือ Perry (จากสมการที่ 3.5) และหาค่าขององค์ประกอบของเฟสไอเริ่มต้นด้วย คำนวณหาค่า Z_v และ Z_L ด้วยสมการที่ 3.14 และ 3.16 และใช้วิธีการหารากสมการของนิวตันโดยจะใช้ค่าเริ่มต้นของ Z_v เป็น 1 ส่วนของ Z_L เป็น 0 ดังรูปที่ ๑.2 โดยค่า Z_L และ Z_v ที่คำนวณได้จะมีค่าเป็นบวก จากนั้นคำนวณค่า ϕ_i^L และ ϕ_i^V จากสมการที่ 3.13 และ 3.15 แล้วคำนวณค่าองค์ประกอบของเฟสไอใหม่ ถ้าองค์ประกอบของเฟสไอไม่เท่ากับองค์ประกอบของเฟสไอเดิมก็จะกลับไปคำนวณค่า Z_v และ ϕ_i^V ใหม่ ถ้าเท่ากันจะดูว่าผลรวมขององค์ประกอบของเฟสไอเท่ากับหนึ่งหรือไม่ ถ้าไม่เท่าจะนำไปคำนวณค่า Z_L และ ϕ_i^L ใหม่โดยเปลี่ยนค่าความดันเป็นความดันเดิมคูณกับผลรวมขององค์ประกอบของเฟสไอ เมื่อได้ค่าผลรวมขององค์ประกอบของเฟสไอเท่ากับหนึ่งแล้ว จะได้คำตอบที่ต้องการคือ ความดันไอของสารละลาย และองค์ประกอบของเฟสไอ

ส่วนการคำนวณหาค่า k_{ij} จะทำตามขั้นตอนดังรูปที่ ๑.3 เริ่มจากป้อนค่าความดัน, อุณหภูมิ, องค์ประกอบของเฟสไอและเฟสของเหลว ตั้งค่าช่วงการคำนวณค่า k_{ij} ซึ่งจากการทดลองคำนวณค่า k_{ij} แล้วปรากฏว่าช่วงค่า k_{ij} จะอยู่ในช่วง -0.1 ถึง 0.2 เนื่องจากในการทดสอบแล้วพบว่าเมื่อตั้งค่า k_{ij} เกิน 0.2 จะไม่สามารถหาค่าได้ เมื่อได้ช่วงการคำนวณค่า k_{ij} ก็จะคำนวณค่าหาค่าต่ำสุดของออฟเจกทีฟฟังก์ชันโดยใช้วิธีของ Fibonacci ส่วนสมการออฟเจกทีฟฟังก์ชันจะใช้สมการที่ 2.3 คือ

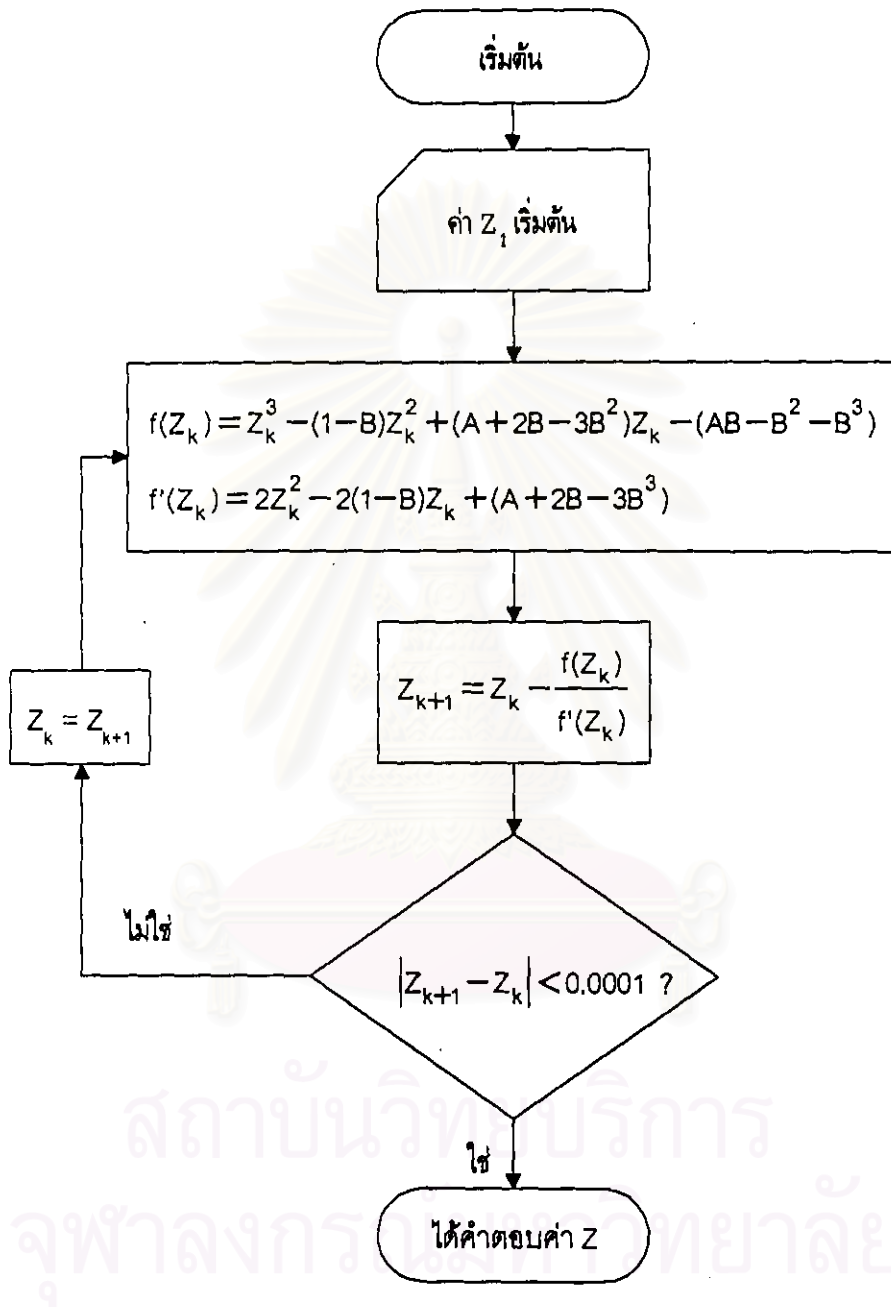
$$OBF = \sum_{i=1}^n \left(\frac{P_{i,exp} - P_{i,cal}}{P_{i,exp}} \right)^2 + \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_{i,exp} - Y_{i,cal}}{Y_{i,exp}} \right)^2 \quad (2.3)$$

จากสมการ 2.3 จะต้องการค่าความดันและองค์ประกอบเฟสไอจากการคำนวณ จะสามารถคำนวณได้โดยใช้วิธี การคำนวณข้างต้นที่กล่าวมาแล้ว

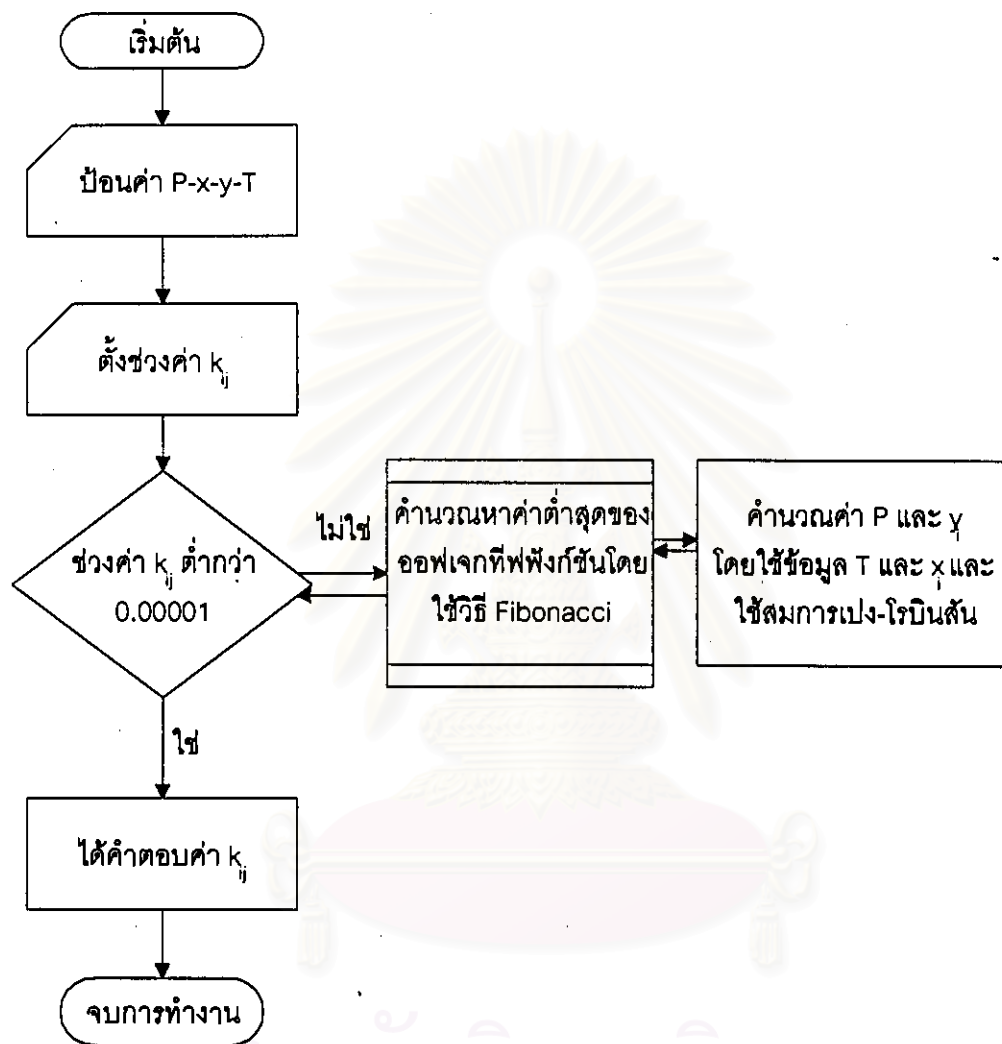
เมื่อได้ค่าออฟเจกทีฟฟังก์ชันต่ำสุด ก็จะได้ค่า k_{ij} ที่ต้องการ



รูปที่ ๑.1 แสดงวิธีการคำนวณหาค่าความดันและองค์ประกอบของเฟสไอ



รูปที่ ๑.๒ แสดงวิธีการคำนวณค่า Z ด้วยวิธีนิวตัน

รูปที่ ๑.3 แสดงวิธีการคำนวณหาค่า k_j

การเขียนโปรแกรมแปลง-โรบินสัน

โปรแกรมจะแบ่งเป็นสองโปรแกรม โปรแกรมแรกจะเป็นยูนิตที่ใช้ในการเปลี่ยนหน่วย โปรแกรมที่สองเป็นโปรแกรมการคำนวณ จะแสดงเนื้อโปรแกรมดังนี้

ยูนิตการเปลี่ยนหน่วย

Unit peng1;

INTERFACE

function power(gound,top:real):real;

procedure changep(l :integer;var np : real); {Change Unit pressure}

procedure changet(m : integer;var nt : real); {Change Unit Temperature}

procedure chunitp (l : integer;var p : real);

procedure chunitt (m : integer;var t : real);

implementation

function power;

begin

power := exp(top*ln(gound));

end;

procedure changep; {Change Unit pressure}

begin

if l = 1 then np := np/1000

else if l = 2 then np :=np/101325

else if l = 3 then np := (np/101325)*14.7

else if l=4 then np:=np/100000;

end;

procedure changet; {Change Unit Temperature}

begin

if m=1 then nt :=nt else if m=2 then nt:=nt-273.15

else if m=3 then nt:=(nt-273.15)*9/5 +32

else if m=4 then nt:=nt*9/5;

end;

procedure chunitp ;

begin

if l = 1 then p := p*1000

else if l = 2 then p:=p*101325

else if l = 3 then p := p*101325/14.7

else if l=4 then p:=p*100000;

```

end;
procedure chunitt;
begin
    if m=1 then t :=t else if m=2 then t:=t+273.15
    else if m=3 then t:=(t-32)*5/9 +273.15
    else if m=4 then t:=t*5/9;
end;
end.

```

โปรแกรมการคำนวณ

```

Program Peng_Robinson2 (input,output);
uses crt,dos,printer,peng1;
const
    R = 8.314;
type
    three = array[1..3] of real;
    met = array[1..3,1..3] of real;
    data= array[1..30] of real;
    comp= array[1..30,1..3] of real;
    names= array[1..3] of string;
var
    v,zl,zv,z0,aj,bl,bv,al,av,aal,aav,bbl,bbv,test1,test2,h,sdp : real;
    y,error : array[1..5] of real;
    p,t,newp : data;
    kij,store : met;
    mname : string;
    name : names;
    up,ut : array[1..4] of string;
    i,j,k,l,m,n,ii,ij,ji,jj,ik : integer;
    choice,select,potect,sekij,mass : char;
    xi,yi,yr : comp;
    btx : array[1..3] of integer;
    result,ai,tc,pc,mi,mw,fil,fiv,oi,bi,ps : three;
    filetext : text;

```

filekij : file of met;

filename,frec : string;

```
procedure critical(var pc,tc,oi,mw : three;var name:names);
```

```
begin
```

```
  pc[1] := 4890000; tc[1] := 562.2; oi[1] := 0.212; mw[1] := 78.114;
```

```
  pc[2] := 4100000; tc[2] := 591.8; oi[2] := 0.263; mw[2] := 92.141;
```

```
  pc[3] := 3540000; tc[3] := 617.1; oi[3] := 0.325; mw[3] := 106.168;
```

```
  name[1] := 'Benzene ';
```

```
  name[2] := 'Toluene ';
```

```
  name[3] := 'm-Xylene ';
```

```
end;
```

```
procedure calf (nt,np:real; kij:met; k,o,ij:integer;
```

```
  var df : real;var fil,fiv : three);
```

```
var
```

```
  i,j : integer;
```

```
begin
```

```
  bl := 0;
```

```
  bv := 0;
```

```
  for i := 1 to ij do
```

```
    begin
```

```
      bi[i] := 0.077796*R*tc[i]/pc[i];
```

```
      bl := bl + xi[o,i]*bi[i];
```

```
      bv := bv + yi[o,i]*bi[i];
```

```
      mi[i] := 0.37646+1.54226*oi[i]-0.26992*oi[i]*oi[i];
```

```
      ai[i] := (0.457235*sqr(R*tc[i])/pc[i])*sqr(1+mi[i]*(1-sqrt(nt/tc[i])));
```

```
    end;
```

```
  al := 0;
```

```
  av := 0;
```

```
  for i := 1 to ij do
```

```
    begin
```

```
      for j := 1 to ij do
```

```
        begin
```

```
          al := al + xi[o,i]*xi[o,j]*sqr(ai[i]*ai[j])*(1-kij[i,j]);
```

```
          av := av + yi[o,i]*yi[o,j]*sqr(ai[i]*ai[j])*(1-kij[i,j]);
```



```

end;

end;

aal := a1*np/(sqr(R*nt));
aav := av*np/(sqr(R*nt));
bbl := b1*np/(R*nt);
bbv := bv*np/(R*nt);
zl := 0;
repeat
  z0 := zl;
  zl := z0 - (z0*z0*z0-(1-bbl)*z0*z0+(aal-2*bbl-3*bbl*bbl)*z0
    -(aal*bbl-bbl*bbl-bbl*bbl*bbl))/(3*z0*z0-2*(1-bbl)*z0+(aal
    -2*bbl-3*bbl*bbl));
until (abs(zl-z0) < 0.0001);
zv := 1;
repeat
  z0 := zv;
  zv := z0 - (z0*z0*z0-(1-bbv)*z0*z0+(aav-2*bbv-3*bbv*bbv)*z0
    -(aav*bbv-bbv*bbv-bbv*bbv*bbv))/(3*z0*z0-2*(1-bbv)*z0+(aav
    -2*bbv-3*bbv*bbv));
until (abs(zv-z0) < 0.0001);
aj := 0;
for j := 1 to ij do
begin
  aj := aj + xi[o,j]*sqr(ai[j])*(1-kij[k,j]);
end;
aj := 2*aj*sqr(ai[k])/ai;
fil[k] := exp(-ln(zl-bbl)+((zl-1)*bi[k]/bl)-((aal/(2.82843*bbl))*
  (aj-bi[k]/bl)*ln((2*zl+(2+sqr(8))*bbl)/(2*zl+(2-sqr(8))*bbl)))));
aj := 0;
for j := 1 to ij do
begin
  aj := aj + yi[o,j]*sqr(ai[j])*(1-kij[k,j]);
end;
aj := 2*aj*sqr(ai[k])/av;
fiv[k] := exp(-ln(zv-bbv)+((zv-1)*bi[k]/bv)-((aav/(2.82843*bbv))*

```

```

      (aj-bi[k]/bv)*ln((2*zv+(2+sqrt(8))*bbv)/(2*zv+(2-sqrt(8))*bbv)));
df := fiv[k]*yi[o,k]-fil[k]*xi[o,k];
end;
function pst(i : integer;t : real):real;
begin
  case i of
    1 : pst := exp(83.918-(6517.7/t)-(9.3453*ln(t))+(7.1182e-6)*sqr(t));
    2 : pst := exp(80.877-(6902.4/t)-(8.7761*ln(t))+(5.8034e-6)*sqr(t));
    3 : pst := exp(84.782-(7598.3/t)-(9.2612*ln(t))+(5.5445e-6)*sqr(t));
  end;
end;
procedure calcp (t : data;n,ik,ij : integer; kij : met;var x4 : real;var p,newp : data);
var
  x1,x2,f1,f2 : real;
  o,i,k : integer;
begin
  x4 :=0;
  for o := 1 to n do
    begin
      newp[o] := 0;
      for i := 1 to ij do ps[i] := pst(btx[i],t[o]);
      for i := 1 to ij do newp[o] :=newp[o] + ps[i]*xi[o,i];
      for i := 1 to ij do yi[o,i] := xi[o,i]*ps[i]/newp[o];
      x2:= 1;
      repeat
        newp[o] := newp[o]*x2;
        x2:=0;
        for k := 1 to ij do
          begin
            x1 := yi[o,k];
            repeat
              yi[o,k] := x1;
              calft(t[o],newp[o],kij,k,o,ij,f1,fil,fiv);
              x1:= xi[o,k]*fil[k]/fiv[k];
            until (abs(yi[o,k] - x1) <0.0001);
          end;
        end;
      until (abs(newp[o] - x4) <0.0001);
    end;
  end;
end;

```

```

    x2:= x2 + yi[o,k];
end;
until (abs(x2-1)<0.0001);
if ik = 1 then
    p[o] := newp[o]
else
    x4 := sqrt((p[o]-newp[o])/p[o]) + sqrt((yr[o,1]-yi[o,1])/yr[o,1]) + x4;
end;
end;
end;
procedure openkij (ii : integer;var kij : met;var filename : string);
var
    pathf,resultf : string;
begin
    case ii of
        1 : begin
            if (filename = '') then
                begin
                    resultf := "";
                    repeat
                        write('Open file of data Kij = ');
                        readln(filename);
                        write('Path of file = ');
                        readln(pathf);
                        filename := filename + '.kij';
                        resultf := fsearch(filename,pathf);
                        if resultf = "" then writeln('Do not find this file');
                        until (resultf <> "");
                    end;
                    assign(filekij,filename);
                    reset(filekij);
                    read(filekij,kij);
                end;
        2 : begin
            assign(filekij,filename);
            rewrite(filekij);

```

```

        write(filekij,kij);
    end;
end;
close(filekij);
end;
procedure caltp;
var
    x1,x2 : real;
label starta,endtp,midtp;
begin
    starta:
    critical(pc,tc,oi,mw,name);
    ik := 1;
    repeat
    clrscr;
    writeln('Calculate Vapour pressure of Benzene, Toluene and m-Xylene mixture');
    writeln('By Peng Robinsion equation');
    writeln('Select to calculate 2 or 3 component ');
    writeln(' 1. Benzene and Toluene');
    writeln(' 2. Benzene and m-Xylene');
    writeln(' 3. Toluene and m-Xylene');
    writeln(' 4. 3 component');
    writeln(' 5. Exit');
    sekij := readkey;
    critical(pc,tc,oi,mw,name);
    case sekij of
        '1' : begin
            btx[1] := 1;
            btx[2] := 2;
            btx[3] := 0;
            jj := 1;
            ij := 2;
        end;
        '2' : begin
            btx[1] := 1;

```



```

        readln(kij[i,j]);
    end;
repeat
write('Do you save this Kij ? (y/n) ');
readln(potect);
until ((potect='y') or (potect='Y') or (potect='n') or (potect='N'));
if ((potect='y') or (potect='Y')) then
begin
    write('Input name of new kij file = ');
    read(filename);
    filename := filename+'.kij';
    openkij(2,kij,filename);
end;
end;
'2' : openkij(1,kij,filename);
'3' : for i := 1 to 3 do
        for j := 1 to 3 do kij[i,j] := 0;
'4' : begin
        filename := 'standard.kij';
        openkij(1,kij,filename);
    end;
else goto starta;
end;
case jj of
    1 : writeln('Determinate P and yi of Benzene(1) and Toluene(2) system');
    2 : begin
        pc[2] := pc[3]; tc[2] := tc[3]; oi[2]:=oi[3];
        name[2]:= name[3]; mw[2] := mw[3];
        kij[1,2] := kij[1,3]; kij[2,1] := kij[1,2];
        writeln('Determinate P and yi of Benzene(1) and m-xylene(2) system');
    end;
    3 : begin
        pc[1] := pc[2]; tc[1] := tc[2]; oi[1]:=oi[2];
        name[1]:= name[2]; mw[1] := mw[2];
        kij[1,2] := kij[2,3]; kij[2,1] := kij[1,2];

```

```

pc[2] := pc[3]; tc[2] := tc[3]; oi[2]:=oi[3];
name[2]:= name[3]; mw[2] := mw[3];
writeln('Determinate P and yi of Toluene(1) and m-xylene(2) system');
end;
end;
for i :=1 to ij do
for j:=1 to ij do writeln(' Kij[',i:1,',',j:1,'] = ',kij[i,j]);
repeat
potect := 'y';
write('Select Unit of Pressure (1) kPa, (2) atm, (3) Psia or (4) bar ');
readln(l);
write('Select unit of Temperature (1) K, (2) C, (3) F or (4) R ');
readln(m);
if (l<1) and (l>4) and (m<1) and (m>4) then potect :='n';
until (potect = 'y');
write('How many points do you input ? (max 30) ');
readln(n);

repeat
write('Do you calculate base on mass ? (y/n) ');
mass := readkey;
writeln;
until ((mass='y') or (mass='Y') or (mass='n') or (mass='N'));
if ((mass='n') or (mass='N')) then writeln('Calculation base on mole ');
for i := 1 to n do
begin
writeln('Data ',i:2);
if ((mass='y') or (mass='Y')) then
begin
xi[i,ij] := 1;
for j := 1 to ij-1 do
begin
write(' Input mass-fraction of ',name[j], ' in Liquid phase (x) = ');
readln(xi[i,j]);
xi[i,ij] := xi[i,ij]-xi[i,j];

```

```

    end;
h := 0;
for j := 1 to ij do
begin
    xi[i,j] := xi[i,j]/mw[j];
    h := h+xi[i,j];
end;
for j:= 1 to ij do xi[i,j]:=xi[i,j]/h;
end else begin {end mass}
xi[i,ij] := 1;
for j := 1 to ij-1 do
begin
    write(' Input mole-fraction of ',name[j],' in Liquid phase (x) = ');
    readln(xi[i,j]);
    xi[i,ij] := xi[i,ij]-xi[i,j];
end;
end; {end mole}
write(' Input Temperature (' ,ut[m],' ) ');
readln(t[i]);
chunitt(m,t[i]);
repeat
    write('Do you sure this data ? [(y)es,(n)o] ');
    potect := readkey;
    if ((potect='n') or (potect='N')) then
    begin
        i := i-1;
        potect := 'y';
    end;
until ((potect='y') or (potect='Y'));
end; {end for data}

clrscr;
calcp(t,n,ik,ij,kij,sdp,p,newp);
for i := 1 to n do
begin
    changet(m,t[i]);

```



```

changeP(l,p[i]);
if (mass = 'y') or (mass = 'Y') then
begin
  x1 := 0;
  x2 := 0;
  for j := 1 to ij do
  begin
    xi[i,j] := xi[i,j]*mw[j];
    yi[i,j] := yi[i,j]*mw[j];
    x1 := x1 + xi[i,j];
    x2 := x2 + yi[i,j];
  end;
  for j := 1 to ij do
  begin
    xi[i,j] := xi[i,j]/x1;
    yi[i,j] := yi[i,j]/x2;
  end;
end;
end;

writeln('Calculation Vapour pressure for Benzene(1), Toluene(2) and m-Xylene(3) system');
writeln('1 is ',name[1]);
writeln('2 is ',name[2]);
writeln(' x1  x2  y1  y2  T('ut[m].') P('up[.].')');
for i := 1 to n do
writeln(' ',xi[i,1]:6:4,' ',xi[i,2]:6:4,' ',yi[i,1]:6:4,' ',yi[i,2]:6:4,' ',
        T[i]:6:2,' ',p[i]:12:4);
repeat
write('Do you want output file ? (y/n) ');
readln(potect);
until ((potect='y') or (potect='Y') or (potect='n') or (potect='N'));
if (potect='y') or (potect='Y') then
begin
  write('Input name file = ');
  readln(frec);
  frec := frec+'.dat';

```



```

assign(filetext,frec);
rewrite(filetext);
writeln(filetext,'1 is ',name[1]);
writeln(filetext,'2 is ',name[2]);
writeln(filetext,' x1  x2  y1  y2  T('ut[m],') P('up[1],');
for i := 1 to n do
writeln(filetext,' ,xi[i,1]:6:4,' ,xi[i,2]:6:4,' ,yi[i,1]:6:4,' ,yi[i,2]:6:4,' ',
          T[i]:6:2,' ',p[i]:12:4);
close(filetext);

end;
goto starta;
endtp :
writeln;
end;
Procedure calkij;
var
  x1,x2,x3,x4 : real;
  kk : integer;
  filename:string;
label stopc,mid,startc;
begin
startc:
repeat
  clrscr;
  writeln('Calculate Kij value in system ');
  writeln(' 1. Benzene and Toluene');
  writeln(' 2. Benzene and m-Xylene');
  writeln(' 3. Toluene and m-Xylene');
  writeln(' 4. All (1-3)');
  writeln(' 5. Exit');
  write('Select choice to calculate Kij ');
  choice := readkey;
  jj := ord(choice) -48;
  until ((jj=1) or (jj=2) or (jj=3) or (jj=4) or (jj=5));
  writeln;

```

```

if jj = 5 then goto stopc;
repeat
  potect := 'y';
  write('Select Unit of Pressure (1) kPa, (2) atm, (3) Psia or (4) bar ');
  readln(l);
  write('Select unit of Temperature (1) K, (2) C, (3) F or (4) R ');
  readln(m);
  if (l<1) or (l>4) or (m<1) or (m>4) then potect := 'n';
until (potect = 'y');
if jj <> 4 then goto mid;
sekij := 'n';
for jj := 1 to 3 do
begin
  jj := jj;
  mid :
  case jj of
  1 : begin
      writeln('Determinate Kij of Benzene(1) and Toluene(2) system');
      btx[1] := 1;
      btx[2] := 2;
    end;
  2 : begin
      pc[2] := pc[3]; tc[2] := tc[3]; oi[2]:=oi[3];
      name[2]:= name[3]; mw[2] := mw[3];
      writeln('Determinate Kij of Benzene(1) and m-xylene(2) system');
      btx[1] := 1;
      btx[2] := 3;
    end;
  3 : begin
      pc[1] := pc[2]; tc[1] := tc[2]; oi[1]:=oi[2];
      name[1]:= name[2]; mw[1] := mw[2];
      pc[2] := pc[3]; tc[2] := tc[3]; oi[2]:=oi[3];
      name[2]:= name[3]; mw[2] := mw[3];
      writeln('Determinate Kij of Toluene(1) and m-xylene(2) system');
      btx[1] := 2;

```

```

    btx[2] := 3;
  end;
end;
write('How many points do you input ? (max 30) ');
readln(n);
repeat
  write('Do you calculate base on mass ? ');
  mass := readkey;
  writeln;
until ((mass='y') or (mass='Y') or (mass='n') or (mass='N'));
if ((mass='n') or (mass='N')) then writeln('Calculation base on mole ');
for i := 1 to n do
begin
  writeln('Data ',i:2);
  if ((mass='y') or (mass='Y')) then
  begin
    write(' Input mass-fraction of ',name[1],' in Vapour phase (y) = ');
    readln(yr[i,j]);
    write(' Input mass-fraction of ',name[1],' in Liquid phase (x) = ');
    readln(xi[i,1]);
    yr[i,2] := 1-yr[i,1];
    xi[i,2] := 1-xi[i,1];
    for j := 1 to 2 do
    begin
      yr[i,j] := yr[i,j]/mw[j];
      xi[i,j] := xi[i,j]/mw[j];
    end;
    h := yr[i,1]+yr[i,2];
    for j:= 1 to 2 do yr[i,j]:=yr[i,j]/h;
    h := xi[i,1]+xi[i,2];
    for j:= 1 to 2 do xi[i,j]:=xi[i,j]/h;
  end else begin
    write(' Input mole-fraction of ',name[1],' in Vapour phase (y) = ');
    readln(yr[i,1]);
    write(' Input mole-fraction of ',name[1],' in Liquid phase (x) = ');

```

```

readln(xi[i,1]);
yr[i,2] := 1-yr[i,1];
xi[i,2] := 1-xi[i,1];
end;
write(' Input Pressure (' ,up[i] ,') ');
readln(p[i]);
chunitp(l,p[i]);
write(' Input Temperature (' ,ut[m] ,') ');
readln(t[i]);
chunitt(m,t[i]);
repeat
  writeln('Do you sure this data ? [(y)es,(n)o] ');
  potect := readkey;
  if ((potect='n') or (potect='N')) then
    begin
      i := i-1;
      potect := 'y';
    end;
  until ((potect='y') or (potect='Y'));
end;
kij[1,1] := 0;
kij[2,2] := 0;
kij[3,3] := 0;
clrscr;
ij := 2;
ik := 2;
writeln('Calculation Kij for ',name[1], ' and ',name[2], ' system');
y[1] := -0.1;
y[4] := 0.2;
y[2] := 0.382*(y[4]-y[1]) + y[1];
y[3] := 0.618*(y[4]-y[1]) + y[1];
repeat
  for kk := 1 to 4 do
    begin
      kij[1,2] := y[kk];

```

```

    kij[2,1] := y[kk];
    calcp(t,n,ik,ij,kij,x4,p,newp);
    error[kk] := x4;
end;
writeln(y[1],error[1],y[4],error[4]);
if (error[2]<error[3]) then
begin
    y[5] := y[2];
    y[4] := y[3];
    y[3] := 0.618*(y[4]-y[1]) + y[1];
    y[2] := 0.382*(y[4]-y[1]) + y[1];
end else
if (error[2] > error[3]) then
begin
    y[5] := y[3];
    y[1] := y[2];
    y[2] := 0.382*(y[4]-y[1]) + y[1];
    y[3] := 0.618*(y[4]-y[1]) + y[1];
end else if (error[2] = error[3]) then
begin
    y[1] := (y[1]-y[4])*0.1+y[1];
    y[2] := 0.382*(y[4]-y[1]) + y[1];
    y[3] := 0.618*(y[4]-y[1]) + y[1];
end;
until (abs(y[4]-y[1]) < 0.00001);
kij[1,2] := y[5];
kij[2,1] := y[5];
calcp(t,n,ik,ij,kij,error[5],p,newp);
writeln(name[1],',',y[5],', objective function = ',error[5]);
for i := 1 to n do
begin
    changet(m,t[i]);
    changep(l,p[i]);
    changep(l,newp[i]);
    if (mass = 'y') or (mass = 'Y') then

```

```

begin
  x1 := 0;
  x2 := 0;
  x3 := 0;
  for j := 1 to ij do
    begin
      xi[i,j] := xi[i,j]*mw[j];
      yr[i,j] := yr[i,j]*mw[j];
      yi[i,j] := yi[i,j]*mw[j];
      x1 := x1 + xi[i,j];
      x2 := x2 + yr[i,j];
      x3 := x3 + yi[i,j];
    end;
  for j := 1 to ij do
    begin
      xi[i,j] := xi[i,j]/x1;
      yr[i,j] := yr[i,j]/x2;
      yi[i,j] := yi[i,j]/x3;
    end;
  end;
end;
writeln(' x y T[ut[m,'] P(old,'up[1,'] P(new,'up[1,'] y(new)');
for i := 1 to n do
  writeln(' ,xi[i,1]:6:4,' ,yr[i,1]:6:4,' ,T[i]:6:2,' ,p[i]:12:4,' ,newp[i]:12:4,' ,yi[i,1]:6:4);
writeln('By value of Kij = ',y[5]);
writeln;
repeat
  write('Do you want output filetext of this data ? ');
  readln(potect);
until ((potect='y') or (potect='Y') or (potect='n') or (potect='N'));
if ((potect = 'y') or (potect='Y')) then
begin
  write('Input name file = ');
  read(frec);
  frec := frec+'.dat';

```

```

assign(filetext,frec);
rewrite(filetext);
writeln(filetext,'Determinate Kij of ',name[1],'(1) and ',name[2],'(2) system');
writeln(filetext,'Kij = ',y[5],'Objective function = ',error[5]);
writeln(filetext,' x y T('ut[m].') P(old,'up[i].') P(new,'up[i].') y(new)');
for i := 1 to n do
  writeln(filetext,' ,xi[i,1]:6:4,' ,yr[i,1]:6:4,' ,T[]:6:2,' ,p[i]:12:4,' ,newp[i]:12:4,'
  ' ,yi[i,1]:6:4);
  writeln(filetext,'By value of Kij = ',y[5]);
  close(filetext);
end;
critical(pc,tc,oi,mw,name);
if choice <> '4' then goto startc;
case ji of
  1 : begin store[1,2] := y[5]; store[2,1] := y[5]; end;
  2 : begin store[1,3] := y[5]; store[3,1] := y[5]; end;
  3 : begin store[2,3] := y[5]; store[3,2] := y[5]; end;
end;
end;
store[1,1] := 0;
store[2,2] := 0;
store[3,3] := 0;
writeln;
repeat
  write('Do you save Kij ? (y/n) ');
  readln(potect);
until ((potect='y') or (potect='Y') or (potect='n') or (potect='N'));
if ((potect='y') or (potect='Y')) then
begin
  writeln;
  write('Input name of new kij file = ');
  readln(filename);
  filename := filename+'.kij';
  openkij(2,store,filename);
end;
end;

```



```

goto startc;

stopc: writeln;

end:

label start,stop;

begin {Main Program}

  up[1] := ' kPa ';
  up[2] := ' atm ';
  up[3] := ' Psia';
  up[4] := ' bar ';
  ut[1] := ' K ';
  ut[2] := ' C ';
  ut[3] := ' F ';
  ut[4] := ' R ';

  start :
  clrscr;
  critical(pc,tc,oi,mw,name);
  writeln('Peng Robinsion Program of Benzene, toluene and m-Xylene System');
  writeln(' A. Calculate Pressure and Composition in vapor phase in Buble point system');
  writeln(' B. Calculate Kij');
  writeln(' X. Exit');
  write('Choice A, B and X ');
  select := readkey;
  clrscr;
  case select of
    'a','A' : caltp;
    'b','B' : calkij;
    'x','X' : goto stop;
  else goto start;
  end;
  goto start;

  stopp :
  writeln;
  writeln('Finish program (Press any key!) ');
  potect := readkey;

end.

```



ประวัติผู้วิจัย

นาย ทนง แก้ววิริยะกิจกุล เกิดวันที่ 24 มีนาคม พ.ศ. 2515 สำเร็จการศึกษาระดับประกาศนียบัตรวิชาชีพ(ปวช.) สาขา เคมีอุตสาหกรรม จากวิทยาลัยเทคนิคกรุงเทพ และสำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรีวิศวกรรมบัณฑิต สาขาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าพระนครเหนือ ในปีการศึกษา 2537



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย