สมดุลไอ-ของเหลว สำหรับระบบสามองค์ประกอบของเบนซีน, โทลูอีน และเมตาไซลีน

นายทนง แก้ววิริยะกิจกูล

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2541

ISBN 974-332-453-4

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

I19236691 30 เม.ย. 2546

VAPOR-LIQUID EQUILIBRIUM FOR TERNARY SYSTEM OF BENZENE, TOLUENE AND M-XYLENE

Mr. Tanong Kaewwiriyakijkul

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering in Chemical Engineering
Department of Chemical Engineering
Graduate School
Chulalongkorn University
Academic Year 1998

ISBN 974-332-453-4

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หัวข้อวิทยานิพนธ์	สมดุลไอ-ของเหลว สำหรับระบบสามองค์ประกอบของเบนซีน, โทลูอีน และเมตาไซลีน
โดย	นายทนง แก้ววิริยะกิจกูล
ภาควิชา	วิศวกรรมเคมี
อาจารย์ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์ ดร.เกริกชัย สุกาญจนัจที
อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม	อาจารย์ขนิษฐา มาลยเวช

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

..... คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

(ศาสตราจารย์ นายแพทย์ ศุภวัฒน์ ชุติวงศ์)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ

(รองศาสตราจารย์ ดร.จิรกานต์ เมืองนาโพธิ์)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา

(รองศาสตราจารย์ ดร.เกริกชัย สุกาญจนัจที)

..... อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

(อาจารย์ขนิษฐา มาลยเวช)

..... กรรมการ

(อาจารย์ ดร. สีรุ้ง ปรีชานนท์)

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พิมพ์เป็นฉบับเทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

ทนง แก้ววิริยะกิจกูล : สมดุลไอ-ของเหลวสำหรับระบบสามองค์ประกอบของเบนซีน, โทลูอีน และเมตาไซลีน (VAPOR-LIQUID EQUILIBRIUM FOR TERNARY SYSTEM OF BENZENE, TOLUENE AND M-XYLENE) อาจารย์ที่ปรึกษา : รศ.ดร. เกริกชัย สุกาญจนัจที, อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม : อ.ขนิษฐา มาลยเวช , 114 หน้า. ISBN 974-332-453-4.

งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาสมดุลไอ-ของเหลวระบบสามองค์ประกอบของเบนซีน+โทลูอีน+เมตาไซลีน และระบบสององค์ประกอบของเบนซีน+โทลูอีน, เบนซีน+เมตาไซลีน และโทลูอีน+เมตาไซลีน โดยใช้เครื่องความดัน-ปริมาตร-อุณหภูมิ(PVT) รุ่น 2370 ของรัสกา(Ruska) โดยการทดลองทั้งหมดจะเป็นการหาจุดเกิดฟองของระบบที่อุณหภูมิคงที่ที่ 148.8, 158.6, 168.5 และ178.4 °ซ ผลการทดลองที่ได้จะนำไปทดสอบกับสมการเปง-โรบินสัน โดยใช้ข้อมูลของระบบสององค์ประกอบหาค่า k_{ij} เฉลี่ยในแต่ละอุณหภูมิและทำนายผลในระบบสามองค์ประกอบ

จากผลการทดลองสององค์ประกอบคำนวณค่า k_{ij} เฉลี่ยแต่ละอุณหภูมิ และนำค่า k_{ij} เฉลี่ยที่ได้สร้างกราฟความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิกับค่า k_{ij} เฉลี่ยจะมีลักษณะเป็นกราฟเส้นตรง ส่วนผลการทำนายระบบสามองค์ประกอบโดยใช้สมการ k_{ij} จะทำนายผลได้ค่าความเบี่ยงเบนเฉลี่ยของความดันเป็น 0.0312, ค่าความเบี่ยงเบนเฉลี่ยขององค์ประกอบเบนซีนในเฟสไอเป็น 0.018, ค่าความเบี่ยงเบนเฉลี่ยขององค์ประกอบของโทลูอีนในเฟสไอเป็น 0.0227 และค่าความเบี่ยงเบนเฉลี่ยขององค์ประกอบของเมตาไซลีนเป็น 0.0232

โดยสรุปสมการเปง-โรบินสันสามารถใช้ทำนายจุดสมดุลสำหรับระบบสามองค์ประกอบของเบนซีน, โทลูอีนและเมตาไซลีนได้

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต ทนง แก้ววิริยะกิจกูล

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

ปีการศึกษา 2541 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

C817332 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING
KEY WORD: VAPOR-LIQUID EQUILIBRIUM / BENZENE / TOLUENE / M-XYLENE
TANONG KAEWWIRIYAKIJKUL : VAPOR-LIQUID EQUILIBRIUM FOR TERNARY SYSTEM OF BENZENE, TOLUENE AND M-XYLENE. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. KROEKCHAI SUKANJANAJTEE, Ph.D. THESIS CO-ADVISOR : KHANITTA MALAYAWECH. 114 pp. ISBN 974-332-453-4.

Vapor-Liquid Equilibrium for binary and ternary systems of Benzene, Toluene and m-Xylene were investigated using PVT equilibrium cell. Decreasing pressure at constant temperature can provide bubble point, which can be used to define equilibrium state. Four temperatures ,viz., 148.8, 158.6, 168.5 and 178.4 °C were chosen in this research. Binary interaction parameter, k_{ij} ,obtained from binary system at each temperature were used to predict pressure and composition of vapor phase in ternary system.

Relationship between k_{ij} and temperature appears to be linear. The Peng-Robinson equation can predict the equilibrium state of ternary system using k_{ij} from binary system. It was found that average derivations of pressure, Benzene composition, Toluene composition and m-Xylene composition in vapor phase were 0.0312, 0.018, 0.0227 and 0.0312 respectively.

It is suggested that Peng-Robinson equation can be used to predict ternary system for this research.

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต .....
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....
ปีการศึกษา 2541 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลุล่วงได้ด้วยความช่วยเหลือจากหลายๆท่าน ผู้วิจัยขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.เกริกชัย สุกาญจนัจที อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ และอาจารย์ชนิษฐา มาลยเวช อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม ที่ได้ให้คำปรึกษาและแนะนำในการพัฒนางานวิจัย ตลอดจนตรวจทานแก้ไขวิทยานิพนธ์จนเสร็จสมบูรณ์

ขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.จิรกานต์ เมืองนาโพธิ์ ประธานกรรมการ และอาจารย์ ดร. สีรุ้ง ปรีชานนท์ กรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ซึ่งได้ให้ความสนใจ และให้ข้อคิดเห็นที่เป็นประโยชน์ต่องานวิจัยนี้

ขอขอบพระคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ยิ่งยศ เขมะโยธิน หัวหน้าภาควิชาปิโตรเลียมและเหมืองแร่ ที่กรุณาอนุญาตในการใช้อุปกรณ์เครื่อง PVT และ GC ตลอดจนให้ความสะดวกในการใช้สถานที่

ขอขอบคุณเพื่อน ๆ และน้อง ๆ ที่ได้ให้ความช่วยเหลือ และคำแนะนำที่เป็นประโยชน์ โดยเฉพาะเพื่อนๆ และน้องๆ สมาชิกห้องกลุ่มวิจัยเทอร์โมไดนามิกส์และกลุ่มวิจัยวิศวกรรมชีวเคมี ที่ให้ความช่วยเหลือ ตลอดจนให้กำลังใจแก่ผู้วิจัย

ท้ายนี้ผู้วิจัยใคร่ขอกราบขอบพระคุณบิดามารดา ซึ่งคอยให้กำลังใจ และสนับสนุนผู้วิจัยในการทำงานวิจัยมาโดยตลอดจนสำเร็จการศึกษา

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย ..... ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ ..... จ
กิตติกรรมประกาศ ..... ฉ
สารบัญ ..... ช
สารบัญตาราง ..... ฌ
สารบัญรูป ..... ญ
สัญลักษณ์ ..... ฏ
บทที่
1 บทนำ 1
1.1 วัตถุประสงค์ 2
1.2 ขอบเขตงานวิจัย 2
2 ตรวจเอกสาร 3
2.1 ผลการทดลองเกี่ยวกับสมดุลไอ-ของเหลวของระบบ เบนซีน,โทลูอีน และ เมตาไซลีนที่ผ่านมา 4
2.2 แนวทางในการดำเนินการทดลอง 8
2.3 แนวทางในการวิเคราะห์ 9
3 ทฤษฎี 13
3.1 ความดันไอ 13
3.2 เฟสไดอะแกรม 14
3.3 สมการสภาวะ 17
3.4 การหาจุดสมดุลไอ-ของเหลวโดยใช้สมการสภาวะ 20
3.5 สมการคณิตศาสตร์ที่ใช้ช่วยในการคำนวณ 22
4 อุปกรณ์และวิธีดำเนินงานวิจัย 24
4.1 อุปกรณ์ 24
4.2 สารเคมี 26
4.3 วิธีการวิเคราะห์ก๊าซโครมาโตกราฟี 26
4.4 วิธีการทดลองหาความดันไอของสารสามองค์ประกอบและสององค์ประกอบ 27

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

5 ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง 31
5.1 ผลการทดลองที่สมดุลไอ-ของเหลวของระบบสามองค์ประกอบและสององค์ประกอบ 31
5.2 การทดสอบโปรแกรมกับผลการทดลอง 33
6 สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ 43
6.1 สรุปผลการทดลอง 43
6.2 ข้อเสนอแนะ 44
รายการอ้างอิง 45
ภาคผนวก 47
ประวัติผู้วิจัย 114

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญตาราง

ตารางที่ หน้า

2.1 ผลการทดลองที่จุดสมดุลของระบบโทลูอีน(1)กับเมตาไซลีน(2)ของ Willman และ Teja(1985) 4

2.2 สมดุลไอ-ของเหลวของระบบเบนซีน(1)-โทลูอีน(2)ของ Klara และคณะ (1987) 5

2.3 แสดงค่า k_{ij} และค่าพารามิเตอร์ของ UNIQUAC ที่คำนวณได้ 6

2.4 สมดุลไอ-ของเหลวของระบบเบนซีน(1)กับโทลูอีน(2) ที่ ความดัน 1 บรรยากาศ ของ Gültekin (1990) 6

2.5 สมดุลไอ-ของเหลวของระบบเบนซีน(1)กับเมตาไซลีน(2) ที่ความดัน 1 บรรยากาศ ของ Gültekin (1990) 7

2.6 สมดุลไอ-ของเหลวของระบบโทลูอีน(1)กับเมตาไซลีน(2) ที่ความดัน 1 บรรยากาศ ของ Gültekin (1990) 7

2.7 สมดุลไอ-ของเหลวของระบบเบนซีน(1), โทลูอีน(2)กับเมตาไซลีน(3) ที่ความดัน 1 บรรยากาศ ของ Gültekin (1990) 8

2.8 ค่าคงที่ของสมการไรเดล 9

4.1 แสดงความเข้มข้นอย่างคราวๆ ของสารสามองค์ประกอบที่ต้องผสม 29

4.2 แสดงความเข้มข้นอย่างคราวๆ ของสารสององค์ประกอบที่ต้องผสม 29

5.1 แสดงค่า k_{ij} ที่คำนวณได้ตามอุณหภูมิ 33

5.2 ค่าความเบี่ยงเบนเฉลี่ยของการคำนวณความดันและองค์ประกอบของเฟสไอ ของระบบสององค์ประกอบ 35

5.3 ค่าความเบี่ยงเบนเฉลี่ยของการคำนวณความดันและองค์ประกอบของเฟสไอ ของระบบสามองค์ประกอบ 35

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญรูป

รูปที่		หน้า
2.1	แสดงเส้นไทไลนที่เกิดจุดอะซิโอโทปของระบบ เบนซีน(1)+ไซโคลเฮกเซน (2)+1-โพรพานอล(3) ที่ 333.15 องศาเคลวิล	3
2.2	เครื่องมือของ Scott M. Klara และคณะ (1987)	9
2.3	ไดอะแกรมในการหาค่าพารามิเตอร์ k_{ij}	10
3.1	แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง x-y ของเฮกเซน-ไตรเอทิลเอมาย (hexane-triethylamine) ที่อุณหภูมิ 60 °ซ	14
3.2	แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง x-y ของคลอโรฟอร์ม-อะซิโตน (chlorofrom-acetone) ที่อุณหภูมิ 35.17 °ซ	15
3.3	แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง ความดันกับเศษส่วนโมล ของระบบเฮกเซน-ไตรเอทิลเอมาย ที่อุณหภูมิ 60 °ซ	15
3.4	แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง อุณหภูมิกับเศษส่วนโมล ของระบบเฮกเซน-ไตรเอทิลเอมาย ที่ความดัน 0.7 บาร์	16
3.5	แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง ความดัน,อุณหภูมิและเศษส่วนโมล ของระบบเฮกเซน-ไตรเอทิลเอมาย	16
3.6	แสดงวิธีการคำนวณหาความดันและองค์ประกอบของเฟสของไอ	21
3.7	แสดงวิธีการหาจุดต่ำสุดของวิธี Fibonacci method	23
4.1	เครื่อง PVT รุ่น 2370 ของบริษัท Ruska	24
4.2	เครื่องก๊าซโครมาโตกราฟี รุ่น 6890	25
4.3	แสดงกระบอกแรงดันของเครื่อง PVT	30
5.1	กราฟไทไลนของระบบเบนซีน+โทลูอีน+เมตาไซลีนที่อุณหภูมิตู้อบ 150 °ซ	31
5.2	กราฟไทไลนของระบบเบนซีน+โทลูอีน+เมตาไซลีนที่อุณหภูมิตู้อบ 160 °ซ	32
5.3	กราฟไทไลนของระบบเบนซีน+โทลูอีน+เมตาไซลีนที่อุณหภูมิตู้อบ 170 °ซ	32
5.4	กราฟไทไลนของระบบเบนซีน+โทลูอีน+เมตาไซลีนที่อุณหภูมิตู้อบ 180 °ซ	33
5.5	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า k_{ij} กับอุณหภูมิ	34
5.6	กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบเบนซีน+โทลูอีนที่ 148.8 °ซ กับจุดการทดลอง	36
5.7	กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบเบนซีน+โทลูอีนที่ 158.6 °ซ กับจุดการทดลอง	36
5.8	กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบเบนซีน+โทลูอีนที่ 168.5 °ซ กับจุดการทดลอง	37
5.9	กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบเบนซีน+โทลูอีนที่ 178.4 °ซ กับจุดการทดลอง	37

สารบัญรูป(ต่อ)

ตารางที่ หน้า

5.10 กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบเบนซีน+เมตาไซลีนที่ 148.8 °ซ กับจุดการทดลอง.....38
5.11 กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบเบนซีน+เมตาไซลีนที่ 158.6 °ซ กับจุดการทดลอง.....38
5.12 กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบเบนซีน+เมตาไซลีนที่ 168.5 °ซ กับจุดการทดลอง.....39
5.13 กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบเบนซีน+เมตาไซลีนที่ 178.4 °ซ กับจุดการทดลอง.....39
5.14 กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบโทลูอีน+เมตาไซลีนที่ 148.8 °ซ กับจุดการทดลอง.....40
5.15 กราฟเฟสไดอะแกรมของระบบโทลูอีน+เมตาไซลีนที่ 158.6 °ซ กับจุดการทดลอง.....40
5.16 แสดงเส้นไทไลนเปรียบเทียบระหว่างการทดลองกับการคำนวณของระบบ เบนซีน+โทลูอีน+เมตาไซลีน ที่ 148.8 °ซ.....41
5.17 แสดงเส้นไทไลนเปรียบเทียบระหว่างการทดลองกับการคำนวณของระบบ เบนซีน+โทลูอีน+เมตาไซลีน ที่ 158.6 °ซ.....41
5.18 แสดงเส้นไทไลนเปรียบเทียบระหว่างการทดลองกับการคำนวณของระบบ เบนซีน+โทลูอีน+เมตาไซลีน ที่ 168.5 °ซ.....42
5.19 แสดงเส้นไทไลนเปรียบเทียบระหว่างการทดลองกับการคำนวณของระบบ เบนซีน+โทลูอีน+เมตาไซลีน ที่ 178.4 °ซ.....42

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สัญลักษณ์

A,B,C	=	ค่าคงที่สมการแอนโทอิก(Antoine equation)
a,b	=	ค่าคงที่แวนเดอร์วาลส์
a_{ij},b_{ij},c_{ij}	=	ค่าพารามิเตอร์ในกฎการผสม
C_1,C_2,C_3,C_4	=	ค่าคงที่ในสมการไรเดล
C_1,C_2,C_3,C_4,C_5	=	ค่าคงที่ในสมการความดันไอ
$f(x_k)$	=	ฟังก์ชันของตัวแปร x ในลำดับที่ k
$f'(x_k)$	=	สมการ differential ของฟังก์ชันของตัวแปร x ในลำดับที่ k
F	=	อัตราการป้อนใน flash drum
f_i^V	=	ฟูกาซิตี้ขององค์ประกอบ i ในเฟสไอ
f_i^L	=	ฟูกาซิตี้ขององค์ประกอบ i ในเฟสของเหลว
ΔH_V	=	ค่าความร้อนแฝงของการกลายเป็นไอ
k_{ij}	=	binary interaction parameter
$k_{a_{ij}},k_{a_{ji}},k_{1_{ij}},k_{2_{ij}}$	=	binary interaction parameter ในกฎการรวมของ a_{ij}
$k_{b_{ij}}$	=	binary interaction parameter ในกฎการรวมของ b_{ij}
K_i	=	equilibrium ratiio จะมีค่าเท่ากับ y_i/x_i
L	=	อัตราไหลออกของของเหลวใน flash drum
L_k	=	ความยาวช่วงรอบ k ของการคำนวณในวิธี Fibonacci
L_0	=	ความยาวช่วงแรกของการคำนวณในวิธี Fibonacci
N หรือ n	=	จำนวนข้อมูล
OBF	=	ออฟเจกทีฟฟังก์ชัน(Objective function)
P	=	ความดัน(กิโลปาสคาล)
P^s	=	ความดันไอของสารบริสุทธิ์ (กิโลปาสคาล)
P_{exp}	=	ความดันไอจากการทดลอง (กิโลปาสคาล)
P_{cal}	=	ความดันไอจากการคำนวณ (กิโลปาสคาล)
P_c	=	ความดันวิกฤต (กิโลปาสคาล)
ΔP	=	ความผิดพลาดสัมบูรณ์เฉลี่ย
R	=	ค่าคงที่ของก๊าซ 8.314 ลูกบาศก์เมตร.ปาสคาล/(กรัมโมล. องศาเคลวิล)
T	=	อุณหภูมิ (องศาเคลวิล)

สัญลักษณ์ (ต่อ)

T_c	=	อุณหภูมิวิกฤต (องศาเคลวิล)
V	=	อัตราการไหลของไอใน flash drum
V	=	ปริมาตร (ลูกบาศก์เมตร)
V_c	=	ปริมาตรวิกฤต (ลูกบาศก์เมตร)
x_i	=	ความเข้มข้นของสาร i ในเฟสของเหลวหน่วยเป็น สัดส่วนโดยโมล
x_k	=	ตัวแปรลำดับที่ k
y_i	=	ความเข้มข้นของสาร i ในเฟสไอหน่วยเป็น สัดส่วนโดยโมล
y_{exp}	=	ความเข้มข้นของสาร i ในเฟสไอที่ได้จากการทดลอง
$y_{i,cal}$	=	ความเข้มข้นของสาร i ในเฟสไอที่ได้จากการคำนวณ
Δy_i	=	ค่าความผิดพลาดสัมบูรณ์เฉลี่ยของความเข้มข้นของสาร i ในเฟสไอ
Z_L	=	Compressibility factor ของเฟสของเหลว
Z_v	=	Compressibility factor ของเฟสไอ
γ_i	=	Activity coefficient ของสาร I
ρ	=	ความหนาแน่น (g/ml)
ϕ_i^L	=	fugacity coefficient ของสาร i ในเฟสของเหลว
ϕ_i^V	=	fugacity coefficient ของสาร i ในเฟสไอ
ω	=	อะเซนทริกแฟกเตอร์ (acentric factor)

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย