

บทที่ 6

โปรแกรมทำนายพฤติกรรมช่วงเริ่มต้นของพอลิเมอไรเซชันแบบสารละลายของสไตรีน

6.1 ส่วนประกอบของโปรแกรม

โปรแกรมทำนายพฤติกรรมช่วงเริ่มต้นของพอลิเมอไรเซชันแบบสารละลายของสไตรีน ประกอบด้วย 3 ส่วน คือ

6.1.1 หน่วยคำนวณสมบัติทางกายภาพ (Physical properties calculation unit)

หน่วยคำนวณสมบัติทางกายภาพจะทำการคำนวณและแสดงผลการคำนวณสมบัติทางกายภาพของพอลิสไตรีนและสารตั้งต้นที่อุณหภูมิต่าง ๆ โดยสมบัติทางกายภาพที่คำนวณ คือ

- ค่าสัดส่วน โมล (Mole fraction)
- ความหนาแน่น (Density)
- ค่าความจุความร้อนจำเพาะ (Specific heat capacity)
- ค่าเอนทาลปี (Enthalpy)
- ค่าการนำความร้อน (Conductivity)
- ค่าความร้อนแฝง (Latent heat)
- ค่าความร้อนของการเกิดปฏิกิริยา (Heat of reaction)
- น้ำหนัก โมเลกุล (Molecular weight)
- ค่าความดันไอ (Vapor pressure)
- ค่ากราฟ (GRAFT)
- ค่าเจล (GEL)
- ค่าความหนืด (Viscosity)

6.1.2 หน่วยคำนวณสมดุลทางมวลสาร (Material balance calculation unit)

หน่วยคำนวณสมดุลทางมวลสารจะทำการคำนวณสมดุลของสารตั้งต้นและผลิตภัณฑ์ของหน่วยผลิตต่าง ๆ ของกระบวนการผลิตพอลิสไตรีนที่ทำการทดลอง ผลคำนวณที่ได้จากหน่วยการคำนวณนี้มีดังนี้

- อัตราการไหลของสารตั้งต้นที่เข้าสู่หน่วยผลิต
- อัตราการไหลของผลิตภัณฑ์ที่ออกจากหน่วยผลิต
- อัตราการไหลของสารเติมแต่ง (Additive)
- ค่าความดันที่หน่วยพอลิเมอไรเซชันขึ้นต้น

หน่วยคำนวณนี้ยังรวมฐานข้อมูลสถานะของการผลิต เพื่อให้ง่ายต่อการใช้งาน และลดความผิดพลาดที่อาจเกิดได้จากการป้อนข้อมูลจำนวนมาก

6.1.3 หน่วยคำนวณการปฏิบัติการช่วงเริ่มต้น (Start up calculation unit)

หน่วยคำนวณการปฏิบัติการช่วงเริ่มต้น เป็นหน่วยที่นำผลจากการวิเคราะห์ผลการทดลองมาเขียนเป็น โปรแกรมเพื่อใช้คำนวณ

- เวลาที่ใช้ทั้งหมดในการเริ่มปฏิบัติการ (Time)
- ค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยา (Rate of reaction)
- ค่าร้อยละ โดยน้ำหนักของการเปลี่ยนจากสไตรีนมอนอเมอร์เป็นพอลิสไตรีน

(% Conversion)

- ค่าร้อยละ โดยน้ำหนักของแข็งในผลิตภัณฑ์ (% Solid)

หน่วยคำนวณนี้ยังบรรจุวิธีการคำนวณแบบเก่าไว้ด้วย เพื่อใช้ในการเปรียบเทียบผลการคำนวณ

6.2 วิธีการใช้งานโปรแกรม

6.2.1 การติดตั้งโปรแกรม

การติดตั้งโปรแกรมทำได้โดยเริ่มจากการสร้าง directory บน drive C : โดยให้ชื่อว่า PSSIM หลังจากนั้นให้ทำการ Copy เพิ่มข้อมูลทั้งหมดจากแผ่นติดตั้งลงใน directory ที่สร้างไว้จากนั้นให้สร้าง Short cut เพื่อเรียกใช้โปรแกรมที่ desktop ของ window 95 โดยใช้คำสั่ง New Shortcut Browse และเรียกเพิ่มข้อมูล PSSIM.EXE จาก directory PSSIM ที่สร้างไว้

6.2.2 การเรียกใช้งานโปรแกรม

การเรียกใช้งานโปรแกรมทำได้โดยดับเบิลคลิกที่ไอคอน PSSIM บน desktop หลังจากนั้นกรอบของเมนูหลักจะปรากฏขึ้นมาดังรูป 6.1 กรอบของเมนูหลักจะประกอบด้วย กรอบปุ่มวิทยุ (Radio Button Group) ที่มีปุ่มวิทยุ (Radio Button) 3 ปุ่ม ให้เลือก เมื่อทำการเลือกรายการในปุ่มวิทยุใด ให้ mouse คลิกที่ปุ่มวิทยุที่หน้ารายการนั้น แล้วกด ปุ่ม Next หน้าจอจะเปลี่ยนไปยังกรอบป้อนข้อมูลของหน่วยการคำนวณที่เลือก

6.2.3 การใช้งานหน่วยคำนวณสมบัติทางกายภาพ

เมื่อเข้าสู่กรอบของการป้อนข้อมูลของการคำนวณสมบัติทางกายภาพ ดังรูป 6.2 ให้ป้อนข้อมูลของหน่วยผลิตที่ต้องการคำนวณดังนี้

- ร้อยละ โดยน้ำหนักของการเปลี่ยนจากสไตรีนเป็นพอลิสไตรีน (% conversion)
- ร้อยละ โดยน้ำหนักของยางบิวตะไคอิน (% Rubber)
- ร้อยละ โดยน้ำหนักของเอทิลเบนซีน (% Ethylbenzene)
- ร้อยละ โดยน้ำหนักของน้ำมันแร่ (% Mineral Oil)

หลังจากป้อนข้อมูลแล้วให้กดปุ่ม Next โปรแกรมจะแสดงกรอบของผลการคำนวณดังรูป 6.3

6.2.4 การใช้งานหน่วยคำนวณสมมูลมวลสาร

เมื่อเข้าสู่กรอบการป้อนข้อมูลเพื่อคำนวณสมมูลมวลสารดังรูป 6.4 ให้เลือกชนิดผลิตภัณฑ์ที่จะผลิตจากรายการ และเลือกอัตราการผลิตจากรายการ หลังจากนั้นให้กดปุ่ม Read Data โปรแกรมจะเรียกข้อมูลการผลิตจากฐานข้อมูลของการผลิต หากต้องการแก้ไขในรายการใดให้ใช้ mouse คลิกที่ช่องรายการนั้น หลังจากนั้นให้กดปุ่ม Next กรอบของการแสดงผลก็จะปรากฏขึ้นมา ดังรูป 6.5

6.2.5 การใช้งานหน่วยคำนวณการเริ่มปฏิกิริยา

เมื่อเข้าสู่กรอบการป้อนข้อมูล เพื่อคำนวณการเริ่มปฏิกิริยา ดังรูป 6.6 ให้ป้อนข้อมูลค่าคงที่ของการทำปฏิกิริยา ค่าร้อยละของของแข็งโดยน้ำหนักเป้าหมาย ค่าร้อยละสไตรีนมอนอเมอร์โดยน้ำหนัก ค่าร้อยละเอทิลเบนซินโดยน้ำหนัก และค่าร้อยละน้ำมันแร่โดยน้ำหนักที่ใช้ในการเริ่มปฏิกิริยา หลังจากนั้นทำการเลือกรูปแบบการคำนวณ ซึ่งมีให้เลือกอยู่ 2 แบบ คือ โปรแกรมคำนวณแบบเก่าที่ใช้อยู่เดิมและโปรแกรมที่ได้จากการวิจัย หลังจากนั้นให้กดปุ่ม Calc กรอบแสดงผลก็จะปรากฏขึ้นมา

ในกรณีที่มีการป้อนข้อมูลผิดพลาดเช่น การป้อนตัวอักษรลงในช่องการป้อนแบบตัวเลข หรือผลรวมของค่าร้อยละสไตรีนมอนอเมอร์โดยน้ำหนัก ค่าร้อยละเอทิลเบนซินโดยน้ำหนักและค่าร้อยละน้ำมันแร่โดยน้ำหนักมีค่าเกิน 100 เป็นต้น โปรแกรมจะทำการตรวจสอบข้อผิดพลาดดังกล่าว หากพบข้อผิดพลาดจะแสดงกรอบการเตือนและระงับการทำงานของปุ่ม Calc ผู้ใช้งานต้องกดปุ่ม Re Enter Data เพื่อให้ป้อนข้อมูลใหม่ดังรูป 6.7

6.3 การทดสอบโปรแกรม

การทดสอบโปรแกรมหน่วยการคำนวณสมบัติทางกายภาพและหน่วยคำนวณสมมูลทางมวลสารได้ทำขณะเขียนโปรแกรมและพบว่าไม่มีข้อผิดพลาด

การทดสอบโปรแกรมหน่วยการคำนวณการเริ่มปฏิกิริยาทำโดยเปรียบเทียบผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์เชชันที่ได้จากโปรแกรมที่ทำการวิจัยที่ช่วงเวลาคำนวณต่าง ๆ กัน โดยการเปรียบเทียบมีเงื่อนไขดังนี้

1. สไตรีนมอนอเมอร์ร้อยละ 89.5 โดยน้ำหนัก
2. เอทิลเบนซีนร้อยละ 8.5 โดยน้ำหนัก
3. น้ำมันแร่ร้อยละร้อยละ 2 โดยน้ำหนัก
4. ค่าคงที่ของการทำปฏิกิริยา 0.875
5. ค่าของแข็งเป้าหมายร้อยละ 32 โดยน้ำหนัก
6. ทำการเปรียบเทียบที่ช่วงเวลาการคำนวณ 1 วินาที 30 วินาที และ 60 วินาที

ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์เชชันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมแบบเก่า เมื่อมีช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 60 วินาที 30 วินาที และ 1 วินาที แสดงได้ดังตารางที่ 6.1 6.2 และ 6.3 ตามลำดับ

ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์เชชันขณะเริ่มปฏิกิริยา ของโปรแกรมที่ทำการวิจัย เมื่อมีช่วงเวลาการคำนวณเท่ากับ 60 วินาที 30 วินาที และ 1 วินาที แสดงได้ดังตารางที่ 6.4 6.5 และ 6.6 ตามลำดับ

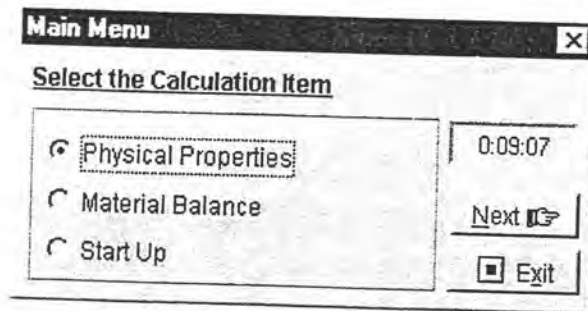
ผลการเปรียบเทียบความแตกต่างของผลการคำนวณอัตราการเกิดปฏิกิริยาพอลิเมอร์เชชันที่ได้จากโปรแกรมแบบเก่าที่ช่วงเวลาการคำนวณ 30 วินาที 60 วินาที เทียบกับผลการคำนวณที่ช่วงเวลาการคำนวณ 1 วินาทีพบว่าผลการคำนวณมีค่าเท่ากัน ยกเว้นผลการคำนวณที่เวลา 100 นาทีที่มีความแตกต่างกันร้อยละ 36.59 ดังแสดงในตาราง 6.7

ผลการเปรียบเทียบความแตกต่างของผลการคำนวณอัตราการเกิดปฏิกิริยาพอลิเมอร์เชชันที่ได้จากโปรแกรมที่ทำการวิจัยที่ช่วงเวลาการคำนวณ 30 วินาที 60 วินาที เทียบกับผลการคำนวณที่ช่วงเวลาการคำนวณ 1 วินาทีพบว่าผลการคำนวณมีค่าเท่ากัน ยกเว้นผลการคำนวณที่เวลา 100 นาทีที่มีความแตกต่างกันร้อยละ 19.35 ดังแสดงในตาราง 6.8

ความแตกต่างของผลการคำนวณอัตราการเกิดปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันที่เวลา 100 นาที มีสาเหตุมาจากความไม่ต่อเนื่องของความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิและเวลา จากผลที่คำนวณได้ในตารางที่ 6.9 ถึง 6.11 แสดงให้เห็นว่าช่วงการคำนวณไม่มีผลต่อการคำนวณ งานวิจัยนี้จึงเลือกใช้ช่วงการคำนวณที่ 1 วินาที และแสดงผลการคำนวณทุก 2 นาที

ผลการเปรียบเทียบความแตกต่างของผลการคำนวณอัตราการเกิดปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันที่ได้จากโปรแกรมแบบเก่าและโปรแกรมที่ทำวิจัยดังแสดงในตารางที่ 6.9 ถึง 6.11 แสดงให้เห็นว่า ในช่วงแรก (เวลาระหว่าง 0 ถึง 90 นาที) ผลการคำนวณจะแตกต่างกันอยู่ในช่วงร้อยละ ± 30 ซึ่งน่าจะมีสาเหตุมาจากสมการความสัมพันธ์ของอุณหภูมิกับเวลาที่ใช้แตกต่างกัน แต่ในช่วงหลัง (เวลามากกว่า 90 นาที) ผลการคำนวณจากโปรแกรมที่ทำวิจัยจะมีผลการคำนวณมากกว่าโปรแกรมแบบเก่าอยู่ประมาณร้อยละ 5 ซึ่งน่าจะมีสาเหตุมาจากการที่อุณหภูมิมียาค่าค่อนข้างคงที่ในช่วงเวลานี้ ซึ่งแสดงให้เห็นว่าโปรแกรมที่ทำวิจัยสามารถทำนายเวลาทั้งหมดในการเริ่มปฏิกิริยาได้เหมาะสมสอดคล้องกับโปรแกรมแบบเก่า

ผลการคำนวณเวลาในการเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมแบบเก่ามีค่า 291.6 นาที ดังแสดงในตาราง 6.3 เทียบกับผลการคำนวณเวลาในการเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมที่ทำวิจัยซึ่งมีค่าประมาณ 278.8 นาที ดังแสดงในตาราง 6.6 แสดงให้เห็นว่าผลการคำนวณเวลาในการเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมที่ทำวิจัยให้ผลที่เร็วขึ้น 12.8 นาทีหรือร้อยละ 4.39 เมื่อเทียบกับโปรแกรมแบบเก่า



รูป 6.1 กรอบเมนูหลัก

The screenshot shows a window titled "Input for Physical Properties Calc." with a close button (X) in the top right corner. Below the title bar, the text "Enter the Data for Physical Properties Calculation" is displayed. There are five input fields with the following labels and values: "% Conversion" (20), "% Rubber" (6.8), "% Ethylbenzene" (4), "% Mineral Oil" (2), and "Temperature (deg.C)" (130). At the bottom left is a "Back" button with a left arrow icon, and at the bottom right is a "Next" button with a right arrow icon.

% Conversion	20
% Rubber	6.8
% Ethylbenzene	4
% Mineral Oil	2
Temperature (deg.C)	130

รูป 6.2 กรอบป้อนข้อมูลของการคำนวณสมบัติทางกายภาพ

Physical Properties
- □ X

Physical Properties Output

Mole Fraction	Rubber = 0.0680 EB = 0.0400 MO = 0.0200 PS = 0.1744 SM = 0.6976 Total = 1.0000	Density (kg/cu.m.)	Rubber = 814.2000 EB = 765.0288 MO = 769.9268 PS = 1021.4500 SM = 803.8000 Total = 833.0592
Enthalpy (kcal/kg)	Rubber = 64.2850 EB = 55.6856 MO = 67.4635 PS = 46.2747 SM = 57.6006 Total = 56.2006	Specific heat (kcal/kg deg.C)	Rubber = 0.5400 EB = 0.4631 MO = 0.5729 PS = 0.4609 SM = 0.5191 Total = 0.5092
Heat of reaction (kcal/kg)	Total = 169.7107	Latent heat (kcal/kg)	SM = 86.9221 EB = 81.8639 Total = 63.9114
GRAFT	Total = 35.2802	Eq. vapor press. (kg/sq.cm)	Absolute = 0.5453 Gauge = -0.4547
Molecular Weight	Total = 67000.000	Viscosity (Poise)	Total = 15.5038
GEL	Total = 9.1991	<input type="button" value="Next"/>	
<input type="button" value="Back"/>			

รูป 6.3 กรอบการแสดงผลของการคำนวณสมบัติทางกายภาพ

Input for Material Balance Calculation

Enter the Data for Material Balance

General Data		Product Name	G110S
V-111 %Solid Set	0.05	Product. Rate (kg/h)	3000
V-112 %Solid Set	38.5	Blue Dye Tank	
R-113 %Solid Set	69	Styrene %	99.98
R-114 %Solid Set	80	Blue Dye %	0.02
%EB in Feed	6.5	MO %	80
%MO in Feed	0	TBPO %	20
		Internal Lube Tank	
		MO %	95.95
		ZnSt %	4.05
		Anti Oxidant Tank	
		Styrene %	0
		IX-1076	0
		Product Formulation	
		Styrene %	97.4
		Rubber %	0
		MO %	2.5
		IX-1076 %	0
		Blue Dye ppm	0.5
		ZnSt %	0.1

V-111	Rate Factor	1.000
	Temp. deg.C	50.00
	Level Set%	65.00
R-113	Rate Factor	1.050
	Temp.A deg.C	145.00
	Temp.B deg.C	152.00
V-112	Rate Factor	0.335
	Temp. deg.C	133.00
	Level Set%	66.00
R-114	Rate Factor	0.421
	Temp.A deg.C	164.00
	Temp.B deg.C	175.00

%Rubber in Feed	0
RV Purge %	1
%Cat. in V-111	0
%Cat. in V-112	0.028
MFI Spec. (g/min)	8-10
Phase Inversion	0

Back

Data Read

Next

รูป 6.4 กรอบป้อนข้อมูลของการคำนวณสมดุลทางมวลสาร

Material Balance Output Dialog

		E110	V111	V112	R113	R114	V121
	Unit	Heater	PrePoly	PrePoly	Reactor	Reactor	Devol.
Poly Rate Factor		0.000	1.000	0.335	1.050	0.421	0.000
Poly Rate (Calc)		0.000	0.038	60.913	15.566	14.014	0.000
Poly Rate (Input)		0.000	0.038	181.831	14.824	33.287	0.000
% Solid (set)	%	0.000	0.050	38.500	69.000	80.000	100.000
% Conversion	%	0.000	0.053	41.103	73.081	85.129	0.000
Polymer Make	%		0.063	48.115	37.705	14.117	0.000
Polymer Make	kg/hr	0.000	1.834	1407.983	1103.370	413.117	0.000
MW (Calc)		0.000	675925.105	221688.064	167890.863	85480.142	0.000
Pressure (Calc)	kg/sq.cm G		-0.050	-0.292			
Reactor Temp. A	deg.C	30.000	50.000	133.000	145.000	164.000	260.000
Reactor Temp. B	deg.C				157.000	175.000	

Back

รูป 6.5 การแสดงผลของการคำนวณสมดุลทางมวลสาร

Start Up Calculation [] [] [X]

Enter the Data for Start Up Calculation

% Styrene	89.5	Rate Factor	0.857
% Ethylbenzene	8.5	Target Solid %	32
% Mineral Oil	2.0		

Select Model

Standard Model

Black Block Model

Time min	Temp. deg.C	PolyRate %/hr	Conversion %	Solid %
282.00	123.02	7.52	29.00	31.00
284.00	123.02	7.52	29.25	31.25
286.00	123.02	7.52	29.50	31.50
288.00	123.01	7.52	29.75	31.75
290.00	123.01	7.51	30.00	32.00

รูป 6.6 กรอบการคำนวณการเริ่มต้นปฏิกิริยา

Start Up Calculation [] [] [X]

Enter the Data for Start Up Calculation

Input Error ! Try Again !

รูป 6.7 กรอบการเตือนเพื่อป้อนข้อมูลใหม่

ตาราง 6.1 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์ในขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมแบบเก่าเมื่อมีช่วงการคำนวณเท่ากับ 60 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที

เวลา (นาที)	อุณหภูมิ ($^{\circ}\text{C}$)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	การเปลี่ยนจากสไตรีนเป็นพอลิสไตรีน (ร้อยละโดยน้ำหนัก)	ของแข็ง (ร้อยละโดยน้ำหนัก)
0	80.00	0.47	0.00	2.00
10	86.71	0.73	0.11	2.11
20	91.36	1.01	0.25	2.25
30	96.01	1.39	0.45	2.45
40	100.66	1.89	0.73	2.73
50	105.31	2.55	1.10	3.10
60	109.95	3.43	1.61	3.61
70	114.60	4.56	2.28	4.28
80	119.25	6.03	3.17	5.17
90	123.90	7.92	4.34	6.34
100	128.55	10.34	5.87	7.87
110	123.35	7.67	7.15	9.15
120	123.33	7.66	8.43	10.43
130	123.31	7.65	9.70	11.70
140	123.29	7.64	10.98	12.98
150	123.28	7.63	12.25	14.25
160	123.26	7.62	13.52	15.52
170	123.24	7.61	14.79	16.79
180	123.22	7.61	16.06	18.06
190	123.20	7.60	17.32	19.32
200	123.18	7.59	18.59	20.59
210	123.16	7.58	19.85	21.85
220	123.14	7.57	21.12	23.12
230	123.12	7.56	22.38	24.38
240	123.10	7.56	23.64	25.64
250	123.08	7.55	24.90	26.90
260	123.07	7.54	26.15	28.15
270	123.05	7.53	27.41	29.41
280	123.03	7.52	28.66	30.66
290	123.01	7.51	29.92	31.92
291	123.01	7.51	30.04	32.04

ตาราง 6.2 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์เจตขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมแบบเก่าเมื่อมี
ช่วงการคำนวณเท่ากับ 30 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที

เวลา (นาที)	อุณหภูมิ ($^{\circ}$ ซ)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	การเปลี่ยนจากสไตรีนเป็นพอลิสไตรีน (ร้อยละโดยน้ำหนัก)	ของแข็ง (ร้อยละโดยน้ำหนัก)
0	80.00	0.47	0.00	2.00
10	86.71	0.73	0.10	2.10
20	91.36	1.01	0.25	2.25
30	96.01	1.39	0.45	2.45
40	100.66	1.89	0.72	2.72
50	105.31	2.55	1.09	3.09
60	109.95	3.42	1.59	3.59
70	114.60	4.56	2.26	4.26
80	119.25	6.03	3.14	5.14
90	123.90	7.92	4.30	6.30
100	128.55	10.34	5.83	7.83
110	123.35	7.67	7.11	9.11
120	123.33	7.66	8.38	10.38
130	123.31	7.65	9.66	11.66
140	123.29	7.64	10.93	12.93
150	123.28	7.63	12.20	14.20
160	123.26	7.62	13.48	15.48
170	123.24	7.61	14.75	16.75
180	123.22	7.61	16.01	18.01
190	123.20	7.60	17.28	19.28
200	123.18	7.59	18.55	20.55
210	123.16	7.58	19.81	21.81
220	123.14	7.57	21.07	23.07
230	123.12	7.56	22.33	24.33
240	123.10	7.56	23.59	25.59
250	123.08	7.55	24.85	26.85
260	123.07	7.54	26.11	28.11
270	123.05	7.53	27.37	29.37
280	123.03	7.52	28.62	30.62
290	123.01	7.51	29.87	31.87
291.5	123.01	7.51	30.06	32.06

ตาราง 6.3 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์เซชันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมแบบเก่าเมื่อมี
ช่วงการคำนวณเท่ากับ 1 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที

เวลา (นาที)	อุณหภูมิ (°ซ)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละ โดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	การเปลี่ยนจากสไตรีนเป็นพอลิสไตรีน (ร้อยละ โดยน้ำหนัก)	ของแข็ง (ร้อยละ โดยน้ำหนัก)
0	80.00	0.47	0.00	2.00
10	86.71	0.73	0.10	2.10
20	91.36	1.01	0.25	2.25
30	96.01	1.39	0.45	2.45
40	100.66	1.89	0.72	2.72
50	105.31	2.55	1.09	3.09
60	109.95	3.42	1.59	3.59
70	114.60	4.56	2.25	4.25
80	119.25	6.03	3.14	5.14
90	123.90	7.92	4.30	6.30
100	123.37	7.57	5.80	7.80
110	123.35	7.67	7.08	9.08
120	123.33	7.66	8.36	10.36
130	123.31	7.65	9.63	11.63
140	123.29	7.64	10.91	12.91
150	123.28	7.63	12.18	14.18
160	123.26	7.62	13.45	15.45
170	123.24	7.61	14.72	16.72
180	123.22	7.61	15.99	17.99
190	123.20	7.60	17.25	19.25
200	123.18	7.59	18.52	20.52
210	123.16	7.58	19.78	21.78
220	123.14	7.57	21.05	23.05
230	123.12	7.56	22.31	24.31
240	123.10	7.56	23.57	25.57
250	123.09	7.55	24.83	26.83
260	123.07	7.54	26.08	28.08
270	123.05	7.53	27.34	29.34
280	123.03	7.52	28.59	30.59
290	123.01	7.51	29.85	31.85
291.6	123.01	7.51	30.05	32.05

ตาราง 6.4 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์เชิงเส้นขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อมีช่วงการคำนวณเท่ากับ 60 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที

เวลา (นาที)	อุณหภูมิ ($^{\circ}\text{C}$)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	การเปลี่ยนจากสไตรีนเป็นพอลิสไตรีน (ร้อยละโดยน้ำหนัก)	ของแข็ง (ร้อยละโดยน้ำหนัก)
0	80.00	0.34	0.00	2.00
10	86.71	0.60	0.08	2.08
20	91.36	0.88	0.21	2.21
30	96.01	1.31	0.39	2.39
40	100.66	1.94	0.66	2.66
50	105.31	2.87	1.07	3.07
60	109.95	4.24	1.66	3.66
70	114.60	5.19	2.47	4.47
80	119.25	6.01	3.41	5.41
90	123.90	8.21	4.67	6.67
100	128.55	9.62	6.17	8.17
110	123.35	8.06	7.51	9.51
120	123.33	8.05	8.85	10.85
130	123.31	8.05	10.19	12.19
140	123.29	8.04	11.54	13.54
150	123.28	8.04	12.88	14.88
160	123.26	8.03	14.22	16.22
170	123.24	8.03	15.55	17.55
180	123.22	8.02	16.89	18.89
190	123.20	8.02	18.23	20.23
200	123.18	8.01	19.56	21.56
210	123.16	8.01	20.90	22.90
220	123.14	8.00	22.23	24.23
230	123.12	8.00	23.57	25.57
240	123.10	7.99	24.90	26.90
250	123.08	7.99	26.23	28.23
260	123.07	7.98	27.56	29.56
270	123.05	7.98	28.89	30.89
279	123.03	7.97	30.09	32.09

ตาราง 6.5 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์เช่นกันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อมีช่วงการคำนวณเท่ากับ 30 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที

เวลา (นาที)	อุณหภูมิ ($^{\circ}\text{C}$)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	การเปลี่ยนจากสไตรีนเป็นพอลิสไตรีน (ร้อยละโดยน้ำหนัก)	ของแข็ง (ร้อยละโดยน้ำหนัก)
0	80.00	0.34	0.00	2.00
10	86.71	0.60	0.08	2.08
20	91.36	0.88	0.21	2.21
30	96.01	1.31	0.39	2.39
40	100.66	1.94	0.66	2.66
50	105.31	2.87	1.06	3.06
60	109.95	4.24	1.65	3.65
70	114.60	5.19	2.46	4.46
80	119.25	6.01	3.39	5.39
90	123.90	8.21	4.64	6.64
100	128.55	9.62	6.12	8.12
110	123.35	8.06	7.47	9.47
120	123.33	8.05	8.81	10.81
130	123.31	8.05	10.15	12.15
140	123.29	8.04	11.49	13.49
150	123.28	8.04	12.83	14.83
160	123.26	8.03	14.17	16.17
170	123.24	8.03	15.51	17.51
180	123.22	8.02	16.85	18.85
190	123.20	8.02	18.19	20.19
200	123.18	8.01	19.52	21.52
210	123.16	8.01	20.86	22.86
220	123.14	8.00	22.19	24.19
230	123.12	8.00	23.52	25.52
240	123.10	7.99	24.86	26.86
250	123.08	7.99	26.19	28.19
260	123.07	7.98	27.52	29.52
270	123.05	7.98	28.85	30.85
279	123.03	7.97	30.04	32.04

ตาราง 6.6 ผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์ในเซชันขณะเริ่มปฏิกิริยาของโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อมีช่วงการคำนวณเท่ากับ 1 วินาทีและแสดงผลทุก 10 นาที

เวลา (นาที)	อุณหภูมิ ($^{\circ}\text{C}$)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	การเปลี่ยนจากสไตรีนเป็นพอลิสไตรีน (ร้อยละโดยน้ำหนัก)	ของแข็ง (ร้อยละโดยน้ำหนัก)
0	80.00	0.34	0.00	2.00
10	86.71	0.60	0.08	2.08
20	91.36	0.88	0.21	2.21
30	96.01	1.31	0.39	2.39
40	100.66	1.94	0.66	2.66
50	105.31	2.87	1.06	3.06
60	109.95	4.24	1.65	3.65
70	114.60	5.19	2.45	4.45
80	119.25	6.01	3.39	5.39
90	123.90	8.21	4.63	6.63
100	123.37	8.06	6.11	8.11
110	123.35	8.06	7.45	9.45
120	123.33	8.05	8.79	10.79
130	123.31	8.05	10.13	12.13
140	123.29	8.04	11.48	13.48
150	123.28	8.04	12.48	14.48
160	123.26	8.03	14.15	16.15
170	123.24	8.03	15.49	17.49
180	123.22	8.02	16.83	18.83
190	123.20	8.02	18.17	20.17
200	123.18	8.01	19.50	21.50
210	123.16	8.01	20.84	22.84
220	123.14	8.00	22.17	24.17
230	123.12	8.00	23.51	25.51
240	123.10	7.99	24.84	26.84
250	123.09	7.99	26.17	28.17
260	123.07	7.98	27.50	29.50
270	123.05	7.98	28.83	30.83
278.8	123.03	7.97	30.00	32.00

ตาราง 6.7 ตารางเปรียบเทียบความแตกต่างของอัตราการเกิดพอลิเมอร์ไอโซไซยาเนตแบบเก่าเมื่อใช้ช่วงการคำนวณเท่ากับ 30 วินาทีและ 60 วินาทีเทียบกับเมื่อใช้ช่วงการคำนวณเท่ากับ 1 วินาที

เวลา (นาทีก)	ช่วงเวลาคำนวณ 1 วินาที	ช่วงเวลาคำนวณ 30 วินาที	ค่าความแตกต่าง (ร้อยละ)	ช่วงเวลาคำนวณ 60 วินาที	ค่าความแตกต่าง (ร้อยละ)
	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)		อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	
0	0.47	0.47	0.00	0.47	0.00
10	0.73	0.73	0.00	0.73	0.00
20	1.01	1.01	0.00	1.01	0.00
30	1.39	1.39	0.00	1.39	0.00
40	1.89	1.89	0.00	1.89	0.00
50	2.55	2.55	0.00	2.55	0.00
60	3.42	3.42	0.00	3.43	0.29
70	4.56	4.56	0.00	4.56	0.00
80	6.03	6.03	0.00	6.03	0.00
90	7.92	7.92	0.00	7.92	0.00
100	7.57	10.34	36.59	10.34	36.59
110	7.67	7.67	0.00	7.67	0.00
120	7.66	7.66	0.00	7.66	0.00
130	7.65	7.65	0.00	7.65	0.00
140	7.64	7.64	0.00	7.64	0.00
150	7.63	7.63	0.00	7.63	0.00
160	7.62	7.62	0.00	7.62	0.00
170	7.61	7.61	0.00	7.61	0.00
180	7.61	7.61	0.00	7.61	0.00
190	7.60	7.60	0.00	7.60	0.00
200	7.59	7.59	0.00	7.59	0.00
210	7.58	7.58	0.00	7.58	0.00
220	7.57	7.57	0.00	7.57	0.00
230	7.56	7.56	0.00	7.56	0.00
240	7.56	7.56	0.00	7.56	0.00
250	7.55	7.55	0.00	7.55	0.00
260	7.54	7.54	0.00	7.54	0.00
270	7.53	7.53	0.00	7.53	0.00
280	7.52	7.52	0.00	7.52	0.00
290	7.51	7.51	0.00	7.51	0.00

ตาราง 6.8 ตารางเปรียบเทียบความแตกต่างของอัตราการเกิดพอลิเมอร์ในเซชันโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อใช้
ช่วงการคำนวณเท่ากับ 30 วินาทีและ 60 วินาทีเทียบกับเมื่อใช้ช่วงการคำนวณเท่ากับ 1 วินาที

เวลา (นาที)	ช่วงการคำนวณ 1 วินาที	ช่วงการคำนวณ 30 วินาที	ค่าความแตกต่าง (ร้อยละ)	ช่วงการคำนวณ 60 วินาที	ค่าความแตกต่าง (ร้อยละ)
	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละ โดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละ โดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)		อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละ โดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)	
0	0.34	0.34	0.00	0.34	0.00
10	0.60	0.60	0.00	0.60	0.00
20	0.88	0.88	0.00	0.88	0.00
30	1.31	1.31	0.00	1.31	0.00
40	1.94	1.94	0.00	1.94	0.00
50	2.87	2.87	0.00	2.87	0.00
60	4.24	4.24	0.00	4.24	0.00
70	5.19	5.19	0.00	5.19	0.00
80	6.01	6.01	0.00	6.01	0.00
90	8.21	8.21	0.00	8.21	0.00
100	8.06	9.62	19.35	9.62	19.35
110	8.06	8.06	0.00	8.06	0.00
120	8.05	8.05	0.00	8.05	0.00
130	8.05	8.05	0.00	8.05	0.00
140	8.04	8.04	0.00	8.04	0.00
150	8.04	8.04	0.00	8.04	0.00
160	8.03	8.03	0.00	8.03	0.00
170	8.03	8.03	0.00	8.03	0.00
180	8.02	8.02	0.00	8.02	0.00
190	8.02	8.02	0.00	8.02	0.00
200	8.01	8.01	0.00	8.01	0.00
210	8.01	8.01	0.00	8.01	0.00
220	8.00	8.00	0.00	8.00	0.00
230	8.00	8.00	0.00	8.00	0.00
240	7.99	7.99	0.00	7.99	0.00
250	7.99	7.99	0.00	7.99	0.00
260	7.98	7.98	0.00	7.98	0.00
270	7.98	7.98	0.00	7.98	0.00

ตาราง 6.9 ตารางเปรียบเทียบผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์ชั้นของ
โปรแกรมแบบเก่าและโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อใช้ช่วงการคำนวณเท่ากับ 1 วินาที

เวลา (นาที)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)		ค่าความแตกต่าง (ร้อยละ)
	โปรแกรมแบบเก่า	โปรแกรมที่ทำวิจัย	
0	0.47	0.34	-27.66
10	0.73	0.60	-17.81
20	1.01	0.88	-12.87
30	1.39	1.31	-5.76
40	1.89	1.94	2.65
50	2.55	2.87	12.55
60	3.42	4.24	23.98
70	4.56	5.19	13.82
80	6.03	6.01	-0.33
90	7.92	8.21	3.66
100	7.57	8.06	6.47
110	7.67	8.06	5.08
120	7.66	8.05	5.09
130	7.65	8.05	5.23
140	7.64	8.04	5.24
150	7.63	8.04	5.37
160	7.62	8.03	5.38
170	7.61	8.03	5.52
180	7.61	8.02	5.39
190	7.60	8.02	5.53
200	7.59	8.01	5.53
210	7.58	8.01	5.67
220	7.57	8.00	5.68
230	7.56	8.00	5.82
240	7.56	7.99	5.69
250	7.55	7.99	5.83
260	7.54	7.98	5.84
270	7.53	7.98	5.98
280	7.52	-	-
290	7.51	-	-

ตาราง 6.10 ตารางเปรียบเทียบผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์เซชันของ
โปรแกรมแบบเก่าและโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อใช้ช่วงการคำนวณเท่ากับ 30 วินาที

เวลา (นาที)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละ โดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)		ค่าความแตกต่าง (ร้อยละ)
	โปรแกรมแบบเก่า	โปรแกรมที่ทำวิจัย	
0	0.47	0.34	-27.66
10	0.73	0.60	-17.81
20	1.01	0.88	-12.87
30	1.39	1.31	-5.76
40	1.89	1.94	2.65
50	2.55	2.87	12.55
60	3.42	4.24	23.98
70	4.56	5.19	13.82
80	6.03	6.01	-0.33
90	7.92	8.21	3.66
100	10.34	9.62	-6.96
110	7.67	8.06	5.08
120	7.66	8.05	5.09
130	7.65	8.05	5.23
140	7.64	8.04	5.24
150	7.63	8.04	5.37
160	7.62	8.03	5.38
170	7.61	8.03	5.52
180	7.61	8.02	5.39
190	7.60	8.02	5.53
200	7.59	8.01	5.53
210	7.58	8.01	5.67
220	7.57	8.00	5.68
230	7.56	8.00	5.82
240	7.56	7.99	5.69
250	7.55	7.99	5.83
260	7.54	7.98	5.84
270	7.53	7.98	5.98
280	7.52	-	-
290	7.51	-	-

ตาราง 6.11 ตารางเปรียบเทียบผลการคำนวณอัตราการเกิดพอลิเมอร์เชนซ์ของ
โปรแกรมแบบเก่าและโปรแกรมที่ทำวิจัยเมื่อใช้ช่วงการคำนวณเท่ากับ 60 วินาที

เวลา (นาที)	อัตราการเกิดปฏิกิริยา (ร้อยละโดยน้ำหนักต่อชั่วโมง)		ค่าความแตกต่าง (ร้อยละ)
	โปรแกรมแบบเก่า	โปรแกรมที่ทำวิจัย	
0	0.47	0.34	-27.66
10	0.73	0.60	-17.81
20	1.01	0.88	-12.87
30	1.39	1.31	-5.76
40	1.89	1.94	2.65
50	2.55	2.87	12.55
60	3.43	4.24	23.62
70	4.56	5.19	13.82
80	6.03	6.01	-0.33
90	7.92	8.21	3.66
100	10.34	9.62	-6.96
110	7.67	8.06	5.08
120	7.66	8.05	5.09
130	7.65	8.05	5.23
140	7.64	8.04	5.24
150	7.63	8.04	5.37
160	7.62	8.03	5.38
170	7.61	8.03	5.52
180	7.61	8.02	5.39
190	7.60	8.02	5.53
200	7.59	8.01	5.53
210	7.58	8.01	5.67
220	7.57	8.00	5.68
230	7.56	8.00	5.82
240	7.56	7.99	5.69
250	7.55	7.99	5.83
260	7.54	7.98	5.84
270	7.53	7.98	5.98
280	7.52	-	-
290	7.51	-	-