การจำลองการกลั่นแบบแบตช์ของสารละลายที่ประกอบด้วย เมทานอล ไกลออกซอลเรซิน น้ำ และฟอร์มาลดีไฮด์

นายสมบัติ อินต๊ะวิชัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2539
ISBN 974-634-334-3
ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

I17761641

BATCH DISTILLATION SIMULATION OF A SOLUTION CONTAINING METHANOL GLYOXALRESINS WATER AND FOR MALDEHYDE

Mr. Sombat Intavichai

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Engineering

Department of Chemical Engineering

Graduate School

Chulalongkorn University

1996

ISBN 974-634-334-3

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การจำลองการกลั่นแบบแบตช์ของสารละลายที่ประกอบด้วย เมทานอล ไกลออกซอลเรซิน น้ำ และฟอร์มาลดีไฮด์
โดย	นายสมบัติ อินต๊ะวิชัย
ภาควิชา	วิศวกรรมเคมี
อาจารย์ที่ปรึกษา	อาจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช
อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม	คุณสุธน ชื่นโชคสันต์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

..... คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

(รองศาสตราจารย์ ดร. สันติ ถุงสุวรรณ)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ

(ศาสตราจารย์ ดร. ปิยะสาร ประเสริฐธรรม)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา

(อาจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช)

..... อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

(คุณสุธน ชื่นโชคสันต์)

..... กรรมการ

(อาจารย์ ดร. สมประสงค์ ศรีชัย)

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวเพียงแผ่นเดียว

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สมบัติ อินต๊ะวิชัย : การจำลองการกลั่นแบทแบทช์ของสารละลายที่ประกอบด้วย เมทานอล ไกลออกซอลเรซิน น้ำ และฟอร์มาลดีไฮด์ (BATCH DISTILLATION SIMULATION OF A SOLUTION CONTAINING METHANOL,GLYOXALRESINS,WATER AND FORMADEHYDE) อ.ที่ปรึกษา : อ.ดร. เดชา ทัตรศิริเวช, อ.ที่ปรึกษาร่วม : คุณสุธน ชื่นโชคสันต์, 147 หน้า. ISBN 974-634-334-3

แบบจำลองคณิตศาสตร์ของสมดุลไอ-ของเหลวที่สภาวะความดันต่ำ ได้ถูกพัฒนาขึ้นโดยพิจารณาจากโครงสร้างโมเลกุลของสารประกอบ เพื่อใช้ทำนายค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆ ทางอุณหพลศาสตร์ของระบบของเหลวขององค์ประกอบ ที่ประกอบด้วย น้ำ เมทานอล ไกลออกซอลเรซิน และฟอร์มาลดีไฮด์ และเพื่อใช้จำลองพฤติกรรมการกลั่นแยกน้ำ เมทานอล และฟอร์มาลดีไฮด์จากไกลออกซอลเรซินแบทแบทช์ ซึ่งประกอบด้วยขั้นสมดุลเพียงขั้นเดียวภายใต้ความดันต่ำกว่าความดันบรรยากาศ ซึ่งพบว่าสามารถแยกเมทานอลความเข้มข้นสูงปริมาณมากได้ในช่วงเวลาการกลั่น 0.75 ชั่วโมงแรกที่ความดัน 0.21 บรรยากาศ

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา ..... ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ปีการศึกษา 2538 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

C416721 MAJOR CHEMICAL ENGINEERING
KEY WORD: BATCH DISTILLATION/ GLYOXALRESINS/ METHANOL/ WATER
SOMBAT INTAVICHAI : BATCH DISTILLATION SIMULATION OF A SOLUTION CONTAINING METHANOL, GLYOXALRESINS, WATER AND FORMALDEHYDE. THESIS ADVISOR : DR.DEACHA CHATSIRIWECH, THESIS CO-ADVISOR : MR.SUTHON CHUENCHOKSANT, 147 pp.
ISBN 974-634-334-3

A mathematical model of vapour-liquid equilibrium at low pressure was developed on molecular structures of compounds. The model was employed to estimate thermodynamic parameter for a multicomponent system consisting of water, methanol, glyoxal resin and formadehyde. In addition, the model was employed to simulate a single equilibrium batch distillation system under sub-atmospheric pressure for separation of water, methanol and formadehyde from glyoxal resin. It was found that the distillate contained high concentration of methanol during the first 0.75 hours of the batch distillation at 0.21 atmospheric pressure.

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา ..... ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ปีการศึกษา 2538 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้โดยได้รับความช่วยเหลือจากหลายฝ่าย ข้าพเจ้าขอขอบพระคุณ อาจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ที่ได้กรุณาให้คำปรึกษาแนะนำแนวทางการวิจัย และให้ข้อคิดเห็นต่าง ๆ ตลอดจนการตรวจทานแก้ไขวิทยานิพนธ์จนสำเร็จเป็นรูปเล่มที่สมบูรณ์

ขอขอบพระคุณ คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ซึ่งประกอบด้วย ศ.ดร. วิโรจน์ ประเสริฐธรรม ประธานกรรมการ, อาจารย์ ดร. สมาประสงค์ ศรีชัย กรรมการ และคุณสุกรม ชื่นโชคสันต์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม ซึ่งให้ข้อคิดเห็นที่เป็นประโยชน์เพิ่มเติม ทำให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้มีความสมบูรณ์ยิ่งขึ้น

ขอขอบพระคุณ คุณวีระพันธ์ โลหะรังสิกุล ที่ได้อนุญาตให้ข้าพเจ้าได้ศึกษางานวิจัยในบริษัทสยามเรซินและเคมีภัณฑ์จำกัด ขอขอบพระคุณ คุณเพ็ญรุจี วนะภูติ คุณเกษมสุข หยันการ คุณวันชัย วัฒนธนากร คุณแสงเดือน แก้ววงตา และกลุ่มบริษัทสยามเรซินและเคมีภัณฑ์จำกัด

ขอขอบพระคุณ คุณสุรพล คำสุภา เรือเอกกาศเอกสรศักดิ์ สุภาพ คุณวีระชาติ นามเพรหม และคุณอ่อนศรี พรมสุข ที่ได้สนับสนุนการทำวิจัย

สุดท้ายนี้ข้าพเจ้าขอกราบขอบพระคุณ บิดา-มารดา ที่เป็นกำลังใจมาโดยตลอด ขอขอบพระคุณอาจารย์และเพื่อนอีกหลายท่านที่ไม่ได้กล่าวนามในครั้งนี้ ที่ได้ช่วยเหลือและให้คำแนะนำในการทำวิจัยนี้

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย ..... ง

บทคัดย่อภาษาอังกฤษ ..... จ

กิตติกรรมประกาศ ..... ฉ

สารบัญตาราง ..... ญ

สารบัญภาพ ..... ฑ

คำอธิบายสัญลักษณ์ ..... ฒ

บทที่ 1. บทนำ 1

1.1 ความสำคัญและที่มาของงานวิจัย 1

1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย 2

1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ 2

1.4 ขอบเขตของงานวิจัย 2

1.5 ผลงานวิจัยในอดีต 3

1.5.1 ผลงานวิจัยในอดีตเกี่ยวกับการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการกลั่นแบบแบตช์ 3

1.5.2 ผลงานวิจัยในอดีตเกี่ยวกับการสร้างแบบจำลองของสมดุลไอ-ของเหลวในระบบของผสมที่ประกอบด้วย น้ำ เมธานอล และฟอร์มาลดีไฮด์ ... 4

บทที่ 2. สมดุลไอ-ของเหลวและการคำนวณค่าคุณสมบัติทางด้านอุณหพลศาสตร์ 6

2.1 สมดุล-ไอของเหลว 6

2.2 การคำนวณคุณสมบัติทางด้านอุณหพลศาสตร์ 8

2.2.1 การคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี้และแบบจำลองของ UNIFAC 8

2.2.2 การคำนวณค่าคุณสมบัติวิกฤตและอุณหภูมิจุดเดือดของสารบริสุทธิ์ 21

2.2.3 การคำนวณค่าความร้อนแฝงของการกลายเป็นไอที่สภาวะจุดเดือดปกติ 22

2.2.4 การคำนวณค่าความดันไอของสารบริสุทธิ์ 23

2.25 การคำนวณค่าเอนทัลปีของสารบริสุทธิ์ 24

บทที่ 3. แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ และการหาคำตอบของแบบจำลองของกระบวนการกลั่นแบบแบตช์ 29

3.1 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการกลั่นแบบแบตช์ในระบบของเมทานอล ไกลออกซอลเรซิน น้ำ และฟอร์มาลดีไฮด์ 29

3.2 การหาคำตอบของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ และการอินทิเกรทเชิงตัวเลข 33

3.2.1 การหาคำตอบของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ 33

3.2.2 การอินทิเกรทเชิงตัวเลข 38

บทที่ 4. อุปกรณ์และขั้นตอนปฏิบัติการกลั่น 39

4.1 อุปกรณ์กระบวนการกลั่นแบบแบตช์ 40

4.2 ขั้นตอนปฏิบัติการกลั่น และการวางแผนการเก็บข้อมูล 41

บทที่ 5. ผลการทดลอง การวิเคราะห์ผล สรุปเปรียบเทียบผลกับแบบจำลอง และการทดลองหาสภาวะที่เหมาะสมในการกลั่น 42

5.1 ข้อมูลจากการปฏิบัติการกลั่น 42

5.2 การวิเคราะห์ผล สรุป และเปรียบเทียบกับแบบจำลอง 47

5.3 การศึกษาผลการเปลี่ยนแปลงค่าความดันระบบ และปริมาณความร้อนที่ใช้กับระบบ ต่อการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลของวัฏภาคไอ 71

5.4 การทดลองเพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในการกลั่น เพื่อเพิ่มคุณค่าผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการกลั่น 74

5.5 สรุปวิจารณ์ผลการทดลอง และข้อเสนอแนะ 83

รายการอ้างอิง 86

ภาคผนวก

ก. การคำนวณหาค่าคุณสมบัติทางด้านอุณหพลศาสตร์ 89

ก.1 การคำนวณหาค่าพารามิเตอร์ R_6 และ Q_6 89

ก.2 ตัวอย่างการคำนวณหาค่าพารามิเตอร์ a_{ij} 91

ก.3 การคำนวณหาค่าคุณสมบัติวิกฤต และอุณหภูมิจุดเดือด 91

ก.4 การคำนวณหาค่าความร้อนแฝงของการกลายเป็นไอของไกลออกซอลเรซิน 94

ก.5 การคำนวณค่าความดันไอของน้ำ 94

ก.6 การคำนวณค่าความจุความร้อน 95

ก.6.1 การคำนวณค่าความจุความร้อนของวัฏภาคของเหลว 95

ก.6.2 การคำนวณค่าความจุความร้อนของวัฏภาคไอ 97

ข. การคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวม 100

ค. แสดงคุณสมบัติของสาร 104

ง. การใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์และโปรแกรมคอมพิวเตอร์ 125

ชีวประวัติ 147

สารบัญตาราง

ตารางที่ หน้า

2.1 แสดงการจำแนกหมู่ฟังก์ชันนอล และแสดงค่าพารามิเตอร์ R_k และ Q_k 12

2.2 แสดงค่าพารามิเตอร์ R_k และ Q_k 13

2.3 แสดงค่าอินเตอร์แอคชั่นพารามิเตอร์ a_{mn} 14

2.4 แสดงค่าพารามิเตอร์ $(u_{mn} - u_{nn})$ และ ค่าพารามิเตอร์ C_{mn} 16

2.5 แสดงการประมาณค่าพารามิเตอร์ C_{mn} 17

2.6 แสดงข้อมูลค่า ΔH_v^* และ Q_m และผลการคำนวณค่า u_{mn} 19

2.7 แสดงค่าพารามิเตอร์ a_{mn} (เคลวิน) ที่ใช้ในการคำนวณ 20

2.8 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\left(T_b/T_c\right)$ กับค่าเอมไพริคอล n 23

2.9 แสดงค่าความร้อนแฝงของการกลายเป็นไอ (ΔH_{vb}) และค่าคงที่แอนโทอิน (C_2) ของเมทานอล น้ำ ฟอร์มาลดีไฮด์ และไกลออกซอลเรซิน 24

2.10 แสดงค่าความจุความร้อนเฉลี่ยของวัฏภาคของไอ และวัฏภาคของของเหลว ของเมทานอล น้ำ ฟอร์มาลดีไฮด์ และไกลออกซอลเรซิน 28

5.1 แสดงข้อมูลปฏิบัติการกลั่นของการทดลองที่ 1 43

5.2 แสดงผลการวิเคราะห์หาปริมาณน้ำ เมทานอล ฟอร์มาลดีไฮด์ และไกลออกซอลเรซิน 44

5.3 แสดงข้อมูลปฏิบัติการกลั่นของการทดลองที่ 2 45

5.4 แสดงผลการวิเคราะห์หาปริมาณน้ำ เมทานอล ฟอร์มาลดีไฮด์ และไกลออกซอลเรซิน 46

5.5 แสดงการเปรียบเทียบการคำนวณจุดเดือด และเศษส่วนโมลวัฏภาคไอของ
องค์ประกอบเมทานอลในวัฏภาคไอ 52
5.6 แสดงการเปรียบเทียบการคำนวณจุดเดือด และเศษส่วนโมลวัฏภาคไอของ
องค์ประกอบ น้ำ เมทานอล ฟอร์มาลดีไฮด์ และไกลออกซอลเรซิน 54
5.7 แสดงการเปรียบเทียบการคำนวณค่าอุณหภูมิจุดเดือด และเศษส่วนโมลของ
วัฏภาคไอและองค์ประกอบ น้ำ เมทานอล และไกลออกซอลเรซิน 56
5.8 แสดงผลการทดลองกับการคำนวณค่าอุณหภูมิจุดเดือด และการคำนวณค่า
เศษส่วนโมลของวัฏภาคของของเหลว และวัฏภาคไอของข้อมูลปฏิบัติการ
กลั่นของการทดลองที่ 1 59
5.9 แสดงการเปรียบเทียบผลการทดลองกับผลการคำนวณอุณหภูมิจุดเดือด
และค่าเศษส่วนโมลขององค์ประกอบ น้ำ เมทานอล ในวัฏภาคไอของ
ข้อมูลปฏิบัติการการกลั่นของการทดลองที่ 1..... 60
5.10 แสดงผลการทดลองกับการคำนวณค่าอุณหภูมิจุดเดือด และการคำนวณค่า
เศษส่วนโมลของวัฏภาคของของเหลว และวัฏภาคไอของข้อมูลปฏิบัติการ
กลั่นของการทดลองที่ 2 66
5.11 แสดงการเปรียบเทียบผลการทดลองกับผลการคำนวณอุณหภูมิจุดเดือด
และค่าเศษส่วนโมลขององค์ประกอบ น้ำ เมทานอล ในวัฏภาคไอของ
ข้อมูลปฏิบัติการการกลั่นของการทดลองที่ 2..... 67
5.12 แสดงการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลขององค์ประกอบเมทานอลในวัฏภาคไอ
เมื่อเปลี่ยนแปลงค่าความดันของระบบ 71

5.13 แสดงปริมาณของผสมเมทานอลควบแน่นสะสม และความเข้มข้นของเมทานอลที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาเมื่อสภาวะความดันของระบบเท่ากับ 1.000 บรรยากาศ 77

5.14 แสดงปริมาณของผสมเมทานอลควบแน่นสะสม และความเข้มข้นของเมทานอลที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาเมื่อสภาวะความดันของระบบเท่ากับ 0.2763 บรรยากาศ 78

5.15 แสดงปริมาณของผสมเมทานอลควบแน่นสะสม และความเข้มข้นของเมทานอลที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาเมื่อสภาวะความดันของระบบเท่ากับ 0.2105 บรรยากาศ 79

5.16 แสดงปริมาณของผสมเมทานอลควบแน่นสะสม และความเข้มข้นของเมทานอลที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาเมื่อสภาวะความดันของระบบเท่ากับ 0.1000 บรรยากาศ 80

5.17 แสดงการเปรียบเทียบปริมาณของผสมเมทานอลควบแน่น ที่สามารถนำกลับมาใช้ใหม่เมื่อเปลี่ยนแปลงค่าความดันของระบบ 81

ภาคผนวก ค

ตารางที่

ค.1 แสดงคุณสมบัติกายภาพสำหรับสารทั่วไป 104

ค.2 แสดงค่าความจุความร้อนของก๊าซอุดมคติ 110

ค.3 แสดงค่าความจุความร้อนของของเหลว 111

ค.4 แสดงค่าพารามิเตอร์ R_k และ Q_k 112

ค.5 แสดงค่าพารามิเตอร์ a_{mn} 115

ค.6 แสดงค่า Lydersen's Increments 118

ค.7 แสดงค่า Group Contribution ของ Rihani และ Doraiswany 120

ค.8 แสดงค่า Group Contribution ของ Missenard 123

สารบัญภาพ

รูปที่ หน้า

2.1 แสดงสมดุลไอ-ของเหลว 6

2.2 แสดงการเปลี่ยนแปลงค่าเอนทัลปีต่ออุณหภูมิของสารบริสุทธิ์ 25

3.1 แสดงอุปกรณ์ที่ใช้ในระบบการผลิตโดยเครื่องปฏิกรณ์เคมี ทำหน้าที่เป็นเครื่องกลั่นแยกเสร็จสิ้นปฏิกริยาเคมี..... 29

3.2 แสดงอัลกอริธึมของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการกลั่น 34

3.3 แสดงผังงานการคำนวณจุดบับเบิล 35

4.1 แสดงไดอะแกรมการไหลและเครื่องมือวัดของกระบวนการกลั่นแบบแบตช์ 40

5.1 แสดงโครมาโตรแกรมของของผสมไกลออกซอลเรซิน 48

5.2 แสดงโครมาโตรแกรมของผสมเมทานอลความแน่น 50

5.3 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลขององค์ประกอบน้ำในวัฏภาคไอกับเวลาของข้อมูลปฏิบัติการกลั่นของการทดลองที่ 1 62

5.4 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลขององค์ประกอบเมทานอลในวัฏภาคไอกับข้อมูลปฏิบัติการกลั่นของการทดลองที่ 1 63

5.5 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลขององค์ประกอบน้ำในวัฏภาคไอกับข้อมูลปฏิบัติการกลั่นของการทดลองที่ 1 69

5.6 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลขององค์ประกอบเมทานอลในวัฏภาคไอกับข้อมูลปฏิบัติการกลั่นของการทดลองที่ 2 70

5.7 กราฟแสดงการเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลขององค์ประกอบเมทานอลในวัฏภาคไอ ที่ความดันของระบบต่างกัน 73

5.8 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของเมทานอลเปลี่ยนแปลงตามเวลา เมื่อความดันของระบบต่างกัน 82

คำอธิบายสัญลักษณ์

ตัวอักษรตัวใหญ่

A	ค่าคงที่ในสมการแอนโทอิน
A_b	พื้นที่แลกเปลี่ยนความร้อน (ตารางเซ็นติเมตร)
B	ค่าคงที่ในสมการแอนโทอิน
C	ค่าคงที่ในสมการแอนโทอิน
C_m	ค่าคงที่ในการคำนวณหาค่าอินเตอร์แอคชั่นพารามิเตอร์
C_p	ความจุความร้อนของสารที่สภาวะความดันคงที่ (แคลอรี่ /โมล.เคลวิน)
C_2	ค่าคงที่ในสมการของ Grain
F	อัตราการไหลของสารละลายในวัฏภาคของของเหลว (โมล/ชั่วโมง)
H	เอนทัลปีรวมของของผสม (แคลอรี่)
ΔH	การเปลี่ยนแปลงเอนทัลปี
ΔH_v	ค่าความร้อนแฝงของการกลายเป็นไอ (แคลอรี่/โมล)
M	โมลรวมของสารละลาย
M.W	น้ำหนักโมเลกุล
P	ความดัน (บรรยากาศ)
P^{VP}	ความดันไอ
Q	พื้นที่ผิววัสเคอร์วาล์วเปรียบเทียบ
Q_b	ฟลักซ์ความร้อนของ Jacket (แคลอรี่/ชั่วโมง)
R	ค่าคงที่ของก๊าซ (1.987 แคลอรี่ /(โมล.เคลวิน))

R_t ปริมาตรวัลเดอร์วาล์วเปรียบเทียบ

T อุณหภูมิ (เคลวิน)

T_b อุณหภูมิจุดเดือดปกติ

T^{sat} จุดเดือดที่สภาวะความดันลด

U_b สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวม (แคลอรี่/(ชม. ชม.^{2} เคลวิน)

V ปริมาตร (ลิตร)

V_b อัตราการระเหยของก๊าซ (โมล/ชั่วโมง)

X_m เศษส่วนโมลของหมู่ฟังก์ชันนอล m ในสารละลาย (สมการ (19))

X^i_m เศษส่วนโมลของหมู่ฟังก์ชันนอล m ในองค์ประกอบ i (สมการ (22)

ตัวอักษรตัวเล็ก

a อินเตอร์แอคชั่นพารามิเตอร์

f ฟิวกาซิตี้

h เอนทันปีของสารบริสุทธิ์เมื่อเทียบกับค่าเอนทัลปีที่อุณหภูมิอ้างอิง (แคลอรี่)

l พารามิเตอร์ในสมการ UNIQUAC

n เอมไพริคอลในสมการ (34)

q พื้นที่ผิววัลเดอร์วาล์วขององค์ประกอบในสารละลาย

r ปริมาตรวัลเดอร์วาล์วขององค์ประกอบในสารละลาย

t เวลา (ชั่วโมง)

u พลังงานภายใน (แคลอรี่)

x เศษส่วนโมลในวัฏภาคของของเหลว

y เศษส่วนโมลในวัฏภาคของก๊าซ

ตัวอักษรกรีก

β เอมไพริคอลในสมการ (27)

γ สัมประสิทธิ์แอคติวิตี้

γ^{C} ส่วน Combinatorial ของสัมประสิทธิ์แอคติวิตี้

γ^{R} ส่วน Residual ของสัมประสิทธิ์แอคติวิตี้

ε ค่าความคลาดเคลื่อน

θ เอมไพริคอลในสมการ (28)

θ_i เศษส่วนพื้นที่ผิวขององค์ประกอบ i (สมการ (12))

θ_m เศษส่วนพื้นที่ผิวของหมู่ฟังก์ชันนอล m ในสารละลาย (สมการ (18))

$\theta_m^{(i)}$ เศษส่วนพื้นที่ผิวของหมู่ฟังก์ชันนอล m ในองค์ประกอบ i (สมการ (21))

ν จำนวนหมู่ฟังก์ชันนอล

$\nu^{(i)}$ จำนวนหมู่ฟังก์ชันนอลในองค์ประกอบ i

Φ_i เศษส่วนปริมาตรขององค์ประกอบ i (สมการ (11))

Γ_k residual แอคติวิตี้ของหมู่ฟังก์ชันนอล k (สมการ (17))

$\Gamma_k^{(i)}$ residual แอคติวิตี้ของหมู่ฟังก์ชันนอล k ในองค์ประกอบ i (สมการ (20))

$$\Psi_{mn} = \exp\left(\frac{-amn}{T}\right)$$

ตัวห้อย

b แสดงตำแหน่งที่ถังปฏิกรณ์

c วิกฤต

d แสดงตำแหน่งที่สายความแน่น

f แสดงตำแหน่งที่สายป้อน

i	องค์ประกอบของของผสม
j	องค์ประกอบของของผสม
k	องค์ประกอบของของผสม
k	หมู่ฟังก์ชันนอล
m	หมู่ฟังก์ชันนอล
n	หมู่ฟังก์ชันนอล
mh	ค่าเฉลี่ย
mn	ลำดับหมู่ฟังก์ชันนอล

ตัวโหน

L	วัฏภาคของเหลว
V	วัฏภาคก๊าซ
S	สภาวะมาตรฐาน
Λ	สมบัติขององค์ประกอบในของผสม
$'$	แสดงสภาวะอ้างอิง