การทำนายพฤติกรรมช่วงเริ่มต้นของพอลิเมอไรเซชันแบบสารละลายของสไตรีน

นาย นนทพนธ์ วัฒนเทศานันท์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2540

ISBN 974-637-667-5

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

PREDICTION OF START UP BEHAVIOR OF STYRENE SOLUTION POLYMERIZATION

Mr. Nonthaphon Vattatanataysanun

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 1997

ISBN 974-637-667-5

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การทำนายพฤติกรรมช่วงเริ่มต้นของพอลิเมอไรเซชันแบบสารละลายของสไตรีน
โดย	นาย นนทพนธ์ วัฒนเทศานันท์
ภาควิชา	วิศวกรรมเคมี
อาจารย์ที่ปรึกษา	ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ธวัชชัย ชรินพาณิชกุล
อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม	คุณ บรรพต สายชล

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้ วิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

..... คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย
(ศาสตราจารย์ นายแพทย์ ศุภวัฒน์ ชุติวงศ์)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ
(ศาสตราจารย์ ดร. วิวัฒน์ ตัณฑะพานิชกุล)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ธวัชชัย ชรินพาณิชกุล)

..... อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม
(คุณ บรรพต สายชล)

..... กรรมการ
(อาจารย์ ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์)

นนทพนธ์ วัฒนเทศานันท์ : การทำนายพฤติกรรมช่วงเริ่มต้นของพอลิเมอไรเซชันแบบสารละลายของสไตรีน (PREDICTION OF START UP BEHAVIOR OF STYRENE SOLUTION POLYMERIZATION) อ. ที่ปรึกษา: ผศ. ดร. ธวัชชัย ชรินพาณิชกุล, อ. ที่ปรึกษาร่วม: คุณ บรรพต สายชล , 108 หน้า. ISBN 974-637-667-5.

พฤติกรรมช่วงเริ่มต้นของกระบวนการพอลิเมอไรเซชันแบบสารละลายของสไตรีนได้ถูกศึกษาด้วยการทดลองและโปรแกรม เพื่อคำนวณเวลาที่ใช้ในการเริ่มปฏิกิริยา (Start up time)และอัตราการเกิดปฏิกิริยา (Rate of reaction) จากนั้นได้นำผลการศึกษามาพัฒนาโปรแกรมเพื่อคำนวณเวลาที่ใช้ในการเริ่มปฏิกิริยาเวลา และอัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นมาใหม่ภายใต้ระบบปฏิบัติการ วินโดว์ 95 เพื่อให้ง่ายต่อการใช้งาน

โปรแกรมที่พัฒนาขึ้นประกอบด้วย หน่วยคำนวณสมบัติทางกายภาพ หน่วยคำนวณการสมดุลมวลสาร และหน่วยคำนวณการเริ่มต้นปฏิกิริยา จากการทดสอบพบว่าผลการคำนวณจากหน่วยคำนวณสมบัติทางกายภาพ และหน่วยคำนวณสมดุลมวลสารมีความสอดคล้องกับโปรแกรมแบบเก่า จากการเปรียบเทียบผลการคำนวณอัตราการเกิดปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันที่ช่วงเวลาการคำนวณต่าง ๆ กัน พบว่าผลการคำนวณมีค่าเท่ากับ ผลการคำนวณเวลาในการเริ่มต้นปฏิกิริยาของโปรแกรมที่พัฒนาให้ผลเร็วกว่าโปรแกรมแบบเก่า 12.8 นาที คิดเป็นร้อยละ 4.39 และผลการคำนวณอัตราการเกิดปฏิกิริยาของโปรแกรมที่พัฒนาในช่วง 90 นาทีแรกมีผลการคำนวณแตกต่างจากโปรแกรมเก่าร้อยละ +/-30 และในช่วง 90 นาทีขึ้นไปมีผลการคำนวณมากกว่าโปรแกรมแบบเก่าร้อยละ 6.00

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต นนทพนธ์ วัฒนเทศานันท์

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

ปีการศึกษา 2540 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

C717397 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING
KEY WORD: POLYMERIZATION / STYRENE / SOLUTION / START UP / PREDICTION

NONTHAPHON VATTANATAYSANUN : PREDICTION OF START UP BEHAVIOR OF STYRENE SOLUTION POLYMERIZATION. THESIS ADVISOR : ASSIST. PROF. TAWATCHAI CHARINPANICHKUL, Ph.D. THESIS COADVISOR : MR. BANPOT SAICHOL, 108 pp. ISBN-974-637-667-5.

The behavior of styrene soltution polymerization at the initial state of reaction was studied by experimental and program for investigate the start up time and the rate of reaction. A new program was developed by experimental data for predict the start up time and the rate of reaction. This program is designed to operate under the Window 95 operating system for easily use.

The developed program is included of the physical properties calculation unit the material balance unit and the start up calculation unit. The physical properties unit and the material balance are tested by compare with the existing program. The comparison results were very close the existing program. For the rate of reaction calculation results, at the different calculation step, it was found that the results were similar. For the start up time calculation results of the developed program were lower than the results of the existing program about 12.8 minutes or 4.39 %. In the first 90 minutes period, the rate of reaction that calculated the developed program were +/- 30 % different from the existing program and the 90 minutes upper the results are higher than the existing program about 6.00 %

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ปีการศึกษา 2540 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยความช่วยเหลืออย่างดียิ่งของผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ธวัชชัย ชรินพาณิชกุล อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ คุณ บรรพต สายชล อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม ซึ่งท่านทั้งสองได้ให้คำแนะนำและข้อคิดเห็นต่าง ๆ ในการวิจัยด้วยดีมาตลอด

ขอขอบพระคุณ ศาสตราจารย์ ดร. วิวัฒน์ ตัณฑะพานิชกุล และอาจารย์ ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์ ที่ได้สละเวลามาร่วมเป็นประธานกรรมการและกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

ขอขอบพระคุณผู้อยู่เบื้องการทำวิทยานิพนธ์ที่ให้คำแนะนำและช่วยเหลือในการวิจัย

ท้ายนี้ ผู้วิจัยใคร่ขอกราบขอบพระคุณ บิดา-มารดาซึ่งให้กำลังใจแก่ผู้วิจัยเสมอมาจนสำเร็จการศึกษา

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย.....ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....จ
กิตติกรรมประกาศ.....ฉ
สารบัญ .....ช
สารบัญตาราง .....ฌ
สารบัญรูป .....ฎ
บทที่
1 บทนำ.....1
1.1 ความสำคัญและที่มาของงานวิจัย 1
1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย.....2
1.3 ขอบเขตของงานวิจัย 3
1.4 ขั้นตอนในการดำเนินงานวิจัย 3
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ 4
2 กระบวนการผลิตพอลิสไตรีนแบบสารละลายและการคำนวณที่เกี่ยวข้อง 5
2.1 กระบวนการผลิตพอลิสไตรีนแบบใช้ตัวทำละลาย.....5
2.2 กลไกของพอลิเมอไรเซชันแบบลูกอนุมูลอิสระ 11
2.3 การคำนวณสมบัติทางกายภาพ 14
3 ผลงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง 19
4 เครื่องมือและวิธีการศึกษา.....33
4.1 เครื่องมือที่ใช้ในการศึกษา.....33
4.2 วิธีเดินเครื่องปฏิกรณ์.....33

สารบัญ(ต่อ)

บทที่

4.3 วิธีการเก็บข้อมูล 35

4.4 วิธีการวิเคราะห์ข้อมูล.....36

5 ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง 38

5.1 ผลการทดลอง 38

5.2 การวิเคราะห์ผลการทดลอง 38

6 โปรแกรมทำนายพฤติกรรมช่วงเริ่มต้นของพอลิเมอไรเซชันแบบสารละลายของสไตรีน.....59

6.1 ส่วนประกอบโปรแกรม.....59

6.2 วิธีการใช้งานโปรแกรม.....61

6.3 การทดสอบโปรแกรม 62

บทที่ 7 สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ 81

7.1 สรุปผลการทดลอง 81

7.2 ข้อเสนอแนะ 83

รายการอ้างอิง 84

ภาคผนวก 85

ประวัติผู้เขียน 108

สารบัญตาราง

ตารางที่ หน้า

3.1 อัตราการเกิดปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันและน้ำหนักโมเลกุลของสไตรีนมอนอเมอร์ที่อุณหภูมิต่าง ๆ 29
3.2 ค่าคงที่อัตราของโฟโตเคมิคอลพอลิเมอไรเซชันในหน่วย (ลิตร/โมล/วินาที) ของสไตรีนมอนอเมอร์ 30
3.3 ค่าคงที่อัตราในแต่ละขั้นของปฏิกิริยาของมอนอเมอร์ที่อุณหภูมิต่าง ๆ 31
3.4 ค่า Frequency Factor และ Activation Energies สำหรับค่าคงที่อัตราของปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันของสไตรีนมอนอเมอร์ 32
5.1 ผลการทดลองของการทดลองที่ 1 42
5.2 ผลการทดลองของการทดลองที่ 2 43
5.3 ผลการทดลองของการทดลองที่ 3 44
5.4 ผลการทดลองของการทดลองที่ 4 45
5.5 ผลการทดลองของการทดลองที่ 5 46
5.6 ผลการทดลองของการทดลองที่ 6 47
5.7 การหาค่าเฉลี่ยอุณหภูมิของการทดลองที่ 1 ถึง 6 48
5.8 อัตราการเกิดปฏิกิริยาเฉลี่ยแต่ละช่วงอุณหภูมิ 49
5.9 อัตราการเกิดปฏิกิริยาเฉลี่ยแต่ละช่วงอุณหภูมิเมื่อตัดค่าที่ติดลบและศูนย์ 50
6.1 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมแบบเก่าเมื่อมีช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 60 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที ...70
6.2 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมแบบเก่าเมื่อมีช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 30 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที ...71
6.3 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมแบบเก่าเมื่อมีช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 1 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที ...72

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่ หน้า

6.4 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อมีช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 60 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที ...73
6.5 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อมีช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 30 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที ...74
6.6 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อมีช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 1 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที 75
6.7 ตารางเปรียบเทียบความแตกต่างของอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันของโปรแกรมแบบเก่าเมื่อใช้ช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 30 วินาทีและ 60 วินาทีเทียบกับเมื่อใช้ช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 1 วินาที 76
6.8 ตารางเปรียบเทียบความแตกต่างของอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันของโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อใช้ช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 30 วินาทีและ 60 วินาทีเทียบกับเมื่อใช้ช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 1 วินาที 77
6.9 ตารางเปรียบเทียบผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันชันของโปรแกรมแบบเก่าและโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อใช้ช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 1 วินาที 78
6.10 ตารางเปรียบเทียบผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันชันของโปรแกรมแบบเก่าและโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อใช้ช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 30 วินาที 79
6.11 ตารางเปรียบเทียบผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอไรเซชันชันของโปรแกรมแบบเก่าและโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อใช้ช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 60 วินาที 80

สารบัญรูป

รูปที่ หน้า

2.1 กระบวนการผลิตพอลิสไตรีนที่ใช้ทำการทดลอง 10

3.1 ความสัมพันธ์ระหว่าง % Conversion และ เวลา 22

3.2 ความสัมพันธ์ระหว่าง % Conversion และ เวลา 23

3.3 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยา และ % Conversion 24

3.4 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยา และ % Conversion 25

3.5 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยา และ % Conversion 26

3.6 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันของสไตรีน ขณะเริ่มต้นและอุณหภูมิ 27

3.7 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยา และน้ำหนักโมเลกุล 28

4.1 ถังปฏิกรณ์ที่ใช้ทำการทดลอง 34

5.1 ความสัมพันธ์ของค่าเฉลี่ยอุณหภูมิกับเวลา 51

5.2 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยาและอุณหภูมิของการทดลองที่1....52

5.3 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยาและอุณหภูมิของการทดลองที่2 ..53

5.4 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยาและอุณหภูมิของการทดลองที่3 ..54

5.5 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยาและอุณหภูมิของการทดลองที่4...55

5.6 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยาและอุณหภูมิของการทดลองที่5 ..56

5.7 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดปฏิกิริยาและอุณหภูมิของการทดลองที่6 ...57

5.8 อัตราการเกิดปฏิกิริยาของการทดลองที่ 3, 4 และ 5เทียบกับโปรแกรมแบบเก่า.58

6.1 กรอบเมนูหลัก 65

6.2 กรอบป้อนข้อมูลของการคำนวณสมบัติทางกายภาพ.....65

6.3 กรอบแสดงผลการคำนวณสมบัติทางกายภาพ 66

6.4 กรอบการป้อนข้อมูลเพื่อคำนวณสมดุลทางมวลสาร 67

6.5 กรอบแสดงผลของการสมดุลมวลสาร 68

สารบัญรูป (ต่อ)

รูปที่ หน้า
6.6 กรอบคำนวณการเริ่มต้นปฏิกิริยา 69
6.7 กรอบการเตือนเพื่อป้อนข้อมูลใหม่ 69
ผ.1 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมหลัก 86
ผ.2 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยสมบัติทางกายภาพ.....87
ผ.3 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยสัดส่วนโมล.....88
ผ.4 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยความหนาแน่น.....89
ผ.5 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยค่าการนำความร้อน 90
ผ.6 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยความร้อนแฝง
ของการกลายเป็นไอ 91
ผ.7 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยค่าความร้อน
ของการทำปฏิกิริยา 92
ผ.8 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยค่าความร้อนจำเพาะ.....93
ผ.9 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยเอนทาลปี 94
ผ.10 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยการเริ่มปฏิกิริยา 95
ผ.11 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยความดันไอ.....96
ผ.12 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยโปรแกรมแบบเก่า.....97
ผ.13 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยโปรแกรมที่ทำวิจัย.....98
ผ.14 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยการสมดุลมวล.....99
ผ.15 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยอัตราการป้อนวัตถุดิบ 100
ผ.16 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยอัตราการไหล
ของสารเติมแต่ง.....101
ผ.17 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยหน่วยผลิต E110 102

สารบัญรูป (ต่อ)

รูปที่ หน้า

ผ.18 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยหน่วยผลิต V111 103

ผ.19 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยหน่วยผลิต V112 104

ผ.20 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยหน่วยผลิต R113 105

ผ.21 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยหน่วยผลิต R114 106

ผ.22 แผนภูมิแสดงการทำงานของโปรแกรมย่อยหน่วยผลิต V121 107