



# แบบจำลองพลังงานอิสระควรวรวมสำหรับการประมาณความหนาแน่นของน้ำมันพืชที่อุณหภูมิต่างๆ

สุรียา พันธุ์โกศล<sup>1\*</sup>, นฤกร สิริมงคลกาล<sup>2</sup>, ทิณณภพ จุ่มอิน<sup>3</sup> และคณิต กฤษณังกูร<sup>4</sup>

## Free Energy Additivity Model for Estimation Vegetable Oils Density at Various Temperatures

Suriya Phankosol<sup>1\*</sup>, Natakron Sirimongkolgal<sup>2</sup>, Thinnaphop Chum-in<sup>3</sup> and Kanit Krisnangkura<sup>4</sup>

<sup>1,2</sup>สาขาวิชาการจัดการอุตสาหกรรมและเทคโนโลยี คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏบ้านสมเด็จเจ้าพระยา กรุงเทพมหานคร 10600

<sup>3</sup>สาขาวิชาการจัดการเทคโนโลยี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยราชภัฏจันทรเกษม กรุงเทพมหานคร 10900

<sup>4</sup>สาขาวิชาเทคโนโลยีชีวเคมี คณะทรัพยากรและเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี (วิทยาเขตบางขุนเทียน) กรุงเทพมหานคร 10150

<sup>1,2</sup>Department of Industrial and Technology Management, Faculty of Science and Technology, Bansomdejchaopraya Rajabhat University, Bangkok, 10600, Thailand.

<sup>3</sup>Department of Technology Management, Faculty of Science, Chandrakasem Rajabhat University, Bangkok, 10900, Thailand.

<sup>4</sup>Division of Biochemical Technology, School of Bioresources and Technology, King Mongkut's University of Technology Thonburi (Bangkhuntien), Bangkok 10150, Thailand.

\* Corresponding author. E-mail address: s.phankosol@gmail.com

Received: 19 December 2016; Accepted: 28 March 2017

### บทคัดย่อ

ความหนาแน่นเป็นสมบัติสำคัญอย่างมากต่อหน่วยปฏิบัติการทางวิศวกรรมเคมีในการไหลของมวลและความร้อน ในงานวิจัยนี้สนใจศึกษาแบบจำลองสำหรับประมาณความหนาแน่นของน้ำมันพืชจากความสัมพันธ์พลังงานอิสระตามกฎควรวรวมของมาร์ติน ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากวรรณกรรมเพื่อสนับสนุนและยืนยันความถูกต้องแม่นยำ สมการที่นำเสนอสำหรับประมาณความหนาแน่นของน้ำมันพืชสามารถประมาณได้จากจำนวนอะตอมคาร์บอน ( $z$ ) จำนวนพันธะคู่ ( $n_d$ ) ของกรดไขมัน ที่อุณหภูมิต่างๆ ( $T$ ) จากการประมาณความหนาแน่นของน้ำมันพืชมีค่าเบี่ยงเบน ค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย และค่าสัมประสิทธิ์การตัดสินใจ ( $R^2$ ) เท่ากับ  $-0.06\%$ ,  $0.23\%$  และ  $0.9877$  ตามลำดับ สำหรับการประมาณความหนาแน่นนอกช่วงอุณหภูมิ 283.15 ถึง 413.15K ที่ศึกษาอาจมีความแม่นยำต่ำลง

**คำสำคัญ:** พลังงานอิสระควรวรวม ความหนาแน่น น้ำมันพืช แบบจำลอง

### Abstract

Density is important in numerous chemical engineering unit operations in mass and heat flow. In this study models for estimating vegetable oils density are correlated to the Martin's rule of free energy additivity. Data available in literatures are used to validate and support the proposed equations. The density of vegetable oils can be easily estimated from its carbon number ( $z$ ), number of double bonds ( $n_d$ ) at different temperatures ( $T$ ). The Bias, average absolute deviation and coefficient of determination ( $R^2$ ) in estimating of vegetable oils are  $-0.06\%$ ,  $0.23\%$  and  $0.9877$ , respectively. The density outside temperature between 283.15 and 413.15 K may be possibly estimated by this model but accuracy may be lower.

**Keywords:** Free Energy Additivity, Density, Vegetable Oil, Modeling

### บทนำ

ในปัจจุบันน้ำมันพืชนอกจากถูกนำมาเป็นอาหารยังถูกใช้เป็นวัตถุดิบผลิตพลังงานหมุนเวียนทางเลือกที่สะอาดในเครื่องยนต์ดีเซลที่เรียกกันทั่วไปว่า ไบโอดีเซล (Biodiesel) ซึ่งในกระบวนการผลิตน้ำมันพืชเพื่อการบริโภคและนำไปเป็นวัตถุดิบสำหรับผลิตพลังงานต้องผ่านเครื่องมืออุปกรณ์และกระบวนการต่างๆ มากมายทั้งทางกายภาพและทางเคมี ดังนั้นในการออกแบบระบบและการนำน้ำมันพืชไปใช้งานจำเป็นต้องทราบสมบัติทางกายภาพโดยเฉพาะความหนาแน่นซึ่งเป็นสมบัติสำคัญที่ต้องพิจารณาเนื่องจากมีการเปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิและยังเปลี่ยนแปลงตาม

องค์ประกอบทางเคมีของน้ำมันพืชแต่ละชนิดอีกด้วย ปัจจุบันได้มีการพัฒนาสมการความสัมพันธ์ทางคณิตศาสตร์เพื่อประมาณค่าความหนาแน่นของน้ำมันพืชเพื่อให้ง่ายต่อการประยุกต์ใช้งาน โดยมีรายละเอียดดังนี้

(Rodenbush, Hsieh, & Viswanath, 1999) เสนอสมการอย่างง่ายสำหรับประมาณความหนาแน่นของน้ำมันพืชที่อุณหภูมิต่างๆ ดังแสดงในสมการที่ (1) ซึ่งสมการที่เสนอได้มีการใช้งานมาก่อนหน้านี้แล้วสำหรับประมาณค่าความหนาแน่นของของเหลวอื่นๆ อย่างไรก็ตามในการใช้งานต้องหาค่าคงที่ใหม่ทุกครั้งเมื่อเปลี่ยนชนิดของน้ำมันพืชและแหล่งที่มาของน้ำมันพืชเพื่อความถูกต้องแม่นยำของสมการ

$$\rho = a + bt \tag{1}$$

เมื่อ  $\rho$  คือความหนาแน่น ( $\text{g/cm}^3$ )  
 $t$  คืออุณหภูมิ ( $^{\circ}\text{C}$ )  
 $a$  และ  $b$  คือค่าคงที่ โดยเปลี่ยนแปลงตามตามองค์ประกอบทางเคมี

สมการที่ (2) เป็นสมการความสัมพันธ์สำหรับประมาณค่าความหนาแน่นของน้ำมันพืชในรูปความถ่วงจำเพาะ ( $S_g$ ) กับค่าสะปอนนิฟิเคชัน ( $SN$ ) และค่าไอโอดีน (IV) ที่อุณหภูมิ  $15^{\circ}\text{C}$  ซึ่งค่าทั้งสองมี

$$S_g = 0.8475 + 0.00030SN + 0.00014IV \tag{2}$$

(Halvorsen, Mammel, & Clements, 1993a) ได้พัฒนาสมการสำหรับการประมาณค่าความหนาแน่นของน้ำมันพืช (สมการที่ 2) จากสมการของ (Rackett, 1970)

ความสัมพันธ์กับขนาดโมเลกุลและระดับความไม่อิ่มตัวของน้ำมันพืช แต่สมการยังมีข้อจำกัดเรื่องการใช้งานที่อุณหภูมิอื่นๆ จำเป็นต้องหาค่าคงที่ใหม่

ที่ปรับปรุงโดย (Spencer & Danner, 1972) ในการประมาณค่าต้องใช้ค่าอุณหภูมิจากจุด และความดันวิกฤต ซึ่งในการใช้งานมีความยุ่งยากซับซ้อนมาก

$$\rho = \frac{\sum x_i M_i}{R \left( \sum \frac{x_i T_{c,i}}{P_{c,i}} \right) \left( \sum x_i Z_{RAi} \right)^{1 + (1 - T / \sum x_i T_{c,i})^{2/7}} + F_c} \tag{3}$$

เมื่อ  $\rho$  คือความหนาแน่น ( $\text{g/cm}^3$ )  
 $x$  คือสัดส่วนโดยโมล  
 $M$  คือมวลโมเลกุล ( $\text{g/mol}$ )  
 $T$  คืออุณหภูมิสัมบูรณ์ (K)  
 $T_c$  คืออุณหภูมิวิกฤต (K)  
 $P_c$  คือความดันวิกฤต (kPa)  
 $Z_{RA}$  คือค่าแฟกเตอร์การอัดตัวของ Rackett (Rackett Compressibility Factor)



R คือค่าคงที่ของแก๊ส ( $8.3144598 \times 10^3 \text{ cm}^3 \text{ kPa K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ )

Fc คือค่าจากสมการความสัมพันธ์ดังแสดงในสมการที่ (4)

$$F_c = 0.0236 + k | 875 - (3 \sum x_i M_i + 38.0488) | \quad (4)$$

เมื่อ  $k$  คือค่าคงที่ โดยพิจารณาจากมวลโมเลกุลของน้ำมันพืช กรณีมวลโมเลกุลของน้ำมันพืชมากกว่าและน้อยกว่า 875 จะมีค่าเท่ากับ 0.000082 และ 0.000098 ตามลำดับ

$x_i$  คือสัดส่วนโดยโมล

$M_i$  คือมวลโมเลกุล

(Halvorsen, Mammel, & Clements, 1993b) ได้แสดงเงื่อนไขสำคัญของสมการที่ดีสำหรับการประมาณสมบัติทางกายภาพของไบโอดีเซลและน้ำมันพืชคือ ต้องมีความสัมพันธ์กับขนาดโมเลกุล ระดับความไม่อิ่มตัว และเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิ จากสมการข้างต้นพบว่า มีเพียงสมการที่ (3) ที่มีองค์ประกอบครบตามเงื่อนไข แต่มีความซับซ้อนไม่สามารถอธิบายความสัมพันธ์ผลของขนาดโมเลกุล และระดับความไม่อิ่มตัว ต่อความหนาแน่นของน้ำมันพืชได้อย่างชัดเจน ดังนั้นในการศึกษานี้สนใจพัฒนาสมการสำหรับประมาณความหนาแน่นของน้ำมันพืชจากกฎควรรวมพลังงานของ (Martin, 1950) ซึ่งเป็นการโยงความสัมพันธ์ของพลังงานอิสระของโมเลกุลในระบบที่ส่งผลต่อสมบัติทางกายภาพ ซึ่งสมการที่น่าเสนอคาดหวัง

ว่าจะมีองค์ประกอบครบตามเงื่อนไขสมการที่ดีและมีความง่ายต่อการนำไปใช้งาน

### ทฤษฎี

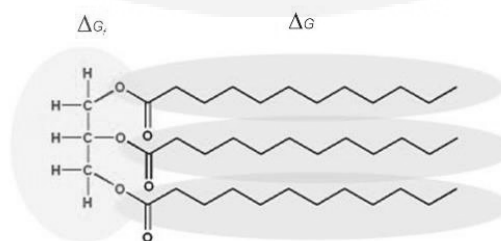
ความหนาแน่นของน้ำมันพืชมีความสัมพันธ์ใกล้ชิดกับโครงสร้างโมเลกุลทั้งความยาวของโซ่อะตอมคาร์บอนและจำนวนพันธะคู่ของอะตอมคาร์บอน (Phankosol, Sudaprasert, Lilitchan, Aryasuk, & Krisnangkura, 2014a) ได้เสนอสมการความสัมพันธ์ความหนาแน่นกับพลังงานอิสระของการขยายปริมาตร (Free energy of volume expansion;  $\Delta G$ ) ดังแสดงในสมการที่ (5)

$$\rho = \rho_0 \exp\left(\frac{\Delta G}{RT}\right) \quad (5)$$

เมื่อ  $\rho$  คือความหนาแน่น ( $\text{g/cm}^3$ )

$\rho_0$  คือความหนาแน่นอ้างอิง ( $\text{g/cm}^3$ )

พิจารณาจากโครงสร้างไตรกลีเซอไรด์ (Triglyceride ; TG) ซึ่งประกอบด้วยกลีเซอรอลกับกรดไขมัน 3 โมเลกุล



รูปที่ 1 โครงสร้างโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์กับพลังงานควรรวมอิสระ (Phankosol, Chum-in, & Krisnangkura, 2016)



โครงสร้างโมเลกุลของ TG ประกอบด้วย เพื่อใช้อธิบายการเปลี่ยนแปลงพลังงานอิสระควมรวมของ  $CH_3-(CH_2)_{z-1}-f$  ซึ่ง (Martin, 1950) ได้แบ่งกลุ่ม การเปลี่ยนสภาพจากสารละลายเป็นแก๊สของสารในอนุกรม โครงสร้างในโมเลกุลที่แตกต่างออกเป็น  $f$ ,  $CH_2$  และ  $CH_3$  เดียวกันของสารสมมติตั้งสมการที่ (6)

$$\Delta G = \Delta G_f + \Delta G_1 + \Delta G_2 \dots + \Delta G_z \quad (6)$$

เมื่อ  $\Delta G_1 \dots \Delta G_z$  คือพลังงานอิสระควมรวมของกลุ่มเมทิลีน (Methylene) และเมทิล (Methyl) ซึ่งเป็นกลุ่มมีความแตกต่างกันน้อยมาก ดังนั้นสามารถทำการเฉลี่ยให้อยู่ในรูป  $\Delta G$  สมการที่ (6) ลดรูปลงได้ตั้งสมการที่ (7)

$$\Delta G = \Delta G_f + 3(z\delta G) \quad (7)$$

เมื่อ  $\Delta G_f$ ,  $\delta G$  และ  $z$  คือพลังงานอิสระควมรวมของสารสมมติที่มีจำนวนอะตอมคาร์บอนเท่ากับศูนย์หรือจะเรียกสั้น ๆ ว่าพลังงานอิสระควมรวมที่เกิดจากกลุ่มฟังก์ชัน, คือพลังงานอิสระควมรวมของการเปลี่ยนแปลงต่อหนึ่งคาร์บอนอะตอม และจำนวนอะตอมคาร์บอนในสายไฮโดรคาร์บอน

สำหรับโมเลกุลที่มีพันธะคู่ (Double Bond(s); อิสรควมรวมของพันธะคู่ ( $\Delta G_{db}$ ) รวมโดยขยาย  $n_d$ ) Sansa-ad et al. (Sansa-ard, Aryasuk, Lilitchan, ความสัมพันธ์สมการที่ (7) ได้ตั้งสมการที่ (8) & Krisnangkura, 2011) เสนอผลของพันธะคู่กับพลังงาน

$$\Delta G = \Delta G_f + 3(z\delta G + n_d \Delta G_{db}) \quad (8)$$

ขยายสมการที่ (8) ด้วยเอนทัลปี (H) และเอนโทรปี (S) แทนในสมการที่ (5) และจัดรูปได้ตั้งสมการที่ (9)

$$\ln \rho = (a + bz + cn_d) + (d + ez + fn_d) \frac{1}{T} \quad (9)$$

เมื่อ  $a = \ln \rho_0 + \frac{\Delta S_f}{R}$ ,  $b = \frac{3\delta S}{R}$ ,  $c = \frac{3\Delta S_{db}}{R}$ ,  $d = -\frac{\Delta H_f}{R}$ ,  $e = -\frac{3\delta H}{R}$  และ  $f = -\frac{3\Delta H_{db}}{R}$

**ระเบียบวิธี**

**1. ข้อมูลการทดลอง**

ในการศึกษานี้ใช้ผลการทดลองของ (Esteban, Riba, Baquero, Rius, & Puig, 2012) และ (Ceriani, Paiva, Gonçalves, Batista, & Meirelles, 2008) ทำการวัดความหนาแน่นของน้ำมันพืชชนิดต่าง ๆ ด้วยไฮโดรมิเตอร์ (Hydrometer) และเครื่อง Anton Paar DMA-58 Vibrating Tube Densimeter (ระดับความแม่นยำ  $0.00004 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ) ตามลำดับ

**2. การหาค่าเฉลี่ยจำนวนอะตอมคาร์บอน ( $z_{ave}$ )**

**และจำนวนพันธะคู่ ( $n_{d,ave}$ )**

ในการศึกษาองค์ประกอบกรดไขมันในน้ำมันพืช ถ้าพิจารณาในรูปของจำนวนอะตอมคาร์บอนของกรดไขมันเฉลี่ย ( $z_{ave}$ ) และจำนวนพันธะคู่เฉลี่ย ( $n_{d,ave}$ ) โดยแทนค่าสมการที่สมการที่ (10) และ (11) (Phankosol, Sudprasert, Lilitchan, Aryasuk, & Krisnangkura, 2014b) ในสมการที่ (9) จะได้สมการที่ (12)



$$z_{ave} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i z_i}{\sum_{i=1}^n x_i} \quad (10)$$

$$n_{d,ave} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i n_{d,i}}{\sum_{i=1}^n x_i} \quad (11)$$

$$\ln \rho = (a + bz_{ave} + cn_{d,ave}) + (d + ez_{ave} + fn_{d,ave}) \frac{1}{T} \quad (12)$$

- เมื่อ  $x_i$  คือ สัดส่วนโดยโมลหรือมวลของกรดไขมันที่เป็นองค์ประกอบในน้ำมันพืช  
 $z_i$  คือ จำนวนอะตอมคาร์บอนของกรดไขมันที่เป็นองค์ประกอบในน้ำมันพืช  
 $n_{d,i}$  คือ จำนวนพันธะคู่ของกรดไขมันที่เป็นองค์ประกอบในน้ำมันพืช  
 $z_{ave}$  คือ จำนวนอะตอมคาร์บอนของกรดไขมันเฉลี่ยที่เป็นองค์ประกอบในน้ำมันพืช  
 $n_{d,ave}$  คือ จำนวนพันธะคู่ของกรดไขมันเฉลี่ยที่เป็นองค์ประกอบในน้ำมันพืช  
 $T$  คือ อุณหภูมิสัมบูรณ์ (K)  
 $a, b, c, \dots$  คือ ค่าคงที่ทางอุณหพลศาสตร์

3. การหาค่าคงที่ในสมการที่ (12) แทนค่าคงที่ต่างๆในสมการที่ (12) ได้สมการประมาณค่าคงที่ในสมการที่ (12) หาด้วยวิธีถดถอยเชิงเส้น ความหนาแน่นของน้ำมันพืชที่อุณหภูมิต่างๆ ดังสมการที่หลายตัวแปรตามวิธี (Phankosol et al., 2014b) เมื่อ (13)

$$\ln \rho = (-1.1651 + 0.04452z_{ave} + 0.0048n_{d,ave}) + (388.88 - 17.447z_{ave} + 3.34n_{d,ave}) \frac{1}{T} \quad (13)$$

- เมื่อ  $\rho$  คือ ความหนาแน่นของน้ำมันพืช ( $\text{g/cm}^3$ )  
 $z_{ave}$  คือ จำนวนอะตอมคาร์บอนของกรดไขมันเฉลี่ยที่เป็นองค์ประกอบในน้ำมันพืช  
 $n_{d,ave}$  คือ จำนวนพันธะคู่ของกรดไขมันเฉลี่ยที่เป็นองค์ประกอบในน้ำมันพืช

4. การวิเคราะห์ทางสถิติ  
 ความคลาดเคลื่อน (D (%))

$$D(\%) = \frac{\rho_{exp} - \rho_{cal}}{\rho_{exp}} \times 100\% \quad (14)$$

โดยที่  $\rho_{exp}$  และ  $\rho_{cal}$  คือ ความหนาแน่นจากการทดลอง และความหนาแน่นจากการประมาณ ตามลำดับ

ความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์ (AD (%))

$$AD(\%) = \left| \frac{\rho_{exp} - \rho_{cal}}{\rho_{exp}} \right| \times 100\% \quad (15)$$

โดยที่  $\rho_{exp}$  และ  $\rho_{cal}$  คือ ความหนาแน่นจากการทดลอง และความหนาแน่นจากการประมาณ ตามลำดับ



**ความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์เฉลี่ย (AAD (%))**

$$AAD(\%) = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\rho_{exp} - \rho_{cal}}{\rho_{exp}} \right| \quad (16)$$

โดยที่  $\rho_{exp}$ ,  $\rho_{cal}$  และ  $N$  คือ ความหนาแน่นจากการทดลอง, ความหนาแน่นจากการประมาณ และจำนวนข้อมูลตามลำดับ

**ค่าเอนเอียง (Bias (%))**

$$Bias(\%) = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left[ \frac{\rho_{exp} - \rho_{cal}}{\rho_{exp}} \right] \quad (17)$$

โดยที่  $\rho_{exp}$ ,  $\rho_{cal}$  และ  $n$  คือ ความหนาแน่นจากการทดลอง, ความหนาแน่นจากการประมาณ และจำนวนของจุดข้อมูล ตามลำดับ

**ค่าคลาดเคลื่อนมาตรฐาน (Standard Error:  $\sigma_{\bar{x}}$ )**

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{\sigma}{N} \quad (18)$$

เมื่อ  $\sigma$  และ  $N$  คือส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Standard Deviation) และจำนวนข้อมูล ตามลำดับ

**ค่าสัมประสิทธิ์การตัดสินใจ (Coefficient of Determination:  $R^2$ )**

$$R^2 = \frac{\left[ n \sum_{i=1}^n \rho_{exp} \rho_{cal} - \left( \sum_{i=1}^n \rho_{exp} \right) \left( \sum_{i=1}^n \rho_{cal} \right) \right]^2}{\left[ \sum_{i=1}^n \rho_{exp}^2 - \left( \sum_{i=1}^n \rho_{exp} \right)^2 \right] \left[ \sum_{i=1}^n \rho_{cal}^2 - \left( \sum_{i=1}^n \rho_{cal} \right)^2 \right]} \quad (19)$$

โดยที่  $\rho_{exp}$ ,  $\rho_{cal}$  และ  $n$  คือความหนาแน่นจากการทดลอง, ความหนาแน่นจากการประมาณ และจำนวนของจุดข้อมูล ตามลำดับ

**ผลการศึกษาและอภิปรายผล**

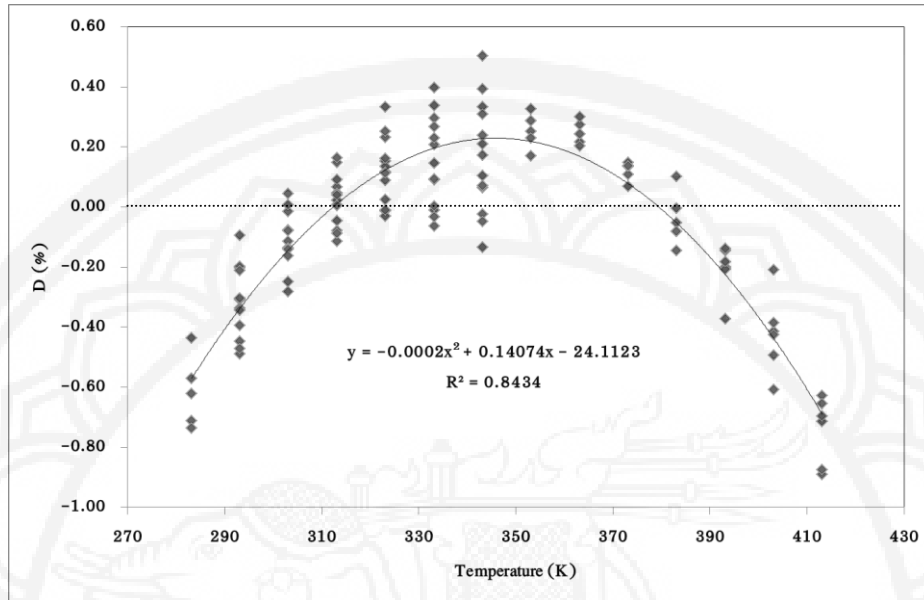
ในการศึกษานี้ได้รวบรวมองค์ประกอบกรดไขมันของน้ำมันพืชชนิดต่างๆ และค่า  $Z_{ave}$  และ  $nd_{ave}$  จากสมการที่ (10) และ (11) ไว้ในตารางที่ 1 พบว่าช่วงของค่า  $Z_{ave}$  และ  $nd_{ave}$  มีค่าเท่ากับ 17.04–17.92 และ 0.60–1.59 ตามลำดับ จากการประมาณความหนาแน่นของน้ำมันพืชจากค่า  $Z_{ave}$  และ  $nd_{ave}$  ที่ช่วงอุณหภูมิ 283.15–413.15K

ด้วยสมการที่ (13) เทียบกับผลการทดลองที่อุณหภูมิต่างๆ มีความถูกต้องแม่นยำ โดยช่วงค่า AD (%) ค่า Bias (%) และค่า AAD (%) เท่ากับ 0.009–0.33%, -0.06% และ 0.23% ตามลำดับ ค่า AAD (%) ของน้ำมันพืชแต่ละชนิดพบที่มีค่าต่ำสุด และสูงสุดคือ น้ำมันพืชจากบราซิลนัต (Brazil nut) (0.09%) และน้ำมันพืชจากเมล็ดทานตะวัน (0.33%) ตามลำดับ การประมาณด้วยสมการที่ (13) มีความแม่นยำกว่าสมการที่ (3) ที่นำเสนอโดย (Halvorsen



et al., 1993a) มีค่า Bias (%) และค่า AAD (%) เท่ากับ 0.13% and 0.30% ตามลำดับ สำหรับการกระจายตัวของค่า D (%) ของค่าที่ประมาณจากสมการที่ (13) เทียบกับผลการทดลองน้ำมันพืชที่อุณหภูมิต่างๆ แสดงในรูปที่ 2

พบว่ามีการกระจายตัวทั้งด้านบวกและลบ เมื่อวาดเส้นแนวโน้มพบว่าสมการที่ (13) มีความแม่นยำในการใช้งานสูงสุดที่อุณหภูมิ 312 และ 379 K



รูปที่ 2 ร้อยละความคลาดเคลื่อน (D (%)) จากการประมาณความหนาแน่นของน้ำมันพืชชนิดต่างๆ ด้วยสมการที่ (13) เทียบกับผลการทดลองในช่วงอุณหภูมิ 283.15 - 413.15 K

ตารางที่ 1 องค์ประกอบกรดไขมันในน้ำมันพืชชนิดต่างๆ (ร้อยละโดยมวล)

Vegetable Oils	C16 <sup>±</sup> :0 <sub>b</sub>	C16:1	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	Other	MW	Z <sub>ave</sub>	n <sub>d,ave</sub>	AAD (%) (Eq.13)
Rapeseed (Esteban et al., 2012)	4.70	0.30	1.30	65.3	19.2	8.30	1.10	883.9	17.92	1.30	0.32
Sunflower (Esteban et al., 2012)	6.70	0.30	2.90	38.7	51.3	0.10	0.20	880.5	17.86	1.42	0.33
Soybean (Esteban et al., 2012)	11.20	0.20	2.90	25.2	55.4	5.00	0.20	876.0	17.77	1.51	0.29
Palm (Esteban et al., 2012)	45.60	0.40	3.80	38.5	10.5	0.10	1.00	849.4	17.04	0.60	0.18
Corn (Esteban et al., 2012)	11.40	0.30	1.70	32.8	53.3	0.50	0.20	876.3	17.76	1.41	0.28
Grape Seed (Esteban et al., 2012)	7.20	0.10	3.90	20.2	68.4	0.20	0.20	879.3	17.85	1.57	0.27
Brazil Nut (Ceriani et al., 2008)	15.92	0.35	10.37	37.75	34.93	0.05	0.64	874.6	17.68	1.08	0.09
Buriti (Ceriani et al., 2008)	16.63	0.41	1.21	78.69	1.40	1.25	0.41	875.0	17.66	0.86	0.10
Grape Seed (Ceriani et al., 2008)	6.80	0.14	3.23	20.31	68.89	0.21	0.42	879.9	17.87	1.59	0.12
Macadamia Nut (Rodrigues, Silva, Marsaioli, & Meirelles, 2005)	9.38	19.28	3.40	59.76	2.03	0.14	6.02	866.3	17.49	0.86	0.18
1to1 <sup>c</sup> (Ceriani et al., 2008)	14.07	0.25	2.10	50.65	28.85	3.55	0.54	875.6	17.72	1.19	0.10

ตารางที่ 1 องค์ประกอบกรดไขมันในน้ำมันพืชชนิดต่างๆ (ร้อยละโดยมวล) (ต่อ)

Vegetable Oils	C16 <sup>a</sup> :0	C16:1	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	Other	MW	Z <sub>ave</sub>	n <sub>D,ave</sub>	AAD (%) (Eq.13)
1to2 (Ceriani et al., 2008)	13.23	0.19	2.40	41.38	37.94	4.31	0.55	875.8	17.74	1.31	0.13
1to3 (Ceriani et al., 2008)	12.81	0.16	2.54	36.74	42.46	4.69	0.60	875.9	17.75	1.36	0.17

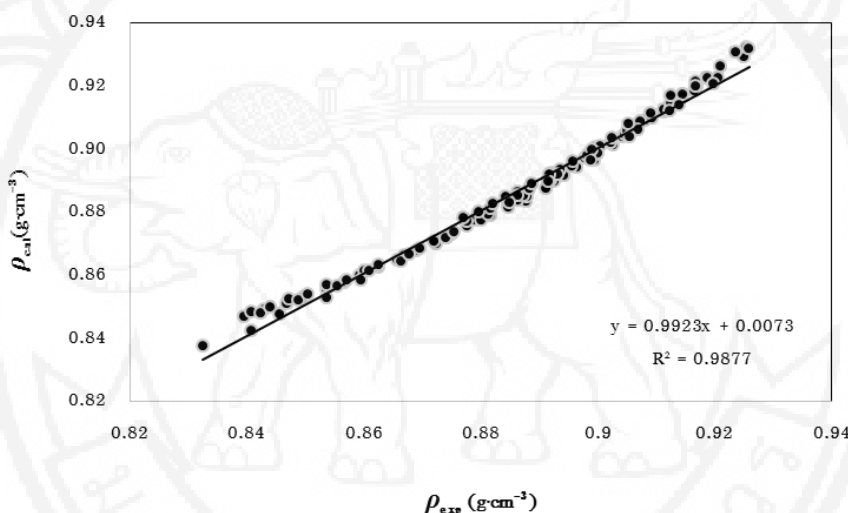
<sup>a</sup> จำนวนอะตอมคาร์บอน

<sup>b</sup> จำนวนพันธะคู่

<sup>c</sup> สัดส่วนโดยปริมาตรของ Buriti oil ต่อ Soybean Oil

เมื่อวาดกราฟความสัมพันธ์ระหว่างค่าความหนาแน่นของน้ำมันพืชชนิดต่างๆ จากการประมาณด้วยสมการที่ (13) กับการทดลอง ได้ดังรูปที่ 3 พบว่ามีความสัมพันธ์เป็นเส้นตรงโดยมีค่า จุดตัด ความชัน สัมประสิทธิ์การตัดสิ้นใจ (R<sup>2</sup>) และค่าความคลาดเคลื่อนมาตรฐาน เท่ากับ

0.0073, 0.9923, 0.9877 และ 0.002 ตามลำดับ เมื่อพิจารณาค่าความชันและค่า R<sup>2</sup> ที่ได้พบว่ามีค่าเข้าใกล้ 1 แสดงให้เห็นว่าค่าที่ได้จากสมการมีค่าใกล้เคียงกับการทดลองมากและมีความสัมพันธ์ในระดับที่สูงมาก



รูปที่ 3 ค่าความหนาแน่นของน้ำมันพืชชนิดต่างๆ ที่ประมาณด้วยสมการที่ (13) เทียบกับผลการทดลองในช่วงอุณหภูมิ 283.15–413.15 K

### สรุป

การโยงความสัมพันธ์ความหนาแน่นของน้ำมันพืชที่อุณหภูมิต่างๆ จากกฎพลังงานอิสระควบรวมร่วมกับโครงสร้างโมเลกุล คือจำนวนอะตอมคาร์บอน และจำนวนพันธะคู่ จากการศึกษาแสดงให้เห็นว่าสมการความสัมพันธ์ที่นำเสนอมีความถูกต้องแม่นยำ มีความสมบูรณ์ตามเงื่อนไขสมการที่ดีและง่ายต่อการใช้งาน ทั้งนี้ถ้าน้ำมันพืชมีสิ่งปนเปื้อนสูง อาทิ เช่น กรดไขมันอิสระ และความชื้น เป็นต้น จะทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนได้เนื่องจากสมการที่นำเสนอพัฒนาจากน้ำมันพืชบริสุทธิ์ การใช้งานสมการที่นำเสนอนอกช่วงอุณหภูมิที่ศึกษาความคลาดเคลื่อนอาจเพิ่มขึ้นได้

### กิตติกรรมประกาศ

คณะผู้วิจัยขอขอบคุณ ศูนย์วิทยาศาสตร์และวิทยาศาสตร์ประยุกต์ คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏบ้านสมเด็จเจ้าพระยา ที่สนับสนุนงบประมาณวิจัย

### เอกสารอ้างอิง

Ceriani, R., Paiva, F. R., Goncalves, C. B., Batista, E. A., & Meirelles, A. J. (2008). Densities and viscosities of vegetable oils of nutritional value. *Journal*





- of *Chemical & Engineering Data*, 53(8), 1846–1853.
- Sansa-ard, C., Aryusuk, K., Lilitchan, S., and Krisnangkura, K. (2011). Free Energy Contribution to Gas Chromatographic Separation of Petroselinic and Oleic Esters. *Chromatography Research International*, 2011.
- Esteban, B., Riba, J. R., Baquero, G., Rius, A., & Puig, R. (2012). Temperature dependence of density and viscosity of vegetable oils. *Biomass and bioenergy*, 42, 164–171.
- Halvorsen, J. D., Mammel, W. C., & Clements, L. D. (1993a). Density estimation for fatty acids and vegetable oils based on their fatty acid composition. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 70(9), 875–880.
- Halvorsen, J. D., Mammel, W. C., & Clements, L. D. (1993b). Density estimation for fatty acids and vegetable oils based on their fatty acid composition. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 70(9), 875–880.
- Martin, A. J. P. (1950). Partition chromatography. *Annual Review of Biochemistry*, 19(1), 517–542.
- Phankosol, S., Chum-in, T., & Krisnangkura, K. (2016). Estimating the Surface Tension of Vegetable oils by Law of Free Energy Additivity. *Naresuan University Journal: Science and Technology*, 24(1), 82–90.
- Phankosol, S., Sudaprasert, K., Lilitchan, S., Aryusuk, K., & Krisnangkura, K. (2014a). Estimation of Density of Biodiesel. *Energy & Fuels*, 28(7), 4633–4641.
- Phankosol, S., Sudaprasert, K., Lilitchan, S., Aryusuk, K., & Krisnangkura, K. (2014b). Estimation of surface tension of fatty acid methyl ester and biodiesel at different temperatures. *Fuel*, 126, 162–168.
- Rackett, H. G. (1970). Equation of state for saturated liquids. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 15(4), 514–517.
- Rodenbush, C. M., Hsieh, F. H., & Viswanath, D. S. (1999). Density and viscosity of vegetable oils. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 76(12), 1415–1419.
- Rodrigues, C. E., Silva, F. A., Marsaioli, A., & Meirelles, A. J. (2005). Deacidification of Brazil Nut and Macadamia Nut Oils by Solvent Extraction: Liquid–Liquid Equilibrium Data at 298.2 K. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 50(2), 517–523.
- Spencer, C. F., & Danner, R. P. (1972). Improved equation for prediction of saturated liquid density. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 17(2), 236–241.