

บทที่ 4

ผลการศึกษาและการวิเคราะห์ผล

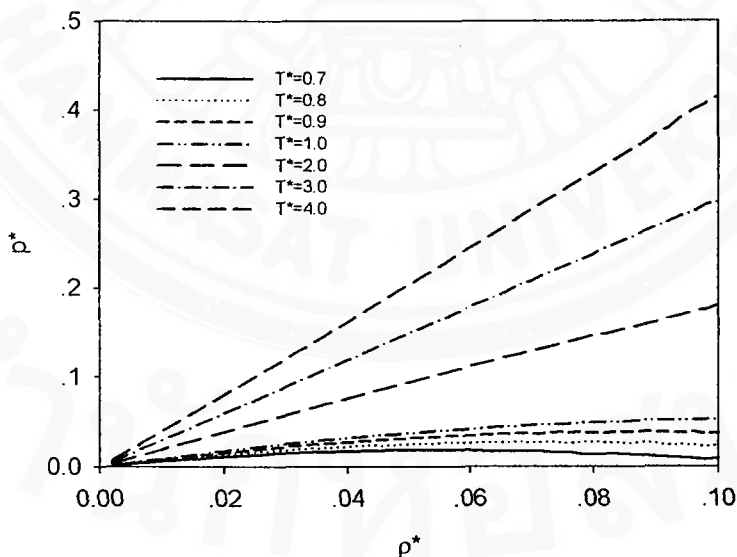
4.1 การคำนวณความดันจากผลการจำลองระบบและการใช้โปรแกรม CATT2 (Computer Aided Thermodynamic Tables 2)

ดังที่กล่าวแล้วว่าในการจำลองระบบปริมาณที่ใช้จะเป็นปริมาณไร้มิติหน่วย reduced properties ดังนั้นเมื่อต้องการจะเปรียบเทียบกับระบบจริง จะต้องคำนวณว่าปริมาณจริงเป็นเท่าไร เช่น เมื่อจำลองระบบ LJ 12-6 ที่ความหนาแน่น $\rho^* = 0.002$ และที่อุณหภูมิ $T^* = 1.0$ จะได้ค่า $p^* = 0.001987$ ถ้าระบบที่สนใจเป็น methane จะสามารถหาค่า parameter ได้ดังนี้ molecular weight = 16.04, $\sigma = 3.78 \text{ \AA}$ และ $\varepsilon/k = 154 \text{ K}$ (Bird และคณะ, 1960) ค่าดังกล่าวได้แสดงไว้ในตารางที่ 1 ในภาคผนวก 1 ดังนั้น จะได้ว่า methane ที่สภาวะอุณหภูมิจริงคือ $T = T^* (\varepsilon/k) = 1(154) = 154 \text{ K} = -119^\circ \text{C}$ และที่ความหนาแน่น $\rho = \rho^* / \sigma^3 = 0.002 / (3.78 \times 10^{-10})^3 = 3.70 \times 10^{25}$ molecule/m³ หรือทำเป็นปริมาตรจำเพาะได้เป็น 1.01 m³/kg จะได้ความดัน $p = p^* \varepsilon / \sigma^3 = 0.078206 \text{ MPa}$

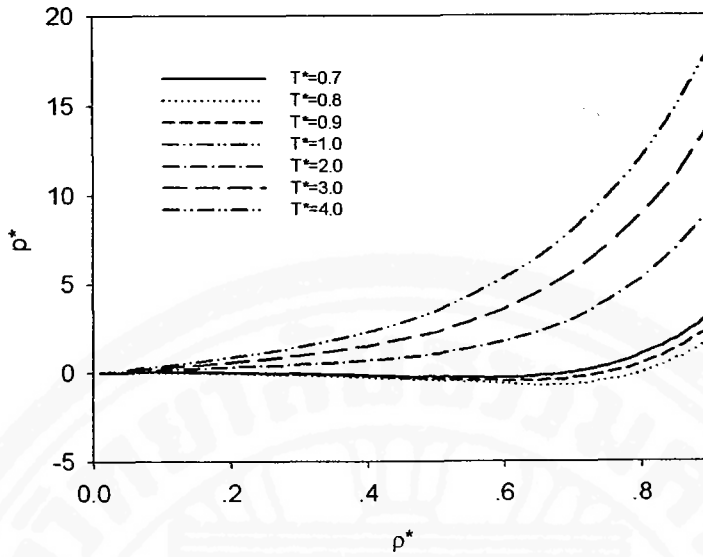
วิธีการใช้โปรแกรม CATT2 นั้นได้อธิบายไว้อย่างละเอียดในภาคผนวก 3 เมื่อใช้ปริมาณในระบบหน่วย SI จะต้องใช้อุณหภูมิเป็นองศาเซลเซียส และปริมาตรจำเพาะหน่วยลูกบาศก์เมตรต่อกิโลกรัม และคำนวณความดันออกมาเป็นหน่วยเมกะปาสคาล เมื่อใส่ค่าคุณสมบัติสองชนิดของ methane ในโปรแกรมแล้วพบว่าผลจากการทดลองได้ความดัน 0.07825 MPa ดังนั้น % ผิดพลาดจากการคำนวณโดยการจำลองระบบคือ $(0.07825 - 0.078206) / 0.07825 \times 100 = 0.057\%$ เมื่อเปรียบเทียบกับค่าที่ได้จาก ideal gas law จะได้ $p = 0.079032 \text{ MPa}$ เมื่อคิด % ความผิดพลาดจาก ideal gas law จะได้ = 1.0 % จะเห็นว่าค่าที่ได้จากการจำลองระบบใกล้เคียงกับค่าจากการทดลองมากกว่าจากการคำนวณโดย ideal gas law ในหัวข้อ 4.2 ได้แสดงผลของการคำนวณที่ความหนาแน่นและอุณหภูมิต่างๆ สำหรับของไหล LJ 12-6 ส่วนหัวข้อ 4.3 แสดงการเปรียบเทียบโครงสร้างของของไหล LJ 12-6 ที่อุณหภูมิและความหนาแน่นต่างกัน และได้เปรียบเทียบค่าความดันของมีเทนและน้ำจากการจำลองระบบและ CATT2 ที่ความหนาแน่นต่างๆ ในหัวข้อ 4.4.1 และเปรียบเทียบที่ความหนาแน่นสูงขึ้นในหัวข้อ 4.4.2 รวมถึงเปรียบเทียบสารต่าง ๆ ในหัวข้อ 4.4.3

4.2 ความสัมพันธ์ของ reduced pressure กับ reduced density ของ LJ Fluid ที่อุณหภูมิต่างๆ

เมื่อนำผลของ reduced pressure กับ reduced density มาวาดกราฟจะได้ดังรูปที่ 4.1 สำหรับระบบความหนาแน่นต่ำๆ (น้อยกว่า 0.10) และรูปที่ 4.2 สำหรับระบบที่มีความหนาแน่นสูงขึ้นจนถึง 0.9 แต่ละกราฟแสดงความสัมพันธ์ที่อุณหภูมิต่างๆ จะเห็นได้ว่า ที่ความหนาแน่นต่ำๆ ที่อุณหภูมิต่ำมากคือ $T^*=1.0$ ถึง 4.0 จะพบว่าความสัมพันธ์ของความดันและความหนาแน่นเกือบจะเป็นเส้นตรง ซึ่งใกล้เคียงกับความสัมพันธ์ที่แสดงโดย ideal gas law เมื่อความหนาแน่นอาจถูกพิจารณาว่าเป็นส่วนกลับของปริมาตรจำเพาะ ที่ความหนาแน่นสูงขึ้นความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นจะไม่เป็นเส้นตรงอีกต่อไป ซึ่งคาดว่าจะให้ผลทำนายความดันได้ถูกต้องมากกว่า ideal gas law ในช่วงดังกล่าว สำหรับที่ระบบที่มีอุณหภูมิต่ำๆ ($T^* < 1.0$) ไม่ว่าจะเป็นที่ความหนาแน่นต่ำๆ หรือสูงขึ้นความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นจะไม่เป็นเส้นตรง และพบว่าค่าของความดันจะมีค่าน้อยกว่าศูนย์ด้วยซึ่งเป็นความผิดพลาดจากการทำ simulation ในบริเวณความหนาแน่นที่เป็นของผสมระหว่างของเหลวและก๊าซ ซึ่งสอดคล้องกับผลการคำนวณของงานวิจัยอื่นๆ (Frenkel และ Smit, 1996) ซึ่งได้ค่าของความดันในช่วงของผสมของเหลวและก๊าซไม่คงที่ ซึ่งจริงๆ จะต้องเป็นค่าคงที่ในสถานะ saturation ดังกล่าว และในบางครั้งได้ค่าความดันน้อยกว่าศูนย์ด้วย สำหรับการเปรียบเทียบค่าของความดันจริงของสารมีเซนและน้ำจะแสดงไว้ในหัวข้อ 4.3



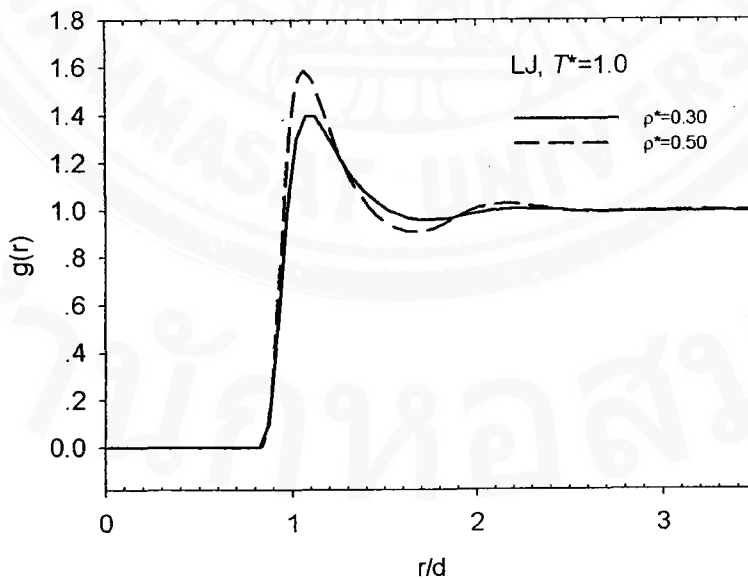
รูปที่ 4.1 แสดงความสัมพันธ์ของ p^* และ ρ^* ที่ T^* ต่างๆ จากผลการจำลองระบบเมื่อความหนาแน่นของระบบต่ำๆ



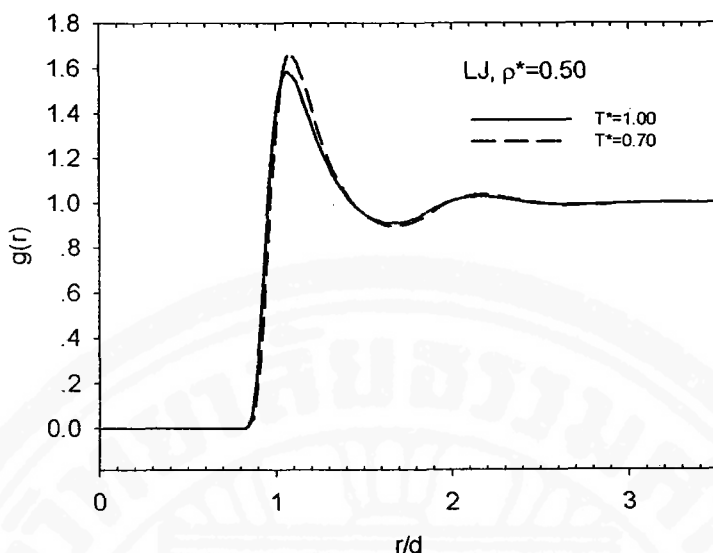
รูปที่ 4.2 แสดงความสัมพันธ์ของ p^* และ ρ^* ที่ T^* ต่างๆ จากผลการจำลองระบบเมื่อความหนาแน่นสูงขึ้น

นอกจากความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นแล้ว กราฟของ radial distribution function ได้แสดงเพื่อเปรียบเทียบโครงสร้างของสาร LJ ที่ความหนาแน่นและอุณหภูมิต่างๆ กันด้วย ดังแสดงในหัวข้อถัดต่อไปนี้

4.3 ฟังก์ชัน radial distribution function ของ LJ Fluid



รูปที่ 4.3 แสดงฟังก์ชัน $g(r)$ ของ Lennard Jones Fluids ที่อุณหภูมิเดียวกันแต่ต่างความหนาแน่น



รูปที่ 4.4 แสดงฟังก์ชัน $g(r)$ ของ Lennard Jones Fluids ที่ความหนาแน่นเดียวกันแต่ต่างอุณหภูมิ

รูปที่ 4.3 แสดงค่า $g(r)$ ที่อุณหภูมิต่างกันที่ $T^*=1.0$ พบว่า ระบบที่มีความหนาแน่นมากกว่า ($\rho^* = 0.5$) จะมีความสูงของกราฟสูงกว่าระบบที่มีความหนาแน่นน้อยกว่า ($\rho^* = 0.3$) และพบว่าเริ่มเห็น peak ที่สองของกราฟในระบบที่มีความหนาแน่นสูง ทั้งนี้เนื่องจาก ระบบที่มีความหนาแน่นมากกว่าจะทำให้โมเลกุลของสารอยู่ใกล้กันมากขึ้นและทำให้โครงสร้างมีความเป็นระเบียบมากขึ้น โมเลกุลจำนวนมากขึ้นนี้จะส่งผลให้แรงกระทำระหว่างโมเลกุลในระบบมากขึ้นด้วย ซึ่งทำให้ความดันของระบบเพิ่มขึ้นตามรูป 4.1 และ 4.2 สำหรับรูปที่ 4.4 นั้นเป็นภาพแสดง $g(r)$ ที่ระบบความหนาแน่นเท่ากันคือ $\rho^* = 0.5$ แต่อยู่ที่อุณหภูมิต่างกันนั่นคือ $T^*=0.7$ และ 1.0 จะพบว่า ยอด peak แรกของกราฟที่ $T^*=0.7$ สูงกว่าที่ $T^*=1.0$ เล็กน้อย แสดงให้เห็นว่าที่อุณหภูมิต่ำลงจะทำให้โมเลกุลของสารอยู่ใกล้กันมากขึ้น ทั้งนี้เนื่องจาก ที่อุณหภูมิต่ำลงจะทำให้ความแรงของแรงดึงดูดระหว่างอนุภาคมีมากขึ้นนั่นเอง ผลที่ได้สอดคล้องกับรูปที่ 4.1 และ 4.2 เมื่อเปรียบเทียบที่ความหนาแน่นเท่ากัน จะได้ว่าสารที่อุณหภูมิต่ำกว่ามีความดันมากกว่าเนื่องจากการจัดเรียงตัวมีความใกล้กันมากกว่านั่นเอง และจุดที่ให้ยอดกราฟสูงสุดจะอยู่บริเวณ $r^*=r/d$ ประมาณ 1.12 ซึ่งเป็นจุดที่พลังงานต่ำสุดใน LJ 12-6 ค่าของ $g(r)$ นั้น สามารถนำมาใช้ในการประมาณค่าต่าง ๆ ทางอุณหพลศาสตร์ได้รวมถึงความดันด้วยซึ่งสามารถคำนวณจากความสัมพันธ์

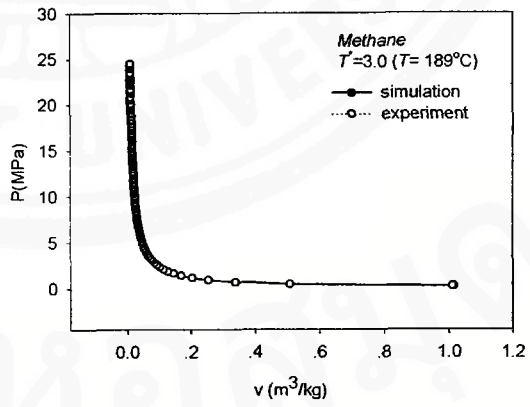
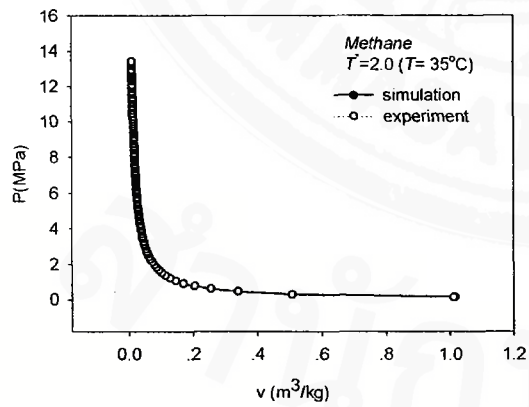
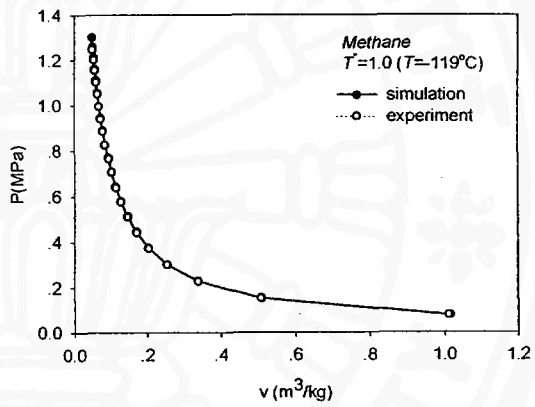
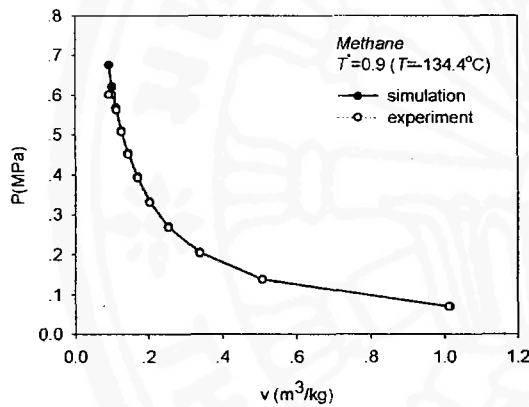
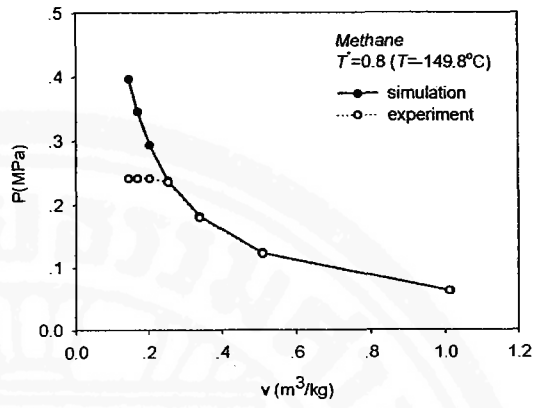
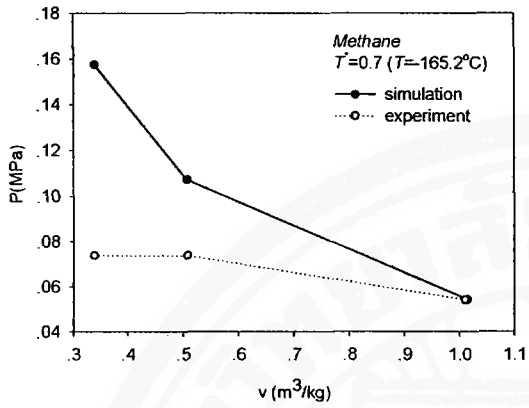
$$\frac{p^*}{kT} = \rho^* - \frac{\rho^{*2}}{6kT} \int_0^\infty ru'(r) g(r) 4\pi r^2 dr \quad \dots(4.1)$$

แต่จะขอละไว้ไม่กล่าวถึงในที่นี้ ผู้สนใจสามารถค้นหารายละเอียดได้จาก McQuarrie (1976)

4.4 เปรียบเทียบความดันจากการคำนวณโดยการจำลองระบบกับค่าจาก CATT2 ที่อุณหภูมิต่างๆ

4.4.1 ที่ความหนาแน่นต่ำ

สำหรับ **Methane** ค่าพารามิเตอร์ $\sigma = 3.78 \text{ \AA}$ และ $\epsilon/k = 154 \text{ K}$



รูปที่ 4.5 เปรียบเทียบค่าความดันที่ได้จากการจำลองระบบกับจากโปรแกรม CATT2 ของสารมีเทนที่อุณหภูมิต่างๆ กัน (a) $T^* = 0.7$, (b) $T^* = 0.8$, (c) $T^* = 0.9$, (d) $T^* = 1.0$, (e) $T^* = 2.0$, และ (f) $T^* = 3.0$

รูปที่ 4.5 เปรียบเทียบค่าความดัน (MPa) ที่คำนวณได้จากการจำลองระบบกับค่าที่ได้จากโปรแกรม CATT2 ของสารมีเซนที่อุณหภูมิต่างๆ กัน จะพบว่าที่อุณหภูมิไร้หน่วย $T^*=0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 2.0,$ และ 3.0 จะเทียบกับอุณหภูมิจริงคือ $-165.2, -149.8, -134.4, -119, 35,$ และ 189 °C ตามลำดับ โดยค่าที่แสดงในรูปจะแสดงในช่วงความหนาแน่นต่ำๆ หรือปริมาตรจำเพาะสูง (m^3/kg) ในช่วงที่ค่าจากโปรแกรม CATT2 เริ่มกับค่าจากการจำลองระบบสอดคล้องกันอย่างนั้นคือในบริเวณที่สารเป็นเฟสเดียว ค่าจาก CATT2 กับค่าจากการจำลองระบบจะเริ่มแตกต่างกันมากเมื่อระบบเป็นของผสมของของเหลวและก๊าซ (ค่าที่เป็นตัวเลขได้แสดงไว้ในตารางในภาคผนวก ตารางที่ 1 ถึง 7) ดังอธิบายได้ดังนี้

ที่อุณหภูมิ -165.2 °C มีเพียงจุดเดียวที่ได้ค่าใกล้เคียงกัน มีความแตกต่างเพียง 0.48% เท่านั้น และสารมีเซนอยู่ในเฟส superheated จะเห็นว่ากราฟของค่าจริงจะเป็นเส้นตรงแสดงถึงความดันคงที่ ซึ่งเป็นสถานะของผสมของของเหลวและก๊าซนั่นเอง

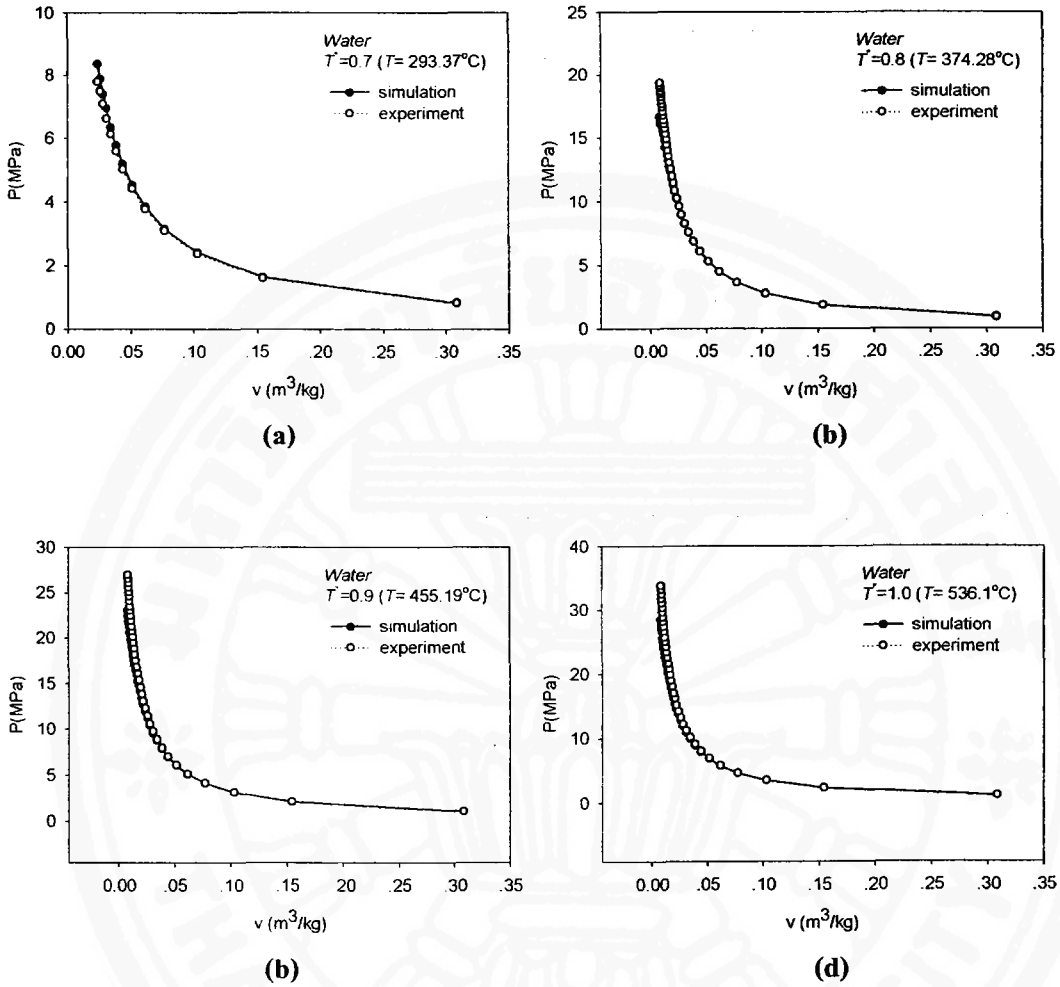
ที่อุณหภูมิสูงขึ้น ($-149.8, -134.4,$ และ -119 °C) มีจุดที่ค่าใกล้เคียงกันมากขึ้น และความแตกต่างมีไม่เกิน 1% ในช่วงที่เป็นเฟส superheated ค่าจากการจำลองระบบให้ค่าที่ดีกว่า ideal gas law ซึ่งให้ค่าความแตกต่างจากค่าจาก CATT2 ถึง 25%

ที่อุณหภูมิ 35 และ 189 °C สถานะของมีเซนเป็น dense fluid คือที่อุณหภูมิสูงกว่าอุณหภูมิวิกฤตของมีเซนคือที่ -81.9 °C ซึ่งค่าที่ได้จากการทดลองที่ความหนาแน่นน้อยๆ จะใกล้เคียงกับค่าจาก CATT2 และแตกต่างกันมากขึ้นที่ความหนาแน่นมากขึ้น อย่างไรก็ตามค่าจากการจำลองระบบยังให้ค่าที่ใกล้เคียงกับ CATT2 มากกว่าจาก ideal gas law

โดยทั่วไปเมื่อจำลองระบบโดยใช้คอมพิวเตอร์นั้น จะให้ความถูกต้องมากที่ความหนาแน่นต่ำๆ และอุณหภูมิสูงๆ และจะแย้ขึ้นที่ความหนาแน่นสูงขึ้นและที่อุณหภูมิต่ำๆ ดังจะเห็นการเปรียบเทียบในหัวข้อ 4.6 สำหรับสารมีเซนนั้นเมื่อใช้โปรแกรม CATT2 จะมี database ในช่วงถึง $T=189$ °C เท่านั้น สำหรับอุณหภูมิสูงเกินกว่านี้ จะไม่สามารถใช้โปรแกรมได้ จะเห็นว่าการจำลองระบบของนั้นคล่องตัวในเรื่องของการทำนายความดันที่อุณหภูมิต่ำๆ ทุกอุณหภูมิ และจะให้ผลดีที่อุณหภูมิสูง

สำหรับน้ำ (Water)

ค่าพารามิเตอร์ $\sigma = 2.641 \text{ \AA}$ และ $\epsilon/k = 809.1 \text{ K}$



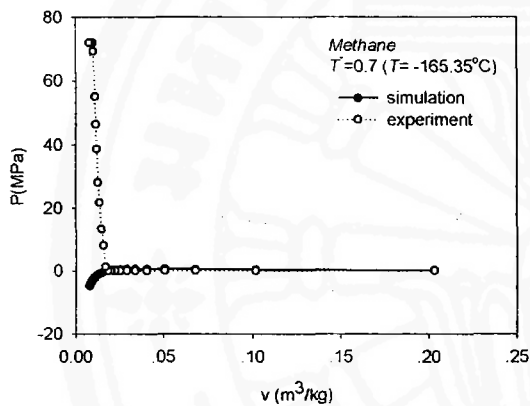
รูปที่ 4.6 เปรียบเทียบค่าความดันที่ได้จากการจำลองระบบกับจากโปรแกรม CATT2 ของน้ำที่อุณหภูมิต่าง ๆ กัน (a) $T^* = 0.7$, (b) $T^* = 0.8$, (c) $T^* = 0.9$, และ (d) $T^* = 1.0$

รูปที่ 4.6 เปรียบเทียบค่าความดัน ที่คำนวณได้จากการจำลองระบบกับค่าที่ได้จากโปรแกรม CATT2 ของน้ำ ที่อุณหภูมิต่าง ๆ กัน จะพบว่าที่อุณหภูมิไร่น้อย $T^* = 0.7, 0.8, 0.9$, และ 1.0 จะเทียบกับอุณหภูมิจริงคือ $293.37, 374.28, 455.19$ และ 536.1°C ตามลำดับ (ค่าที่เป็นตัวเลขได้แสดงไว้ในตารางในภาคผนวก ตารางที่ 8 ถึง 11) ข้อมูลสำหรับน้ำที่อุณหภูมิสูงเกินกว่า 536.1°C ไม่สามารถหาได้จากโปรแกรม CATT2 จึงเปรียบเทียบค่าถึงเพียงอุณหภูมินั้น สถานะของน้ำที่เปรียบเทียบในรูป 4.6(a) คือที่ 293.37°C นั้นอยู่ในสถานะ superheated ซึ่งให้ค่าความแตกต่างไม่เกิน 5% และเมื่อใช้

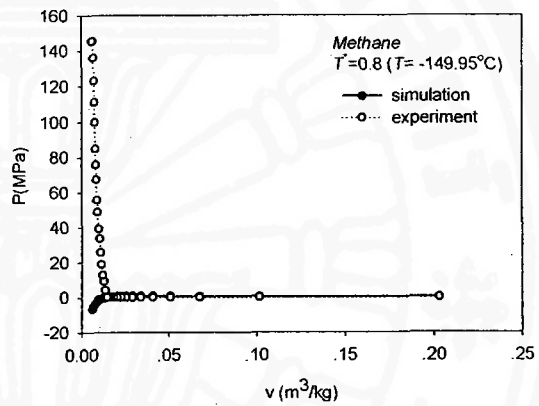
ideal gas law จะให้ความแตกต่างถึง 35% สำหรับที่อุณหภูมิอื่นๆ สภาวะที่เปรียบเทียบอยู่ในสถานะ dense fluid คือที่อุณหภูมิสูงเกินอุณหภูมิวิกฤตของน้ำคือที่ $374.15\text{ }^{\circ}\text{C}$ สำหรับที่อุณหภูมิ $374.28\text{ }^{\circ}\text{C}$ นั้นใกล้เคียงกับจุดวิกฤตของน้ำมาก ซึ่งการจำลองระบบสามารถให้ผลของความดันได้ใกล้เคียงกับ CATT2 ดีกว่า ideal gas law เป็นอย่างมาก และเช่นเดียวกับระบบมีเทนที่เมื่ออุณหภูมิของระบบสูงขึ้น และที่ความหนาแน่นต่ำๆ การจำลองระบบให้ผลใกล้เคียงกับ CATT2 มากขึ้น

4.4.2 ที่ความหนาแน่นสูง

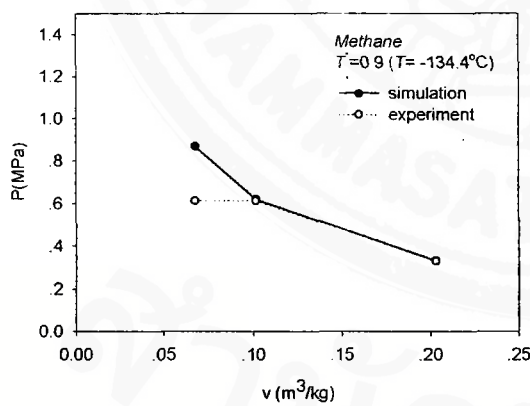
สำหรับ Methane



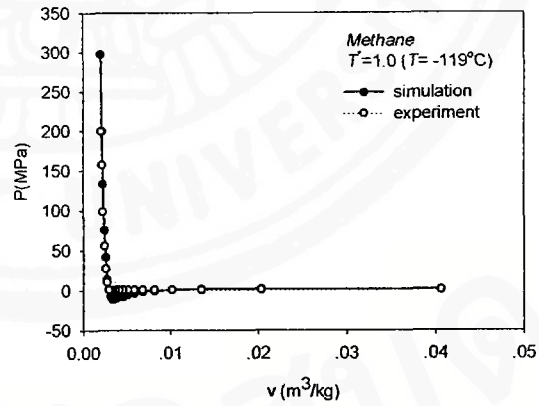
(a)



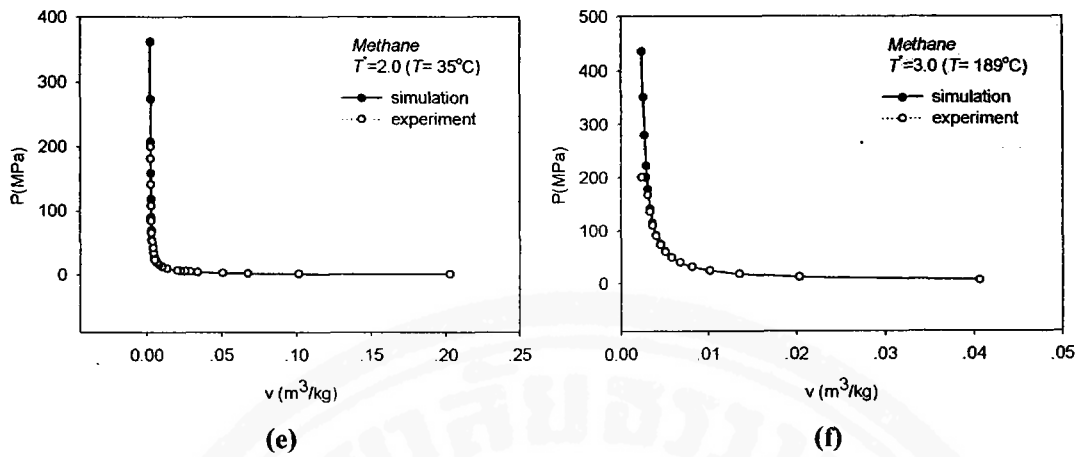
(b)



(c)



(d)

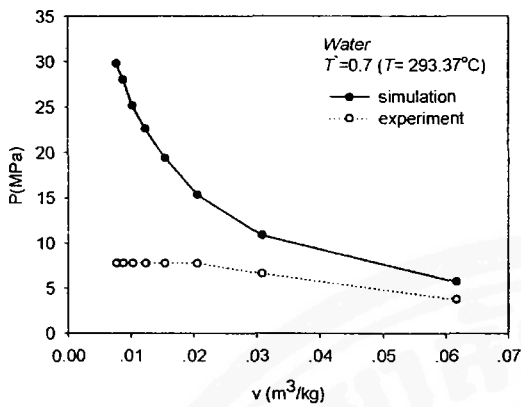


รูปที่ 4.7 เปรียบเทียบค่าความดันที่ได้จากการจำลองระบบกับจากโปรแกรม CATT2 ของสารมีเทนที่อุณหภูมิต่าง ๆ กัน (a) $T^* = 0.7$, (b) $T^* = 0.8$, (c) $T^* = 0.9$, (d) $T^* = 1.0$, (e) $T^* = 2.0$, และ (f) $T^* = 3.0$ ที่ความหนาแน่นสูงขึ้นไป

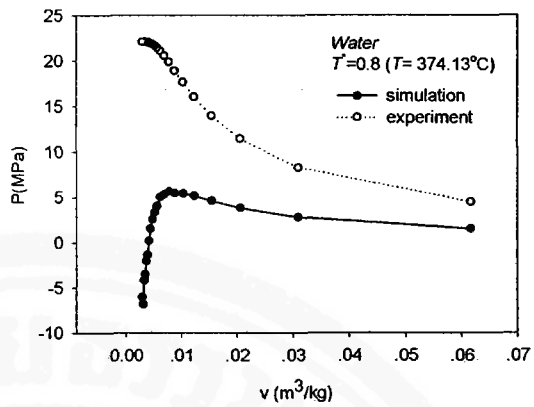
การเปรียบเทียบผลของการจำลองระบบและค่าจาก CATT2 ที่ความหนาแน่นสูงของสารมีเทน ได้แสดงไว้ในรูป 4.7 (a)-(f) สำหรับค่าตัวเลขที่คำนวณได้แสดงไว้ในตารางที่ 12 ถึง 17 ในภาคผนวก ในรูป 4.7(a)-(d) ค่าจากการจำลองระบบใกล้เคียงกับค่าจาก CATT2 ที่ความหนาแน่นต่ำ (ปริมาตรจำเพาะสูง) และแตกต่างกันอย่างมากที่ปริมาตรจำเพาะต่ำ ๆ นั่นคือที่สถานะที่เป็นของเหลว การจำลองระบบให้ผลไม่ดี ในรูป 4.7(d) ค่าความดันจากการจำลองระบบมีบางค่าที่น้อยกว่าศูนย์ดังที่ได้กล่าวไว้แล้วในหัวข้อ 4.2 สำหรับรูป 4.7(e)-(f) ที่อุณหภูมิที่สูงขึ้นนั้นการเปรียบเทียบทำในเฟสของ dense fluid ซึ่งจะได้ค่าจากการจำลองระบบมีค่าแตกต่างจาก CATT2 น้อยกว่า 10%

จะเห็นว่า การจำลองระบบที่ความหนาแน่นสูงจะให้ผลไม่ดัดนัก โดยเฉพาะอย่างยิ่งที่อุณหภูมิของระบบต่ำๆ ทั้งนี้เนื่องจากการจำลองพลังงานศักย์นั้นสมมติว่าแรงกระทำต่อโมเลกุลใดๆ มาจากผลรวมของแรงกระทำของโมเลกุลนั้นกับโมเลกุลอื่นๆ ทั้งหมดในระบบ นั่นคือพลังงานศักย์เป็นแบบ pair-wise potential ซึ่งจะให้ผลที่ถูกต้องในระบบที่มีผลของแรงดึงดูดไม่มากนัก นั่นคือมีจำนวนโมเลกุลไม่มากและมีความแรงของแรงดึงดูด (strength of interaction) ไม่มากนักคือที่อุณหภูมิไม่ต่ำมากนักเอง การการคำนวณความดันให้ถูกต้องมากยิ่งขึ้น จึงต้องคำนึงถึงผลของอนุภาคหลายๆ (multi-body interaction) ในระบบ โดยอาจเริ่มจาก three-body interaction ซึ่งเป็นผลของสามอนุภาคที่มีต่ออนุภาคอ้างอิงใดๆ ซึ่งจะทำให้การจำลองระบบซับซ้อนยิ่งขึ้น

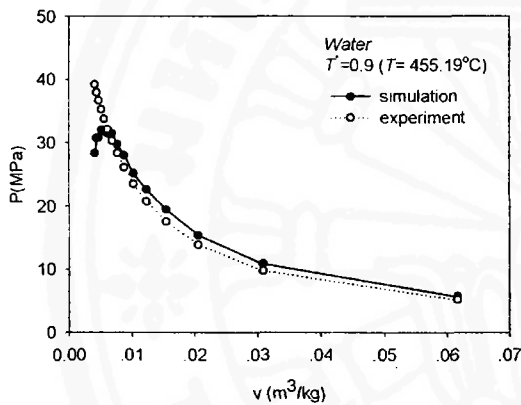
สำหรับน้ำ (Water)



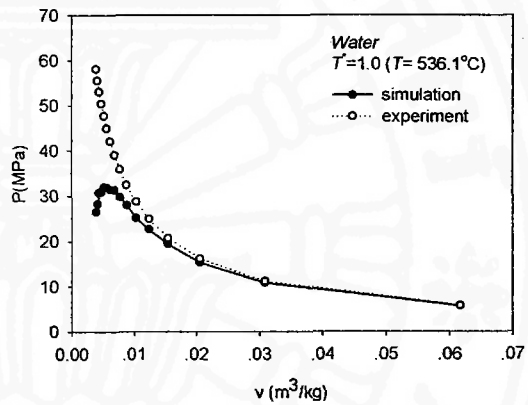
(a)



(b)



(c)



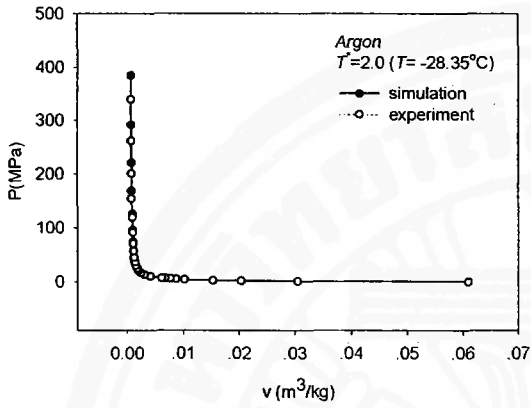
(d)

รูปที่ 4.8 เปรียบเทียบค่าความดันที่ได้จากการจำลองระบบกับจากโปรแกรม CATT2 ของน้ำที่อุณหภูมิต่าง ๆ กัน (a) $T^* = 0.7$, (b) $T^* = 0.8$, (c) $T^* = 0.9$, และ (d) $T^* = 1.0$ ที่ความหนาแน่นสูงขึ้น

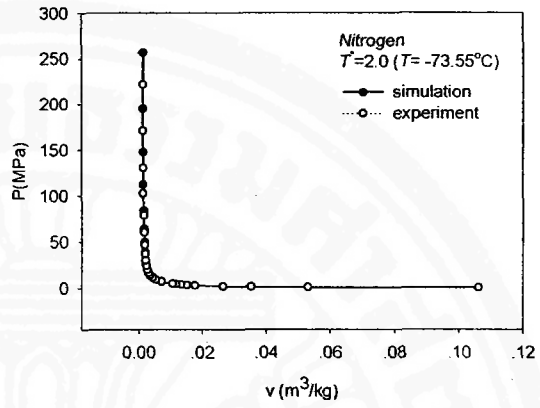
ความสัมพันธ์ของความดันและปริมาตรจำเพาะ (ที่ความหนาแน่นของระบบมากขึ้น) ของน้ำได้แสดงไว้ในรูปที่ 4.8 และค่าตัวเลขที่ได้จากการคำนวณได้แสดงไว้ในตารางที่ 18 ถึง 21 ในภาคผนวก จากรูปทั้ง 4 จะเห็นได้อย่างชัดเจนว่า เมื่ออุณหภูมิของระบบสูงขึ้น จะทำให้ค่าที่ได้จากการจำลองระบบเข้าใกล้ค่าที่ได้จากการทดลอง CATT2 มากขึ้น สถานะที่เปรียบเทียบในรูปนั้นต่าง ๆ กัน คือ เป็น superheated, liquid-gas mixture และ compressed liquid ในรูป 4.8 (a)-(b) และเป็น dense fluid ในรูป 4.8 (c)-(d) ผลจากการจำลองระบบของน้ำนั้นจะให้ผลไม่ดีเท่าของมีเซนดังสังเกตเห็นได้จากรูป ทั้งนี้เนื่องมาจาก น้ำมีโครงสร้างโมเลกุลที่มีขั้วในขณะที่สารมีเซนเป็นสารไม่มีขั้ว ซึ่งทำให้การจำลองพลังงานศักย์โดย LJ 12-6 นั้นใช้ได้ดีกว่ามีเซนมากกว่าน้ำ ในหัวข้อต่อไป จะเปรียบเทียบที่

ผลของสารต่างๆ นอกจากน้ำและมีเทนที่อุณหภูมิเดียวกัน เพื่อดูว่า LJ-12-6 สามารถใช้กับสารอื่นๆ ได้
อีกหรือไม่

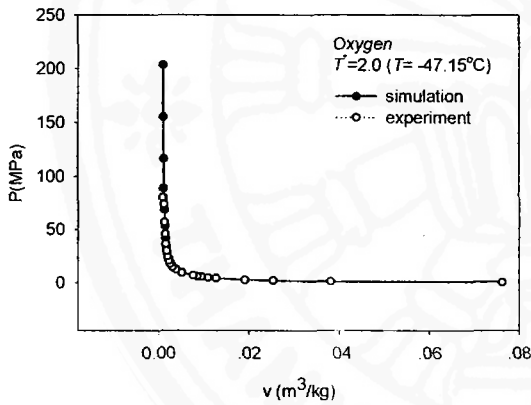
4.4.3 เปรียบเทียบผลจากการจำลองระบบและ CATT2 ของสารต่างๆ ที่อุณหภูมิ $T^* = 2.0$



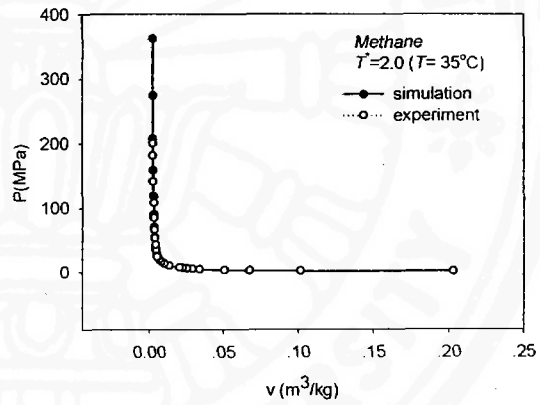
(a)



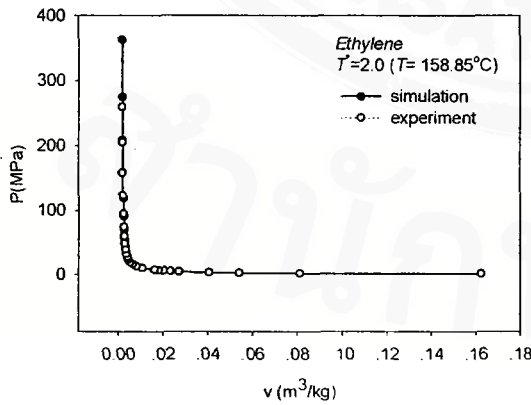
(b)



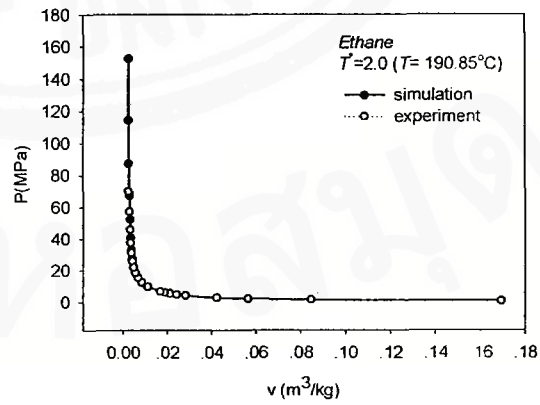
(c)



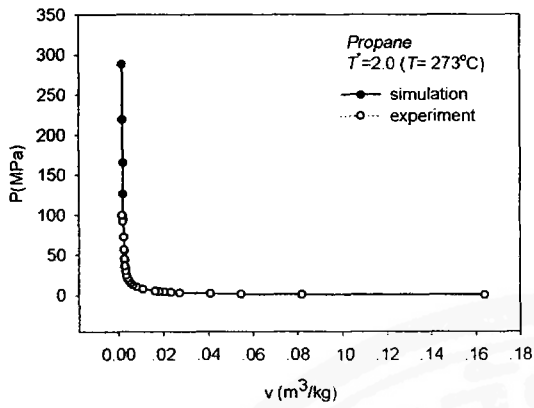
(d)



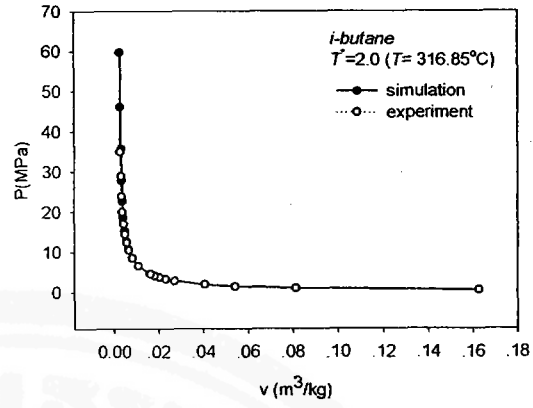
(e)



(f)



(f)



(h)

รูปที่ 4.9 เปรียบเทียบค่าความดันที่ได้จากการจำลองระบบกับจากโปรแกรม CATT2 ของสารหลายชนิดที่อุณหภูมิ $T^*=2.0$ เดียวกัน (a) argon, (b) nitrogen, (c) oxygen, (d) methane, (e) ethylene, (f) ethane, (g) propane, และ (h) i-butane

ความสัมพันธ์ของความดันและปริมาตรจำเพาะสำหรับสารต่าง ๆ ได้แก่ อาร์กอน ไนโตรเจน ออกซิเจน มีเทน อีเทน เอธิลีน โพรเพน และ ไอ-บิวเทน แสดงไว้ในรูปที่ 4.9 (a) ถึง (h) ตามลำดับ สารที่เลือกมานี้เป็นสารที่มีข้อมูลในโปรแกรม CATT2 นั่นเอง โดยจะเห็นว่าอาร์กอนนั้นเป็นสารอะตอมเดี่ยว ไนโตรเจนและออกซิเจนเป็นสารอะตอมคู่ สำหรับสารอื่นๆ คือสารที่มีจำนวนคาร์บอนมากขึ้น ในอะตอม (โมเลกุลมีขนาดใหญ่ขึ้น) ค่าที่ได้จากการคำนวณนั้นได้แสดงไว้ในตารางที่ 23 ถึง 29 ในภาคผนวก สารทุกสารนั้นเปรียบเทียบกันที่อุณหภูมิ $T^*=2.0$ ซึ่งเท่ากับ $-28.35\text{ }^{\circ}\text{C}$ สำหรับอาร์กอน $-73.55\text{ }^{\circ}\text{C}$ สำหรับไนโตรเจน $-47.15\text{ }^{\circ}\text{C}$ สำหรับออกซิเจน $35\text{ }^{\circ}\text{C}$ สำหรับมีเทน $158.85\text{ }^{\circ}\text{C}$ สำหรับเอธิลีน $190.85\text{ }^{\circ}\text{C}$ สำหรับอีเทน $273\text{ }^{\circ}\text{C}$ สำหรับโพรเพน และ $316.85\text{ }^{\circ}\text{C}$ สำหรับไอ-บิวเทน นั่นคืออุณหภูมิจริงสูงขึ้นตามขนาดของโมเลกุล (เนื่องจากค่าพารามิเตอร์ ϵ/k มากขึ้น) สำหรับทุกสารที่นำมาเปรียบเทียบในที่นี้ มีสถานะเป็น dense fluid ทั้งสิ้นเพราะอุณหภูมิดังกล่าวสูงเกินกว่าอุณหภูมิวิกฤต

จากการเปรียบเทียบพบว่าสำหรับทุกสารที่ความหนาแน่นต่ำๆ การจำลองระบบให้ผลที่ใกล้เคียงกับ CATT2 อย่างมาก และแย่งที่ความหนาแน่นมากขึ้น การจำลองระบบให้ผลดีขึ้นที่ความหนาแน่นสูงกว่าสำหรับสารที่มีโมเลกุลขนาดเล็กๆ กว่าเนื่องจากในการประมาณแบบจำลองพลังงานศักย์นั้น มีการสมมติว่าโมเลกุลเป็นทรงกลมที่มีขนาดเป็น σ ซึ่งสมมติฐานดังกล่าวจะถูกต้องสำหรับสารโมเลกุลเล็กๆ และแย่งสำหรับสารโมเลกุลใหญ่ขึ้นอย่าง i-butane ซึ่งเป็นสายของคาร์บอนที่ยาวขึ้น