

★純物質の h, s 計算 bpred (n=1 として)

純物質の h, s の計算は下記の方法による。

(1) 単位系はフルに使える。また, VLE, 均相 共に適用できる。

(2) ただし,  $\Delta h$ ,  $\Delta s$  の計算は手計算による。

(3) また等エンタルピー, 等エントロピー計算はできない。行うときは混合物 (n=2 以上) で注目成分の組成を 0.999 などとして行う。

★ 【問2】 任意の値をベースとして h1, s1 の計算, さらに h2, s2 を計算しその差から  $\Delta h$ ,  $\Delta s$  も求める

成分数 (nn:2 桁), 物質コード入力 (4 桁)

Help(nn) 0: 物質コード -1: 物性 -2: mij -3: H, S (混合物) -4: 固流体平衡 -9: 終了  
nn----- 最大成分数: 19

1 87

Enter: 通常計算 1: h 2: s 3: Cp, Cv 4: h&s 5: HP 線図 8: 終了 9: 計算続行

4

\*\*\* h & s のベース計算 (均相) \*\*\*

H ベース, S ベース, T, P (単位系はあとで指定する)

0 0 273.15 2 <- 任意の値。273.15 K はポピュラー。2 MPa は液体といったところ  
低温で圧力を大きくすると h は小さな値となり, これからの計算値  
は正の値で計算されるので望ましい

Enter: 通常計算 2: チェック計算

Enter

1: mol base 2: mass (g or lb) base

2

0: 前計算で使用した単位 1: K, atm, l/mol, cal 2: C, atm, l/mol, cal  
3: R, psi, cu. ft. /lb-mol, Btu 4: F, psi, cu. ft. /lb-mol, Btu  
5: C, mmHg, l/mol, mol, cal 6: K, MPa, l/mol, J 7: C, MPa, l/mol, J  
8: combination 9: 終了

6

ベース h (or s) 相の選択

1= 蒸気相

2= 液相

3= 終了

2

<- 一応液をベースとする意向があるので

\*\*\* h (or s) ベース計算 終了。本計算開始 \*\*\*

(1) 2点あるが, まず沸点での値を計算

0= 飽和域

1= 均相域

3= 終了

0

1: 圧力データ 2: 温度データ

2

温度データ数, T, T, T, ----- (max=50)

1 323

\*\*\*\*\* 気液平衡: C3H6 系 \*\*\*\*\*

t = 323.00 (deg-K) p = 0.203260E+01 (MPa)

	feed	liquid	vapor
compressibility factor		0.06686	0.71409
volume ( l/g )		0.0021	0.0224
density( g/l )		476.5424	44.6154
fugacity (MPa )	0.1586E+01		
v. entropy( J /g. K )	0.9027E+00		
hv - hl( J /g )	0.2916E+03		
enthalpy ( J /g )		0.5217E+02	0.3437E+03
entropy ( J /g. K )		0.1743E+00	0.1077E+01

Enter:通常計算 1:h 2:s 3:Cp, Cv 4:h&s 5:HP 線図 8:終了 9:計算続行

## 9 <-計算続行

### (2) 次に大気圧での値

0= 飽和域

1= 均相域

3= 終了

1

0= (T, P) データセット読み込み

1= 等温下における P データ読み込み

2= 等圧下における T データ読み込み

1

T, 圧力データ数, P, P, P, -----

### 323 1 0.1

\*\*\*\*\*C3H6 の均相蒸気 \*\*\*\*\*

t = 323.00 (deg-K) p = 0.1000E+00 (MPa )

compressibility factor	0.98892
volume ( l/g )	0.6309
density( g/l )	1.5850
fugacity (MPa )	0.9890E-01
enthalpy( J /g )	0.4015E+03
entropy ( J /g. K )	0.1804E+01

Enter:通常計算 1:h 2:s 3:Cp, Cv 4:h&s 5:HP 線図 8:終了 9:計算続行

8

手計算で

$\Delta h = 401.5 - 52.17 = 349.3 \text{ J/g}$

$\Delta s = 1.804 - 0.1743 = 1.63 \text{ J/g K}$