รายการอ้างอิง

ภาษาไทย

ปิยะสาร ประเสริฐธรรม. หลักการออกแบบเครื่องมือแยกสาร. กรุงเทพฯ: สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2536.

ภาษาอังกฤษ

Abrams, D.S. and J.M Prausnitz. Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures. A New Expression for the Exuss Gibbs Energy of Partly and Completely Misecible Systems. AIChE J. 21 (1975): 116-128.

Brandani, S. Brandani, V. Di Giacomo, G.A. Physical Theory Superimposed on to the Chemical Theory of Describing Vapor-Liquid Equilibria of Binary Systems of Formaldehyde in Active Solvents. Ind. Eng. Chem. Res. 30 (1991): 414-420.

_____. The System Formaldehyde-Water-Methanol: Thermodynamics of Solvated and Associated Solutions. Ind. Eng. Chem. Res. 31 (1992): 1792-1798.

Daubert, T.E. Chemical Engineering Thermodynamics. Singapore: McGraw-Hill, 1985.

Distefano, G.P. Mathematical Modeling and Numerical Integration of Multicomponent Batch Distillation Equations. AIChE J. 14 (1968): 190-199.

Franks, R.G. Modeling and Simulation in Chemical Engineering. New York : John Wiley&Sons, 1972.

Fredenslund, Aa. Jones, R.L. Prausnitz, J.M. Group-Contribution Estimation of Activity Coefficients in Nonideal Liquid Mitures. AIChE J. 21 (1975): 1086-1099.

Galindez H. and Fredenslund A.A. Simulation of Multicompomponent Batch Distillatoin Process. AIChE J. 12 (1988): 281-288.

H. Perry, R. W.Green, D. Peery's Chemical Engineer's Hand Book. New York : McGraw-Hill, 1984.

Maure, G. Vapor-Liquid Equilibrium of Formaldehyde and Water-Containing Multicomponent Mixture. AIChE J. 32 (1986): 932-948.

Robert C.R. John M. and Bausnitz Bruce E.P. The Properties of Gases and Liquids. New York : McGraw-Hill, 1988.

Roberto B. Alberto B. Alessandro D.R. and Massimo M. Development of Composition Estimator for Binary Distillantion Columns. Application to Pilot Plant. Chem. Engng. Sci. 50 (1995): 1541-1550.

Smith J.M. and Van Ness H.C. Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. New York : McGraw-Hill, 1987.

W. Rousseau R. Hand Book of Separation Process Technology. New York : John Wiley&Son, 1987.

Waggoner R.C. and holland C.D. Solution of Problems Involving Conventional and Complex Distillation Columns at Unsteady State Operation. AIChE J. 11 (1965): 112-120.

Warren J.L. William F.R. and Davidh R.. Hand Book of Chemical Property Estimation Methods. New York : McGraw-Hill, 1982.

Wu, H.S. Sandler, S.I. The use of ab Initio Quantum Mechanics Calculations in Group Contribution Methods. 1. Theory and the Basis for Group Identifications. Ind. Eng. Chem. Res. 31 (1991): 881-889.

_____. The Use of ab Initio Quantum Mechanics Calculations in Group Contribution Methods. 2. Test of New Groups in UNIFAC. Ind. Eng. Chem. Res. 31 (1991): 889-897.

ภาคผนวก ก.

ตัวอย่างการคำนวณหาค่าคุณสมบัติทางด้านอุณหพลศาสตร์

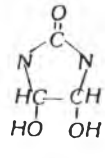
ก.1 การคำนวณหาค่าพารามิเตอร์ R_6 และ Q_6

การคำนวณหาค่าพารามิเตอร์ R_6 และ Q_6 จะหาจากการประยุกต์ใช้สมการ (15) และสมการ (16) ตามลำดับเกายใต้สมมุติฐานรูปร่างระยะห่างระหว่างอะตอม มุมในการจับตัวของอะตอมในแต่ละหมู่ฟังก์ชันนอลจะไม่เปลี่ยนแปลง เมื่อรวมตัวกันเป็นโมเลกุลที่ใหญ่ขึ้น

$$R_6 = r_i = \sum_k \nu_k^{(i)} R_k \tag{15}$$

$$R_6 = q_i = \sum_k \nu_k^{(i)} R_k \tag{16}$$

พิจารณาหมู่ฟังก์ชันนอลลำดับที่ 6 สามารถแยกเป็นหมู่ฟังก์ชันนอลย่อยได้ดังนี้

สูตรโครงสร้าง	หมู่ฟังก์ชันนอล	$\nu_k^{(i)}$	พารามิเตอร์ R_k	พารามิเตอร์ Q_k
	OC-N-CH	1	1.5036	1.432
	N-CH	1	0.7323	0.320
	O-H	2	1.0000	1.200

โดยค่าพารามิเตอร์ R_k และ Q_k ของหมู่ฟังก์ชันนอล C-N-CH และ N-CH หาจากหมู่ฟังก์ชันนอลที่ทราบค่าพารามิเตอร์ ซึ่งแสดงดังนี้

หมู่ฟังก์ชันนอล	พารามิเตอร์ R_k	พารามิเตอร์ Q_k
$N\text{-}CH_3$	1.1865	0.940
CH_3	0.9011	0.848
CH	0.4469	0.228
$OC\text{-}CH_3$	1.6724	1.488

หาค่าพารามิเตอร์ R_k และ Q_k ของหมู่ฟังก์ชันนอล N-CH และ C-N-CH จากความสัมพันธ์ดังนี้

$$CH_3 + N = N\text{-}CH_3 \qquad (ก.1)$$

$$CH + N = N\text{-}CH \qquad (ก.2)$$

$$CO + CH_3 = OC\text{-}CH_3 \qquad (ก.3)$$

$$CO + N\text{-}CH = CO\text{-}N\text{-}CH \qquad (ก.4)$$

จากสมการ (ก.1) หาค่า R_k และ Q_k ของหมู่ฟังก์ชันนอล N ได้เท่ากับ 0.2854 และ0.092 ตามลำดับ และจากสมการ (ก.2) หาค่า R_k และ Q_k ของหมู่ฟังก์ชันนอล N-CH เท่ากับ 0.732 และ 0.320 ตามลำดับ หาค่าพารามิเตอร์ R_k และ Q_k ของหมู่ฟังก์ชันนอล CO จากสมการ (ก.3) ได้เท่ากับ 0.7713 และ 0.640 และจากสมการ (ก.4) หาค่าพารามิเตอร์ R_k และ Q_k ของหมู่ฟังก์ชันนอล CO-N-CH ได้เท่ากับ 1.5036 และ 0.960 ตามลำดับ ดังนั้นเมื่อแทนค่าในสมการ(15) และสมการ(16) หาค่าพารามิเตอร์ R_k และ Q_k ได้ดังนี้

$$R_\sigma = (1 \times 1.5036) + (1 \times 0.7323) + (2 \times 1.000)$$

$$= 4.2359$$

$$Q_6 = (1 \times 0.960) + (1 \times 0.320) + (2 \times 1.200)$$

$$= 3.680$$

ก.2 ตัวอย่างการคำนวณหาค่าพารามิเตอร์ a_{mm}

ตัวอย่าง หาค่าพารามิเตอร์ a_{16} จากตารางที่ 2.6 ค่า $u_{11} = -7,091$ แคลอรี่/โมล

$u_{66} = -10,530$ แคลอรี่/โมล หาค่า C_{16} จากตารางที่ 2.5 ได้ $C_{16} = 0.200$

จาก $$a_{mm} = \frac{u_{mm} - u_{m}}{R} \qquad (24)$$

$$u_{mm} = u_{mm} = - (u_{mm}\, u_{m})^{0.5} (1 - C_{mm}) \qquad (25)$$

ดังนั้น $$a_{16} = \frac{u_{16} - u_{66}}{R} \qquad (ก.5)$$

$$u_{16} = -(u_{11}\, u_{66})^{0.5} (1 - C_{16}) \qquad (ก.6)$$

แทนค่า $$u_{16} = -|(-7,091) \times (-10,530)|^{0.5} (1-0.2)$$

$$= -6,913 \quad \text{แคลอรี่/โมล}$$

$$a_{16} = \frac{-6,913 - (-10,530)}{1.987}$$

$$a_{16} = 1,820.332 \quad \text{เคลวิน}$$

ก.3 การคำนวณหาค่าคุณสมบัติวิกฤตและอุณหภูมิจุดเดือด

หาค่า T_c , P_c และ V_c ขององค์ประกอบไกลออกซอลเรซิน

$$T_c = \frac{e^{B}}{R} \qquad (27)$$

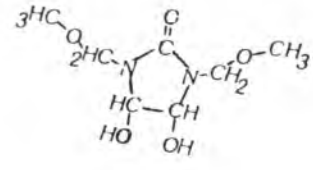
$$\beta = \frac{\left[(1-\theta)^{2/7} - 0.048\right] \ln V_c + (1-\theta)^{2/7} \ln P_c + 1.255}{(1-\theta)^{2/7}} \quad (28)$$

$$P_c = \frac{M.W}{(0.34 + \Sigma\Delta P)^2} \quad (29)$$

$$V_c = 40 + \Sigma\Delta V \quad (30)$$

$$\theta = 0.567 - \Sigma\Delta T + (\Sigma\Delta T)^2 \quad (31)$$

พิจารณาสูตรโครงสร้างของไกลออกซอลเรซิน หาค่า ΔT , ΔP และ ΔV จากตาราง ในภาคผนวก ค.6 ได้ดังนี้



แสดงสูตรโครงสร้างของไกลออกซอลเรซิน (M.W. = 206)

Increment	ΔT	ΔP	ΔV
2(-CH_3)	2 X (0.020)	2 X (0.227)	2 X (55)
2(-CH_2)	2 X (0.020)	2 X (0.227)	2 X (55)
2(-O-)	2 X (0.021)	2 X (0.16)	2 X (20)
2(-OH)	2 X (0.082)	2 X (0.06)	2 X (18)
2[-N-]	2 X [0.007]	2 X [0.13]	2 X [32]
O [-C-]	[0.033]	[0.20]	[50]
2[-CH-]	2 X [0.012]	2 X [0.192]	2 X [46]
	$\Sigma\Delta T$ = 0.357	$\Sigma\Delta P$ = 2.192	$\Sigma\Delta V$ = 456

หมายเหตุ "( )" = Non Ring Increment

"[ ]" = Ring Increment

$$P_C = \frac{206}{(0.34 + 2.192)^2}$$

$= 32.132$ บรรยากาศ

$V_C = 40 + 456$

$= 496$ ซม.^{3}/โมล

$\theta = 0.567 + 0.357 - (0.357)^2$

$= 0.7966$

$$\beta = \frac{\left[(1 - 0.7966)^{2/7} - 0.048\right] \ln 496 + (1 + 0.7966)^{2/7} \ln 32.132 + 1.255}{(1 - 0.7966)^{2/7}}$$

$= 11.1850$

$$T_C = \frac{e^{11.1850}}{82.054}$$

$= 878.0$ เคลวิน

หาค่า T_b โดยสมการ

$T_b = \theta T_C$

$T_b = 0.7966 \times 878.0$

$= 699.4$ เคลวิน

ก.4 การคำนวณหาค่าความร้อนแฝงของการกลายเป็นไอของไกลออกซอลเรซิน

ตัวอย่าง การคำนวณหาค่าความร้อนแฝงของการกลายเป็นไอของไกลออกซอลเรซิน ซึ่งหาโดย วิธีการของ Chen (ดูบทที่ 2 หัวข้อที่ 2.2.3)

$$\Delta H_{vb} = \frac{T_b\left[7.11\log P_C - 7.82 + 7.9\left(T_b/T_C\right)\right]}{1.07 - \left(T_b/T_C\right)} \qquad (33)$$

สำหรับไกลออกซอลเรซิน T_b = 699.4 เคลวิน T_C = 878.0 เคลวิน และค่า P_C = 32.132 ความดันบรรยากาศ แทนค่าในสมการ (33)

$$\Delta H_{vb} = \frac{699.4\left[7.11\log 32.132 - 7.82 + 7.9\left(\frac{699.4}{878.0}\right)\right]}{1.07 - \left(\frac{699.4}{878.0}\right)}$$

$$= \quad 20{,}075 \quad \text{แคลอรี่/โมล}$$

ก.5 การคำนวณหาค่าความดันไอของน้ำ

การคำนวณค่าความดันไอโดยวิธีการของ Grain (ดูบทที่ 2 หัวข้อที่ 2.2.4) ตัวอย่าง การคำนวณหาค่าความดันไอของน้ำที่อุณหภูมิ 323.15 เคลวิน

$$\ln P^{vp} = \frac{\Delta H_{vb}(T_b - C_2)^2}{1.91866T_b^2}\left[\frac{1}{(T_b - C_2)} - \frac{1}{(T - C_2)}\right] \qquad (36)$$

สำหรับน้ำ T_b = 373.15 เคลวิน ΔH_{vb} = 9,720 แคลอรี่/โมล และ C_2 = 52.908 แทนค่า

$$\ln P^{vp}_{water} = \frac{9720(373.15-52.908)^2}{1.91866(373.15)^2}\left[\frac{1}{(373.15-52.908)} - \frac{1}{(323.15-52.908)}\right]$$

$$P^{vp}_{water} = 0.1158 \text{ บรรยากาศ}$$

ก.6 การคำนวณหาค่าความจุความร้อน

ก.6.1 การคำนวณหาค่าความจุความร้อนของของเหลว

สำหรับองค์ประกอบของน้ำ และเมทานอลค่าความจุความร้อนหาจากตารางในภาคผนวก ค.3 ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ของความจุความร้อนเป็นอนุกรมกำลังกับอุณหภูมิดังนี้

$$\frac{C_p}{R} = A + BT + CT^3 \qquad (ก.7)$$

เนื่องจากในปฏิบัติการกลั่นอุณหภูมิเริ่มปฏิบัติงานที่อุณหภูมิห้อง (298.15 เคลวิน) ถึงอุณหภูมิประมาณ 333.15 เคลวิน ค่าความจุความร้อนที่ใช้เป็นค่าความจุร้อนเฉลี่ย (C^L_{pmh}) ในช่วงอุณหภูมิดังกล่าวโดย

$$C^L_{pmh} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} C_p^L dT}{T_2 - T_1} \qquad (ก.8)$$

แทนค่า (ก.7) ลงใน (ก.8)

$$\frac{C^L_{pmh}}{R} = A + BT_{am} + \frac{C}{3}(4T_{am}^2 - T_1T_2) \qquad (ก.9)$$

โดย $T_{am} = \frac{(T_1+T_2)}{2}$ และ T_1 = 298.15 เคลวิน T_2 = 333.15 เคลวิน สำหรับน้ำค่า A = 8.712

B = 1.25 X 10^{-3} C = -0.18 X 10^{6} และค่า R = 1.987 แคลอรี่/(โมล.เคลวิน) แทนค่าใน

สมการ (ก.9)

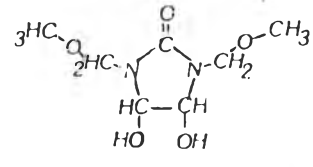
$$\frac{C^{L}_{pmh}}{R} = 8.712 + 1.25x10^{-3} \text{ x } 315.65 - \frac{0.18x10^{6}}{3}(4 \text{ x } 315.65^{2} - 298.15 \text{ x } 333.15)$$

$C^{L}pmh$ = 9.0886 X 1.987 แคลอรี่/(โมล.เคลวิน)

$C^{L}pmh$ = 18.0591 แคลอรี่/(โมล.เคลวิน)

การคำนวณหาค่าความจุความร้อนของไกลออกซอลเรซินโดยวิธีการของ Missenard จากตารางแสดงว่า Group Contribution ของ Missenard ในภาคผนวก ค.8 ซึ่งแสดงว่า Cp^{L} ของแต่ละหมู่ฟังก์ชันนอลที่อุณหภูมิ 248 เคลวิน ถึง 373 เคลวิน ในการคำนวณจะเลือกใช้ค่าที่อุณหภูมิ 323 เคลวินในการหาค่า Cp^{L} ที่อุณหภูมิ 323 เคลวินเป็นค่าความจุความร้อนเฉลี่ย ($C^{l}pmh$)

สำหรับไกลออกซอลเรซินเขียนเป็นสูตรโครงสร้างได้ดังนี้



จากตารางที่ ค.8

C_{p}^{l}(323K) = 2(-H) + 2(-CH) + 2(-CH_2) +2(-CH_3) + 2(-O-) + 2(-N-)

+2(-OH) + -C-

= (2 X15.5)+(2 X 25.7)+(2 X 29.1)+(2 X 43.5)+(2 X 30.1)

+(2 X 8.4)+(2 X 52.3)+44.4

= 453.6 จูล/(โมล.เคลวิน)

= 108.4104 แคลอรี่/(โมล.เคลวิน)

ก.6.2 การคำนวณหาค่าความจุความร้อนของวัฏภาคไอ

สำหรับองค์ประกอบของ น้ำ เมทานอล และ ฟอร์มาลดีไฮด์ ค่าความจุความร้อนหาจากตารางในภาคผนวก ก.2 ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ของความจุความร้อนเป็นอนุกรมกำลังกับอุณหภูมิดังนี้

$$\frac{C_P^V}{R} = A + BT + CT^2 + DT^{-2} \qquad (ก.10)$$

และ $$\frac{C_{pmh}^V}{R} = A + BT_{am} + \frac{C}{3}(4T_{am}^2 - T_1 T_2) + \frac{D}{T_1 T_2} \qquad (ก.11)$$

โดย T_1 = 298.15 เคลวิน T_2 = 333.15 เคลวิน $T_{am} = \frac{(T_1 + T_2)}{2}$ และสำหรับน้ำ

A = 3.470 B = 1.450 X 10^{-3} C = 0 D = 0.121 X 10^5 แทนค่า

$$\frac{C_{pmh}^V}{R} = 3.470 + 1.450 \times 10^{-3} \times 315.65 + \frac{0.121 \times 10^5}{333.15 \times 298.15}$$

$C^v pmh$ = 4.0495 X 1.987 แคลอรี่/(โมล.เคลวิน)

= 8.0464 แคลอรี่/(โมล.เคลวิน)

สำหรับองค์ประกอบไกลออกซอลเรซิน ค่าความจุความร้อนหาโดยวิธีการของ Rihani และ Doraiswamy ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ของความจุความร้อนเป็นอนุกรมกำลังกับอุณหภูมิดังนี้

$$C^v p = A + BT + CT^2 + DT^3 \qquad (ก.12)$$

จากสูตรโครงสร้างของไกลอกซอลเรซินหาค่า A, B, C และ D จากตารางในภาคผนวก ค.7 ได้ดังนี้

Increment	A	B X 10^2	C X 10^4	D X 10^6
2(-CH_3)	2 X (0.6087)	2 X (2.1433)	2 X (-0.0852)	2 X (0.001135)
2(-CH_2-)	2 X (0.3945)	2 X (2.1363)	2 X (-0.1197)	2 X (0.002596)
2(-O-)	2 X (2.8461)	2 X (-0.0100)	2 X (0.0454)	2 X (-0.002728)
2(-OH)	2 X (6.5128)	2 X (-0.1347)	2 X (0.0414)	2 X (-0.001623)
2[-N]	2 X [-3.4677]	2 X [2.9433]	2 X [-0.2673]	2 X [0.007828]
2[HC-]	2 X [-1.4572]	2 X [1.9147]	2 X [-0.1233]	2 X [0.002985]
O [-C-]	[1.0016]	[2.0763]	[-0.1636]	[0.004494]
5-Membredrimg	[-12.2850]	[1.861]	[-0.1037]	[0.002145]

ΣA = -0.409 ΣB = 21.920 ΣC = -1.2847 ΣD = 0.0270

หมายเหตุ "( )" = Non Ring Increment

"[ ]" = Ring Increment

แทนค่า A B C D และแทนค่า T เท่ากับ 323 เคลวินลงในสมการ (ก.12) หาค่า C_p^v

$$C_p^v = -0.409 + (21.920 \times 10^{-2} \times 323) + (-1.2847 \times 10^{-4} \times 323^2)$$

$$+(0.027 \times 10^{-6} \times 323^3)$$

$$= 57.90 \quad \text{แคลอรี่/(โมล.เคลวิน)}$$

ภาคผนวก ข.

ตัวอย่างการคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวม

จากสมการ (52)

$$Q_6 = U_b A_b (T_j - T) \qquad (52)$$

U คือค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวม A เป็นพื้นที่ผิวแลกเปลี่ยนความร้อนของถังปฏิกรณ์เคมี ค่า U_b และ A_b มีค่าเปลี่ยนแปลงตามเวลาในการจำลองกระบวนการกลั่น สมมุติให้ค่า U_b และ A_b มีค่าคงที่ ซึ่งค่า U_b และ A_b ประเมินจากข้อมูลปฏิบัติการกลั่น ซึ่งทราบค่าอุณหภูมิของถังปฏิกรณ์เคมี (T) อุณหภูมิของ Jacket (T_j) เวลาที่ใช้ในปฏิบัติการกลั่น ทราบค่าปริมาณและความเข้มข้นของสารละลายในสายกลั่น ถ้าไม่คำนึงถึงปริมาณความร้อนที่สูญเสียไปสู่บรรยากาศ ดังนั้นปริมาณความร้อนที่ให้เท่ากับปฏิมาณความร้อนที่ใช้ในการระเหย

จากข้อมูลปฏิบัติการกลั่น (การทดลองที่ 1) อุณหภูมิ Jacket เฉลี่ยเท่ากับ 393 เคลวิน อุณหภูมิถังปฏิกรณ์เคมีเฉลี่ยเท่ากับ 326 เคลวิน คำนวณหาค่าพื้นที่ผิวแลกเปลี่ยนความร้อนเท่ากับ 39700 ตารางเซ็นติเมตร ระระเวลาการกลั่นเท่ากับ 4.5 ชั่วโมง

หาปริมาณน้ำและเมทานอลที่ระเหยในระยะเวลา 4.5 ชั่วโมง

จากการทดลองที่ 1

ปริมาณของผสมที่นำมากลั่นทั้งหมด = ปริมาณของผสมในถังปฏิกรณ์เคมีเริ่มต้น + ปริมาณของผสมที่ป้อนทั้งหมด

= 2,130 + 2,700 กิโลกรัม

= 4,830 กิโลกรัม

ปริมาณของผสมในถังปฏิกรณ์เคมีเริ่มต้น = 2,100 กิโลกรัม หาปริมาณน้ำในของผสมที่นำมากลั่น

$$= 4{,}830 \times \frac{34.69}{100}$$

= 1,675.5 กิโลกรัม

หาปริมาณน้ำในของผสมที่ถังปฏิกรณ์เคมีสุดท้าย = $2{,}100 \times \frac{29.07}{100}$

= 610.5 กิโลกรัม

ปริมาณน้ำที่ระเหยทั้งหมด = 1,675.5 - 610.5

= 1,065.0 กิโลกรัม

หาปริมาณเมทานอลในของผสมที่นำมากลั่น = $4{,}830 \times \frac{35.32}{100}$

= 1,730.1 กิโลกรัม

หาปริมาณเมทานอลในของผสมในถังปฏิกรณ์เคมีสุดท้าย = $2{,}100 \times \frac{29.07}{100}$

= 131.7 กิโลกรัม

ปริมาณเมทานอลที่ระเหยทั้งหมด = 1,730.1 - 131.7

= 1,598.4 กิโลกรัม

หาค่าความร้อนแฝงของการกลายเป็นไอของน้ำและเมธานอลที่อุณหภูมิ 326 เคลวิน

จากสมการ (34)

$$\Delta H_V = \Delta H_{vb}\left[\frac{1-\left(T/T_C\right)}{1-\left(T_b/T_C\right)}\right]^n$$

น้ำ = 9,720 แคลอรี่/โมล n = 0.311 T_b = 373.2 เคลวิน T_C = 647.3 เคลวิน

แทนค่าในสมการ (34)

$$\Delta H_V = 9{,}720\left[\frac{1-\left(\frac{326.0}{647.3}\right)}{1-\left(\frac{373.2}{647.3}\right)}\right]^{0.311}$$

$$= 10,212 \quad \frac{\text{แคลอรี่}}{\text{โมล}}$$

และเมทานอล = 8,592 แคลอรี่/โมล n = 0.372 T_b = 337.7 เคลวิน T_C = 512.6 เคลวิน

แทนค่าในสมการ (34)

$$\Delta H_v = 8,592 \left[\frac{1-\left(\frac{326.0}{512.6}\right)}{1-\left(\frac{337.7}{512.6}\right)} \right]^{0.372}$$

$$= 8,801 \quad \frac{\text{แคลอรี่}}{\text{โมล}}$$

หาพลังงานที่ใช้ในการระเหยน้ำ 1,065.0 กิโลกรัม

$$\text{พลังงานที่ใช้} = \frac{1,065.0 \times 10^3}{M.W} \times 10,212$$

$$= \frac{1,065.0 \times 10^3}{18.015} \times 10,212$$

$$= 6.07 \times 10^8 \text{ แคลอรี่}$$

หาพลังงานที่ใช้ในการระเหยเมทานอล 1,598.4 กิโลกรัม

$$\text{พลังงานที่ใช้} = \frac{1,598.4 \times 10^3}{M.W} \times 8,592$$

$$= \frac{1,598.4 \times 10^3}{32.04} \times 8,592$$

$$= 4.286 \times 10^8 \text{ แคลอรี่}$$

พลังงานที่ใช้ทั้งหมด $= 6.07 \times 10^8 + 4.286 \times 10^8$

$= 10.323 \times 10^8$ แคลอรี่

$$= 2.294 \times 10^{8} \quad \frac{\text{แคลอรี่}}{\text{ชั่วโมง}}$$

คำนวณหาค่า U_b ได้จากการแทนค่า $Q_b = 2.294 \times 10^{8}$ $\frac{\text{แคลอรี่}}{\text{ชั่วโมง}}$

$T_j = 394.4$ เคลวิน $T = 326$ เคลวิน และ $A_b = 39,700$ ตารางเซ็นติเมตร ลงในสมการ (53)

$$39,700 \times U_b \times (394.4 - 326) = 2.294 \times 10^{8} \quad \frac{\text{แคลอรี่}}{\text{ชั่วโมง}}$$

$$U_b = 84.482 \quad \frac{\text{แคลอรี่}}{(\text{ชม. เคลวิน. ชม}^2)}$$

ภาคผนวก ก.

ตารางแสดงคุณสมบัติของสาร

ตาราง ก.1 แสดงคุณสมบัติกายภาพสำหรับสารทั่วไป

สมบัติกายภาพสำหรับสารประกอบบริสุทธิ์ 96 ชนิด แสดงในตาราง ค่าเหล่านี้เป็นค่าที่แนะนำโดย สถาบันปิโตรเลียมแห่งสหรัฐอเมริกา "Technical Data Book-Petroleum Refining" และสถาบันวิศวกรรมเคมีสหรัฐอเมริกา

นิยามและหน่วยสำหรับแต่ละสมบัติ ให้ไว้ดังนี้

MW	น้ำหนักโมเลกุล	IUPAC
NBP	จุดเดือดปกติ	เคลวิน
FP	จุดเยือกแข็ง	เคลวิน
TC	อุณหภูมิวิกฤต	เคลวิน
PC	ความดันวิกฤต	กิโลพาสคัล
VC	ปริมาตรวิกฤต	m^3/กิโลโมล
ZC	แฟกเตอร์สภาพอัดวิกฤตนิยามโดย (PC)(VC)/(R)(TC)	
ω	แฟกเตอร์อะเซนทริก	
V_L	ปริมาตรโมลาร์ของเหลวที่ 25° ซ และ 1 บรรยากาศ $(m^3/กิโลโมล)(10)^2$	
C_P	ความจุความร้อนก๊าซอุดมคติ 25° ซ	กิโลจูล/(กิโลโมล · เคลวิน)
ΔH_f	ความร้อนการเกิดที่สถานะมาตรฐานก๊าซอุดมคติที่ 25° ซ	$(กิโลจูล/กิโลโมล)(10^{-4})$
ΔG_f	พลังงานเสรีกิบส์ ของการเกิดที่สถานะมาตรฐานก๊าซอุดมคติที่ 25° ซ	$(กิโลจูล/กิโลโมล)(10^{-4})$
S	เอนโทรปีสัมบูรณ์ของก๊าซอุดมคติที่ 25° ซ	$[กิโลจูล/(กิโลโมล · เคลวิน)](10^{-2})$
$(C_P)_\ell$	ความจุความร้อนของเหลวที่ 25° ซ และ 1 บรรยากาศ ถ้า NBP มากกว่า 25° ซ ที่ 25° ซ และความดันยิ่งตัวในกรณีอื่น	กิโลจูล/(กิโลโมล · เคลวิน)
ΔH_C	ความร้อนการเผาไหม้ (ค่าฤทธิมาตรฐานและกรณีไอน้ำ)	$(กิโลจูล/กิโลโมล)(10^{-3})$
ΔH_{fus}	ความร้อนการหลอมที่จุดเยือกแข็ง	$(กิโลจูล/กิโลโมล)(10^{-3})$
ΔH_{vap}	ความร้อนการระเหยที่จุดเดือดปกติ	$(กิโลจูล/กิโลโมล)(10^{-3})$

No.	Compound	MW	NBP, K	FP, K	TC, K	PC, kPa	VC, m^3/kmol	ZC	ω	$\bar{V}_L$, $(m^3/kmol)(10)^2$
					Paraffins					
1	Methane	16.04	111.7	90.7	190.6	4604.	0.0992	0.288	0.01083	3.780
2	Ethane	30.54	184.6	89.9	305.4	4880.	0.1479	0.284	0.0989	5.474
3	Propane	44.10	231.1	85.5	369.8	4249.	0.2029	0.280	0.1517	7.561
4	n-Butane	58.12	272.7	134.8	425.2	3797.	0.2550	0.274	0.1931	9.665
5	Isobutane	58.12	261.4	113.5	408.1	3648.	0.2627	0.282	0.1770	9.770
6	*n*-Pentane	72.15	309.2	143.4	469.7	3369.	0.3040	0.262	0.2486	11.610
7	*n*-Hexane	86.18	341.9	177.8	507.4	3012.	0.3701	0.264	0.3047	13.129
8	*n*-Heptane	100.2	371.6	182.6	540.3	2736	0.4323	0.263	0.3494	14.711
9	*n*-Octane	114.2	398.8	216.4	568.8	2486.	0.4920	0.259	0.3962	16.366
10	*n*-Nonane	128.3	424.0	219.7	595.6	2306.	0.5477	0.255	0.4368	17.932
11	n-Decane	142.3	447.3	243.5	618.5	2123.	0.6031	0.249	0.4842	19.534
12	*n*-hexadecane	226.4	560.0	291.3	720.6	1419.	0.9300	0.220	0.7471	29.406
13	2,2,4,Trimethyl pentane	114.2	372.4	165.8	544.0	2568.	0.4680	0.266	0.3031	16.536
					Cycloparaffins					
14	Cylopentane	70.13	322.4	179.3	511.8	4502.	0.2583	0.273	0.1943	9.351
15	Methylcyclopentane	84.16	345.0	130.7	532.8	3784.	0.319	0.272	0.2302	11.304
16	Cyclohexane	84.16	353.9	279.7	553.5	4075.	0.3079	0.273	0.2149	10.886
17	Methylcyclohexane	98.19	374.1	146.6	572.2	3471.	0.3680	0.268	0.2350	12.819
18	*cis*-Decalin	138.3	469.0	230.2	677.2	2498.	0.416	0.267	0.2942	15.462
19	*trans*-Decalin	138.3	460.5	242.8	664.2	2616.	0.393	0.238	0.2536	15.933
					Unsaturates					
20	Ethylene	28.05	169.5	104.0	282.4	5032.	0.1291	0.277	0.0852	4.924
21	Propylene	42.08	225.4	87.9	364.8	4613.	0.1810	0.275	0.1424	6.880
22	Isobutylene	56.11	266.3	132.8	417.9	3999.	0.2389	0.275	0.1893	8.943
23	1-Butene	56.11	266.9	87.8	419.6	4020.	0.2399	0.276	0.1867	8.962
24	*c*-2-Butene	56.11	276.9	134.2	435.6	4206.	0.2340	0.272	0.2030	8.745
25	*t*-2-Butene	56.11	274.0	167.6	428.6	4102.	0.2382	0.274	0.2182	8.941
26	1-Hexene	84.16	336.6	133.3	504.0	3140.	0.3540	0.265	0.2800	12.610
27	1-Decene	140.3	443.8	206.9	615.2	2200.	0.650	...	...	19.035
28	1,3-Butadiene	54.09	268.7	164.3	425.4	4330.	0.2208	0.270	0.1932	8.311
29	Acetylene	26.04	188.7	192.0	308.3	6139.	0.1130	0.271	0.1873	4.214
30	Cyclohexene	82.1	356.2	169.7	...	...	...	...	...	10.19

No.	Compound	MW	NBP, K	FP, K	TC, K	PC, kPa	VC, m³/kmol	ZC	ω	$\bar{V}_L$, (m³/kmol)(10)³
					Aromatics					
31	Benzene	78.11	353.2	278.7	562.2	4898.	0.2589	0.271	0.2108	8.950
32	Toluene	92.14	383.8	178.2	591.8	4109.	0.3158	0.264	0.2641	10.656
33	Ethylbenzene	106.2	409.4	178.2	617.2	3609.	0.3738	0.264	0.3036	12.269
34	*o*-Xylene	106.2	417.6	248.0	630.4	3773.	0.3692	0.263	0.3127	12.125
35	*m*-Xylene	106.2	412.3	225.3	617.1	3541.	0.3758	0.259	0.3260	12.341
36	*p*-Xylene	106.2	411.5	286.5	616.3	3511.	0.3791	0.260	0.3259	12.385
37	Cumene	120.2	425.6	177.1	631.2	3209.	0.4277	0.262	0.3482	13.977
38	Naphthalene	128.2	491.1	353.4	748.4	4051.	0.4130	0.269	0.3019	13.083
39	Tetralin	132.2	480.8	237.4	720.2	3300.	0.4410	0.243	0.2981	13.670
40	Styrene	104.2	418.3	242.5	647.6	3999.	0.3518	0.261	0.2339	11.584
41	Phenanthrene	178.2	613.5	372.3	869.3	2900.	0.6180	0.248	0.4856	16.575
42	Indene	116.2	455.8	271.7	687.0	3820.	0.3920	0.262	0.3352	11.715
43	Biphenyl	154.2	528.2	342.4	789.3	3847.	0.5016	0.294	0.5659	15.588
					Gases					
44	Carbon monoxide	28.01	81.7	68.1	132.9	3499.	0.0931	0.296	0.0663	3.545
45	Carbon dioxide	44.01	194.6	216.6	304.2	7382.	0.0940	0.274	0.2276	3.742
46	Hydrogen sulfide	34.08	212.8	187.7	373.5	8937.	0.0985	0.283	0.0814	3.614
47	Carbon disulfide	76.13	319.4	161.5	552.0	7903.	0.1600	0.276	0.1079	6.062
48	Sulfur dioxide	64.06	263.1	197.7	430.8	7884.	0.1220	0.268	0.2451	4.386
49	Sulfur trioxide	80.06	317.9	290.0	490.9	8207.	0.1271	0.256	0.4215	4.235
50	Water	18.015	373.15	273.15	647.3	22090.	0.0568	0.233	0.3442	1.807
51	Ammonia	17.03	239.7	195.4	405.7	11280.	0.0725	0.242	0.2515	2.499
52	Chlorine	70.91	239.1	172.2	417.2	7711.	0.1238	0.275	0.0690	4.539
					Gases					
53	Hydrogen chloride	36.47	188.1	159.0	324.7	8309.	0.0810	0.250	0.1322	3.053
54	Nitric oxide	30.01	121.4	112.2	180.2	6485.	0.0577	0.250	0.5846	2.319
55	Nitrous oxide	44.01	184.7	182.3	309.6	7245.	0.0974	0.274	0.1418	3.476
56	Hydrogen	2.016	20.38	13.95	33.25	1279.	0.0650	0.305	-0.2252	2.856
57	Oxygen	32.00	90.2	54.4	154.6	5043.	0.0734	0.288	0.0218	2.804
58	Nitrogen	28.	77.4	63.1	126.1	3394.	0.0901	0.292	0.0403	3.471
59	Argon	39.95	87.3	83.8	150.9	4898.	0.0746	0.291	-0.0038	2.859
60	Helium-4	4.00	4.2	1.8	5.2	228.	0.0573	0.301	-0.3948	3.201
					Alcohols					
61	Methanol	32.04	337.9	175.5	512.6	8096.	0.1178	0.224	0.5688	4.069
62	Ethanol	46.07	351.4	159.1	516.3	6383.	0.1667	0.248	0.6371	5.852
63	Isopropanol	60.10	355.4	184.7	508.3	4764.	0.2201	0.248	0.6689	7.692
64	*n*-Propanol	60.10	370.4	147.0	536.7	5170.	0.2185	0.253	0.6279	7.494
65	1-Hexanol	102.2	430.2	228.6	611.4	3510.	0.3813	0.263	0.5803	12.521
66	Ethylene glycol	62.07	470.5	260.2	645.1	7530.	0.1910	0.268	1.1360	5.591
67	1,2-Propylene glycol	76.10	460.8	213.2	626.0	6100.	0.2390	0.280	1.1058	7.369

No.	Compound	MW	NBP, K	FP, K	TC, K	PC, kPa	VC, m^3/kmol	ZC	ω	$\bar{V}_L$, $(m^3/kmol)(10)^2$
					Other oxygenated compounds					
68	Formaldehyde	30.03	254.1	181.2	408.0	6586.	0.1050	0.204	0.2816	3.674
69	Acetaldehyde	44.05	293.6	150.2	461.0	5550.	0.1570	0.227	0.3167	5.652
70	Acetone	58.08	329.4	178.5	508.2	4701.	0.2090	0.233	0.3064	7.393
71	Methyl ethyl ketone	72.11	352.8	186.5	535.5	4154.	0.2670	0.249	0.3241	9.020
72	Acetic acid	60.05	391.1	289.8	592.7	5786.	0.1710	0.201	0.4624	5.758
73	Terephthalic acid	166.1	sub	700.	1392.	3952.	0.4240	0.145	...	8.517
74	Methyl acetate	74.08	330.1	175.2	506.8	4691.	0.2280	0.254	0.3254	7.983
75	Ethyl acetate	88.11	350.2	189.6	523.3	3830.	0.2860	0.252	0.3611	9.861
76	Phenol	94.11	455.0	314.1	694.3	6130.	0.2290	0.243	0.4259	8.909
77	Dimethyl-terephthalate	194.2	561.2	413.8	766.	2785.	0.5290	0.231	0.6887	17.887
78	Diethyl ether	74.12	307.6	156.9	466.7	3638.	0.2800	0.262	0.2846	10.467
79	Isopropyl ether	102.2	341.5	187.7	500.0	2878.	0.3860	0.267	0.3238	14.178
80	Benzoic acid	121.1	522.4	395.5	751.	4470.	0.3440	0.246	0.6310	11.291
					Nitrogen and sulfur compounds					
81	Methylamine	31.06	266.8	179.7	430.1	7458.	0.1540	0.322	0.2813	4.483
82	Ethylamine	45.08	289.7	192.2	456.2	5624.	0.1820	0.270	0.2851	6.563
83	Methylmercaptan	48.10	279.1	150.2	470.0	7235.	0.1450	0.268	0.1486	5.414
84	Ethylmercaptan	62.13	308.2	125.3	499.2	5490.	0.2070	0.274	0.1921	7.461
85	Dimethylsulfide	62.13	310.5	174.9	503.0	5530.	0.2009	0.266	0.1893	7.309
86	Urea	60.06	478.	405.9	725.0	6750.	0.2180	0.244	...	...
					Halogenated organics					
87	Methyl chloride	50.49	248.9	175.4	416.3	6679.	0.1390	0.268	0.1603	5.018
88	Ethyl chloride	64.51	285.4	136.8	460.4	5269.	0.2000	0.275	0.1905	7.118
89	Methylene chloride	84.93	312.9	178.0	510.0	6080.	0.1850	0.265	0.1916	6.443
90	Chloroform	119.4	334.3	209.6	536.4	5472.	0.2390	0.293	0.2209	8.066
91	Carbon tetrachloride	153.8	349.8	250.3	556.4	4560.	0.2760	0.272	0.1926	9.711
92	Dichlorodi-fluoromethane	120.9	243.4	115.2	385.0	4125.	0.2170	0.280	0.1796	8.138
93	Dichloroethylene	99.0	356.6	237.5	561.0	5370.	0.2200	0.253	0.2876	7.944
					Inorganics					
94	Sodium hydroxide	40.00	1830.	596.0	2815.	25,331.	0.2	0.22	1.015	2.243
95	Sulfuric acid	98.07	610.	283.5	925.	5066.	0.3	0.2	0.467	5.346
96	Phosphoric acid	98.00	680.	315.5	1030.	5066.	0.34	0.2	...	5.278

	Ideal gas thermal properties							
No.	C_p^*, kJ/(kmol·K)	ΔH_f, (kJ/kmol)(10^{-4})	ΔG_f, (kJ/kmol)(10^{-4})	S, [kJ/(kmol·K)] (10^{-3})	$(C_p)_l$, kJ/(kmol·K)	Net ΔH_f, (kJ/kmol) (10^{-4})	ΔH_{vb}, (kJ/kmol) (10^{-4})	ΔH_{vap}, (kJ/kmol) (10^{-4})
1	35.73	−7.485	−5.082	1.8627	83.42*	−8.023	0.9414	8.165
2	52.48	−8.385	−3.195	2.2912	142.4	−14.278	2.859	14.70
3	73.59	−10.468	−2.440	2.7020	117.7	−20.440	3.524	18.80
4	98.85	−12.577	−1.607	3.1012	140.6	−26.571	4.661	22.50
5	97.23	−13.418	−2.076	2.9539	141.6	−26.487	4.540	21.40
6	120.1	−14.671	−0.877	3.495	167.5,	−32.454	8.393	25.99
7	143.1	−16.694	−0.008	3.887	195.2	−38.552	13.079	29.12
8	165.9	−18.765	0.815	4.280	225.5	−44.649	14.054	31.73
9	188.7	−20.882	+1.592	4.672	253.8	−50.746	20.740	34.77
10	211.6	−22.887	+2.473	5.064	283.9	−56.851	15.468	37.69
11	234.5	−24.953	+3.297	5.457	314.5	−62.942	28.715	40.02
12	370.3	−37.334	+8.368	7.783	501.5	−99.528	53.359	52.52
13	187.6	−22.401	+1.393	4.230	238.3	−50.653	9.196	31.02
14	82.92	−7.703	+3.887	2.929	127.2	−30.709	0.6088	27.26
15	...	−10.67	+3.577	3.399	...	−36.74	...	...
16	105.9	−12.314	+3.176	2.982	154.8	−36.558	2.677	29.89
17	135.1	−15.477	+2.728	3.4334	184.8	−42.571	6.751	31.82
18	...	−16.924	+8.552	3.7773	...	−58.92	...	39.80
19	...	−18.217	+7.355	3.7455	...	−58.81	...	38.62
20	43.73	5.228	6.812	2.1945	179.6	−13.226	3.351	13.46
21	63.92	1.971	6.214	2.6660	112.6	−19.257	3.003	18.49
22	89.16	−1.690	5.807	2.9359	130.7	−25.240	5.931	22.21
23	89.68	−0.054	7.024	3.0783	127.8	−25.412	3.848	22.45
24	78.94	−0.699	6.586	3.0083	128.0	−25.344	7.309	23.43
25	87.86	−1.117	6.297	2.9648	127.9	−25.287	9.758	22.91
26	128.7	−4.167	8.761	3.8464	183.3	−37.394	9.347	28.64
27	214.1	−12.33	12.20	...	300.3	−61.79	...	61.79
28	79.48	11.017	15.067	2.7874	123.6	−24.097	7.985	22.49
29	44.23	22.675	20.920	2.0082	...	−12.556	3.766	17.02
30	105.	...	...	...	149.	−35.32	...	35.32
31	81.66	8.293	12.966	2.6920	136.3	−31.356	9.866	30.75
32	103.8	5.000	12.229	3.2067	157.3	−37.339	6.636	33.60
33	128.4	2.979	13.057	3.6045	183.2	−43.448	9.184	35.91
34	133.3	1.900	12.208	3.5275	186.1	−43.328	13.598	37.00
35	127.6	1.724	11.885	3.5769	183.1	−43.318	11.569	36.33
36	126.9	1.803	12.127	3.5210	181.5	−43.328	17.113	35.82
37	151.7	0.393	13.698	3.8857	210.7	−49.513	7.786	38.07
38	133.3	15.058	22.410	3.3315	176.4	−49.809	18.979	43.42
39	154.9	2.661	16.710	3.6964	217.5	−53.575	12.450	42.35
40	122.1	14.736	21.380	3.4510	182.0	−42.193	10.950	36.62
41	189.8	20.710	30.810	3.9450	260.5	−68.344	16.463	54.38
42	125.1	16.328	23.397	3.3687	187.1	−46.195	10.200	40.94
43	162.3	18.209	28.008	3.9267	226.2	−60.317	18.577	49.05
44	29.14	−11.053	−13.716	1.9754	76.13	−2.830	0.841	5.910
45	37.05	−39.352	−39.441	2.1369	209.3	0.0	8.652	15.30†
46	34.16	−2.063	−3.344	2.0559	67.7†	−6.170	2.377	18.89
47	45.48	11.707	6.691	2.3779	76.43	−11.042	4.393	27.03
48	39.87	−29.684	−30.016	2.4811	89.00	0.0	7.402	24.69
49	50.81	−39.572	−37.095	2.5651	258.1	0.989	1.968	40.23
50	33.60	−24.182	−22.859	1.8872	75.41	0.0	6.002	40.67

No.	Ideal-gas thermal properties							
	C_p^*, kJ/(kmol·K)	ΔH_f, (kJ/kmol)(10^{-4})	ΔG_f, (kJ/kmol)(10^{-4})	S, [kJ/(kmol·K)] (10^{-1})	$(C_p)_l$, kJ/(kmol·K)	Net ΔH_c, (kJ/kmol) (10^{-1})	$\Delta H_{f,m}$, (kJ/kmol) (10^{-1})	$\Delta H_{v,p}$, (kJ/kmol) (10^{-1})
51	35.66	−4.590	−1.640	1.9267	80.88	−31.68	5.657	23.33
52	33.94	0.0	0.0	2.2297	67.0†	0.0	6.406	20.41
53	29.13	−9.231	−9.530	1.8680	62.†	−0.286	1.998	16.21
54	29.83	9.025	8.657	2.1060	67.6†	−0.572	2.301	13.55
55	38.52	8.205	10.417	2.1985	77.5†	−0.159	6.540	17.21
56	29.16•	0.0	0.0	1.3057	13.93†	−2.418	1.172	0.935†
57	29.34	0.0	0.0	2.0503	53.32†	0.0	4.435	6.825
58	29.10	0.0	0.0	1.9150	55.52†	0.0	7.196	5.543
59	20.78	0.0	0.0	1.5473	41.66†	0.0	1.182	6.440
60	20.79	0.0	0.0	1.2604	−12†	0.0	0.500	0.083
61	43.92	−20.108	−16.242	2.3970	80.92	−6.381	3.205	35.95
62	65.51	−23.443	−16.790	2.8259	112.1	−12.355	5.012	39.40
63	88.88	−27.242	−17.339	3.0991	156.5	−18.300	5.410	39.87
64	87.26	−25.640	−16.180	3.2472	144.6	−18.194	5.197	41.38
65	155.8	−31.757	−13.593	4.4150	244.1	−36.744	15.397	45.93
66	97.10	−38.932	−30.447	3.2355	148.6	−10.576	11.623	52.49
67	109.0	−42.150	−30.448	3.5187	190.8	−16.476	...	54.48
68	35.38	−11.590	−10.990	2.1866	...	−5.194	...	23.16
69	54.61	−16.619	−12.891	2.5020	109.4	−11.046	3.222	27.60
70	74.49	−21.715	−15.272	2.9535	126.3	−16.592	5.691	29.79
71	104.4	−23.836	−14.606	3.3811	158.6	−22.616	8.439	31.22
72	64.50	−43.225	−37.405	2.8250	123.3	−7.864	11.715	23.33
73	124.8	−71.789	−59.718	4.4237	...	−30.576	...	...
74	85.41	−40.914	−32.154	3.1983	142.7	−14.609	...	30.61
75	113.4	−44.292	−32.740	3.6275	170.7	−20.548	10.480	32.32
76	103.8	−9.640	−3.263	3.1481	196.4	−29.215	11.514	47.31
77	168.0	−64.358	−47.365	5.4978	318.5	−44.115	31.631	53.35
78	112.5	−25.213	−12.175	3.4100	175.6	−25.035	7.301	27.09
79	157.9	−31.899	−11.924	3.8158	216.8	−37.023	11.046	29.04
80	103.4	−29.020	−21.041	3.6899	221.2	−30.951	18.075	50.63
81	50.07	−2.297	3.209	2.4330	96.95	−9.751	6.134	26.11
82	72.63	−4.602	3.728	2.8485	123.7	−15.874	...	27.35
83	50.29	−2.226	−0.916	2.5501	91.07	−11.517	5.904	25.48
84	72.70	−4.577	−0.427	2.9606	117.9	−17.357	4.975	26.87
85	74.09	−3.720	0.736	2.8585	118.1	−17.440	7.985	26.91
86	55.68	−24.560	−15.272	2.4937	120.5	−5.442	14.853	87.86†
87	40.77	−8.644	−6.295	2.3425	81.17	−6.754	6.548	21.55
88	62.73	−11.226	−6.050	2.7578	104.3	−12.849	4.452	24.75
89	51.23	−9.552	−6.897	2.7018	101.2	−5.139	4.602	28.38
90	65.68	−10.318	−7.041	2.9550	114.2	−3.799	9.540	29.79
91	83.80	−9.598	−5.367	3.0970	130.7	−2.581	2.535	29.84
92	73.10	−49.162	−45.272	3.0088	117.9	...	...	20.61
93	78.85	12.979	−7.393	3.0828	128.4	−11.050	8.828	32.16
94	48.66	−19.776	−20.046	2.2833	87.18•	...	6.611	
95	80.81	−73.513	−65.347	2.9870	139.1	...	10.711	50.1
96	...	125.42	−111.17	1.5062	145.0•	...	12.979	

• Extrapolated.
† At freezing point.

ตาราง ก.2 แสดงค่าความจุความร้อนของก๊าซอุดมคติ

Constants for the equation $C_P^0/R = A + BT + CT^2 + DT^{-2}$ T (kelvins) from 298 K to T_{max}

Chemical species		T_{max}	A	10^1B	10^5C	$10^{-5}D$
Paraffins:						
Methane	CH_4	1,500	1.702	9.081	−2.164	
Ethane	C_2H_6	1,500	1.131	19.225	−5.561	
Propane	C_3H_8	1,500	1.213	28.785	−8.824	
n-Butane	C_4H_{10}	1,500	1.935	36.915	−11.402	
iso-Butane	C_4H_{10}	1,500	1.677	37.853	−11.945	
n-Pentane	C_5H_{12}	1,500	2.464	45.351	−14.111	
n-Hexane	C_6H_{14}	1,500	3.025	53.722	−16.791	
n-Heptane	C_7H_{16}	1,500	3.570	62.127	−19.486	
n-Octane	C_8H_{18}	1,500	8.163	70.567	−22.208	
1-Alkenes:						
Ethylene	C_2H_4	1,500	1.424	14.394	−4.392	
Propylene	C_3H_6	1,500	1.637	22.706	−6.915	
1-Butene	C_4H_8	1,500	1.967	31.630	−9.873	
1-Pentene	C_5H_{10}	1,500	2.691	39.753	−12.447	
1-Hexene	C_6H_{12}	1,500	3.220	48.189	−15.157	
1-Heptene	C_7H_{14}	1,500	3.768	56.588	−17.847	
1-Octene	C_8H_{16}	1,500	4.324	64.960	−20.521	
Miscellaneous organics:						
Acetaldehyde	C_2H_4O	1,000	1.693	17.978	−6.158	
Acetylene	C_2H_2	1,500	6.132	1.952	.....	−1.299
Benzene	C_6H_6	1,500	−0.206	39.064	−13.301	
1,3-Butadiene	C_4H_6	1,500	2.734	26.786	−8.882	
Cyclohexane	C_6H_{12}	1,500	−3.876	63.249	−20.928	
Ethanol	C_2H_6O	1,500	3.518	20.001	−6.002	
Ethylbenzene	C_8H_{10}	1,500	1.124	55.380	−18.476	
Ethylene oxide	C_2H_4O	1,000	−0.385	23.463	−9.296	
Formaldehyde	CH_2O	1,500	2.264	7.022	−1.877	
Methanol	CH_4O	1,500	2.211	12.216	−3.450	
Toluene	C_7H_8	1,500	0.290	47.052	−15.716	
Styrene	C_8H_8	1,500	2.050	50.192	−16.662	
Miscellaneous inorganics						
Air		2,000	3.355	0.575	.....	−0.016
Ammonia	NH_3	1,800	3.578	3.020	.....	−0.186
Bromine	Br_2	3,000	4.493	0.056	.....	−0.154
Carbon monoxide	CO	2,500	3.376	0.557	.....	−0.031
Carbon dioxide	CO_2	2,000	5.457	1.045	.....	−1.157
Carbon disulfide	CS_2	1,800	6.311	0.805	.....	−0.906
Chlorine	Cl_2	3,000	4.442	0.089	.....	−0.344
Hydrogen	H_2	3,000	3.249	0.422	.....	0.083
Hydrogen sulfide	H_2S	2,300	3.931	1.490	.....	−0.232
Hydrogen chloride	HCl	2,000	3.156	0.623	.....	0.151
Hydrogen cyanide	HCN	2,500	4.736	1.359	.....	−0.725
Nitrogen	N_2	2,000	3.280	0.593	.....	0.040
Dinitrogen oxide	N_2O	2,000	5.328	1.214	.....	−0.928
Nitric oxide	NO	2,000	3.387	0.629	.....	0.014
Nitrogen dioxide	NO_2	2,000	4.982	1.195	.....	−0.792
Dinitrogen tetroxide	N_2O_4	2,000	11.660	2.257	.....	−2.787
Oxygen	O_2	2,000	3.639	0.506	.....	−0.227
Sulfur dioxide	SO_2	2,000	5.699	0.801	.....	−1.015
Sulfur trioxide	SO_3	2,000	8.060	1.056	.....	−2.028
Water	H_2O	2,000	3.470	1.450	.....	0.121

† Selected from H. M. Spencer, *Ind. Eng. Chem.*, 40: 2152, 1948; K. K. Kelley, *U.S. Bur. Mines Bull.*, 584, 1960; L. B. Pankratz, *U.S. Bur. Mines Bull.*, 672, 1982.

ค.3 แสดงค่าความจุความร้อนของของเหลว

Constants for the equation $C_p/R = A + BT + CT^2$
T from 273.15 to 373.15 K

Chemical species	A	$10^1 B$	$10^4 C$
Ammonia	22.626	−100.75	192.71
Aniline	15.819	29.03	−15.80
Benzene	−0.747	67.96	−37.78
1,3-Butadiene	22.711	−87.96	205.79
Carbon tetrachloride	21.155	−48.28	101.14
Chlorobenzene	11.278	32.86	−31.90
Chloroform	19.215	−42.89	83.01
Cyclohexane	−9.048	141.38	−161.62
Ethanol	33.866	−172.60	349.17
Ethylene oxide	21.039	−86.41	172.28
Methanol†	13.431	−51.28	131.13
n-Propanol	41.653	−210.32	427.20
Sulfur trioxide	−2.930	137.08	−84.73
Toluene	15.133	6.79	16.35
Water	8.712	1.25	−0.18

† Based on correlations presented by J. W. Miller, Jr., G. R. Schorr, and C. L. Yaws, *Chem. Eng.*, 83(23): 129, 1976.

ค.4 แสดงค่าพารามิเตอร์ R_k และ Q_k

TABLE 8-21 *UNIFAC Group Specifications and Sample Group Assignments*

Group numbers						Sample assignment	
Main	Sec.	Name	R	Q	MW	NOGP	ID
1	1	CH_3	0.9011	0.848	15.03	2,2,-4-Trimethylpentan	
1	2	CH_2	0.6744	0.540	14.03	6	1
1	3	CH	0.4469	0.228	13.02	1	2
						1	3
1	4	C	0.2195	0	12.01	1	4
2	6	CH_2—CH	1.3454	1.176	27.05	3-Methyl-1-hexene:	
2	6	CH—CH	1.1167	0.867	26.04	2	1
2	7	CH_2—C	1.1173	0.988	26.04	2	2
2	8	CH—C	0.8886	0.676	25.03	1	3
2	9	C—C	0.6605	0.485	24.02	1	5
3	10	ACH	0.5313	0.400	13.02	Benzene:	
3	11	AC	0.3652	0.120	12.01	6	10
4	12	$ACCH_3$	1.2663	0.968	27.05	Xylene:	
4	13	$ACCH_2$	1.0396	0.660	26.04	4	10
4	14	ACCH	0.8121	0.348	25.03	2	12
6	16	OH	1.0000	1.200	17.01	Ethanol:	
						1	1
						1	2
						1	15
6	10	CH_3OH	1.4311	1.432	32.04	Methanol:	
						1	16
7	17	H_2O	0.9200	1.400	18.02	Water:	
						1	17
8	18	ACOH	0.8952	0.680	29.03	Phenol:	
						5	10
						1	18
9	19	CH_3CO	1.6724	1.488	43.06	Methylethylketone:	
9	20	CH_2CO	1.4457	1.180	42.04	1	1
						1	2
						1	19
10	21	CHO	0.9980	0.948	29.02	Hexanal:	
						1	1
						4	2
						1	21
11	22	CH_3COO	1.9031	1.728	59.04	Butyl acetate:	
11	23	CH_2COO	1.6764	1.420	58.04	1	1
						3	2
						1	22
12	24	HCOO	1.2420	1.188	46.02	Ethyl formate:	
						1	1
						1	2
						1	24
13	25	CH_3O	1.1460	1.088	31.03	Ethyl ether:	
13	26	CH_2O	0.9183	0.780	30.03	2	1
13	27	CH—O	0.6908	0.468	29.02	1	2
13	28	FCH,O	0.9183	1.100	30.03	1	28
14	29	CH_3NH_2	1.5959	1.544	31.06	Propyl amine:	
14	30	CH_2NH_2	1.3692	1.236	30.05	1	1
14	31	$CHNH_2$	1.1417	0.924	29.04	1	2
						1	30
15	32	CH_3NH	1.4337	1.244	30.06	Diethyl amine:	
15	33	CH_2NH	1.2070	0.936	29.04	2	1
15	34	CHNH	0.9795	0.624	28.03	1	2
						1	33

TABLE 8-21 UNIFAC Group Specifications and Sample Group Assignments (*Continued*)

Group numbers						Sample assignment	
Main	Sec.	Name	R	Q	MW	NOGP	IDGP
16	36	CH_3N	1.1866	0.940	29.04	Triethyl amine:	
16	36	CH_3N	0.9697	0.632	28.03	3	1
						2	2
						1	36
17	37	$ACNH_2$	1.0600	0.816	28.03	Aniline:	
						5	10
						1	37
18	38	C_5H_5N	2.9993	2.113	79.10	Methyl pyridine:	
18	39	C_5H_5N	2.8332	1.833	78.09	1	1
18	40	C_5H_5N	2.6670	1.553	77.09	1	39
19	41	CH_2CN	1.8701	1.724	41.05	Propionitrile:	
19	42	CH_2CN	1.6434	1.416	40.04	1	1
						1	42
20	43	COOH	1.3013	1.224	45.02	Acetic acid:	
20	44	HCOOH	1.5280	1.532	46.03	1	1
						1	43
21	45	CH_2Cl	1.4654	1.264	49.48	Chloroethane:	
21	46	$CHCl$	1.2380	0.962	48.47	1	1
21	47	CCl	1.0060	0.721	47.46	1	45
22	48	CH_2Cl_2	2.2564	1.988	84.93	1, 1-Dichloroethane:	
22	49	$CHCl_2$	2.0606	1.684	83.92	1	1
22	50	CCl_2	1.8016	1.448	82.92	1	49
23	51	$CHCl_3$	2.8700	2.410	119.38	1, 1, 1-Trichloroethane:	
23	52	CCl_3	2.6401	2.184	118.37	1	1
						1	52
24	53	CCl_4	3.3900	2.910	153.82	Trichloromethane:	
						1	53
25	54	$ACCl$	1.1562	0.844	47.46	Chlorobenzene:	
						5	10
						1	54
26	55	CH_3NO_2	2.0086	1.868	61.04	Nitroethane:	
26	56	CH_2NO_2	1.7818	1.560	60.03	1	1
26	57	$CHNO_2$	1.5544	1.248	59.02	1	56
27	58	$ACNO_2$	1.4199	1.104	58.02	Nitrobenzene:	
						5	10
						1	58
28	59	CS_2	2.0570	1.650	76.13	Carbon disulfide:	
						1	59
29	60	CH_2SH	1.8770	1.676	48.10	Ethanethiol:	
29	61	CH_2SH	1.6610	1.368	47.09	1	1
						1	61
30	62	Furfural	3.1680	2.484	96.09	Furfural:	
						1	62
31	63	$(CH_2OH)_2$	2.4088	2.248	62.07	Ethylene glycol:	
						1	63
32	64	I	1.2640	0.992	126.90	Iodomethane:	
						1	1
						1	64
33	65	Br	0.9492	0.832	79.90	Bromomethane:	
						1	1
						1	64
34	66	CH-trip-C	1.2920	1.088	25.03	Propyne:	
34	67	C-trip-C	1.0613	0.784	24.02	1	1
						1	66
35	68	Me_2SO	2.8266	2.472	78.13	Dimethylsulfoxide:	
						1	68
36	69	Acry	2.3144	2.052	53.06	Acrylonitrile:	
						1	69
37	70	Cl(C=C)	0.7910	0.724	36.46	Trichloroethylene:	
						1	8
						3	70

TABLE 8-21 UNIFAC Group Specifications and Sample Group Assignments (*Continued*)

Group numbers						Sample assignment	
Main	Sec.	Name	*R*	*Q*	MW	NOGP	IDGI
38	71	ACF	0.6948	0.624	31.01	Fluorobenzene:	
						5	10
						1	71
39	72	DMF-1	3.0856	2.736	73.09	Dimethylformamide:	
39	73	DMF-2	2.6322	2.120	43.03	1	72
						Diethylformamide:	
						2	1
						1	73
40	74	CF_2	1.4060	1.380	69.01	Perfluoroethane:	
40	75	CF_3	1.0105	0.920	50.01	2	74
40	76	CF	0.6160	0.460	31.01		
41	77	COO	1.3800	1.200	44.01	Butylacetate:	
						2	1
						3	2
						1	77
42	78	SiH_3	1.6035	1.263	31.11	Methylsilane:	
42	79	SiH_2	1.4113	1.006	30.10	1	1
42	80	SiH	1.2851	0.749	29.09	1	78
42	81	Si	1.0470	0.410	28.09		
43	82	SiH_2O	1.4338	1.062	46.10	Hexamethyldisiloxane:	
43	83	SiHO	1.3030	0.764	45.09	6	1
43	84	SiO	1.1044	0.466	44.09	1	81
						1	84
44	85	*tert*-N	0.2854	0.092	14.01	Triethylamine:	
						3	1
						3	2
						1	85
45	86	Amide	1.4660	1.336	44.03	Acetamide:	
						1	1
						1	86
46	87	$CON(Me)_2$	2.8590	2.428	72.09	*N,N*-Methylethylamide:	
46	88	$CONMeCH_2$	2.6320	2.120	71.08	2	1
46	89	$CON(CH_2)_2$	2.4060	1.812	70.07	1	88

ก.5 แสดงค่าพารามิเตอร์ a_{mn}

TABLE 8-22 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters, In Kelvins

Main group numbers *	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	0	86.020	61.130	76.500	000.500	697.200	1318.000	1333.000	476.400	677.000	232.100	741.400	251.500	391.500
2	−35.360	0	38.810	74.150	524.100	787.600	270.600	526.100	182.600	448.800	37.850	449.100	214.500	240.900
3	−11.120	3.446	0	167.000	636.100	637.300	903.800	1329.000	25.770	347.300	8.994	-92.860	32.140	161.700
4	−69.700	−113.600	−146.800	0	803.200	603.200	5695.000	881.900	−62.100	660.600	8688.000	118.200	213.100	0
5	156.400	457.000	89.600	25.820	0	−137.100	353.500	−259.700	84.000	441.800	101.100	193.100	28.060	83.020
6	16.610	−12.820	−60.000	−41.800	249.100	0	−181.000	−101.700	23.390	300.400	−10.720	193.400	-128.600	359.300
7	300.000	496.100	362.300	377.600	−229.100	289.600	0	324.600	−195.400	−257.300	72.870	0	840.800	48.890
8	275.800	217.600	25.340	244.200	−451.600	−265.200	−601.800	0	−350.100	0	−449.400	0	0	0
9	26.760	42.920	140.100	365.800	164.500	108.700	472.500	−133.100	0	−37.360	−213.100	-38.470	-103.600	0
10	505.700	56.300	23.390	106.000	−401.800	−310.200	232.700	0	128.000	0	-110.300	11.310	304.100	0
11	114.800	132.100	85.810	−170.000	245.400	249.600	200.800	−36.720	372.200	186.100	0	372.900	−235.700	0
12	90.490	−62.550	1967.000	2347.000	191.200	155.700	0	0	70.420	36.360	−261.100	0	0	0
13	89.360	26.510	62.130	65.690	237.700	238.400	−314.700	0	191.100	−7.838	461.300	0	0	0
14	−30.480	1.163	−41.850	0	−161.000	−481.700	−330.400	0	0	0	0	0	0	0
15	65.330	−28.700	−22.310	223.000	−150.000	−600.400	−448.200	0	0	0	136.000	0	−49.300	108.800
16	−83.080	−25.380	−223.900	109.900	28.600	−400.800	−598.800	0	226.300	0	-294.800	0	0	38.890
17	1130.000	2000.000	247.600	762.800	-17.400	-118.100	-367.800	-253.100	-460.300	0	0	0	0	-16.070
18	−101.600	0	31.870	49.800	−132.300	−318.200	−332.900	−341.600	−51.510	0	0	0	0	0
19	24.820	−40.620	−22.930	−138.400	−185.400	157.800	242.800	0	−287.500	0	−266.600	0	38.810	0
20	315.300	1264.000	62.320	268.200	−151.000	1020.000	−66.170	0	−297.800	0	−256.300	312.500	−338.500	0
21	91.460	97.510	4.680	122.900	662.200	529.000	698.200	0	286.300	−47.510	36.300	0	225.400	0
22	31.010	18.250	121.300	140.800	747.700	669.900	708.100	0	423.200	0	−132.900	0	−197.700	0
23	36.700	61.060	288.500	33.610	742.100	649.100	826.700	0	652.100	242.800	176.500	488.900	−20.930	0
24	−78.450	160.900	−4.700	131.700	856.300	860.100	1201.000	10000.000	372.000	0	129.500	403.100	113.900	261.100
25	−141.300	−158.800	−237.700	375.500	246.900	661.600	920.400	0	128.100	0	−216.300	0	96.860	203.500
26	−32.600	−1.996	10.380	−97.050	261.600	252.600	417.900	0	−142.600	0	129.300	0	−94.490	0
27	6511.000	0	1821.000	−127.800	661.600	0	369.700	0	0	0	0	0	0	0
28	−62.650	16.620	21.500	40.680	823.500	914.200	1081.000	0	303.700	0	243.800	0	112.400	0
29	−7.481	0	28.410	0	461.600	382.800	0	0	160.600	0	0	239.800	63.710	106.700
30	−25.310	0	157.300	404.300	621.600	0	23.480	0	317.500	0	−146.300	0	0	0
31	-110.000	0	221.400	150.600	267.600	0	-142.100	838.400	0	0	152.000	0	9.207	0
32	128.000	0	68.680	0	601.300	0	0	0	138.000	0	21.920	0	476.600	0
33	−31.520	0	155.600	291.100	721.900	494.700	0	0	−142.600	0	24.310	0	736.400	0
34	−72.880	41.380	0	0	0	0	0	0	443.600	0	0	0	0	0
35	50.490	422.400	−2.504	−143.200	−25.870	695.000	−210.000	0	110.400	0	41.570	0	−122.100	0
36	−165.900	0	0	0	0	0	386.600	0	0	0	176.600	0	0	0
37	47.410	124.200	395.800	0	738.900	628.000	0	0	−40.900	0	16.990	0	−217.900	0
38	−6.132	0	−237.200	−157.300	649.700	645.900	0	0	0	0	0	0	167.100	0
39	−31.950	249.000	−133.900	−210.200	64.160	172.200	−287.100	0	91.040	0	0	0	−158.200	0
40	147.300	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
41	829.000	1391.000	317.600	615.800	88.630	171.000	204.400	−167.300	123.400	0	−231.900	65.370	−247.800	0
42	-34.360	0	787.900	191.600	1913.000	0	0	0	892.400	0	0	0	0	0
43	110.200	0	234.400	221.800	81.850	0	0	0	0	0	0	0	0	0
44	220.300	0	30.010	46.300	-804.200	0	-462.200	0	0	0	0	0	0	0
45	272.000	0	−288.000	−1020.000	0	−668.000	−1000.000	0	−435.000	−686.000	−463.000	0	2880.000	0
46	8960.000	−963.000	−63.100	−196.000	0	0	0	0	−444.000	−167.000	0	0	−74.700	0
47	−11.100	0	−11.800	−36.600	0	0	0	0	1630.000	−60.800	−466.000	0	0	0

*Parameters for groups 45 to 47 were estimated from gas-liquid chromatographic data. While the accuracy of these parameters is not as high as that obtained from reduction of conventional vapor-liquid equilibrium data, these parameters appreciably extend the range of applicability of UNIFAC.

TABLE 8-22 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters, in Kelvins (*Continued*)

Main group numbers*	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28
1	225.700	206.600	920.700	287.700	697.000	663.500	36.930	63.760	24.900	104.300	321.500	661.500	543.000	163.600
2	163.900	61.110	749.300	0	336.900	318.900	204.600	6.892	−13.990	−109.700	393.100	357.500	0	76.300
3	122.800	90.490	618.200	−4.449	212.500	537.400	−18.810	−141.400	−231.900	3.000	639.200	168.000	194.900	52.070
4	−49.290	23.500	664.200	52.800	6096.000	603.800	−114.100	-111.000	−12.140	−141.300	−126.900	3629.000	4448.000	−9.451
5	42.780	−323.000	-52.390	170.000	6.712	199.000	76.620	−112.100	−98.120	143.100	287.800	256.500	157.100	477.000
6	266.000	53.900	489.7	580.500	36.230	−289.500	−38.320	−102.500	−139.400	−67.800	17.120	75.140	0	−31.090
7	168.000	304.000	-59.29	459.000	112.600	−14.090	325.400	370.400	353.700	497.500	678.200	220.600	399.500	887.100
8	0	0	119.900	−305.500	0	0	0	0	0	1827.000	0	0	0	0
9	0	-169.000	6201.000	165.100	481.700	669.400	−191.700	−284.000	−354.600	−39.200	174.600	137.600	0	216.100
10	0	0	0	0	0	0	751.900	0	-483.700	0	0	0	0	0
11	−73.500	0	475.500	0	494.600	660.200	-34.740	108.900	−209.700	54.470	629.000	-81.130	0	183.000
12	0	0	0	0	0	−356.300	0	0	−287.200	30.810	0	0	0	0
13	141.700	0	0	0	-18.510	664.600	301.100	137.800	−154.300	47.670	66.160	95.180	0	140.900
14	63.720	−41.110	-200.700	0	0	0	0	0	0	−99.810	68.810	0	0	0
15	0	−189.200	0	0	0	0	0	0	0	71.230	4350.000	0	0	0
16	865.900	0	0	0	0	0	0	−73.850	−352.900	−8.283	−86.360	0	0	0
17	0	0	0	0	-281.600	0	287.000	0	0	882.000	287.900	0	-139.300	0
18	0	0	0	0	−169.700	−153.700	0	−351.600	−114.700	−165.100	0	0	0	0
19	0	0	777.400	134.300	0	0	88.750	-152.700	−15.620	−54.860	52.310	-0.615	0	230.900
20	0	0	0	−313.500	0	0	44.420	120.200	76.750	212.700	0	0	0	0
21	0	0	429.700	0	-62.410	326.400	0	108.300	249.200	62.420	464.400	32.760	0	450.100
22	0	−141.400	0	687.300	258.600	339.600	−84.530	0	0	66.330	0	0	0	0
23	0	−293.700	0	18.980	74.040	1346.000	−157.100	0	0	−30.100	0	0	0	116.600
24	91.130	−126.000	898.200	309.200	492.000	689.000	11.800	17.970	51.900	0	475.800	490.900	534.700	132.200
25	−108.400	1088.000	530.500	0	356.900	0	−314.900					−		
26	0	0	0	0	0.283	0	113.000	0	0	−255.400	0	-154.600	0	0
27	0	0	134.900	0	0	0	0	0	0	−34.680	794.400	0	533.200	0
28	0	0	0	0	335.700	0	−73.090	0	0	514.600	0	−85.120	0	0
29	0	0	0	0	125.700	0	−27.910	0	−26.060	−60.710	0	0	0	0
30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
31	0	0	255.400	0	0	0	0	0	48.480	−133.100	0	0	0	0
32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	481.300	0	0
33	0	0	0	0	0	5256.000	1169.000	−40.820	21.760	48.490	0	64.280	0	0
34	0	0	0	0	329.100	0	0	0	0	225.800	224.000	125.300	0	0
35	0	-257.200	0	0	0	150.000	0	0	0	0	0	174.400	0	0
36	0	0	0	0	−42.310	0	0	−215.000	−343.600	−58.430	0	0	0	0
37	0	0	0	0	301.000	898.200	428.500	0	0	-85.150	0	0	0	0
38	0	116.500	0	0	0	0	0	0	−149.800	-134.200	0	379.400	0	167.900
39	0	0	343.700	0	0	-106.600	0	0	0	−124.600	0	0	0	0
40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	−186.700	0	0	0	0
41	284.500	0	-221.000	0	−61.600	1179.000	182.200	0	0	0	0	0	0	0
42	0	0	0	0	0	2150.000	0	305.400	−193.000	335.700	1107.000	-124.700	0	885.500
43	0	0	0	0	0	2496.000	0	0	0	0	0	0	0	0
44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	70.810	0	0	0	0
45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
								0	0	0	0	0	0	0

TABLE 8-22 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters, In Kelvins (*Continued*)

Main group numbers *	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42
1	181.400	354.500	3025.000	336.800	479.500	298.900	626.500	689.000	−4.189	125.800	485.300	−2.859	387.100	-460.400
2	0	0	0	0	0	31.140	−137.400	0	−66.460	0	−70.450	0	48.330	0
3	−10.430	−64.690	210.400	113.300	−13.590	0	169.900	0	−259.100	389.300	245.600	0	103.500	-432.300
4	0	−20.360	4975.000	0	−171.300	0	4284.000	0	0	101.400	5629.000	0	69.260	683.300
5	147.500	−120.500	−318.900	313.500	133.400	0	−202.100	0	225.800	44.780	−143.900	0	190.300	-817.700
6	37.840	0	0	0	100.300	0	−309.300	0	33.470	−48.250	−172.400	0	165.700	0
7	0	188.000	13.630	0	0	0	−139.000	160.800	0	0	319.000	0	−197.500	0
8	0	0	−687.100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	−494.200	
9	−46.280	−163.700	0	63.590	245.200	−216.600	−44.580	0	−34.570	0	−61.700	0	−18.800	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	0	202.300	−101.700	148.300	18.880	0	52.080	-28.610	−83.300	0	0	0	560.200	0
12	4.339	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	−70.210	0
13	−8.538	0	−20.110	−149.500	−202.300	0	172.100	0	240.200	-273.900	254.800	0	417.000	0
14	−70.140	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	−38.770	0
16	0	0	0	0	0	0	243.100	0	0	-196.300	0	0	0	0
17	0	0	-136.900	0	0	0	0	0	0	0	-334.400	0	-89.420	0
18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	21.370	0	0	0	0	−203.000	0	81.570	3.509	0	0	0	120.300	0
20	0	0	0	0	-95.000	0	-661.200	0	−11.160	0	-246.600	0	−337.000	169.300
21	69.020	0	0	0	-126.900	0	0	0	−245.400	0	0	0	63.670	0
22	0	0	0	177.600	0	0	215.000	0	0	0	0	0	−96.870	0
23	0	−61.380	0	86.400	0	0	363.700	0	111.200	0	0	0	255.800	0
24	0	546.700	0	247.800	41.940	0	337.700	369.600	187.100	215.200	498.600	0	256.500	639.300
25	0	0	0	0	−60.700	0	0	0	0	0	0	0	−145.100	0
26	0	0	139.800	304.300	10.170	−27.700	0	0	10.760	0	0	0	248.400	0
27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
28	0	0	0	0	0	0	0	0	−47.370	0	0	0	469.800	0
29	0	0	0	0	0	0	31.660	0	0	0	78.920	0	0	0
30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
31	0	0	0	0	0	0	−417.200	0	0	0	302.200	0	0	0
32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	68.550	0
33	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	−119.800	0	0	0
35	85.700	0	535.800	0	0	0	0	0	0	0	−97.710	0	153.700	0
36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	423.400	0
37	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	730.800	0
38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
39	−71.000	0	−191.700	0	0	6.699	136.600	0	0	0	0	0	0	0
40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	186.600	0	0	0	0
41	0	0	0	288.100	0	0	−29.340	−53.910	−198.000	0	0	0	0	0
42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	746.300
44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

ค.6 แสดงค่า Lydersen's Increments

	Δ_T	Δ_P	Δ_V
Nonring Increments			
$-CH_3$	0.020	0.227	55
$-\overset{\vert}{C}H_2-$	0.020	0.227	55
$-\overset{\vert}{C}H-$	0.012	0.210	51
$-\overset{\vert}{\underset{\vert}{C}}-$	0.00	0.210	41
$=CH_2$	0.018	0.198	45
$=\overset{\vert}{C}H$	0.018	0.198	45
$=\overset{\vert}{C}-$	0.0	0.198	36
$=C=$	0.0	0.198	36
$\equiv CH$	0.005	0.153	(36)
$\equiv C-$	0.005	0.153	(36)
Ring Increments			
$-CH_2-$	0.013	0.184	44.5
$-\overset{\vert}{C}H-$	0.012	0.192	46
$-\overset{\vert}{\underset{\vert}{C}}-$	(−0.007)	(0.154)	(31)
$=\overset{\vert}{C}H$	0.011	0.154	37
$=\overset{\vert}{C}-$	0.011	0.154	36
$=C=$	0.001	0.154	36
Halogen Increments			
$-F$	0.018	0.224	18
$-Cl$	0.017	0.320	49
$-Br$	0.010	(0.50)	(70)
$-I$	0.012	(0.83)	(95)
Oxygen Increments			
$-OH$ (alcohols)	0.082	0.06	(18)
$-OH$ (phenols)	0.031	(−0.02)	(3)

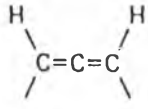
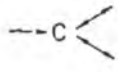
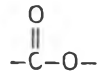
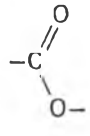
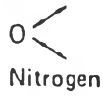
	Δ_T	Δ_P	Δ_V
—O— (nonring)	0.021	0.16	20
—O— (ring)	(0.014)	(0.12)	(8)
—C(=O)— (nonring)	0.040	0.29	60
—C(=O)— (ring)	(0.033)	(0.2)	(50)
HC(=O)— (aldehyde)	0.048	0.33	73
—COOH (acid)	0.085	(0.4)	0.80
—COO— (ester)	0.047	0.47	80
=O (except for combinations above)	(0.02)	(0.12)	(11)
Nitrogen increments			
$-NH_2$	0.031	0.095	28
—NH— (nonring)	0.031	0.135	(37)
—NH— (ring)	(0.024)	(0.09)	(27)
—N< (nonring)	0.014	0.17	(42)
—N< (ring)	(0.007)	(0.13)	(32)
—CN	(0.060)	(0.36)	(80)
$-NO_2$	(0.055)	(0.42)	(78)
Sulfur increments			
—SH	0.015	0.27	55
—S— (nonring)	0.015	0.27	55
—S— (ring)	(0.008)	(0.24)	(45)
=S	(0.003)	(0.24)	(47)
Miscellaneous			
—Si<	0.03	(0.54)	
—B<	(0.03)		

หมายเหตุ : ค่าในวงเล็บมาจากข้อมูลการทดลองจำนวนน้อยจึงเชื่อถือได้ไม่มาก

ก.7 แสดงค่า Group Contribution ของ Rihani และ Doraiswany

Group	a	b X 10^3	c X 10^4	d X 10^6
Aliphatic Hydrocarbon Groups				
$-CH_3$	0.6087	2.1433	− 0.0852	0.001135
$-CH_3$	0.3945	2.1363	− 0.1197	0.002696
$=CH_2$	0.5266	1.8357	− 0.0954	0.001950
$-C(-)(-)-H$	− 3.5232	3.4168	− 0.2816	0.008015
$-C(-)(-)-$	− 5.8307	4.4541	− 0.4208	0.012630
$H-C(=)-CH_2$	0.2773	3.4580	− 0.1918	0.004130
$-C(=)-CH_2$	− 0.4173	3.8857	− 0.2783	0.007364
$H_2C=C(-)-H$	− 3.1210	3.8060	− 0.2359	0.005504
$H-C(=)-C(-)-H$	0.9377	2.9904	− 0.1749	0.003918
$H-C(=)-C(-)-$	− 1.4714	3.3842	− 0.2371	0.006063
$-C(=)-C(-)-$	0.4736	3.5183	− 0.3150	0.009205
$H-C(=)-C=CH_2$	2.2400	4.2896	− 0.2566	0.005908
$-C(=)-C=CH_2$	2.6308	4.1658	− 0.2845	0.007277

(continued)

Group	a	b X 10^2	c X 10^4	d X 10^6
Aliphatic Hydrocarbon Groups (cont'd.)[a]				
	− 3.1249	6.6843	− 0.5766	0.017430
≡CH	2.8443	1.0172	− 0.0690	0.001866
−C≡	− 4.2315	7.8689	− 0.2973	0.00993
Aromatic Hydrocarbon Groups				
	− 1.4572	1.9147	− 0.1233	0.002985
	− 1.3883	1.5159	− 0.1069	0.002659
	0.1219	1.2170	− 0.0855	0.002122
Oxygen-Containing Groups				
−OH	6.5128	− 0.1347	0.0414	− 0.001623
−O−	2.8461	− 0.0100	0.0454	− 0.002728
	3.5184	0.9437	0.0614	− 0.006978
	1.0016	2.0763	− 0.1636	0.004494
	1.4055	3.4632	− 0.2557	0.006886
	2.7350	1.0751	0.0667	− 0.009230
	− 3.7344	1.3727	− 0.1265	0.003789
Nitrogen-Containing Groups				
−C≡N	4.5104	0.5461	0.0269	− 0.003790
−N≡C	5.0860	0.3492	0.0259	− 0.002436
$-NH_2$	4.1783	0.7378	0.0679	− 0.007310

Group	a	b X 10^2	c X 10^4	d X 10^6
Nitrogen-Containing Groups (cont'd.)				
>NH	− 1.2530	2.1932	− 0.1604	0.004237
>N−	− 3.4677	2.9433	− 0.2673	0.007828
N<	2.4458	0.3436	0.0171	− 0.002719
$-NO_2$	1.0898	2.6401	− 0.1871	0.004750
Sulfur-Containing Groups				
−SH	2.5597	1.3347	− 0.1189	0.003820
−S−	4.2256	0.1127	− 0.0026	− 0.000072
S<	4.0824	− 0.0301	0.0731	− 0.006081
$-SO_3H$	6.9218	2.4735	0.1776	− 0.022445
Halogen-Containing Groups				
−F	1.4382	0.3452	− 0.0106	− 0.000034
−Cl	3.0660	0.2122	− 0.0128	0.000276
−Br	2.7605	0.4731	− 0.0455	0.001420
−I	3.2651	0.4901	− 0.0539	0.001782
Contributions Due to Ring Formation				
3-membered ring	− 3.5320	− 0.0300	0.0747	− 0.005514
4-membered ring	− 8.6550	1.0780	0.0425	− 0.000250
5-membered ring				
Pentane	− 12.2850	1.8609	− 0.1037	0.002145
Pentene	− 6.8813	0.7818	− 0.0345	0.000591
6-membered ring				
Hexane	− 13.3923	2.1392	− 0.0429	− 0.001865
Hexene	− 8.0238	2.2239	− 0.1915	0.005473

Source: Rihari and Doraiswamy [11]. *(Reprinted with permission from the American Chemical Society.)*

ก.8 แสดงค่า Group Contribution ของ Missenard

Group	Temperature, K					
	248	273	298	323	348	373
-H	12.6	13.4	14.6	16.5	16.7	18.8
$-CH_3$	38.5	40.0	41.6	43.5	45.8	48.3
$-CH_2$	27.2	27.6	28.2	29.1	29.9	31.0
$-\underset{\vert}{CH}-$	20.9	23.8	24.9	25.7	26.6	28.0
$-\underset{\vert}{\overset{\vert}{C}}-$	8.4	8.4	8.4	8.4	8.4	
-C=C-	46.0	46.0	46.0	46.0		
-O-	28.9	29.3	29.7	30.1	30.6	31.0
-CO- (ketone)	41.8	42.7	43.6	44.4	45.2	46.0
-OH	27.2	33.6	43.0	52.3	61.7	71.1
-COO- (ester)	66.5	67.7	69.0	61.1	63.2	64.9
-COOH	71.1	74.1	78.7	83.7	90.0	94.1
$-NH_2$	58.6	58.6	62.8	66.9		
$-\underset{\vert}{NH}-$	61.0	61.0	61.0			
$-\underset{\vert}{N}-$	8.4	8.4	8.4			
-CN	66.1	66.6	66.9			
$-NO_2$	64.4	64.9	65.7	66.9	68.2	
-NH-NH-	79.5	79.6	79.6			
C_6H_5- (phenyl)	108.8	113.0	117.2	123.4	129.7	136.0
$C_{10}H_7-$ (naphthyl)	179.9	184.1	188.3	196.6	205.	213.
-F	24.3	24.3	26.1	25.9	27.0	28.2
-Cl	28.9	29.3	29.7	30.1	30.8	31.4
-Br	35.1	35.6	36.0	36.4	37.2	38.1
-I	39.3	39.7	40.4	41.0		
-S-	37.2	37.7	38.6	39.3		

ภาคผนวก ง.

การใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ และโปรแกรมคอมพิวเตอร์

ง.1 การใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์

การใช้โปรแกรมการจำลองกระบวนการกลั่นแบบแบตช์มีข้อจำกัดและขอบเขตการใช้ดังนี้

1. ใช้ได้กับระบบ 3 องค์ประกอบ คือ น้ำ เมทานอล และไกลออกซอลเรซิน กำหนดให้การป้อนค่าเศษส่วนโมลในถังปฏิกรณ์เคมีเริ่มต้นมีค่ามากกว่าศูนย์

2. ใช้ได้กับระบบที่สภาวะความดันของระบบน้อยกว่า 2 บรรยากาศ

3. การประมวลกำหนดให้ระยะเวลาในการประมวลผลเท่ากับ 6 ชั่วโมง

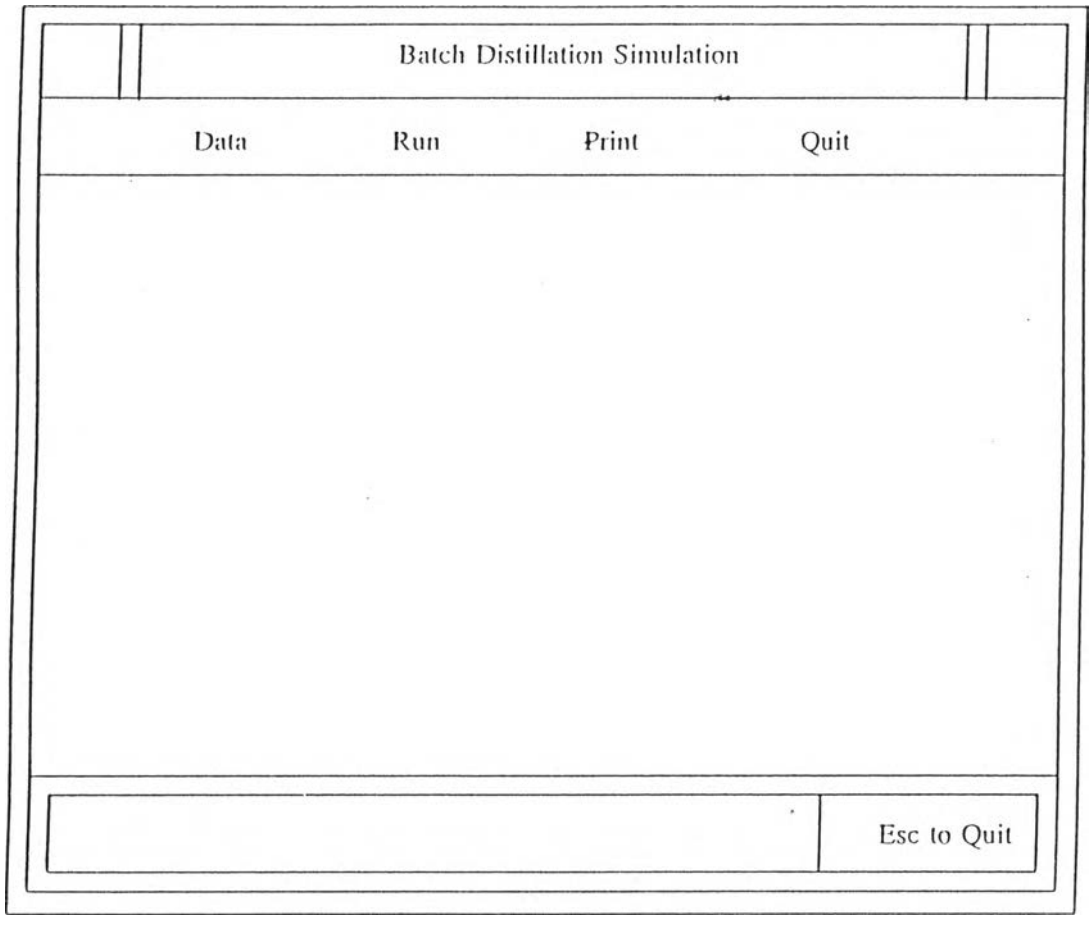
แสดงรายละเอียดการใช้โปรแกรมดังนี้

1. เริ่มเข้าสู่โปรแกรม

ที่สภาวะดอสผู้เรียกใช้โปรแกรม "batchsim" จากห้องขับดิสก์ที่มีโปรแกรมอยู่โดยการป้อน "batchsim" ต่อจากเครื่องหมายพร็อมท์ (prompt) ดังนี้

C:> batchsim

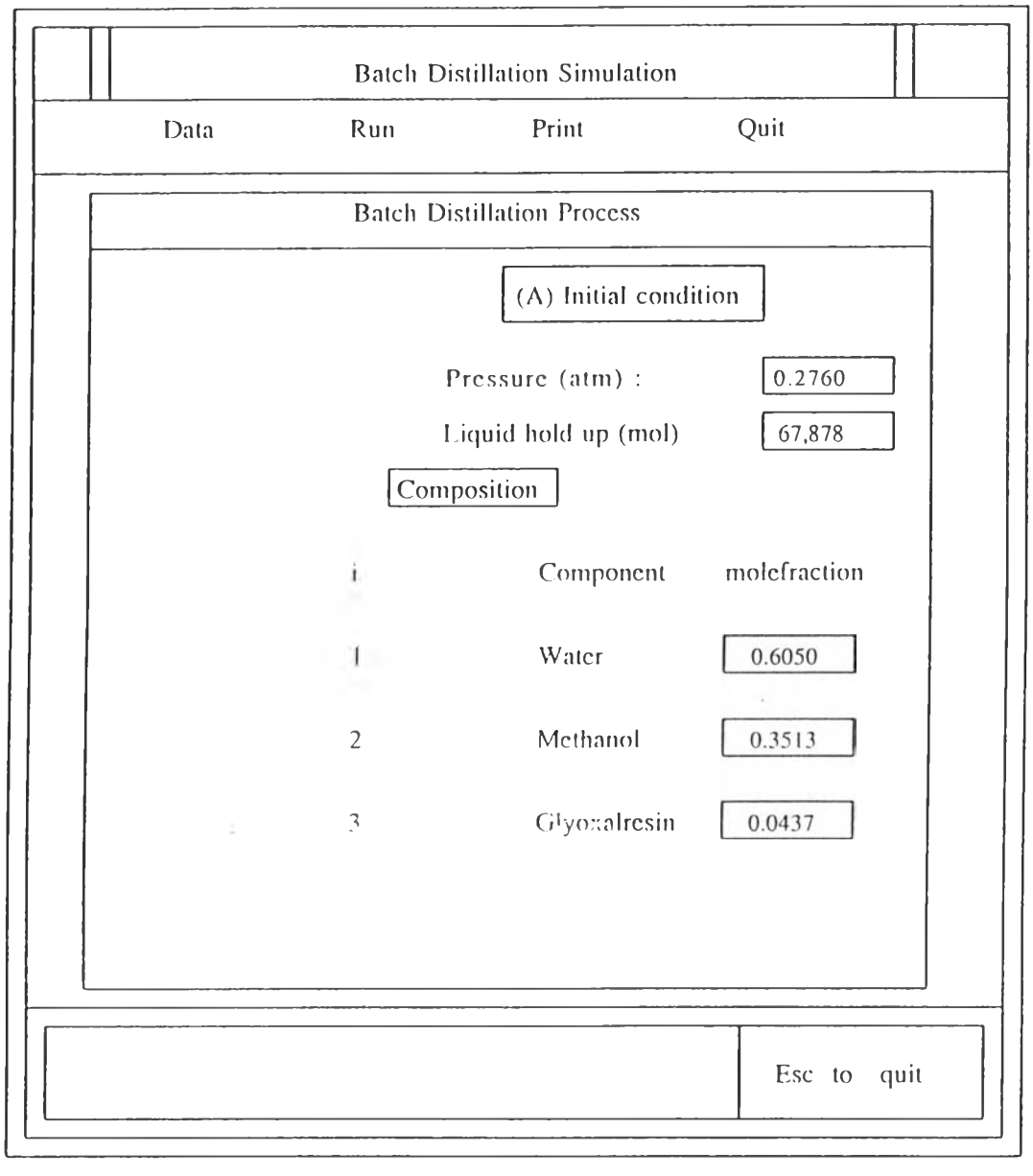
หลังจากที่ผู้ใช้เรียก batchsim ทำงานเมนูหลักจะปรากฏจอภาพ แสดงดังรูปที่ 1 ประกอบด้วยเมนูหลักของหน่วยจัดการข้อมูล (DATA), หน่วยประมวลผล (RUN) หน่วยแสดงผล (Print) และส่วนออกจากโปรแกรม (Quit)



รูปที่ 1 เมนูหลักของ Batchsim

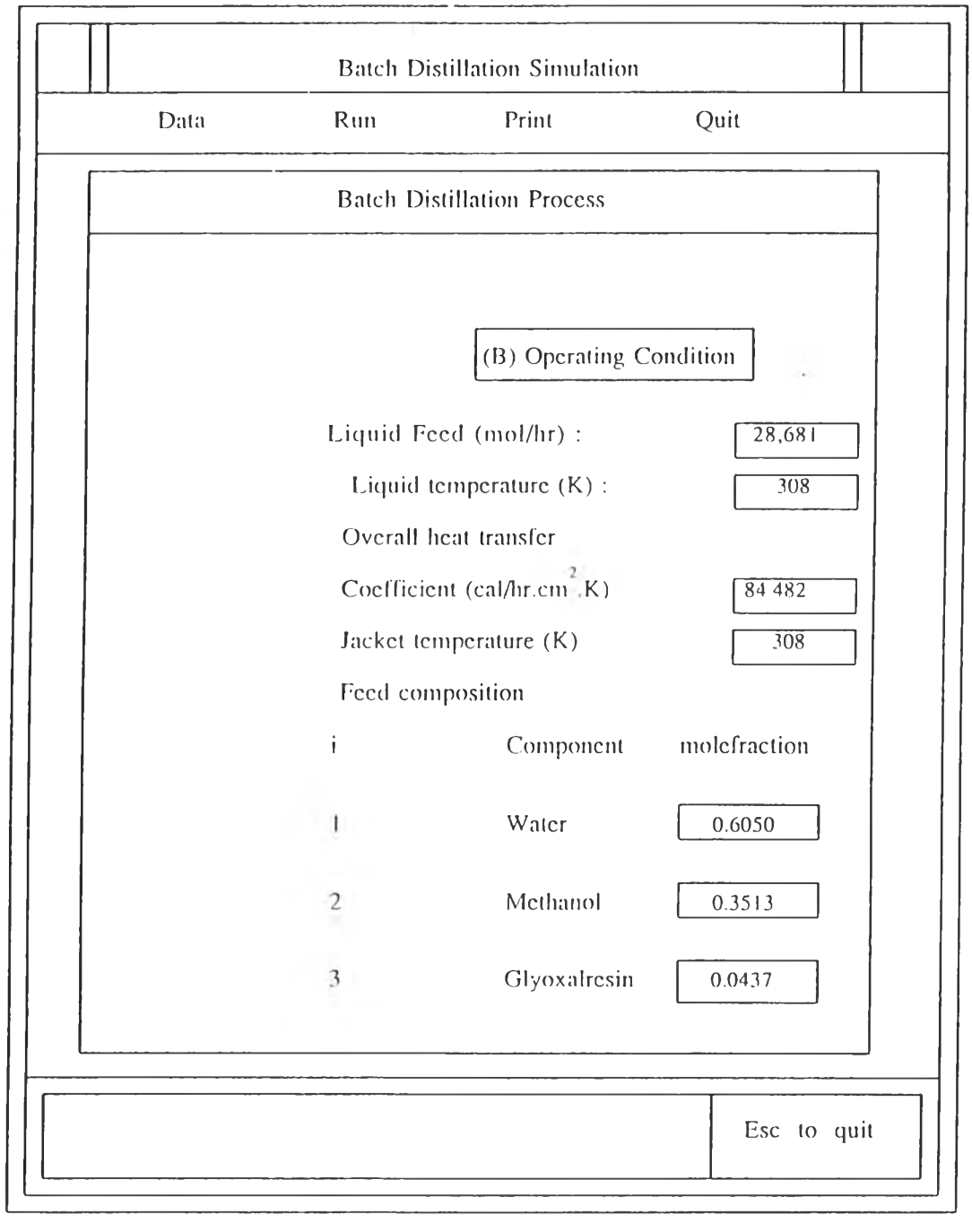
2. หน่วยจัดการข้อมูล

จากเมนูหลักเข้าสู่หน่วยจัดการข้อมูลโดยป้อน "D" จะปรากฏเมนูย่อยแสดงดังรูปที่ 2



รูปที่ 2 แสดงเมนูย่อยของหน่วยจัดการข้อมูล ในการป้อนค่า Initial Condition

จากเมนูย่อยรูปที่ 2 โปรแกรมกำหนดให้ป้อนค่าความดันของระบบ (บรรยากาศ) ปริมาณของผสมในถังปฏิกรณ์เคมีเริ่มต้น (โมล) และค่าเศษส่วนโมลในถังปฏิกรณ์เคมีเริ่มต้นขององค์ประกอบ น้ำ เมทานอล และไกลออกซอลเรซิน เมื่อป้อนค่าครบตามที่กำหนดจะปรากฏเมนูย่อย ดังรูปที่ 3

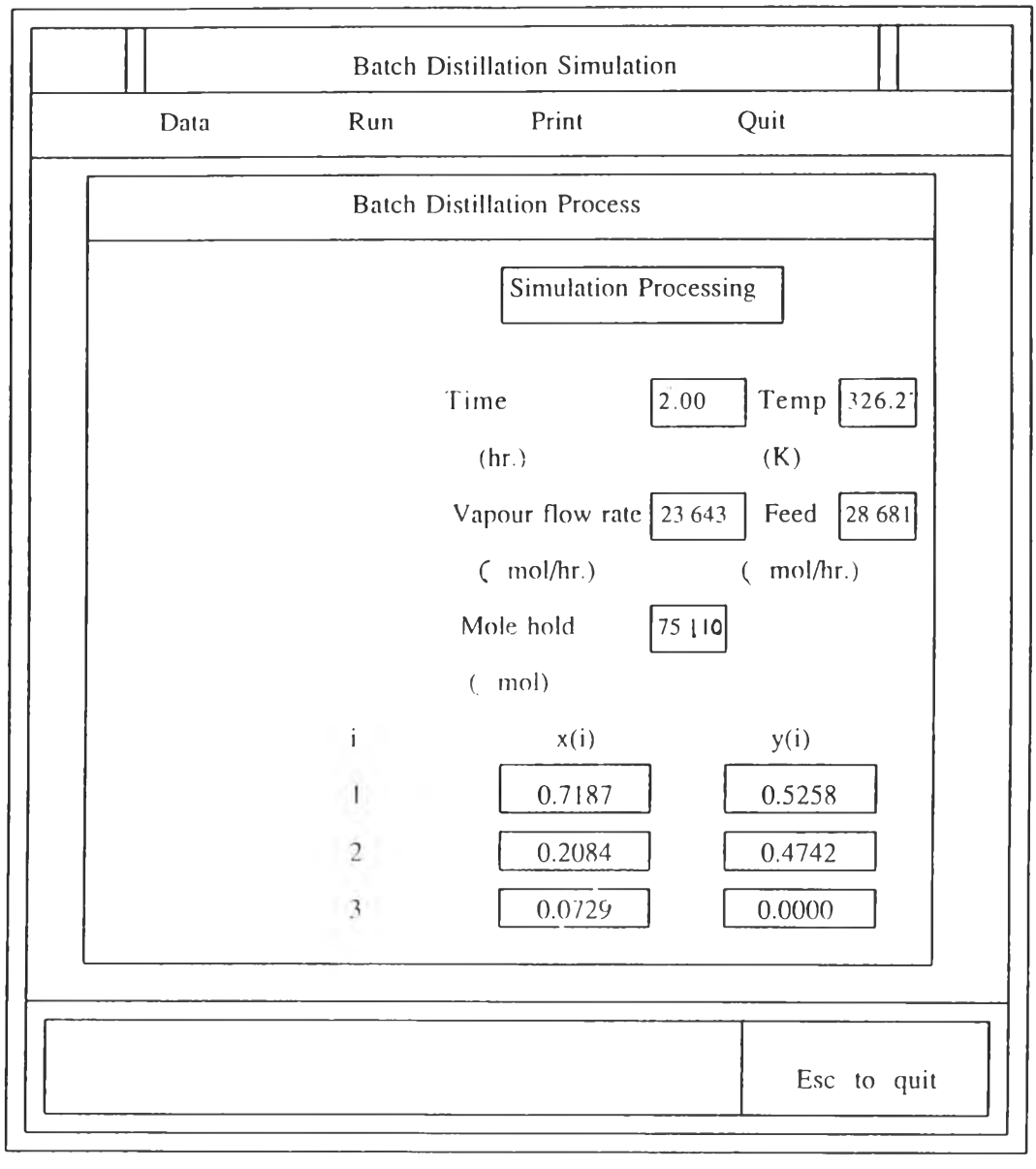


รูปที่ 3 แสดงเมนูย่อยของหน่วยจัดการข้อมูล ในการป้อนค่า Operating Condition

จากเมนูย่อยรูปที่ 3 โปรแกรมกำหนดให้ป้อนค่าอัตราการไหลของสายป้อน (โมล/ชั่วโมง) อุณหภูมิของสายป้อน (เคลวิน) ค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวม (แคลอรี่/ชม.ซม^2.เคลวิน) อุณหภูมิ Jacket (เคลวิน) และค่าเศษส่วนโมลขององค์ประกอบ น้ำ เมทานอล และไกลออกซอลเรซินในสายป้อน เมื่อป้อนค่าครบโปรแกรมจะกำหนดให้กลับไปที่เมนูหลัก รูปที่ 1

3. หน่วยประมวลผล

จากเมนูหลักป้อนค่า "R" เพื่อดูการประมวลผล ซึ่งแสดงดังรูปที่ 4 ระหว่างการประมวล หากต้องการทราบข้อมูลที่เวลาใด ๆ ให้กด "Pause Break" และหากต้องการให้โปรแกรมประมวลผลต่อให้กด "Esc"



รูปที่ 4 แสดงเมนูย่อยของหน่วยประมวลผล

4. หน่วยแสดงผล

ในกรณีที่ต้องการผลเป็นเอกสารให้ป้อน "P" เพื่อพิมพ์เอกสาร

5. การออกจากโปรแกรม

ป้อน "Q" หรือ "Esc" เพื่อกลับสู่สภาวะดอส

ง.2 โปรแกรมคอมพิวเตอร์ และ ตัวอย่างการประมวลผล

โปรแกรมคอมพิวเตอร์ของการจำลองการกลั่น

```
/* ::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::
   :::::: Batch distillation simulation                          ::::::
   :::::: Program : batchsim.c                                   ::::::
   :::::: Description : To predict the optimal                   ::::::
   ::::::    operating condition  for methanol                   ::::::
   ::::::    distillation in batch  processing                   ::::::
   :::::: Programmer : Mr.Sombat Intavichai                      ::::::
   :::::: Last update  : April  21, 1996                         ::::::
   ::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::::
*/

#include <dos.h>
#include <dir.h>
#include <math.h>
#include <conio.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <stdarg.h>
#include <graphics.h>
#include <ctype.h>

#define ESC         0x1b                    /* Define the escape key      */
#define TRUE        1                       /* Define some handy constants    */
#define FALSE       0                       /* Define some handy constants    */
#define PI          3.14159                 /* Define a value for PI      */
#define ON          1                       /* Define some handy constants    */
#define OFF         0                       /* Define some handy constants    */
#define TIMEPRINT 25

            /* ::::  Function prototypes :::: */
void  arrow(int x1,int y1,int x2,int y2,int status);
void  data();
void  valid(float x[250],float desire[250],float cross[250],float desire2[250]);
void  reactor(int lx,int ly,int rx,int ry);
void  run();
void  icon(int x1, int y1, int x2, int y2);
void  Initialize(void);
void  mainbox(int minx, int miny, int maxx, int maxy,int upcolor,int lowcolor);
void  mainbox2(int minx,int miny,int maxx, int maxy, int upcolor, int lowcolor);
void  shadow1(int x1, int y1, int x2, int y2, int color);
void  shadow2(int x1, int y1, int x2, int y2, int color);
void activity();
void enthalpy();
void bbpoint();
void composition();

            /* ::::  Global  variable :::: */

float xi[4]= {.6050,.3513,.0000000000001,.0437};
float xfi[4]= {.6050,.3513,.00000000000001,.0437};
float yi[4] =  {0.0,0.0,0.0,0.0};
float tsat[4],psat[4], feed= 28681, loopcheck = 0, step = 0.01;
float actvy[4],vflow = 0, molhold = 67878;
float q,temp ,vrate,hold,preasur=.2763;
float ventpy, lentpy, fentpy,time = 0.0;
float u = 84.482, tj = 394.4, area = 39700;

          /* ::::: global variable for graphic ::::: */
```

```
int  maxx, maxy;    /* The maximum resolution of the screen */
int  MaxColors;                  /* The maximum # of colors available */
int  inputsize, outputsize , hidlayer = 1;
int  act_num1 = 1, act_num2 = 1; /* 1 : hidden ,2: output activation func*/
int  layer[4] = {6,5,5,1};
int  pattern,rawdata=1,pastout ;
int  globax,globbx,globcx,globdx ;
int  exit_status=0;
float AspectRatio;
struct  palettetype palette;                /* Used to read palette info
char    *s;
void    *buffer;
unsigned size;

 struct viewporttype vp;
 static char patterns[][8] = {
   { 0xAA, 0x55, 0xAA, 0x55, 0xAA, 0x55, 0xAA, 0x55 },
   { 0xFF, 0x12, 0xFF, 0x12, 0xFF, 0x12, 0xFF, 0x12 },
   { 0x6A, 0x55, 0x6A, 0x55, 0x6A, 0x55, 0x6A, 0x55 },
   { 0x69, 0x44, 0x69, 0x44, 0x69, 0x44, 0x69, 0x69 },
   { 0x58, 0x33, 0x58, 0x33, 0x58, 0x33, 0x58, 0x33 },
   { 0xA1, 0x81, 0xA1, 0x81, 0xA1, 0x81, 0xA1, 0x81 },
   { 0x1A, 0x1C, 0x1A, 0x1C, 0x1A, 0x1C, 0x1A, 0x1C },
   { 0xA9, 0x55, 0xA9, 0x55, 0xA9, 0x55, 0xA9, 0x55 },
   { 0xAC, 0xAC, 0xAC, 0xAC, 0xAC, 0xAC, 0xAC, 0xAC },
   { 0xFF, 0x7E, 0x3C, 0x18, 0x18, 0x3C, 0x7E, 0xFF },
   { 0xAA, 0x45, 0xAA, 0x45, 0xAA, 0x45, 0xAA, 0x45 },
   { 0x33, 0x33, 0xCC, 0xCC, 0x33, 0x33, 0xCC, 0xCC }
 };


void main()
{
 char *title1 = " D          R          P          Q";
 char *title2 = "  ata       un          rint       ntt";
 char *title3 = "Batch Distillation Simulation";
 char *title4 = "Esc to quit";
 char ans,qqq;
 int i,s,c,minx,miny;

 Initialize();                  /* Set system into Graphics mode       */
 setbkcolor(LIGHTBLUE);

 minx = 0; miny = 0;

 setcolor(DARKGRAY);
 setfillstyle(SOLID_FILL,YELLOW);
 bar(180,95,380,140);
 size =imagesize(200,110,262,130);
 buffer = malloc(size);
 getimage(200,110,262,130,buffer);

 mainbox(minx,miny,maxx,maxy,MAGENTA,CYAN);
 shadow1(minx+28,miny+6,maxx-28,miny+24,LIGHTBLUE);

 line(minx+6,miny+50,maxx-6,miny+50);
 setfillstyle(SOLID_FILL,LIGHTBLUE);
 bar(minx+6,miny+26,maxx-5,miny+50);

 setcolor(WHITE);line(minx+6,maxy-29,maxx-6,maxy-29);
 shadow1(minx+10,maxy-27,minx+400,maxy-8,RED);
 shadow1(minx+402,maxy-27,minx+500,maxy-8,RED);
 shadow1(minx+502,maxy-27,minx+620,maxy-8,RED);
 setcolor(WHITE);outtextxy(200,10,title3);

 setcolor(YELLOW);outtextxy(515,458,title4);
 outtextxy(40,35,title1);
```

```
  setcolor(WHITE);
  outtextxy(42,35,title2);
  setcolor(RED);
  s = 1;
  do
  {
     do
     {
          ans = toupper(getch() );
          setfillstyle(SOLID_FILL,WHITE);
          bar(minx+16,miny+60,maxx-16,maxy-35);
          if(ans == 'Q'|| ans == ESC  )
          {
            closegraph();
            exit(1);
            s = 0;
          }
          switch (ans)
          {
           case 'D':
             putimage(36,28,buffer,XOR_PUT);
             shadow1(37,29,97,47,DARKGRAY);
             data();
             setcolor(LIGHTGRAY);rectangle(37,29,97,47);
             putimage(36,28,buffer,XOR_PUT);
             break;
           case 'R' :
             putimage(150,28,buffer,XOR_PUT);
             shadow1(151,29,211,47,DARKGRAY);
             run();
             setcolor(LIGHTGRAY);rectangle(151,29,211,47);
             putimage(150,28,buffer,XOR_PUT);
             time = 0.0;
             break;
           case 'P' :
             putimage(290,28,buffer,XOR_PUT);
             shadow1(291,29,351,47,DARKGRAY);
             run();
             setcolor(LIGHTGRAY);rectangle(291,29,351,47);
             putimage(290,28,buffer,XOR_PUT);
             time = 0.0;
             break;
          }
     } while(!strchr("DRPQ",ans) );

  } while( s== 1);
}


void data()
{
  int a,b,x,sign,i,j,k,m,n,p,numran;
  int lx,rx,ly,ry,cx,cy;    /* graphics parameter for locate on screen */

  lx = 40,rx=600,ly = 80,ry =430; cx =  (rx+lx)/2;cy = (ly+ry)/2;
  mainbox2(lx,ly,rx,ry,CYAN,LIGHTGRAY);
  reactor(lx+10,ly+30,cx-5,ry-30);                    /*display CSTR */
  outtextxy(lx+185,ly+10,"Batch Distillation Process");

  /*  :::::::::::::: Input Data :::::::::::::: */

  setcolor(BLUE);
  setfillstyle(SOLID_FILL,LIGHTGRAY);
  bar(cx,ly+30,rx-10,ry-30);
  shadow2(cx,ly+30,rx-10,ry-30,DARKGRAY);

  setfillstyle(SOLID_FILL,MAGENTA);
```

```
 line(cx-18,cy+25,cx+18,cy+25);
 shadow2(cx-28,cy+15,cx-18,cy+35,DARKGRAY);
 shadow2(cx+18,cy+15,cx+28,cy+35,DARKGRAY);
 shadow2(cx-10,cy-105,cx+10,cy-85,DARKGRAY);
 outtextxy(cx-3,cy-100,"M");

 /* LEGEND  */ setcolor(RED);
 outtextxy(cx-110,cy-100,"Ff");
 outtextxy(cx-110,cy-85,"xfi");
 outtextxy(cx-105,cy-32,"Qb");
 outtextxy(cx-105,cy+5,"Jacket");
 outtextxy(cx-123,cy+15,"Heat flux");
}

void run(void)
{
  int a,b,x,sign,i,j,k,m,n,p,numran;
  int lx,rx,ly,ry,cx,cy;    /* graphics parameter for locate on screen */

   lx = 40,rx=600,ly = 80,ry =430; cx =  (rx+lx)/2;cy = (ly+ry)/2;
   mainbox2(lx,ly,rx,ry,CYAN,LIGHTGRAY);
   reactor(lx+10,ly+30,cx-5,ry-30);                    /*display CSTR */
   outtextxy(lx+185,ly+10,"Batch Distillation Process");

   setcolor(BLUE);
   setfillstyle(SOLID_FILL,LIGHTGRAY);
   bar(cx,ly+30,rx-10,ry-30);
   shadow2(cx,ly+30,rx-10,ry-30,DARKGRAY);

   setfillstyle(SOLID_FILL,MAGENTA);
   bar(cx+25,ly+35,rx-30,ly+55);
   shadow2(cx+25,ly+35,rx-30,ly+55,DARKGRAY);
   outtextxy(cx+35,ly+45,"  Simulation processing");
   setcolor(MAGENTA);
   outtextxy(cx+20,ly+67,"Time");outtextxy(cx+20,ly+77,"<hr.>");
   outtextxy(cx+125,ly+67,"Temp.<'C>");
   outtextxy(cx+20,ly+115,"Vapour");outtextxy(cx+20,ly+125,"flow");
   outtextxy(cx+20,ly+135,"rate<kmol/hr>");
   outtextxy(cx+125,ly+115,"Feed");outtextxy(cx+125,ly+125,"<kmol/hr>");
   outtextxy(cx+20,ly+163,"Mole hold");outtextxy(cx+20,ly+173,"<kmol>");
 setcolor(YELLOW);
 outtextxy(cx+15,ly+200,"  i     xi[i]          yi[i]");

 bbpoint();
 gotoxy(50,10);printf("%3.2f",time);
 gotoxy(67,10);printf("%3.2f",temp);
 gotoxy(50,13);printf("%6.3f",vflow);
 gotoxy(67,13);printf("%6.3f",feed);
 gotoxy(55,16);printf("%6.3f",molhold);

    gotoxy(45,20);printf("1");
    gotoxy(45,22);printf("2");
    gotoxy(45,24);printf("3");
    gotoxy(50,20);printf("%8.4f",xi[0]);
    gotoxy(50,22);printf("%8.4f",xi[1]);
    gotoxy(50,24);printf("%8.4f",xi[3]);
    gotoxy(63,20);printf("%8.4f",yi[0]);
    gotoxy(63,22);printf("%8.4f",yi[1]);
    gotoxy(63,24);printf("%8.4f",yi[3]);


for(i=0; i<625; i++)          /* 6hr >= step 0.01 * timeprint 25 * 25 */
{
 bbpoint();

 if(loopcheck >= TIMEPRINT)
 {
```

```
  gotoxy(65,24);scanf("%f",&xfi[3]);
  xfi[2] = 0.00000000000001;

}

void reactor(int lx,int ly,int rx,int ry)
{
 int cx,cy,i;
 cx = (lx+rx)/2;
 cy = (ly+ry)/2;

  setcolor(BLUE);
  line(cx-34,cy-10,cx+34,cy-10);              /* reactor level */
  setcolor(RED);
  outtextxy(cx-28,cy-25,"ybi");
  outtextxy(cx+15,cy-25,"Vb");
  outtextxy(cx+15,cy,"Mb");
  outtextxy(cx-28,cy,"xbi");

 setcolor(BLUE);
  arc(cx,cy+40,270,360,35);             /* reactor & condenser */
  arc(cx,cy+40,188,270,35);
  arc(cx,cy-40,0,180,35);
  line(cx+35,cy-45,cx+35,cy+45);
  line(cx-35,cy-45,cx-35,cy+45);

  line(cx+45,cy-35,cx+45,cy+50);       /* jacket */
  line(cx-45,cy-35,cx-45,cy+50);
  arc(cx+35,cy-35,0,90,10);
  arc(cx-35,cy-35,90,180,10);
  arc(cx+35,cy+50,250,360,10);
  arc(cx-35,cy+50,180,290,10);
  arrow(cx-100,cy-15,cx-45,cy-15,1);      /* jacket feed */
  line(cx-100,cy,cx-100,cy-15);
  outtextxy(cx-27,cy+90,"REACTOR");

  arc(cx+70,cy+95,90,270,20);                        /* condenser */
  arc(cx+105,cy+95,270,90,20);
  line(cx+70,cy+75,cx+105,cy+75);
  line(cx+70,cy+115,cx+105,cy+115);
  line(cx+50,cy+95,cx+125,cy+95);
  outtextxy(cx+50,cy+130,"RECIEVER");


  line(cx+26,cy-63,cx+26,cy-115);        /* line condenser */
  line(cx+26,cy-115,cx+70,cy-115);
  arrow(cx+70,cy-115,cx+70,cy-85,3);
  circle(cx+70,cy-75,10);
  setcolor(MAGENTA);
  arrow(cx+70,cy-65,cx+70,cy+75,3);
  settextstyle(0,VERT_DIR,1);
  outtextxy(cx+95,cy-105,"Condenser");
  line(cx+100,cy+75,cx+100,cy+45);
  arrow(cx+100,cy+45,cx+115,cy+45,1);
  setcolor(RED);
  settextstyle(0,HORIZ_DIR,1);
  outtextxy(cx+78,cy+20,"To Vac.");
  outtextxy(cx+90,cy+30,"pump");
  outtextxy(cx+50,cy+45,"Fd");
  outtextxy(cx+45,cy+60,"Xdi");

setcolor(BLUE);
line(cx-70,cy-80,cx-30,cy-80);       /* line feed */
arrow(cx-30,cy-80,cx-30,cy-60,3);

setcolor(DARKGRAY);
line(cx,cy-85,cx,cy+25);             /* motor & agitator */
```

```
bar(cx+25,ly+35,rx-30,ly+55);
shadow2(cx+25,ly+35,rx-30,ly+55,DARKGRAY);

outtextxy(cx+35,ly+45," (A) Initial condition");
outtextxy(cx+20,cy-105,"Pressure      <atm> :");
outtextxy(cx+20,cy-75,"liquid hold up <kmol>:");
shadow1(rx-77,cy-114,rx-20,cy-92,DARKGRAY);
shadow1(rx-77,cy-82,rx-20,cy-60,DARKGRAY);
gotoxy(67,10);scanf("%f",&pressur);
gotoxy(67,12);scanf("%f",&molhold);

setcolor(BLUE);
outtextxy(cx+25,cy-55,"Composition ::");
outtextxy(cx+25,cy-35,"i  Component  Mole fraction");
shadow2(cx+20,cy-60 ,cx+120,cy-45,DARKGRAY);

setcolor(RED);
outtextxy(cx+25,cy-10,"1  Water  ");
outtextxy(cx+25,cy+20,"2  Methanol");
outtextxy(cx+25,cy+50,"3  Glyoxal Resin");
shadow1(rx-95,cy-19,rx-35,cy+5,DARKGRAY);
shadow1(rx-95,cy+11,rx-35,cy+35,DARKGRAY);
shadow1(rx-95,cy+43,rx-35,cy+67,DARKGRAY);
gotoxy(65,16);scanf("%f",&xi[0]);
gotoxy(65,18);scanf("%f",&xi[1]);
gotoxy(65,20);scanf("%f",&xi[3]);
xi[2] = 0.00000000000001;

/* :::::::::: Input data for operating condition :::::::::::::: */

setfillstyle(SOLID_FILL,LIGHTGRAY);
bar(cx,ly+30,rx-10,ry-30);
shadow2(cx,ly+30,rx-10,ry-30,DARKGRAY);
setfillstyle(SOLID_FILL,MAGENTA);
bar(cx+25,ly+35,rx-30,ly+55);
shadow2(cx+25,ly+35,rx-30,ly+55,DARKGRAY);
outtextxy(cx+35,ly+45," (B) Operating condition");
setcolor(MAGENTA);
outtextxy(cx+20,cy-105,"Liquid feed  <kmol/hr>:");
outtextxy(cx+20,cy-75, "Liquid temperature <K>:");
outtextxy(cx+20,cy-45,"Overall heat transfer :");
outtextxy(cx+20,cy-35,"coeff.<kcal/hr.m2.K>  ");
outtextxy(cx+20,cy-15, "Jacket Temperature <K>:");

shadow1(rx-74,cy-114,rx-20,cy-92,DARKGRAY);
shadow1(rx-74,cy-82,rx-20,cy-60,DARKGRAY);
shadow1(rx-74,cy-54,rx-20,cy-30,DARKGRAY);
shadow1(rx-74,cy-24,rx-20,cy+3,DARKGRAY);
gotoxy(67,10);scanf("%f",&feed);
gotoxy(67,12);scanf("%f",&temp);
gotoxy(67,14);scanf("%f",&u);
gotoxy(67,16);scanf("%f",&tj);

setcolor(BLUE);
outtextxy(cx+25,cy+5,"Feed composition ::");
outtextxy(cx+25,cy+25,"i  Component  Mole fraction");
shadow2(cx+20,cy ,cx+160,cy+15,DARKGRAY);

setcolor(RED);
outtextxy(cx+25,cy+50,"1  Water  ");
outtextxy(cx+25,cy+80,"2  Methanol");
outtextxy(cx+25,cy+110,"3  Glyoxal Resin");
shadow1(rx-90,cy+44,rx-35,cy+70,DARKGRAY);
shadow1(rx-90,cy+73,rx-35,cy+100,DARKGRAY);
shadow1(rx-90,cy+108,rx-35,cy+133,DARKGRAY);
gotoxy(65,20);scanf("%f",&xfi[0]);
gotoxy(65,22);scanf("%f",&xfi[1]);
```

```
    delay(5000);
    gotoxy(50,10);printf("%3.2f",time);
    gotoxy(67,10);printf("%3.2f",temp);
    gotoxy(50,13);printf("%6.3f",vflow);
    gotoxy(67,13);printf("%6.3f",feed);
    gotoxy(55,16);printf("%6.3f",molhold);

    gotoxy(45,20);printf("1");
    gotoxy(45,22);printf("2");
    gotoxy(45,24);printf("3");
    gotoxy(50,20);printf("%8.4f",xi[0]);
    gotoxy(50,22);printf("%8.4f",xi[1]);
    gotoxy(50,24);printf("%8.4f",xi[3]);
    gotoxy(63,20);printf("%8.4f",yi[0]);
    gotoxy(63,22);printf("%8.4f",yi[1]);
    gotoxy(63,24);printf("%8.4f",yi[3]);

    loopcheck = 0;
   }

   loopcheck = loopcheck + 1;
   enthalpy();
   composition();
  }
}

/*        INITIALIZE: Initializes the graphics system and reports    */

void Initialize(void)
{
 int i,hy,ht,xmax,xasp, yasp;                    /* Used to read the aspect ratio*/
 int    GraphDriver;                    /* The Graphics device driver                */
 int    GraphMode;                      /* The Graphics mode value                   */
 int    ErrorCode;              /* Reports any graphics errors                       */
 struct palettetype pal;

 GraphDriver = DETECT;      /* VGA=>IBM8514LO  Request auto-detection               */
 initgraph( &GraphDriver, &GraphMode, "" );
 ErrorCode = graphresult();              /* Read result of initialization*/
 if( ErrorCode != grOk ){                /* Error occured during init  */
  printf(" Graphics System Error: %s\n", grapherrormsg( ErrorCode ) );
  exit( 1 );
 }
 getpalette( &palette );                 /* Read the palette from board          */
 MaxColors = getmaxcolor() + 1;          /* Read maximum number of colors*/

 maxx = getmaxx();
 maxy = getmaxy();                               /* Read size of screen                 */

 getaspectratio( &xasp, &yasp );         /* read the hardware aspect   */
 AspectRatio = (double)xasp / (double)yasp; /* Get correction factor            */

}

void arrow(int x1,int y1,int x2,int y2,int status)
{
 line(x1,y1,x2,y2);
 if(status == 1)                 /* left to rigth */
          {
           line(x2-5,y2-5,x2,y2); line(x2-5,y2+5,x2,y2);
          }
 else if(status == 2)                    /* rigth to left */
    {
          line(x2+5,y2-5,x2,y2); line(x2+5,y2+5,x2,y2);
    }
 else if(status == 3)                    /* up to down */
          {
```

```
            line(x2-5,y2-5,x2,y2); line(x2+5,y2-5,x2,y2);
           }
  else if(status == 4)                    /* down to up */
           {
            line(x2-5,y2+5,x2,y2); line(x2+5,y2+5,x2,y2);
           }
 }

 void mainbox(int minx, int miny, int maxx, int maxy, int upcolor, int lowcolor)
 {
  setfillstyle(SOLID_FILL,lowcolor);
  setcolor(DARKGRAY);
  bar(minx+2,miny+2,maxx-2,maxy-2);
  rectangle(minx+2,miny+2,maxx-2,maxy-2);
  setfillstyle(SOLID_FILL,WHITE);
  bar(minx+5,miny+5,maxx-5,maxy-5);
  rectangle(minx+5,miny+5,maxx-5,maxy-5);
 /*  setfillstyle(SOLID_FILL,upcolor);  */
  setfillpattern(&patterns[0][0],upcolor);
  bar(minx+6,miny+6,maxx-6,miny+25);
  line(minx+2,miny+25,maxx-2,miny+25);
  setfillstyle(SOLID_FILL,lowcolor);
  bar(minx+6,maxy-30,maxx-6,maxy-6);
  line(minx+2,maxy-30,maxx-2,maxy-30);
  icon(minx+6,miny+6,minx+26,miny+25);
  icon(maxx-26,miny+6,maxx-6,miny+25);
 }

 void mainbox2(int minx,int miny,int maxx, int maxy, int upcolor, int lowcolor)
 {
  float cx,cy,rx,ry;
  int style = 11;

  cx = (minx+maxx)/2;                     /* center of box */
  setfillpattern( &patterns[0][0], GREEN);
  bar(minx+15,miny+15,maxx+15,maxy+15);
  setfillstyle(SOLID_FILL,MAGENTA);
  setcolor(DARKGRAY);
  bar(minx+2,miny+2,maxx-2,maxy-2);
  rectangle(minx+2,miny+2,maxx-2,maxy-2);

  setfillpattern( &patterns[0][0], YELLOW);
 /*  setfillstyle(INTERLEAVE_FILL,YELLOW);   */
  bar(minx+5,miny+5,maxx-5,maxy-5);
  setfillstyle(SOLID_FILL,LIGHTGRAY);
  bar(minx+10,miny+30,cx-5,maxy-30);
  shadow1(minx+11,miny+31,cx-6,maxy-31,DARKGRAY);
  rectangle(minx+5,miny+5,maxx-5,maxy-5);

  setfillstyle(SOLID_FILL,upcolor);
  bar(minx+6,miny+6,maxx-6,miny+25);
  line(minx+2,miny+25,maxx-2,miny+25);

  setfillstyle(SOLID_FILL,lowcolor);
  bar(minx+6,maxy-25,maxx-6,maxy-6); setcolor(WHITE);
  line(minx+6,maxy-25,maxx-6,maxy-25);
  shadow1(minx+8,maxy-23,maxx-8,maxy-8,DARKGRAY);
  icon(minx+6,miny+6,minx+26,miny+25);
  icon(maxx-26,miny+6,maxx-6,miny+25);
 }

 void shadow1(int x1, int y1, int x2, int y2, int color)
 {
  setcolor(WHITE);
  moveto(x1,y2); lineto(x2,y2); lineto(x2,y1);
  setcolor(color); lineto(x1,y1); lineto(x1,y2);
 }
```

```
void shadow2(int x1, int y1, int x2, int y2, int color)
{
 setcolor(color);
 moveto(x1,y2); lineto(x2,y2); lineto(x2,y1);
 setcolor(WHITE); lineto(x1,y1); lineto(x1,y2);
}

void icon(int x1, int y1, int x2, int y2)
{
 int i,j,k;

 setfillstyle(SOLID_FILL,CYAN);
 bar(x1,y1,x2,y2-1);
 shadow1(x1,y1,x2,y2-1,DARKGRAY);
 i = (x1+x2)/2; j = (y1+y2)/2;
 shadow2(i-5,j-3,i+5,j+3,DARKGRAY);
}

void activity()
{
 int i,j,k,m,n;
 float tempo,tempo1,tempo2,tempo3,tempo4;
 float afrac[6],sfrac[6],ri[4],li[4],qi[4];
 float tempoc[4],xm[6],xmi[4][6],sm[6],smi[4][6];
 float rk[6] = {.92,1.4311,0.9183,0.6744,1.145,4.2359};
 float qk[6] = {1.4,1.4320,0.7800,0.5400,1.088,3.6800};
 float actvyc[4],actvyr[4];
 float intrcn[6][6],resdli[4][6],resdlk[6];

 /* :: number of group in molecule :: */
 float mk[4][6] = {{1,0,0,0,0,0},
                   {0,1,0,0,0,0},
                   {0,0,1,0,0,0},
                   {0,0,0,2,2,1}};

 /* ::::::: interaction parameter ::::::::::: */
 float amk[6][6] = {{0.0000,289.60,540.50,300.00,540.50,1820.322},
                    {-181.0,0.0000,-128.6,16.510,-128.6,2246.986},
                    {-314.7,238.40,0.0000,83.360,0.0000,2186.714},
                    {1318.0,679.20,251.50,0.0000,251.50,8241.070},
                    {-314.7,238.40,0.0000,83.360,0.0000,2186.741},
                    {89.582,-304.982,-256.165,4957.725,-256.165,0}};

 /* ::::::::: find ri ::::::::::: */

 for(i=0;i<4;i++)
 {
   ri[i] = 0;
   for(j=0;j<6;j++)
         ri[i] = ri[i] + mk[i][j] * rk[j];
 }

 /* ::::::::: find qi ::::::::::: */

 for(i=0;i<4;i++)
 {
   qi[i] = 0;
   for(j=0;j<6;j++)
         qi[i] = qi[i] + mk[i][j] * qk[j];
 }

 /* ::::::::: find li ::::::::::: */

 for(i=0;i<4;i++)
         li[i] = 5*(ri[i] - qi[i]) - (ri[i] - 1);
```

```
/* ::::: find segment fraction, sfrac[i] ::::: */
for(i=0;i<4;i++)
{
  sfrac[i] = ri[i] * xi[i];
  tempo = 0;
  for(j=0;j<4;j++)
        tempo = tempo + ri[j]*xi[j];
  sfrac[i] = sfrac[i] / tempo;
}

/* ::::: find area fraction, afrac[i] ::::: */
for(i=0;i<4;i++)
{
  afrac[i] = qi[i] * xi[i];
  tempo = 0;
  for(j=0;j<4;j++)
        tempo = tempo + qi[j]*xi[j];

  afrac[i] = afrac[i] / tempo;
}
/* ::::: find activity combinatorial part, actvyc[i] ::::: */
for(i=0;i<4;i++)
{
  tempoc[i] = 0;
  for(j=0;j<4;j++)
  {
        tempoc[i] = tempoc[i] + li[j]*xi[j];
  }
  actvyc[i]=log(sfrac[i]/xi[i])+5*qi[i]*log(afrac[i]/sfrac[i])+li[i]-sfrac[i]/xi[i]*tempoc[i];
}
/* ::::::: find group fraction in molecule i, xmi :::::::: */

for(i=0;i<4;i++)
{
  for(j=0;j<6;j++)
  {
        tempo = 0;
        for(k=0;k<6;k++)
          tempo = tempo + mk[i][k];

        xmi[i][j] = mk[i][j]/tempo;
  }
}
/* ::::::: find group fraction in mixture , xm :::::::: */

for(j=0;j<6;j++)
{
  tempo2 = 0;
  for(i=0;i<4;i++)
        tempo2 = tempo2 + mk[i][j]*xi[i];

  tempo = 0;
  for(k=0;k<6;k++)
        for(i=0;i<4;i++)
          tempo = tempo + mk[i][k]*xi[i];

  xm[j] = tempo2/tempo;
}

/* ::::::: find group surface area fraction in molecule i, smi :::::::: */

for(i=0;i<4;i++)
{
  for(j=0;j<6;j++)
  {
        tempo = 0;
        for(k=0;k<6;k++)
```

```
            tempo = tempo + qk[k]*xmi[i][k];

          smi[i][j] = qk[j]*xmi[i][j]/tempo;
    }
}

/* ::::::: find group surface area fraction in mixture, sm :::::::: */

for(i=0;i<6;i++)
{
          tempo = 0;
          for(k=0;k<6;k++)
            tempo = tempo + qk[k]*xm[k];

   sm[i] = qk[i]*xm[i]/tempo;
}

/* ::::: find interaction parameter, intrcn[i] :::::::::::: */

for(i=0;i<6;i++)
{
  for(j=0;j<6;j++)
  {
          intrcn[i][j] = exp(-amk[i][j]/temp);
  }
}

/*  find group residual activity coefficient in ref.soln i, resdli[i][k] */

for(i=0;i<4;i++)
{
  for(k=0;k<6;k++)
  {
          tempo1 = 0;  tempo2 =0;   tempo4 = 0;

          for(m=0;m<6;m++)
           tempo1 = tempo1 + smi[i][m]*intrcn[m][k] ;

          for(m=0;m<6;m++)
          {
           tempo3 = 0;

           for(n=0;n<6;n++)
           {
             tempo3 = tempo3 + smi[i][n]*intrcn[n][m] ;
           }
           tempo4 = (smi[i][m]*intrcn[k][m]);
           tempo2 = tempo2 + tempo4/tempo3 ;
          }
          resdli[i][k] =  qk[k]*( 1 - log(tempo1) - tempo2) ;
  }
}

/*  :::: find group residual activity coefficient, resdlk[k] :::: */

  for(k=0;k<6;k++)
  {
          tempo1 = 0; tempo2 =0; tempo4 = 0;

          for(m=0;m<6;m++)
           tempo1 = tempo1 + sm[m]*intrcn[m][k] ;

          for(m=0;m<6;m++)
          {
           tempo3 = 0;
           for(n=0;n<6;n++)
           {
```

```
            tempo3 = tempo3 + sm[k]*intrcn[n][m] ;
          }
          tempo4 = (sm[m]*intrcn[k][m]);
          tempo2 = tempo2 + tempo4/tempo3 ;
        }
        resdlk[k] = qk[k]*( 1-log(tempo1) - tempo2 );
    }

  /* :::: find activity residual part, actvyr[i] :::::::::::::: */

  for(i=0;i<4;i++)
  {
    actvyr[i] = 0;

    for(k=0;k<6;k++)
    {
          actvyr[i] = actvyr[i] + rnk[i][k]*(resdlk[k] - resdli[i][k]);
    }
/*      printf("i  activity residual %3d %8.4f\n",i+1,actvyr[i]);    */

  }
  /* :::::::: find activity, activy[i] ::::::::::::::::: */

    for(i=0;i<4;i++)
    {
          actvy[i] = exp(actvyr[i] + actvyc[i]);
/*        printf("i  activity  %3d %8.4f\n",i+1,actvy[i]);          */
    }

}

void bbpoint()
{
  int i,j,k,loop;
  float tempo,tempo1,tempo2;
  float vpheat[4]  = {9720.0,8592.0,5535.0,20075.0};
  float tboil[4]   = {373.2,337.7,254.0,699.4};
  float antoin[4]  = {52.908,46.163,30.26,114.866};
  float dtemp,error,temp1,vpresr[4],vpresk;

  /* :::::: calculate saturated temperature, tsat ::::: */
  for(i=0;i<4;i++)
  {
     tempo  = vpheat[i]*pow( (tboil[i]-antoin[i]) , 2);
  tempo1 = vpheat[i]*(tboil[i]-antoin[i])-1.91866*log(pressur)*pow(tboil[i],2);
     tsat[i] = tempo/tempo1 + antoin[i];
  }
  /* :::::: calculate temperature, temp :::::: */
  temp = 0;
  for(i=0; i<4 ; i++)
  {
     temp = temp + xi[i]*tsat[i];

  }
  /* :::::: calculate vapour pressur, vpresr :::::::::::: */

  for(i=0;i<4;i++)
  {
   tempo1=vpheat[i]*pow( (tboil[i]-antoin[i]),2)/(1.91866*tboil[i]*tboil[i]);
   tempo2 = 1/(tboil[i]-antoin[i]) - 1/(temp - antoin[i]);
   vpresr[i] = exp(tempo1 * tempo2);
  }

  /* :::: calculate vapour pressur k = 1 = water , vpresk :::: */

  activity();
  tempo1 = 0;
```

```
  for(i=0;i<4;i++)
    tempo1 = tempo1 + xi[i]*actvy[i]*vpresr[i]/vpresr[0] ;

  vpresk = pressur/tempo1;

  /* :::::: calculate temperature T :::::::::::: */

  tempo1 = vpheat[0] * pow( (tboil[0]-antoin[0]), 2);
  tempo2 = vpheat[0]*(tboil[0]-antoin[0])-1.91866*tboil[0]*tboil[0]*log(vpresk);
  temp   = (tempo1 / tempo2 ) + antoin[0];

  /* :::::: calculate vapour pressur, vpresr :::::::::::: */
  loop = 1;
  do
  {
   temp1 = temp;
   for(i=0;i<4;i++)
   {
    tempo1 = vpheat[i]*pow( (tboil[i]-antoin[i]),2)/(1.91866*tboil[i]*tboil[i]);
    tempo2 = 1/(tboil[i]-antoin[i]) - 1/(temp - antoin[i]);
    vpresr[i] = exp(tempo1 * tempo2);
   }

   /* :::::: calculate yi,i : yi[i] ::::::::::::::::::::: */

   for(i=0;i<4;i++)
   {
        yi[i] = xi[i] * actvy[i] * vpresr[i] / pressur;
   }
   loop++;
   /* :::: calculate vapour pressur k = 1 = water , vpresk :::: */

   activity();

   tempo1 = 0;
   for(i=0;i<4;i++)
    tempo1 = tempo1 + xi[i]*actvy[i]*vpresr[i]/vpresr[0] ;

    vpresk = pressur/tempo1;

   /* :::::: calculate temperature T :::::::::::: */

   tempo1 = vpheat[0] * pow( (tboil[0]-antoin[0]), 2);
   tempo2 = vpheat[0]*(tboil[0]-antoin[0])-1.91866*tboil[0]*tboil[0]*log(vpresk);
   temp   = (tempo1 / tempo2 ) + antoin[0];
   dtemp = temp1 - temp;
   error = sqrt(dtemp*dtemp);
   } while(error > 0.0001);

}

void enthalpy()
{
 int i,j,k ;
 float tf = 308.0;
 float cpl[4] = { 18.06, 20.51,14.32, 108.41 };
 float cpv[4] = { 8.05, 11.35, 8.53 , 57.90 };
 float cpf[4] = { 18.06, 20.51,14.32, 108.41 };
 float latents[4] = {10520, 8410, 5020, 30421};

 /* ::::::: find enthalpy of liquid & vapour :::::::::: */

 ventpy = 0;
 lentpy = 0;
 fentpy = 0;

 for(i=0;i<4;i++)
```

```
    lentpy = lentpy + xi[i]*cpl[i]*(temp - 298.15);

  for(i=0;i<4;i++)
    ventpy = ventpy + yi[i] * (cpv[i]*(temp - 298.15) + latents[i]);

  for(i=0;i<4;i++)
    fentpy = fentpy + xfi[i]* (cpf[i]*(tf - 298.15) );

}

void composition()
{
  int  i,j,k,m;
  float dmb,tempo,tempo2,tempo3;
  float k1,k2,k3,k4;
  float heat;

  /* :::::::::: find xi composition by Runge-kutta :::::::::::::: */
  k1 = 0;  k2 = 0;  k3 = 0;  k4 = 0;

   heat = u * area * (tj - temp);
   vflow  = (1/(ventpy-lentpy)) * ( feed*(fentpy-lentpy) + heat)  ;
   dmb  = (feed - vflow)*step;
   molhold  = dmb + molhold;

   if(time>=3.0)
         feed = 0.0;

   time = time + step;

   for(i=0;i<4;i++)
   {
   tempo = step/molhold;
   k1=tempo*(feed*(xfi[i] - xi[i]) - vflow*(yi[i]-xi[i]) );
   k2=tempo*(feed*(xfi[i] - (xi[i]+0.5*k1))-vflow*(yi[i]-(xi[i]+0.5*k1)));
   k3=tempo*(feed*(xfi[i] - (xi[i]+0.5*k2))-vflow*(yi[i]-(xi[i]+0.5*k2)));
   k4=tempo*(feed*(xfi[i] - (xi[i]+k3))-vflow*(yi[i]-(xi[i]+k3)));

   xi[i] = xi[i] + (0.16666667)*(k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4);

   }
}
```

ตัวอย่างการประมวลผล

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
0.00	320.7	0.0	28681.0	67878.0

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.6050	0.3202
2	METHANOL	0.3513	0.6798
3	RESIN	0.0437	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
0.50	322.6	25014.6	28681.0	69430.5

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.6516	0.3844
2	METHANOL	0.2967	0.6156
3	RESIN	0.0517	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
1.0	324.2	24078.0	28681.0	71513.3

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.6833	0.4397
2	METHANOL	0.2577	0.5603
3	RESIN	0.0590	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
1.50	325.3	23386.5	28681.0	74000.6

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.7035	0.4837
2	METHANOL	0.2310	0.5163
3	RESIN	0.0655	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
2.00	326.1	22897.3	28681.0	76779.9

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.7157	0.5168
2	METHANOL	0.2131	0.4832
3	RESIN	0.0713	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
2.50	326.6	22558.8	28681.0	79763.4

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.7223	0.5411
2	METHANOL	0.2012	0.4589
3	RESIN	0.0765	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
3.00	326.9	22326.9	28681.0	82887.3

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.7253	0.5585
2	METHANOL	0.1936	0.4415
3	RESIN	0.0811	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
3.50	328.4	23230.2	0.0	71695.5

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.7466	0.6302
2	METHANOL	0.1590	0.3698
3	RESIN	0.0943	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
4.00	329.8	22555.8	0.0	60257.1

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.7618	0.7061
2	METHANOL	0.1260	0.2939
3	RESIN	0.1123	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
4.50	330.9	22025.6	0.0	49121.5

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.7662	0.7796
2	METHANOL	0.0961	0.2204
3	RESIN	0.1378	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
5.00	332.0	21682.8	0.0	38204.3

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.7529	0.8453
2	METHANOL	0.0699	0.1547
3	RESIN	0.1773	0.0000

Time [hr.]	Temperature [K]	vapour flowrate [mol/hr]	Feed flowrate [mol/hr]	Molar hold up [mol]
5.50	333.4	21516.1	0.0	27411.1

i	Description	xi[i]	yi[i]
1	WATER	0.7055	0.8995
2	METHANOL	0.0472	0.1005
3	RESIN	0.2473	0.0000

ชีวประวัติ

นายสมบัติ อินต๊ะวิชัย เกิดเมื่อวันที่ 25 มีนาคม พ.ศ. 2507 สำเร็จการศึกษาในระดับชั้นมัธยมศึกษาปีที่ 5 จากโรงเรียนเวียงสา เมื่อ พ.ศ. 2525 สำเร็จปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาเคมี จากมหาวิทยาลัยเชียงใหม่ เมื่อ พ.ศ. 2530 ทำงานที่บริษัทสยามเรซินและเคมีภัณฑ์ จำกัด เมื่อ พ.ศ. 2530 - 2539