การจำลองซีเอฟดีของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงในการเผาไหม้แบบเคมิคอลลูปิง



บทคัดย่อและแฟ้มข้อมูลฉบับเต็มของวิทยานิพนธ์ตั้งแต่ปีการศึกษา 2554 ที่ให้บริการในคลังปัญญาจุฬาฯ (CUIR) เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตเจ้าของวิทยานิพนธ์ ที่ส่งผ่านทางบัณฑิตวิทยาลัย

The abstract and full text of theses from the academic year 2011 in Chulalongkorn University Intellectual Repository (CUIR) are the thesis authors' files submitted through the University Graduate School.

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาเคมีเทคนิค ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ปีการศึกษา 2557 ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

CFD SIMULATION OF FUEL REACTOR IN CHEMICAL LOOPING COMBUSTION

Mr. Ratikorn Sornumpol

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Science Program in Chemical Technology Department of Chemical Technology Faculty of Science Chulalongkorn University Academic Year 2014 Copyright of Chulalongkorn University

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การจำลองซีเอฟดีของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงในการเผา
	ไหม้แบบเคมิคอลลูปิง
โดย	นายรติกร ศรอำพล
สาขาวิชา	เคมีเทคนิค
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก	รองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม	ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เบญจพล เฉลิมสินสุวรรณ

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่ง ของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

_____คณบดีคณะวิทยาศาสตร์

(ศาสตราจารย์ ดร. สุพจน์ หารหนองบัว)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

ประธานกรรมการ

(รองศาสตราจารย์ ดร. เก็จวลี พฤกษาทร)

.....อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

(รองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์)

.....อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เบญจพล เฉลิมสินสุวรรณ)

.....กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ประพันธ์ คูชลธารา)

.....กรรมการภายนอกมหาวิทยาลัย

(ดร. บุญรอด สัจจกุลนุกิจ)

รติกร ศรอำพล : การจำลองซีเอฟดีของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงในการเผาไหม้ แบบเคมิคอลลูปิง (CFD SIMULATION OF FUEL REACTOR IN CHEMICAL LOOPING COMBUSTION) อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: รศ. ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์, อ.ที่ปรึกษา วิทยานิพนธ์ร่วม: ผศ. ดร. เบญจพล เฉลิมสินสุวรรณ, หน้า.

้ในงานวิจัยนี้ได้ทำการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์วงปฏิกิริยาเคมี ฝั่งเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงขึ้น โดยใช้พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณเป็นเครื่องมือด้วย โปรแกรม ANSYS Fluent เพื่อจำลองภาวะการไหลแบบไม่เกิดปฏิกิริยาเคมี (Cold flow) พบว่า พฤติกรรมอุทกพลศาสตร์จากแบบจำลองมีความสอดคล้องกับผลการทดลอง ผลการทดลองพบว่าตัว แปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน คือ ความเร็วแก๊สป้อนเข้า สมบัติทางกายภาพของของแข็ง ขนาดอนุภาค ความหนาแน่นของ อนุภาค ความสูงเบดเริ่มต้น อันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคและความสูงเบดเริ่มต้น อันตรกิริยา ระหว่างขนาดอนุภาคและความหนาแน่นของแข็ง อันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคและความเร็วแก๊ส ป้อนเข้า และอันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดเริ่มต้นและความเร็วแก๊สป้อนเข้า และตัวแปรที่ส่งผล ต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมีคือ ขนาดอนุภาค ความ หนาแน่นของอนุภาค ความสูงเบดเริ่มต้น อันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคและความหนาแน่น ของแข็ง และอันตรกิริยาระหว่างความเร็วแก๊สป้อนเข้าและความสูงเบดเริ่มต้น จากนั้นเพิ่ม แบบจำลองปฏิกิริยาเคมีระหว่างโลหะนิกเกิลออกไซด์และแก๊สเชื้อเพลิงโดยใช้แบบจำลองแบบ แกนกลางหดตัว (Shrinking core model) เพื่อศึกษาการเดินระบบเมื่อเกิดปฏิกิริยาเคมี จาก การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการเมื่อเกิดปฏิกิริยาเคมีพบว่า ความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้า ส่งผล ต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง โดยภาวะที่เหมาะสมที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนของ ้แก๊สเชื้อเพลิงมากที่สุดคือ ขนาดอนุภาค 150 ไมครอน อัตราส่วนความสูงเบดเริ่มต้นต่อขนาดเส้น ้ผ่านศูนย์กลางเครื่องปฏิกรณ์ 0.75 เท่า อุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า 873 K และความเร็วแก๊ส เชื้อเพลิงป้อนเข้า 1.5 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน

ภาควิชา	เคมีเทคนิค	ลายมือชื่อนิสิต
สาขาวิชา	เคมีเทคนิค	ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาหลัก
ปีการศึกษา	2557	ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาร่วม

d

5572233623 : MAJOR CHEMICAL TECHNOLOGY

KEYWORDS: COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS / OPERATING PARAMETER / CHEMICAL LOOPING COMBUSTION / FUEL REACTOR

RATIKORN SORNUMPOL: CFD SIMULATION OF FUEL REACTOR IN CHEMICAL LOOPING COMBUSTION. ADVISOR: ASSOC. PROF. PORNPOTE PIUMSOMBOON, Ph.D., CO-ADVISOR: ASST. PROF. BENJAPON CHALERMSINSUWAN, Ph.D., pp.

In this work, mathematical model of fuel reactor in chemical looping was developed by CFD using ANSYS FLUENT. The cold flow model was simulated for understanding its hydrodynamic behavior. It was found that the results was consistent with the experimental data. The results showed that gas velocity, particle density, particle diameter, initial bed height and the interaction between particle diameter and initial bed height; between particle diameter and particle density; between particle diameter and gas velocity and between initial bed height and gas velocity had affected on standard deviation of solid volume fraction in axial direction. For the radial direction, the results showed that particle diameter, particle density, initial bed height and the interaction between particle diameter and particle density and between initial bed height and gas velocity had affected on standard deviation of solid volume fraction in radial direction. For hot flow model when the chemical reaction took place, shrinking core model was used to express the conversion of nickel oxide with fuel gas. The operating parameter that had affected on syngas conversion was gas velocity. The parameters that affected on optimum condition for obtaining maximum syngas conversion were nickel oxide particle diameter 150 micron, ratio of initial bed height to diameter column 0.75, syngas temperature 873 K and 1.5 times of minimum fluidization velocity.

Department: Chemical Technology Field of Study: Chemical Technology Academic Year: 2014

Student's Signature	
Advisor's Signature	
Co-Advisor's Signature	

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์การจำลองซีเอฟดีของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงในการเผาไหม้แบบเคมิ คอลลูปิงฉบับนี้ สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี ด้วยความช่วยเหลืออย่างดียิ่ง ทางผู้จัดทำขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลักและ ผศ. ดร. เบญจพล เฉลิมสินสุวรรณ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม ที่กรุณาให้คำแนะนำและ ข้อเสนอแนะ ข้อคิดเห็นในงานวิจัยนี้ตลอดมา

ขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร. เก็จวลี พฤกษาทร ประธานกรรมการสอบ วิทยานิพนธ์ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ประพันธ์ คูชลธารา กรรมการสอบวิทยานิพนธ์ และ อาจารย์ ดร. บุญรอด สัจจกุลนุกิจ กรรมการจากภายนอกมหาวิทยาลัย ที่กรุณารับเชิญเป็น กรรมการสอบสอบและให้คำแนะนำในการจัดทำวิทยานิพนธ์ให้มีความสมบูรณ์

ขอบคุณทุนอุดหนุนวิทยานิพนธ์สำหรับนิสิต จากบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์ มหาวิทยาลัย และทุนการศึกษาจากศูนย์ความเป็นเลิศด้านเทคโนโลยีปิโตรเคมีและวัสดุ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ขอบคุณคณาจารย์และเจ้าหน้าที่ทุกท่านในภาควิชาเคมีเทคนิคที่ได้ให้คำแนะนำ ช่วยเหลือและอำนวยความสะดวกในการวิจัยครั้งนี้

สุดท้ายนี้ขอกราบขอบพระคุณบิดา มารดา ญาติพี่น้อง ที่ให้ความช่วยเหลือให้กำลังใจ เป็นอย่างดีและให้การสนับสนุนจนสำเร็จการศึกษา รวมทั้งขอบคุณพี่ๆ เพื่อนๆ และน้องๆชาวเคมี เทคนิคทุกคนที่ให้กำลังใจในการทำวิทยานิพนธ์มาตลอด

สารบัญ

	/1
บทคัดย่อภาษาไทยง	
บทคัดย่อภาษาอังกฤษจ	
กิตติกรรมประกาศฉ	
สารบัญช	
บทที่ 1 บทนำ1	
1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา1	
1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย2	
1.3 ขอบเขตของการวิจัย	
1.4 ข้อจำกัดของการวิจัย3	
1.5 คำจำกัดความที่ใช้ในการวิจัย	
1.6 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	
1.7 วิธีดำเนินการวิจัย4	
1.8 ลำดับขั้นตอนในการเสนอผลการวิจัย5	
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	
2.1 เทคโนโลยีการดักจับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และกักเก็บ (Carbon capture and	
storage technology)6	
2.2 การเผาไหม้แบบเคมิคอลลูปปิง (Chemical-looping combustion)	
2.3 การออกแบบการทดลอง (Design of experiment)8	
2.3.1 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลแบบ 2k8	
2.3.2 การออกแบบ 2 ⁴ 9	
2.3.3 การวิเคราะห์ความแปรปรวน11	
2.3.4 การวิเคราะห์แบบจำลองการถดถอย14	
2.4 พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (Computational fluid dynamics, CFD)	

หน้า

	หน้า
2.4.1 ขั้นตอนการแก้ปัญหา	. 16
2.4.2 การแบ่งโดเมนของการไหลออกเป็นส่วนย่อยๆ (Discretization)	. 18
2.4.3 ปัญหาการแพร่กระจายความร้อน (Heat diffusion)	. 21
2.4.4 ปัญหาการพาและการแพร่กระจายความร้อน (Heat convection and heat	
diffusion)	. 22
2.5 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	. 26
บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย	. 30
3.1 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง	. 32
3.1.1 การหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ (Mathematical model)	. 32
3.1.1.1 สมการอนุรักษ์ (Conservation equations)	. 33
3.1.1.1.1 สมการอนุรักษ์มวล (Mass conservation equations)	. 33
3.1.1.1.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัม (Momentum conservation	
equations)	. 34
3.1.1.1.3 สมการอนุรักษ์พลังงานจลน์เนื่องจากการกวัดแกว่งของของเ	เข็ง
(Fluctuating kinetic energy conservation equation).	. 35
3.1.1.1.4 สมการอนุรักษ์พลังงาน	. 35
3.1.1.1.5 สมการอนุรักษ์การไหลและสปีชีส์	. 36
3.1.1.2 สมการเสริม (Constitutive equations)	. 36
3.1.2 การทดสอบความเป็นอิสระของจำนวนกริดที่เหมาะสมในการคำนวณ (Grid	
independency test)	. 39
3.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อดัชนีการผสม	เใน
เครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส	. 40
3.3 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี	. 42

3.3.1 การทดสอบความเป็นอิสระของจำนวนกริดที่เหมาะสมในการคำนวณ (Grid
independency test)
3.4 แบบจำลองการเกิดปฏิกิริยาเคมี (Chemical reaction model)
3.5 ศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameters) ที่ส่งผลต่ออัตราการ เกิดปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง
3.5.1 การกำหนดคุณสมบัติของแต่ละวัฏภาคที่ใช้ในการจำลองภาวะ
บทที่ 4 ผลการทดลองและอภิปรายผลการทดลอง54
4.1 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส
4.1.1 ผลการจำนวนเซลล์ที่เหมาะสมกับการคำนวณ (Grid independency test) และ หาเวลาที่ภาวะคงตัว (Steady state)
4.1.2 การเปรียบเทียบผลการจำลองและผลการทดลอง
4.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อดัชนีการผสมใน เครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง
4.3 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี
4.3.1 ผลการจำนวนเซลล์ที่เหมาะสมกับการคำนวณ (Grid independency test) และ หาเวลาที่ภาวะคงตัว (Steady state)73
4.3.2 การเปรียบเทียบผลการจำลองและผลการทดลอง
4.4 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการ เปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง
4.4.1 การหาเวลาที่ภาวะเสมือนคงตัว (Quasi steady state)
4.4.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อค่าร้อย ละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง
บทที่ 5 สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ
5.1 สรุปผลการวิจัย
5.1.1 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส

หน้า

5.1.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameters) ที่ส่งผลต่อดัชนี
การผสมในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส
5.1.3 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี
5.1.4 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีภายใน เครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง
5.2 ข้อเสนอแนะ
รายการอ้างอิง
ภาคผนวก
ภาคผนวก ก
ภาคผนวก ข
ภาคผนวก ค
ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

หน้า

ល្ង

สารบัญตาราง

ตารางที่ 2.1 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียล 2⁴9
ตารางที่ 3.1 ค่าตัวแปรต่างๆที่ใช้ในการทดลองในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส41
ตารางที่ 3.2 การออกแบบการทดลอง 2 ⁴ ของการศึกษาตัวแปรดำเนินการ กรณีไม่เกิดปฏิกิริยาเคมี42
ตารางที่ 3.3 อัตราการเกิดปฏิกิริยา และค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา
ตารางที่ 3.4 ค่าสัมประสิทธิ์ของปฏิกิริยาวอเตอร์แก๊สชิฟต์46
ตารางที่ 3.5 ค่าตัวแปรต่างๆที่ใช้ในการทดลองในเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้วงปฏิกิริยาเคมีในการไหลแบบ ไม่เกิดปฏิกิริยา (Cold flow)
ตารางที่ 3.6 ภาวะขอบที่ใช้ในแบบจำลองอุทกพลศาสตร์เครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้วงปฏิกิริยา เคมี
ตารางที่ 3.7 ภาวะขอบที่ใช้ในแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้วงปฏิกิริยาเคมีแบบเกิดปฏิกิริยา เคมี
ตารางที่ 3.8 การออกแบบการทดลอง 2 ⁴ ของการศึกษาตัวแปรดำเนินการ กรณีเกิดปฏิกิริยาเคมี53
ตารางที่ 4.1 การออกแบบการทดลองแฟกทอเรียล 2 ⁴ ของการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการและค่าดัชนี การผสมในแนวแกนและแนวรัศมี
ตารางที่ 4.2 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของของแข็งในแนวแกนเป็น ค่าตอบสนอง
ตารางที่ 4.3 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของของแข็งในแนวรัศมีเป็น ค่าตอบสนอง
ตารางที่ 4.4 การออกแบบการทดลองแฟกทอเรียล 2 ⁴ ของการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการและค่า ร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง
ตารางที่ 4.5 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ เป็นตัวแปรตอบสนอง
ตารางที่ 4.6 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนเป็นตัวแปร
ตอบสนอง

สารบัญรูป

8
14
17
ume . 19
21
นและการ
)31
ion และ
32
39
43
ุ่กิริยา
49
ที่ความสูง
55
56
57
57
าที 58
าที 58

รูปที่ 4.7 คอนทัวร์ของสัดส่วนเชิงปริมาตรของอนุภาคของแข็งที่ เวลา 20 วินาที
รูปที่ 4.8 ผลของตัวแปรหลักและผลของอันตรกิริยาที่มีผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของ
สัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน (ก) ผลของตัวแปรหลัก (ข) ผลของอันตรกิริยา
ระหว่าง ขนาดอนุภาคของแข็ง (A) และความสูงเบดเริ่มต้น (B) (ค) ผลของอันตรกิริยาระหว่าง
ขนาดอนุภาคของแข็ง (A) และความหนาแน่นของแข็ง (C) (ง) ผลของอันตรกิริยาระหว่าง
ขนาดอนุภาคของแข็ง (A) และความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D) (จ) ผลของอันตรกิริยาระหว่าง ความ
สูงเบดเริ่มต้น (B) และความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D)

รูปที่ 4.11 (ก) พื้นที่ผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตร
ของของแข็ง เมื่อขนาดอนุภาคและความหนาแน่นของของแข็งแตกต่างกัน (ข) พื้นที่ผิวตอบสนองของ
ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็ง เมื่อความสูงเบดเริ่มต้น
และความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน73
รูปที่ 4.12 ค่าความดันสมบูรณ์ ของ เครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี ฝั่งเครื่องปฏิกรณ์
อากาศ ตลอดแนวความสูงเครื่อง ที่จำนวนเซลล์ต่างๆ
รูปที่ 4.13 ค่าความดันสมบูรณ์ฝั่งเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ที่ระยะเวลา 0-25 วินาที
รูปที่ 4.14 ค่าความดันลดตลอดแนวความสูงเครื่องอากาศศ.
รูปที่ 4.15 ค่าความดันลดตลอดแนวความสูงเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง
รูปที่ 4.16 อุณหภูมิของแก๊สที่ทางออกครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง ที่กรณีต่างๆ ช่วงเวลา 0 – 40
วินาที77

รูปที่ 4.17 คอนทัวร์โมลฟลักซ์คาร์บอนมอนอกไซด์ ที่ 25 วินาที (ก) กรณี 13 (ข) กรณี 2 79
รูปที่ 4.18 (ก) ผลของตัวแปรหลัก (ข) ผลของอันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคของโลหะนิกเกิล ออกไซด์ และ ความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้า (ค) ผลของอันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดเริ่มต้น และ อุณหภูมิแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้า
รูปที่ 4.19 (ก) ผลของตัวแปรหลัก (ข) ผลของอันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคของโลหะนิกเกิล ออกไซด์ และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า
รูปที่ 4.20 พื้นผิวตอบสนองของค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ (ก) เมื่อ ขนาดอนุภาคของนิกเกิลออกไซด์และความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้าแตกต่างกัน (ข) เมื่อความสูง เบดเริ่มต้นและอุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าแตกต่างกัน
รูปที่ 4.21 พื้นผิวตอบสนองของค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจน เมื่อขนาดอนุภาคของ นิกเกิลออกไซด์และความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้าแตกต่างกัน

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย Chulalongkorn University

บทที่ 1 บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

ปัจจุบันการปล่อยแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์สู่บรรยากาศของโลกได้ก่อให้เกิดปัญหา ปรากฏการณ์เรือนกระจก ซึ่งแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์นี้ส่วนใหญ่มาจากกิจกรรมในชีวิตประจำวัน ของมนุษย์ทั้งในโรงงานอุตสาหกรรม และการเผาไหม้ของรถยนต์ ซึ่งล้วนเป็นสาเหตุหลักในการทำให้ อุณหภูมิบนพื้นผิวโลกสูงขึ้น ทั้งยังทำให้เกิดปัญหาอื่นๆ ตามมาอีกมากมาย ประชาคมโลก นักวิชาการ และนักวิทยาศาสตร์ได้รณรงค์ลดการปล่อยแก๊สเรือนกระจก ลดการใช้พลังงานฟอสซิล หันมาใช้พลังงานหมุนเวียน ร่างกฎหมายควบคุมปริมาณการปล่อยแก๊สเรือนกระจก และนำ เทคโนโลยีการดักจับหรือแยกแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ เช่น การดูดซึมด้วยสารละลายเอมีน การดูด ซับด้วยสารที่มีความพรุนสูง อย่างไรก็ตามเทคโนโลยีเหล่านี้มีข้อจำกัด เรื่อง ต้นทุนค่าใช้จ่ายสูง เทคโนโลยีดักจับที่มีประสิทธิภาพสูงล่าสุด ที่กำลังได้รับความสนใจอยู่ คือ การเผาไหม้แบบเคมิ คอลลูปิง ซึ่งมีประสิทธิภาพการเผาไหม้สูง ไม่มีค่าใช้จ่ายในการแยก และยังได้แก๊สผลิตภัณฑ์ที่มีความ บริสุทธิ์สูง และมีความเป็นมิตรต่อสิ่งแวดล้อม [1]

ความแตกต่างระหว่างปฏิกิริยาการเผาไหม้โดยทั่วไปและการเผาไหม้แบบเคมิคอลลูปิง การ เผาไหม้ทั่วไปจะเป็นปฏิกิริยาเคมีระหว่างเชื้อเพลิงดั้งต้น ซึ่งในที่นี่คือ เชื้อเพลิงกับแก้สออกซิเจน จาก อากาศ ได้ผลิตภัณฑ์ออกมาเป็นไอน้ำ และแก้สคาร์บอนไดออกไซด์ มีการคายความร้อน หรือ พลังงานออกมาจากกระบวนการ การเผาไหม้ในกระบวนการเคมิคอลลูปิงขั้นตอนแรก เชื้อเพลิงจะ เกิดปฏิกิริยาการเผาไหม้กับออกซิเจนที่ได้มาจากโลหะออกไซด์ ในกระบวนการ ที่เป็นสารประกอบ ของโลหะที่มีออกซิเจนเป็นองค์ประกอบ เมื่อผ่านการเกิดปฏิกิริยาดังกล่าว วัสดุของแข็งจะเปลี่ยนรูป กลายเป็นโลหะบริสุทธิ์ หรือออกไซด์ของโลหะที่มีปริมาณของออกซิเจนลดลง โดยแก้สผลิตภัณฑ์ที่ได้ จากปฏิกิริยาเคมีจะยังคงเป็นไอน้ำ และคาร์บอนไดออกไซด์เช่นเดิม ไอน้ำที่เกิดขึ้นจะเกิดการ ควบแน่นภายในอุปกรณ์คอนเดนเซอร์ที่ติดตั้งไว้ และแยกตัวออกจากแก้สคาร์บอนไดออกไซด์ ดังนั้น ผลิตภัณฑ์ที่ได้จึงมีความเข้มข้นของแก้สคาร์บอนไดออกไซด์สูง และพร้อมจะส่งต่อไปเก็บหรือใช้เป็น สารตั้งต้นในการผลิตเป็นสารเคมีตัวอื่นต่อไป ข้อดีของกระบวนการนี้ที่ดีกว่ากระบวนการอื่นที่ใช้งาน กันอยู่ในปัจจุบัน คือ เป็นการหลีกเลี่ยงการสัมผัสกันโดยตรงของเชื้อเพลิงกับอากาศที่จะส่งผลให้ ประสิทธิภาพทางความร้อนที่ได้ลดลง และเป็นการเผาไหม้ที่มีการแยกแก้สคาร์บอนไดออกไซด์ออก โดยกลไกภายในกระบวนการเอง ทำให้ลดค่าใช้จ่ายในการแยกแก้สผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้นได้ โลหะ บริสุทธิ์หรือออกไซด์ของโลหะที่มีปริมาณออกซิเจนลดลงถูกนำเข้าสู่เครื่องปฏิกรณ์อากาศ เพื่อทำ ปฏิกิริยากับออกซิเจนใหม่อีกครั้งและจะได้ผลิตภัณฑ์เป็นออกไซด์ของโลหะเดิมที่พร้อมจะนำไป ป้อนกลับเข้าสู่กระบวนการเป็นวัฏจักร

พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณเป็นการใช้คอมพิวเตอร์มาช่วยทำการวิเคราะห์ปัญหา พลศาสตร์ของไหล โดยกำหนดรูปทรงทางเรขาคณิตของปัญหาที่ทำการศึกษา และแบ่งปริมาตรนั้น ออกเป็นปริมาตรย่อย แล้วใช้โปรแกรมที่เขียนขึ้น ด้วยภาษาคอมพิวเตอร์แก้สมการแบบจำลองทาง กายภาพ ได้แก่ สมการอนุรักษ์มวล สมการความความต่อเนื่องและสมการพลังงาน กำหนดเงื่อนไข ขอบเขต เมื่อคำนวณแบบจำลองด้วย วิธีการคำนวณเชิงตัวเลขที่เลือกไว้ด้วยการทำซ้ำ โปรแกรมจะ ทำการแก้สมการด้วยระเบียบวิธี Finite volume method จนกระทั่งคำตอบลู่เข้า และได้มาซึ่ง คำตอบที่ถูกต้อง ข้อดีของการใช้คอมพิวเตอร์เข้ามาช่วยคำนวณทำให้มีความสะดวกรวดเร็ว นอกจากนี้ยังมีประโยชน์ ในการปรับปรุงออกแบบอุปกรณ์ทางวิศวกรรม การผสมในเครื่องปฏิกรณ์ เคมี การถ่ายเทความร้อนในอุปกรณ์แลกเปลี่ยนความร้อน และ วิเคราะห์ประสิทธิภาพของเครื่องได้ โดยที่ไม่ต้องลงทุนสร้างอุปกรณ์จริงๆทำให้ไม่มีค่าใช้จ่ายเกิดขึ้น [2]

จากการศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับกระบวนการเคมิคอลลูปิงในระบบ 2 มิติและ 3 มิติ ที่ ผ่านมายังไม่มีงานที่ศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเครื่องปฏิกรณ์ เชื้อเพลิง งานวิจัยนี้จะทำการศึกษาพฤติกรรมทางอุทกพลศาสตร์ และผลของตัวแปรดำเนินการ ได้แก่ ขนาดอนุภาค ความสูงเบดเริ่มต้น ความหนาแน่นของของแข็ง และ ความเร็วแก๊สป้อนเข้า ตัวแปรเหล่านี้จะส่งผลต่อการผสมของของแข็งและแก๊ส และ หาภาวะที่เหมาะสมในการดำเนินการ โดยใช้วิธีการออกแบบการทดลอง ร่วมกับวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ ผลที่ได้จะนำไปเป็น แนวทางในการปรับปรุงประสิทธิภาพของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงในเคมิคอลลูปิงให้มีประสิทธิภาพ สูงขึ้น

1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย

- หาแบบจำลองภาวะอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงของกระบวนการเคมิคอล ลูปปิงในระบบสองมิติด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณโดยใช้โปรแกรม ANSYS®FLUENT® และนำผลวิเคราะห์เชิงตัวเลขมาเปรียบเทียบกับผลการทดลองจริงที่ได้ จากงานวิจัยของ Jung และคณะ และของ Johansson และคณะ
- 2) วิเคราะห์ผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อพฤติกรรมทางอุทกพลศาสตร์และการเกิด ปฏิกิริยาภายในเคมิคอลลูปปิง

1.3 ขอบเขตของการวิจัย

- จำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงของกระบวนการเคมิคอลลูปปิงเพื่อหา แบบจำลองที่ใช้ทำนายผลที่ได้จากการทดลองจริง
- 2) นำแบบจำลองอุทกพลศาสตร์ในข้อแรกมาทำการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ
 (Operating parameter) เพื่อทำนายพฤติกรรมการไหลที่ให้ผลการผสมดีที่สุด
- จำลองปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นในวงปฏิกิริยาเคมีและศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ เพื่อหา ภาวะที่ให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงที่สุด

1.4 ข้อจำกัดของการวิจัย

- 1) แบบจำลองการไหลที่ใช้ในการวิจัยนี้เป็นแบบ 2 มิติ
- งานวิจัยส่วนแรกเป็นการจำลองส่วนเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงในระบบแบบกะ ในสภาวะที่ไม่มี การเกิดปฏิกิริยาเคมี (cold flow)
- งานวิจัยส่วนที่สองเป็นการจำลองทั้งระบบของกระบวนการเคมิคอลลูปปิงในสภาวะที่มี ปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นภายในระบบ (hot flow)
- 4) อนุภาคของแข็งในการจำลองมีขนาดและสมบัติทางกายภาพเช่นเดียวกันทั้งหมด

1.5 คำจำกัดความที่ใช้ในการวิจัย

พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ อุทกพลศาสตร์ การจำลองในระบบสองมิติ ตัวแปรดำเนินการ การไหลแบบหลายวัฏภาค

1.6 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

ได้แบบจำลองกระบวนการที่สามารถใช้ทำนายพฤติกรรมทางอุทกพลศาสตร์ และ ทำนายปฏิกิริยาใน การเผาไหม้แบบเคมิคอลลูปปิง ในระบบสองมิติ ทราบถึงผลกระทบของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของเครื่องปฏิกรณ์ และหาภาวะที่ เหมาะสมที่สุดในการดำเนินการ

1.7 วิธีดำเนินการวิจัย

- 1) ศึกษาค้นคว้าเอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องในหัวข้อต่างๆ ดังต่อไปนี้
- การทดลองและการจำลองพฤติกรรมอุทกพลศาสตร์ในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส
- การศึกษาแบบจำลองทางจลนพลศาสตร์ที่เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง
- การออกแบบการทดลองและวิเคราะห์ผลของตัวแปรต่างๆในเคมิคอลลูปิง
- การทดลองและการจำลองปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส

 จำลองภาวะเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊สด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ สองมิติโดยใช้โปรแกรมสำเร็จรูป ANSYS FLUENT เครื่องปฏิกรณ์ระบบ 2 มิติ มีขนาดสูง 0.4 เมตร กว้าง 0.155เมตร และอนุภาคของแข็งที่ใช้มีขนาด 530 ไมโครเมตร ความหนาแน่นของแข็ง 2,500 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร ความหนาแน่นอากาศ 1.225 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร ความสูงเบดเริ่มต้น 0.2 เมตร ความเร็วแก๊สป้อนเข้า 0.587 เมตรต่อวินาที ค่าสัมประสิทธิ์การชนระหว่างอนุภาค-อนุภาค 0.99 specularity coefficient 0.6 ตั้งค่าแบบจำลองแรงต้านของ Gidaspow และเลือก QUICK numerical scheme ตามงานวิจัยของ Loha และคณะ [3] สำหรับผลการทดลองที่จะนำมา เปรียบเทียบ ได้แก่ ผลการทดลองจากงานวิจัยที่ผ่านมาของ Jung และคณะ [4] โดยค่าผลการ ทดลองที่นำมาเปรียบเทียบได้แก่

- ความเร็วของของแข็งในแนวแกน Y ในแนวรัศมี (Axial solid velocity in radial direction)
- สัดส่วนปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมี (Solid volume fraction in radial direction)
- อุณหภูมิแกรนูลาร์ในแนวรัศมี (Granular temperature in radial direction)
- ในการจำลองจะทำการปรับขนาดกริดที่เหมาะสมกับการคำนวณที่สุด(Grid independency)

 ออกแบบและวางแผนการทดลอง (Design of experiment) ทำการจำลองกระบวนการ ตามการทดลองที่ออกแบบไว้และวิเคราะห์ผลกระทบของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อพฤติกรรมทาง อุทกพลศาสตร์ด้วยวิธีการวิเคราะห์ความแปรปรวน (Analysis of variance)

 ออกแบบและวางแผนการทดลอง (Design of experiment) เลือกตัวแปรที่ส่งผลต่อค่าการ เปลี่ยนของแก๊สเซื้อเพลิง (Fuel conversion) ทำการจำลองกระบวนการตามการทดลองที่ออกแบบ ไว้และวิเคราะห์ผลกระทบของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่ออัตราการปฏิกริยาเคมีในเครื่องปฏิกรณ์ เชื้อเพลิงด้วยวิธีการวิเคราะห์ความแปรปรวน (Analysis of variance) 5) วิเคราะห์ผล สรุปผล เขียนรายงาน และวิทยานิพนธ์

1.8 ลำดับขั้นตอนในการเสนอผลการวิจัย

ลำดับขั้นตอนในการเสนอผลการวิจัยนี้ประกอบด้วยเนื้อหาต่างๆ ดังนี้

บทที่ 1	ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา วัตถุประสงค์ของการวิจัย ขอบเขตของ				
	การวิจัย ข้อจำกัดของการวิจัย คำจำกัดความที่ใช้ในการวิจัย ประโยชน์ที่คาดว่าจะ				
	ได้รับจากงานวิจัย วิธีดำเนินการวิจัย และขั้นตอนในการเสนอผลการวิจัย				
บทที่ 2	การดักจับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และกักเก็บ การเผาไหม้แบบเคมิคอลลูปปิง การ				
	ออกแบบการทดลอง(Design of experiment) พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ				
	(Computational fluid dynamics) และงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง				
บทที่ 3	ข้อมูลเบื้องต้นในการวิจัย การจำลองอุทกพลศาสตร์ในงานวิจัย การจำลองปฏิกิริยา				
	เคมีในงานวิจัย ขั้นตอนการวิจัย				
บทที่ 4	ผลการหาแบบจำลองอุทกพลศาสตร์ที่เหมาะสม ผลของตัวแปรดำเนินการภายใน				
	เครื่องปฏิกิริยาเชื้อพลิง ผลของตัวแปรดำเนินการต่อปฏิกิริยาเคมี				
บทที่ 5	สรุปผลการวิจัย อภิปรายผลการวิจัย และข้อเสนอแนะ				

5

บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ปัจจุบันปัญหาสภาวะโลกร้อน (Global warming) ส่งผลกระทบต่อมนุษยชาติอย่างมาก สาหตุเกิดจาก การเพิ่มขึ้นของปริมาณแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ จากการเผาไหม้เชื้อเพลิงฟอสซิล น้ำมัน ถ่านหิน และก้าซธรรมชาติ การขนส่ง และการผลิตจากภาคอุตสาหกรรม ซึ่งในปัจจุบัน เชื้อเพลิงฟอสซิลเป็นพลังงานหลักของโลกอุตสาหกรรม โดยเชื้อเพลิงฟอสซิลเป็นพลังงานที่ไม่สามารถ นำกลับมาใช้ใหม่ได้ (Non-renewable energy) เราสามารถลดการปลดปล่อยแก๊ส คาร์บอนไดออกไซด์เพื่อแก้ปัญหาภาวะโลกร้อน โดยรณรงค์ให้แต่ละประเทศนั้น หันมาใช้พลังงาน หมุนเวียน (Renewable energy) ซึ่งเป็นแหล่งพลังงานที่เกิดขึ้นอยู่ต่อเนื่องและไม่มีวันหมดไป เช่น พลังงานแสงอาทิตย์ พลังงานลม พลังงานน้ำ เป็นต้น พลังงานหมุนเวียนเหล่านี้มีข้อดี คือ จะไม่ส่งผล กระทบต่อสิ่งแวดล้อม และไม่มีการปลดปล่อยแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์สู่ชั้นบรรยากาศ แต่ยังมีข้อเสีย คือ ไม่สามารถผลิตพลังงานได้อย่างต่อเนื่อง และต้องใช้พืนที่มากในการติดตั้ง แต่ในปัจจุบัน นักวิทยาศาสตร์ได้คิดค้นเทคโนโลยีที่จะสามารถลดการปลดปล่อยแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ได้ โดยใช้ เทคโนโลยีการดักจับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ไว้ [5]

2.1 เทคโนโลยีการดักจับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และกักเก็บ (Carbon capture and storage technology)

เทคโนโลยีการดักจับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ เป็นเทคนิคที่สามารถดักจับการปลดปล่อย ปริมาณแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์จากเชื้อเพลิงฟอสซิลไว้ได้สูงถึง 90% ซึ่งการใช้พลังงานฟอสซิล เหล่านี้ส่วนใหญ่จะมาจากการผลิตกระแสไฟฟ้า และในอุตสาหกรรม เทคโนโลยีนี้ประกอบไปด้วย 3 ขั้นตอน 1. การดักจับคาร์บอนไดออกไซด์ โดยใช้การดูดซับด้วยของแข็งและดูดซึมด้วยสารละลาย การแยกโดยใช้เยื่อเลือกผ่าน เป็นต้น 2. การกักเก็บแก๊ส และขนส่งแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ 3. การนำ แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ลงไปเก็บไว้ในหลุมแก๊สธรรมชาติและน้ำมัน ซึ่งขั้นตอนแรก แก๊ส คาร์บอนไดออกไซด์ที่ถูกดักจับไว้จะถูกขนส่งผ่านท่อส่งแก๊สหรือ เรือขนส่ง แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ 3. การนำ แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ที่ถูกดักจับไว้จะถูกขนส่งผ่านท่อส่งแก๊สหรือ เรือขนส่ง แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ หลายล้านตันจะถูกลำเลียงลงไปใต้พื้นผิวโลกเพื่อป้องกันการปลดปล่อยสู่บรรยากาศโดยตรง นอกจากนี้ก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ยังสามารถนำไปใช้เป็นก๊าซอัดเพื่อเพิ่มความดันในหลุมน้ำมัน (Oil and gas reservoir) เมื่อความดันในหลุมแก๊สธรรมชาติสูงขึ้น เครื่องสูบจะดึงเอาน้ำมันขึ้นมาได้มาก ขึ้น ซึ่งเป็นอีกเทคนิคหนึ่งในการเพิ่มกำลังการผลิตน้ำมันดิบในหลุมน้ำมันดิบ (Enhanced oil recovery) ได้อีกด้วย [6]

2.2 การเผาไหม้แบบเคมิคอลลูปปิง (Chemical-looping combustion)

เป็นเทคนิคหนึ่งของการดักจับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์โดยใช้ของแข็งทำปฏิกิริยาเพื่อดักจับ แก๊สที่ทำปฏิกิริยากับของแข็ง เช่น แก๊สซัลเฟอร์ไดออกไซด์ แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (Separation with sorbents/solvents) โดยหลักการของกระบวนการเทคโนโลยีวงปฏิกิริยาเคมี คือ การไม่ให้เกิด การสัมผัสกันโดยตรงระหว่างแก๊สเซื้อเพลิง (Fuel gas) กับ แก๊สออกซิเจน (Oxygen) ซึ่งเป็นสาร ออกซิไดซ์ (Oxidized agent) โดยตรงซึ่งจะทำให้ประสิทธิภาพการเผาไหม้ลดลง เนื่องจากแก๊ส ไนโตรเจนในอากาศจะเกิดปฏิกิริยากับแก๊สเซื้อเพลิง หัวใจของกระบวนการนี้มีกุญแจสำคัญ คือ โลหะ ออกซิเจน์ (Metal oxide , M_xO_y) หรือโลหะออกไซด์ที่ถูกรีดิวซ์หรือโลหะออกไซด์ที่อะตอมของ ออกซิเจนลดลง (M_xO_{y-1}) โดยความจุแก๊สออกซิเจนของโลหะออกไซด์นั้นขึ้นอยู่กับชนิดของธาตุโลหะ บริสุทธิ์ (M) การเกิดปฏิกิริยาเคมี จะเกิดขึ้นสองขั้นตอนต่อเนื่องกัน ในเครื่องปฏิกรณ์สองเครื่อง โดยมีโลหะออกไซด์เป็นตัวพาออกซิเจนเป็นตัวหมุนเวียนออกซิเจนระหว่างเครื่องปฏิกรณ์สงทั้งสอง เครื่อง คือ ออกซิไดเซอร์ (Oxidizer) และรีดิวเซอร์ (Reducer) หรือ เครื่องปฏิกรณ์อากาศและเครื่อง ปฏิกรณ์เชื้อเพลิง (Air reactor and fuel reactor) ตามลำดับ แสดงดังรูปที่ 2.1



รูปที่ 2.1 การเผาไหม้แบบเคมิคอลลูปปิง (Chemical looping combustion) [7]

ซึ่งขั้นตอนการเกิดปฏิกิริยาเป็นดังนี้ โลหะธาตุบริสุทธิ์ หรือโลหะออกไซด์ที่ถูกรีดิวซ์ จะส่งเข้า ไปในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ เพื่อทำปฏิกิริยากับอากาศ ซึ่งประกอบไปด้วยออกซิเจนและไนโตรเจน โดยธาตุโลหะ หรือโลหะที่ถูกรีดิวส์ จะทำปฏิกิริยาออกซิไดซ์กับออกซิเจน ได้เป็นโลหะออกไซด์ (M_xO_y) โดยปฏิกิริยานี้จะเป็นปฏิกิริยาคายความร้อน (Exothermic reaction) จะเกิดที่อุณหภูมิสูง ส่วนแก๊สไนโตรเจนและออกซิเจนที่เหลือจะถูกแยกโดยไซโคลน ออกจากโลหะออกไซด์ที่จะส่งต่อไป ยังเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงเพื่อทำปฏิกิริยากับแก๊สเชื้อเพลิง โลหะออกไซด์จะถูกรีดิวส์กลับไปเป็นธาตุ โลหะบริสุทธิ์(M) หรือโลหะออกไซด์ที่ถูกรีดิวส์ (M_xO_{y-1}) ปฏิกิริยาที่เครื่องฝั่งนี้จะเป็นปฏิกิริยาดูด ความร้อน (Endothermic reaction) หรือ คายความร้อน (Exothermic reaction) ก็ได้ขึ้นกับชนิด ของโลหะออกไซด์นั้น และได้ผลิตภัณฑ์ออกมาเป็น ไอน้ำและแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ ซึ่งจะสามารถ แยกผลิตภัณฑ์ผสมนี้ได้ง่ายโดยผ่านการควบแน่น เพื่อดึงเอาน้ำออก ท้ายที่สุดก็จะได้แก๊ส คาร์บอนไดออกไซด์ที่มีความบริสุทธิ์สูง ปฏิกิริยาในวงปฏิกิริยาเคมีทั้งสองเครื่อง [5, 6] แสดงดังรูปที่ 2.2

$$M + nO_{2} \rightarrow M_{x}O_{y}$$
(Air reactor) ---(1)
$$M_{x}O_{y} + C_{x}H_{y} \rightarrow xCO_{2} + yH_{2}O$$
(Fuel reactor) ---(2)

รูปที่ 2.2 ปฏิกิริยาการเผาไหม้ในวงปฏิกิริยาเคมี (Chemical looping combustion)

2.3 การออกแบบการทดลอง (Design of experiment)

การทดลองที่มีประสิทธิภาพ ควรเป็นการทดลองที่จะได้มาซึ่งข้อมูลที่มีความถูกต้อง และการ ลงทุนเพื่อทำการทดลองหนึ่งเพื่อทดสอบสมมุติฐานอะไรอย่างใดอย่างหนึ่งหรือ การศึกษาอิทธิพลของ สิ่งทดลองที่มีต่อตัวแปรสังเกต นั้นควรจะมีต้นทุนต่ำ การทดลอง (Experiment) เป็นเครื่องบ่งชี้ถึง ข้อมูลอย่างมีเหตุผลและช่วยตัดสินใจว่าจะทำการทดลองที่จะศึกษาปัจจัยที่ต้องการศึกษาต่อไป หรือไม่ การออกแบบการทดลองเป็นการวางแผนเพื่อศึกษาผลกระทบของสิ่งทดลองว่าจะส่งผลต่อ กระบวนการอย่างไร หรือตัวแปรตอบสนองที่สนใจ ในการทดลองหนึ่งนั้นจะประกอบไปด้วย สิ่ง ทดลอง (Treatment) คือ สิ่งที่สนใจจะศึกษาอิทธิพลที่มีต่อตัวแปรตอบสนอง สิ่งทดลองร่วม (Treatment combination) ปัจจัย (Factor) เป็นลักษณะของสิ่งทดลอง ตัวแปรตอบสนอง หรือ ตัวแปรที่ถูกสังเกต (Response variable) และ ตัวแปรรบกวน (Noise variable) เป็นตัวแปรที่มีผล ต่อตัวแปรตอบสนองแต่ไม่ใช่ตัวแปรที่เราสนใจจะศึกษา ซึ่งส่วนใหญ่ขึ้นอยู่กับสิ่งแวดล้อม [8]

2.3.1 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลแบบ 2k

การออกแบบการทดลอง Factorial design เป็นการวางแผนออกแบบการทดลองที่จะใช้ศึกษา ผลกระทบต่างๆของปัจจัยที่จะศึกษาในกรณีที่มีปัจจัยสองปัจจัยหรือมากกว่า ซึ่งส่งผลต่อตัวแปร ตอบสนอง โดยการออกแบบการทดลองนั้นจะมีจำนวนปัจจัย k ปัจจัย และแต่ละปัจจัยมีระดับ 2 ระดับ ซึ่งเราจะกำหนดระดับของปัจจัยสูงต่ำเหล่านี้ด้วยสัญลักษณ์ เช่นสัญลักษณ์ระดับต่ำ แทนด้วย (-) ระดับสูงแทนด้วย (+) และ จำนวนของสิ่งทดลองร่วม จะคำนวณได้เท่ากับ 2k สิ่งทดลองร่วมของ ปัจจัยต่างๆ (Treatment combination)

2.3.2 การออกแบบ 2⁴

การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลแบบ 2⁴ นี้ คือการออกแบบการทดลองที่มีปัจจัย 4 ปัจจัย และ แต่ละปัจจัยประกอบด้วย 2 ระดับ คือ ได้จำนวนสิ่งทดลอง และสิ่งทดลองร่วม มีระดับสูง ระดับต่ำ รวมทั้งหมด 16 การทดลอง ดัง ตารางที่ 2.1 ตารางที่ 2.1 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียล 2⁴

Run	А	В	C	D	Combination
1	-			-	1
2	+	2///	-	<u>_</u>	А
3	-	+		<u> </u> -	В
4	+	+		-	ab
5	-	- 2	+	-	С
6	+	8	+	2	ас
7	-	+	+		bc
8	+ C	HULALONG	KORN [†] UN	VERSITY	abc
9	-	-	-	+	D
10	+	-	-	+	ad
11	-	+	-	+	bd
12	-	-	+	+	cd
13	+	+	-	+	abd
14	+	-	+	+	acd
15	-	+	+	+	bcd
16	+	+	+	+	abcd

ในการพิจารณาการประมาณค่าผลกระทบจากปัจจัยจะสามารถคำนวณได้จากค่าคอนแทรสต์ (Contrast) ของการทดลองร่วมปัจจัยนั่นเอง สำหรับนิยาม ของ ค่าคอนทราสต์ คือความแตกต่าง ระหว่างผลรวมของค่าตอบสนองของค่าสูง (+) และ ค่าตอบสนองของค่าต่ำ (-) นั่นเอง แสดงดัง สมการ

ค่าคอนทราสต์ของตัวแปรหลัก (Main factor) เช่นตัวแปร A แสดงดังตัวอย่างการประมาณผลของตัวแปรหลัก

$$A = \frac{1}{8n} [a - 1 - b + ab - c + ac - bc + abc - d + ad - bd - cd + abd + acd - bcd + abcd]$$

ตัวอย่างของการประมาณผลอันตกิริยาสองตัวแปร AB

$$AB = \frac{1}{8n} [1 - a - b + ab + c - ac - bc + abc + d - ad - bd + cd + abd - acd - bcd + abcd]$$

ตัวอย่างของการประมาณผลอันตกิริยาสามตัวแปร ABC

$$ABC = \frac{1}{8n} [a - 1 + b - ab + c - ac - bc + abc - d - ad + bd + cd + abd - acd - bcd + abcd]$$

ซึ่งเขียนให้อยู่ในรูปแบบสมการทั่วๆไปได้ว่า

$$AB...K = \frac{2}{n2^{k}}(Contrast_{AB..K})$$
(2.2)

หลังจากนั้นจะคำนวณทำการหาค่าผลรวมของกำลังสอง (Sum square ; SS) สำหรับผลแต่ละตัว คือ

$$SS_{AB..K} = \frac{1}{n2^{k}} (Contrast_{AB..K})^{2}$$
(2.3)

สุดท้ายก็นำค่าที่คำนวณได้ทั้งหมดไปทำการใส่ในตารางการวิเคราะห์ความแปรปรวน (ANOVA) หาค่า F₀ หรือค่า p-Value วิเคราะห์ผลว่าตัวแปรตัวใดที่มีผลอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ และสร้างกราฟ ค่า Residual และ ค่าที่สังเกตได้ ซึ่งค่า Residual ที่ได้ควรมีการกระจายตัวแบบสุ่ม แสดงถึงความ สม่ำเสมอของข้อมูล

2.3.3 การวิเคราะห์ความแปรปรวน

การวิเคราะห์ความแปรปรวน เป็นวิธีหนึ่งที่ทดสอบสมมติฐานเพื่อใช้วิเคราะห์ความแตกต่างของสิ่ง ทดลองสองกลุ่มขึ้นไป โดยวิเคราะห์ผ่านค่าความแปรปรวน จึงเรียกว่า การวิเคราะห์ความแปรปรวน (Analysis of Variance) ผลการทดลองที่ได้ โดยการวิเคราะห์ความแปรปรวน มาจากความหมาย ของการแบ่งความแปรปรวนทั้งหมดออกเป็นส่วนประกอบย่อยๆ ซึ่ง ก็คือ ผลรวมของค่าความ แปรปรวนทุกอิทธิพลมารวมกัน

ตัวอย่าง ผลรวมของค่าความแปรปรวนของอิทธิพลหลัก (Sum of square of treatment) สามารถ เขียนให้อยู่ในรูปอย่างง่าย คือ

$$SS_{Treatment} = \frac{1}{bcdn} \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{b} \sum_{k=1}^{c} \sum_{l=1}^{n} y_{ijkl}^{2} - \frac{y_{....}^{2}}{abcdn}$$
(2.4)

ส่วนประกอบย่อยๆ ของ การวิเคราะห์ความแปรปรวน ประกอบไปด้วย ผลรวมค่าความแปรปรวน ของอิทธิพล A (SS_A) ผลรวมค่าความแปรปรวนของอิทธิพล B (SS_B) ผลรวมความแปรปรวนของ อิทธิพล C (SS_C) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพล D (SS_D) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพล ร่วมระหว่าง A และ B (SS_{AB}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่าง A และ C (SS_{AC}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่างปัจจัย B และ C (SS_{BC}) ผลรวมความแปรปรวนของ อิทธิพลร่วมระหว่าง B และ D (SS_{BD}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่าง A และ D (SS_{AD}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่าง B และ D (SS_{BD}) ผลรวมความแปรปรวนของ อิทธิพลร่วมระหว่าง C และ D (SS_{CD}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่าง A B และ C (SS_{ABC}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่าง A C และ D (SS_{ACD}) ผลรวมความแปรปรวนของ อิทธิพลร่วมระหว่าง C และ D (SS_{CD}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่าง A B และ C (SS_{ABC}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่าง A C และ D (SS_{ACD}) ผลรวมความแปรปรวน ของอิทธิพลร่วมระหว่าง B C และ D (SS_{BCD}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่าง A B และ D (SS_{ABD}) ผลรวมความแปรปรวนของอิทธิพลร่วมระหว่าง A C และ D (SS_{ABC}) ผลรวมความแปรปรวนของค่าความคลาดเคลื่อน (SS_E)และเมื่อนำผลรวมของความแปรปรวนของ อิทธิพลย่อยเหล่านี้มารวมกัน สุดท้ายจะได้ว่า Total Corrected Sum of Square

$$SS_T = \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{n} (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2$$
(2.5)

ค่านี้จะใช้สำหรับวัดความแปรผันทั้งหมดของข้อมูล และหาร SS_T ด้วย N-1 หรือ ระดับขั้นความเสรี (Degree of freedom) โดย N คือจำนวนข้อมูลทั้งหมด สุดท้ายจะได้ ค่าเฉลี่ยของความคลาดเคลื่อน ของอิทธิพลทั้งหมด (Mean square error of total of sum square)

$$MS_T = \frac{SS_T}{N-1} \tag{2.6}$$

โดยความแปรปรวนทั้งหมดของข้อมูล ซึ่งวัดจาก Total Corrected Sum of Square จะ แบ่งออกเป็นสองส่วนคือ ส่วนของผลรวมกำลังสองของความแตกต่างระหว่างค่าเฉลี่ยในแต่ละปัจจัย กับค่าเฉลี่ยรวม รวมกับ ผลบวกกำลังสองของความคลาดเคลื่อน

ผลรวมกำลังสองของความคลาดเคลื่อน(Sum of square error) นั้นหาได้จากการนำ Total Corrected Sum of Square หักลบออกด้วยผลรวมค่าความแปรปรวนของอิทธิพลย่อยและอิทธิพล ร่วมทุกตัว

$$SS_T = SS_{Treatment} + SS_E$$

(2.7)

$$SS_E = SS_{Treatment} - SS_T$$

ซึ่ง SS_{Treatment} เรียกว่า ผลรวมกำลังสองที่เกิดเนื่องจากอิทธิพลแต่ละตัวนั่นเอง ซึ่งหาได้จากสมการ 2.4 ที่เคยกล่าวไว้ โดยผลรวมกำลังสองที่เกิดจากอิทธิพลแต่ละตัวจะมีระดับขั้นความเสรีเท่ากับ ระดับ ของค่าเฉลี่ย a - 1 และ SS_E เรียกว่า ผลรวมของกำลังสองของความคลาดเคลื่อน มีระดับขั้นความเสรี เท่ากับ N-a ซึ่งเมื่อทำการนำค่าของผลรวมกำลังสอง (Sum of Square) ของแต่ละตัวหารด้วยระดับ ขั้นความเสรีของตัวเองจะได้เป็น ค่าเฉลี่ยของความคลาดเคลื่อนของอิทธิพลนั้น (Mean square error of treatment) ดังสมการ

$$MS_{Treatment} = \frac{SS_{Treatment}}{a - 1}$$
(2.8)

และค่า ค่าเฉลี่ยของความคลาดเคลื่อนของความคลาดเคลื่อน(Mean square error) เป็น

$$MS_E = \frac{SS_E}{N-a} \tag{2.9}$$

จากนั้นหาอัตราส่วน F₀ ซึ่งเป็นการทดสอบสมมติฐานความแตกต่างกันของความแปรปรวนของ ตัวอย่างสองกลุ่ม โดยคำนวณได้ดังนี้

$$F_0 = \frac{MS_{Treatment}}{MS_E}$$
(2.10)

การทดสอบ F-test มีสมมติฐาน คือ กลุ่มตัวอย่างสองกลุ่มนี้เป็นอิสระกัน (Independent) สามารถตั้งสมมติฐานได้ดังนี้

สมมติฐาน 1

$$H_0: \mu_1 = \mu_2$$
 $H_1: \mu_1 \neq \mu_2$
 หรือ

 สมมติฐาน 2
 $H_0: \mu_1 = \mu_2$
 $H_1: \mu_1 > \mu_2$
 หรือ

 สมมติฐาน 3
 $H_0: \mu_1 = \mu_2$
 $H_1: \mu_1 > \mu_2$
 หรือ

 $H_1: \mu_1 < \mu_2$
 หรือ

 $H_1: \mu_1 < \mu_2$
 $H_1: \mu_1 < \mu_2$

ขั้นแรก คำนวณหาว่ากลุ่มตัวอย่างทั้งสองกลุ่มมีความแปรปรวนแตกต่างกันหรือไม่ ด้วยสูตร F-test มีสมมติฐานดังนี้

$$H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2$$
$$H_1: \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$$

$$F_o = \frac{MS_{Treatmen}}{MG}$$

คำนวณด้วยสูตร MS_E พิจารณาค่า F₀ ถ้าค่า F₀ >F_{α ,a-1,N-a} แสดงว่าค่าที่คำนวณได้ไม่ มีนัยสำคัญทางสถิติ (Significant > α) นั่นคือปฏิเสธ H0 แสดงว่าความแปรปรวนของทั้งสองกลุ่ม เท่ากันหรือไม่มีความแตกต่างกันระหว่างค่าเฉลี่ยของความแปรปรวน แต่ถ้าค่า F₀ < F_{α,a-1,N-a} แสดง ว่าค่าที่คำนวณได้นั้นมีความสำคัญทางสถิติ (Significant < ^α) นั่นคือ ยอมรับ H₀ ข้อมูลมีความ แตกต่างกันระหว่างค่าเฉลี่ยของความแปรปรวนทั้งสองกลุ่ม หากเราต้องการสรุปผลการทดสอบ สมมติฐานนั้น เราจะสนใจว่า สมมติฐานหลัก (Null hypothesis) ถูกยอมรับหรือปฏิเสธ ถ้าถูกยอมรับ นั่นก็แปลว่า สมมติฐานเป็นจริง หรือแปลว่าสมมติฐานนั้นไม่เป็นจริง ถ้าถูกปฏิเสธ จึงมีการกำหนดค่า ระดับนัยสำคัญ เพื่อที่จะบอกยอมรับหรือปฏิเสธ Null hypothesis เรียกว่า Probability Value (P-Value) ส่วนใหญ่แล้ว p-value จะถูกกำหนดไว้ที่ระดับความเชื่อมั่น 95% หรือ p-value = 0.05 การทดสอบสมมติฐานนั้นจะทำการปฏิเสธสมมติฐานหลักH0เมื่อค่า p-value < 0.05

2.3.4 การวิเคราะห์แบบจำลองการถดถอย

หลังจากทำการทดลอง และวิเคราะห์ข้อมูลด้วยวิธีทางสถิติ เพื่อทำการตรวจสอบสมมุติฐาน ขั้นตอนสุดท้ายคือการสรุปผลการทดลองที่ได้ ซึ่งโดยส่วนมากจะแสดงอยู่ในรูปของกราฟ เช่น Box plot , Scatter diagram แสดงดังรูป ที่ 2.3 (ก) Box plot (ข) Scatter diagram



แต่อย่างไรก็ตามในบางกรณี อาจใช้วิธีการนำเสนอในรูปปแบบอื่นได้ เช่น การสร้าง แบบจำลองถดถอย (Regression model)

ปัจจัยส่วนใหญ่ในการทดลอง จะแบ่งออกเป็น สองประเภท คือ ปัจจัยเชิงปริมาณ (Quantitative) และ ปัจจัยเชิงคุณภาพ (Qualitative) ในที่นี้ ปัจจัยเชิงปริมาณ ระดับของปัจจัยนั้น สามารถแสดงให้อยู่ในรูปของระดับค่าเชิงตัวเลขได้ เช่น อุณหภูมิ ความดัน และเวลา แต่หากเป็น ปัจจัยเชิงคุณภาพระดับของปัจจัยนั้นไม่สามารถแสดงให้อยู่ในรูปเชิงตัวเลขได้ เช่น ผู้ปฏิบัติการ (Operator) และ ชนิดของวัตถุดิบ(Batch of raw material) สมมุติว่าการทดลองหนึ่ง ต้องการศึกษา อิทธิพลของปัจจัย ซึ่งประกอบไปด้วยทั้ง ปัจจัยเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ การวิเคราะห์ข้อมูลทาง สถิติ และแสดงผลให้อยู่ในรูปกราฟที่เคยกล่าวมา ซึ่งก็ไม่อาจไม่เหมาะสมเท่าใดนัก ดังนั้น เราอาจ สร้างความสัมพันธ์ระหว่างปัจจัยนี้ให้อยู่ในรูปแบบสมการเอมพิริคัล (Empirical model) วิธีการฟิต สมการเอมพิริคัลนี้เรา เรียกว่า การสร้างแบบจำลองถดถอย เป็นการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ของตัว แปรสองตัว เมื่อตัวแปรมีความสัมพันธ์กัน คือ ตัวแปรที่เป็นค่าประมาณการ(X) และ ตัวแปร ตอบสนอง (Y) แนวโน้มของกราฟจะมีแนวโน้มเดียวกัน แสดงว่ามีความสัมพันธ์กัน หากทราบค่าของ ตัวแปรหนึ่งจะทำนายค่าของตัวแปรอีกตัวหนึ่งได้ แต่ถ้าไม่มีความสัมพันธ์กัน แนวโน้มของกราฟจะไม่ ไปทางเดียวกัน โดยรูปแบบของสมการถดถอยเซิงเส้นอย่างง่าย (Simple linear regression model) แสดงดังสมการข้างล่าง

$$y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \varepsilon$$

(2.11)

Chulalongkorn University

Y เป็นตัวแปรตาม X เป็นตัวแปรอิสระ ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) β_1 และ β_2 คือค่าคงที่และค่า β_0 จะเป็นจุดตัดของสมการถดถอย และ ϵ ค่าความคลาดเคลื่อนของ แบบจำลอง

การตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลองทำได้โดย การสร้างกราฟระหว่างค่าเศษตกเหลือ (Residual)กับค่าที่ได้จากการทำนาย (Predicted value) ถ้าแบบจำลองที่ได้มีความสัมพันธ์กัน กราฟระหว่างค่าเศษตกเหลือและค่าที่ได้จากการทำนายการกระจายตัวของข้อมูลจะไม่มีรูปแบบ เฉพาะ(Random) และสามารถตรวจสอบได้อีกวิธี โดยการหาค่า R² (R-squared) ซึ่งเป็นค่าตัวสถิติ ที่ใช้วัดว่าแบบจำลองคณิตศาสตร์ที่ได้มีความสอดคล้องกับข้อมูลมากน้อยอย่างไร ซึ่งค่า R-squared จะมีค่าอยู่ระหว่าง 0 – 1 ยิ่งค่า R-Squared สูงๆ หมายความแบบจำลองนั้นมีความเหมาะสมกับ ข้อมูล ถึงแม้ R-Squared มีค่าสูง ก็ไม่ได้หมายความว่าแบบจำลองมีความเหมาะสมกับข้อมูลเสมอไป เพราะ Residual plot อาจได้รูปแบบการกระจายของข้อมูลที่ไม่ไร้รูปแบบ (Non-random) ซึ่งจะ ทำให้ได้ตัวแบบจำลองที่ไม่ดี ดังนั้นในการวิเคราะห์สมการถดถอย ควรจะวิเคราะห์ R-Squared และ Residual plot ควบคู่กันไปด้วย

2.4 พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (Computational fluid dynamics, CFD)

พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ เป็นการวิเคราะห์เพื่อแก้ปัญหาพลศาสตร์ของไหล เพื่อหา ความเร็ว ความดัน อุณหภูมิ วิเคราะห์พฤติกรรมของไหลในอุปกรณ์ หรือ ในระบบ โดยนำระเบียบ ้วิเคราะห์เชิงตัวเลข (Numerical methods) และ การเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์ข้ามาช่วยในการ ้แก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial differential equation) ซึ่งสมการเหล่านี้จะประกอบไป ด้วย 3 สมการหลัก คือ สมการอนุรักษ์โมเมนตัม (Conservative of momentum) สมการอนุรักษ์ พลังงาน (Conservative of energy) และสมการความต่อเนื่อง หรือสมการอนุรักษ์มวล (Conservative of mass) ซึ่งชุดสมการเหล่านี้จะมีความสอดคล้องกับการไหลของของไหลจริง โดยมี หลักการพื้นฐานในการพิจารณาของไหลที่มีความต่อเนื่องให้อยู่ในลักษณะเป็นช่วง (discrete) ข้อดี ของพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ คือลดค่าใช้จ่ายและเวลาในการทดลองในห้องปฏิบัติการจริง การ ้ออกแบบอุปกรณ์ทางวิศวกรรมต่างๆ เช่น การออกแบบอากาศพลศาสตร์ของยานยนต์ เมื่อรถยนต์ เคลื่อนที่นั้นจะมีอากาศที่ไหลผ่านมาปะทะที่รถยนต์ เนื่องจากอากาศที่ไหลผ่านหลังคารถยนต์มี ความเร็วสูงกว่าอากาศที่ไหลผ่านใต้ ท้องรถยนต์ ดังนั้นอากาศเหนือหลังคารถจึงมีความดันต่ำกว่า อากาศใต้ท้องรถ ความแตกต่างของความดันนี้ทำให้เกิด แรงยก (Lift) และการหมุนวนของอากาศ ู้ขึ้น (Vortex) การหมุนวนของอากาศที่เกิดขึ้นที่ส่วนท้ายของรถยนต์ อากาศที่หมุนวนนี้เองที่ทำให้ ้เกิดแรงต้านการเคลื่อนที่ของรถยนต์ หากเราต้องออกแบบรูปร่างของรถยนต์อย่างไรให้ให้เกิดแรงต้าน การเคลื่อนที่น้อยที่สุด ซึ่งหากทำการออกแบบปรับและดัดแปลงใหม่ และทำการทดลองเพื่อ เปรียบเทียบค่าจากการทดลองอีก อาจจจะต้องใช้เวลานานหลายเดือนในการสร้างตามแบบที่ ้ออกแบบไว้ และ เสียค่าใช้จ่ายในการทำการทดลองแต่ละครั้งสูง จากค่าแรงงานคนและค่าอุปกรณ์ใน การทดลอง ซึ่งพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณสามารถแก้ปัญหาเหล่านี้ได้ [2]

2.4.1 ขั้นตอนการแก้ปัญหา

้ขั้นตอนการแก้ปัญหาสำหรับพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ มีขั้นตอนดังต่อไปนี้

 กำหนดลักษณะรูปร่างของปัญหา การกำหนดรูปร่างของปัญหาทางวิศวกรรม ซึ่ง ระดับความยาก การแก้ปัญหานั้นจะขึ้นอยู่กับ รูปร่างที่มีลักษณะรูปแบบซับซ้อน ก็จะแก้ปัญหาได้ลำบาก
 การแบ่งช่วงของโดเมนปริภูมิ (Spatial Domain) แบ่งออกเป็นเซลล์ช่วงๆ ลักษณะเป็นโครงตาข่าย (Grid) แสดงดังตัวอย่าง ดังรูปที่ 2.4 การบ่งเซลล์ในลักษณะโครงตาข่ายของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์ เบดแบบหมุนเวียนในระบบสองมิติ ฝั่งไรเซอร์ (Riser-2D) [9]



รูปที่ 2.4 โดเมนของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบหมุนเวียน ฝั่งไรเซอร์ [9]

 การกำหนดสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial differential equations) ที่เป็นสมการอนุพันธ์ย่อยที่ อธิบายการไหลของของไหลตามความจริง ซึ่งระบบสมการ ประกอบไปด้วย สมการอนุรักษ์มวล โมเมนตัม และพลังงาน การที่จะแก้สมการได้ ต้องเข้าใจความหมายเชิงกายภาพของเทอมต่างๆ ใน สมการก่อน จึงจะนำไปสู่การแก้ปัญหาที่มีความถูกต้อง

4. การกำหนดเงื่อนไขอบเขต (Boundary condition) การแก้ระบบสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย ซึ่ง เงื่อนไขขอบนั้นส่วนใหญ่จะเกี่ยวข้องกับพฤติกรรมของของไหล และสมบัติของของไหล ในการ วิเคราะห์ปัญหาที่ภาวะไม่คงตัว (transient) จะต้องกำหนดเงื่อนไขเริ่มต้น (Initial conditions) ด้วย ยกตัวอย่างเช่น การแก้ปัญหาการไหลของของไหลในท่อ ต้องมีการกำหนด เงื่อนไขขอบ Boundary condition ดังนี้ Velocity inlet, Fluid wall และ Pressure outlet และตั้งเงื่อนไข ตรงผนัง เป็น ผนังแบบไม่ลื่นไถล (No slip) ดังรูป ที่ 2.5



รูปที่ 2.5 เงื่อนไขขอบเขตการไหลในท่อ (Flow in pipe) [10]

การแก้ระบบสมการอนุพันธ์ย่อย ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข โดยใช้ระเบียบวิธีการซ้ำ(Iteration)
 การแสดงผลลัพธ์การแก้สมการให้อยู่ในรูปของ คอนทัวร์ 3 มิติ และเวกเตอร์ของความเร็วของของ
 ไหล เพื่อง่ายต่อการตีความและทำความเข้าใจความหมายเชิงกายภาพของระบบ

2.4.2 การแบ่งโดเมนของการไหลออกเป็นส่วนย่อยๆ (Discretization)

เป็นการแบ่งโดเมนของการไหลออกเป็นตารางเล็กๆ และทำการแก้ระบบสมการทางพีชคณิต (system of algebraic equations) โดยใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลข วิธีการเทคนิคการแบ่งโดเมน ออกเป็นเซลล์ย่อยๆ (discretization) ที่นิยมใช้ใน การแก้ปัญหาการไหลของของไหล ในโปรแกรม เชิงพาณิชย์ที่ขายตามท้องตลาดในปัจจุบัน เช่น ANSYS FLUENT คือระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุม (Finite Volume Method) ทำได้โดยการแบ่งโดเมนออกเป็นเซลล์ย่อยๆ และกำหนดตัวไม่ทราบค่า (Unknown) ตรงกลางเซลล์ และทำการอินทิเกรตสมการเชิงอนุพันธ์นั้นๆ บน ปริมาตรควบคุม (Control volume) ดังแสดงดังรูปที่ 2.6 นั้นแล้วใช้วิธีการประมาณ เปลี่ยนสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยให้ เป็นสมการเชิงเส้น (System of Algebra) ซึ่งในสมการการไหลของของไหลจะมีทั้งพจน์การ แพร่กระจายและการพาของของไหลรวมอยู่ด้วยกัน (convection-diffusion) ระเบียบวิธีไฟไนต์ วอลุมนี้ เราจะนำมาใช้กับสมการควบคุมพื้นฐาน (Governing equation) สมการที่ 2.12 ในรูปแบบ ของ ตัวแปร Φ ซึ่งตัวแปรนี้ ซึ่งตัวแปรนี้อาจแทนด้วย อุณหภูมิ ความเร็ว ความเข้มข้น เป็นต้น

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + div(\rho\phi u) = div(\Gamma grad\phi) + S_{\phi}$$
(2.12)





$$\frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{S_{\phi}}{Source \ Term}$$

$$Source \ Term$$
(2.13)

กรณีที่พิจารณาระบบที่มีการแพร่กระจายความร้อนและการพาความร้อน พจน์แรกซ้ายมือ คือ พจน์ของการพาของของไหล (Convection term) พจน์แรกทางขวามือ พจน์ของการ แพร่กระจาย (Diffusion term) พจน์ที่สอง คือ Source term ขั้นตอนการเปลี่ยนสมการอนุพันธ์ให้ เป็นสมการพีชคณิต โดยการอินทิเกรตปริมาตรควบคุม

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) dV + \int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \phi) dV = \int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV + \int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV + \int_{CV} S_{\phi} dV$$
(2.14)

หลังจากนั้นทำการ แปลงพจน์ dV = Adx และ อินทิเกรตปริมาตรควบคุมทีละพจน์จะได้ว่า ทำการการอินทิเกรตทีละเทอม โดยกำหนดให้ Ae = Aw = 1× Δ y An = As = 1× Δ x สุดท้ายจะ ได้เทอมของการพาของามการควบคุมพื้นฐานทั้ง สองแกน × และ y

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) dV = (\rho u A)_e \phi_e - (\rho u A)_w \phi_w = F_e \phi_e - F_w \phi_w$$

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \phi) dV = (\rho v A)_n \phi_n - (\rho v A)_s \phi_s = F_n \phi_n - F_s \phi_s$$
(2.16)

เทอมของการแพร่กระจาย

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_{e} - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_{w} = D_{e}(\phi_{E} - \phi_{P}) - D_{w}(\phi_{P} - \phi_{W})$$
(2.17)

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} A \right)_n - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} A \right)_s = D_n(\phi_N - \phi_P) - D_s(\phi_P - \phi_S)$$
(2.18)

Source term

$$\int_{CV} S_{\phi} dV = S_{\phi} V \tag{2.19}$$

เมื่อ A_e , A_w , A_n , A_s แทนพื้นที่การและการนำความร้อนของ ตำแหน่งรอบๆปริมาตรควบคุม ขอบ e,w,n,s ของเซลล์

สัญลักษณ์ F และ D แทน สัมประสิทธิ์ของการพาและการนำความร้อน ตามลำดับ

F =
ho u A ซึ่งแทนสัมประสิทธิ์การพาความร้อน

U หรือ v แทนความเร็วซึ่ง เป็นปริมาณเวกเตอร์ อาจมีค่าเป็นบวกหรือลบก็ได้ โดย u แทนความเร็ว ในแนวแกน x และ y แทนความเร็วในแนวแกน y

$$D = \Gamma \frac{A}{\delta}$$

้ ซึ่งแทนสัมประสิทธิ์การนำความร้อน

การนำความร้อน สัญลักษณ์ Г สัมประสิทธิ์การนำความร้อน (Thermal conductivity) ดังนั้นจึงมี ค่าเป็นบวกเสมอ

2.4.3 ปัญหาการแพร่กระจายความร้อน (Heat diffusion)

การแก้ปัญหาการแพร่กระจายความร้อนในระบบหนึ่งมิติ ด้วยวิธีไฟไนต์วอลุม เริ่มต้นจากสมการ ควบคุมพื้นฐาน สมการที่ 2.14 กรณีที่เป็นการแพร่กระจายความร้อน และ **ф** แทนด้วย อุณหภูมิ(T)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + div(\rho\phi u) = div(\Gamma g rad\phi) + S_{\phi}$$
สมการมีแค่เทอมการแพร่ ดังนั้นจึง ลดรูปเหลือเป็น $\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma \frac{dT}{dx}\right) + S = 0$

ทำการ discretization รอบปริมาตรควบคุม ดังรูป ที่ 2.7



รูปที่ 2.7 การแบ่งโดเมนของของการแพร่กระจายความร้อนออกเป็นเซลล์ [11] Сни асонскови University

การแบ่งโดเมนออกเป็นเซลล์ จุด P และเส้นรอบจุด P มีความยาว ∆x เซลล์ด้านซ้ายและ ขวาคือ เซลล์ W และ E ตามลำดับ และทำการอินทิเกรตรอบปริมาตรควบคุม ซึ่งจะได้ว่า

$$\int_{w}^{e} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{dT}{dx} \right) + S \right] dx = 0$$
(2.20)

$$\left(\Gamma\frac{dT}{dx}\right)_{e} - \left(\Gamma\frac{dT}{dx}\right)_{w} + \int_{w}^{e} Sdx = 0$$
(2.21)

สมการนี้เป็นไปตามกฎอนุรักษ์พลังงาน โดยฟลักซ์ความร้อนที่เข้ามาทางด้านขวาของเซลล์ และออก ทางด้านซ้ายของเซลล์ และพจน์ ต้นกำเนิดความร้อนภายในเซลล์ (Source term) ทั้งหมดรวมกัน ต้องมีค่าเป็นศูนย์ เทอม ค่าการเปลี่ยนแปลง (gradient) สองพจน์แรก ในสมการสามารถหาค่า

โดยประมาณได้โดย $\left(\frac{dT}{dx}\right)_e = \frac{T_E - T_p}{\Delta x}$ และ $\left(\frac{dT}{dx}\right)_w = \frac{T_P - T_w}{\Delta x}$ และพจน์ Source term อินทิเกรตรอบปริมาตรควบคุม จะเปลี่ยนให้อยู่ในรูปสมการพีชคณิตได้ดังนี้

$$\int_{w}^{e} Sdx = \int_{w}^{e} (S_{c} + S_{p}T)dx = S_{c}\Delta x + S_{p}\int_{w}^{e}Tdx = (S_{c} + S_{p}T_{p})\Delta x$$

ดังนั้นสุดท้าย การแก้ปัญหาการแพร่กระจายความร้อน (Heat diffusion) จะสามารถเปลี่ยนสมการ ให้อยู่ในรูปสมการพืชคณิตได้ว่า

$$\frac{\Gamma_e(T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{\Gamma_W(T_P - T_W)}{(\delta x)_w} + (S_C + S_P T_P)\Delta x = 0$$
(2.22)

หรือเขียนให้อยู่ในรูปสมการ discretization ได้ $a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b$ โดยที่ $a_E = \frac{k_e}{(\delta x)_e}$, $a_W = \frac{k_W}{(\delta x)_W}$, $b = S_C \Delta x$ $a_P = a_E + a_W - S_P \Delta x$

ในปัญหานี้หากเรารู้ เงื่อนไขสภาวะเริ่มต้น (Initial condition) ในที่นี้คือ อุณหภูมิ ที่ปลายขอบ ด้านซ้าย และปลายขอบด้านขวา ก็จะสามารถแก้หาคำตอบได้ [11]

2.4.4 ปัญหาการพาและการแพร่กระจายความร้อน (Heat convection and heat diffusion)

คราวนี้มาพิจารณาปัญหาที่มีการไหลของของไหลในระบบหนึ่งมิติ ดังรูปที่ 2.8 ซึ่งเกิดปรากฏการณ์ การถ่ายโอนความร้อน สองแบบพร้อมกัน สมการจะพิจารณาทั้งเทอม การพาและการแพร่กระจาย

ความร้อนตาม สมการที่ 2.13 จะได้ว่า $\frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + S_{\phi} \quad \vec{v}$ การอินทิเกรตรอบปริมาตรควบคุม และจัดรูปสมการสุดท้ายจะได้ตามสมการที่เคยได้พิสูจน์ไว้แล้วได้
เป็นสมการ ที่ 2.23 และสมมุติว่าระบบไม่สามารถผลิตความร้อนได้เอง จึงละเทอมต้นกำเนิดความ ร้อนภายในเซลล์ทิ้งไป จะเหลือสมการดังนี้



รูปที่ 2.8 การทำ Finite volume ของปริมาตรควบคุม ที่มีทั้งการแพร่กระจายความร้อนและการ แพร่ความร้อน (Heat convection and heat diffusion) [11]

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) dV = \int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV$$
(2.23)

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) dV = (\rho u A)_e \phi_e - (\rho u A)_w \phi_w = F_e \phi_e - F_w \phi_w$$
(2.24)

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_{e} - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_{w} = D_{e} (\phi_{e} - \phi_{p}) - D_{w} (\phi_{p} - \phi_{w})$$
(2.25)

$$(\rho u A)_{e} \phi_{e} - (\rho u A)_{w} \phi_{w} = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A\right)_{e} - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A\right)_{w}$$
(2.26)
and the set of the s

สำหรับการประมาณค่าขอบที่ตำแหน่งต่างๆแสดงดังนี้ $\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{w} = \frac{\phi_{W} - \phi_{P}}{\Delta x} \qquad \phi_{e} = \frac{\phi_{P} + \phi_{E}}{2} \qquad \qquad \mu_{abe} \qquad \phi_{w} = \frac{\phi_{P} + \phi_{W}}{2}$

จัดให้อยู่ในรูปสมการ discretization ได้ว่า

$$F_{e}\phi_{e} - F_{w}\phi_{w} = D_{e}(\phi_{e} - \phi_{P}) - D_{w}(\phi_{P} - \phi_{w})$$
(2.27)

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \tag{2.28}$$

หากพิจารณาสมการที่กล่าวมาทั้งหมด **¢** เป็นตัวแปรที่อยู่รอบๆปริมาตรควบคุมทั้งขอบ ทางซ้ายและขวา การจะคำนวณนั้นต้องทำการประมาณค่าทั้งใช้วิธีการถัวเฉลี่ยทั้งทางด้านซ้ายและ ด้านขวาของเซลล์ เป็นต้น การหาค่าของตัวแปร **¢** บนผิวปริมาตรควบคุมในเทอมของการพาที่อยู่ ในสมการ จะสามารถหาได้จากการประมาณค่าด้วย Numerical scheme ต่างๆ เช่น Central differencing scheme , First order upwind differencing scheme , Power-law differencing scheme และ Hybrid differencing scheme โดยรายละเอียดของแต่ละวิธี Discretization มี ดังต่อไปนี้ [2, 11]

$$\phi_{w} = \frac{(\phi_{P} + \phi_{W})}{2}, \quad \phi_{e} = \frac{(\phi_{E} + \phi_{P})}{2}, \quad \phi_{n} = \frac{(\phi_{N} + \phi_{P})}{2}, \quad \phi_{s} = \frac{(\phi_{P} + \phi_{N})}{2}$$

2) First order upwind differencing scheme

เป็นวิธีแก้ไขปัญหาที่เกิดจากวิธี Central differencing scheme ซึ่งเป็นการถัวเฉลี่ยที่จุด ขอบของเซลล์กับจุด P นั้นไม่ได้นำทิศทางของการไหลเข้ามาพิจารณาเลย ดังนั้นหลักการของวิธี upwind จะให้ความสำคัญของทิศทางการไหลเข้ามาพิจารณาด้วย รูปที่ 2.8 ของไหลไหลจากซ้ายไป ขวาค่า **\$** ที่ขอบของเซลล์ P ก็จะหาได้จากการกำหนดค่าให้เท่ากับ **\$** ที่จุดกึ่งกลางเซลล์ ซึ่งไม่ใช่ การถัวเฉลี่ยเหมือนวิธีผลต่างแบบตรงกลาง และวิธีนี้จะใช้เฉพาะกับพจน์การพาความร้อนเท่านั้น

L

T

สามารถเขียนสมการพีชคณิตของสมการdiscretization ของการพาและการแพร่กระจายความร้อน ได้ว่า

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_\phi V$$
(2.29)

$$a_{N} = \max[-F_{n}, 0]$$

$$a_{S} = \max[F_{s}, 0]$$

$$a_{E} = \max[-F_{e}, 0]$$

$$a_{W} = \max[F_{w}, 0]$$

โดยที่ max[A,B] คือ ค่าสูงสุดที่ได้จากการเปรียบเทียบค่าของA กับB

$$a_{P} = a_{N} + a_{S} + a_{E} + a_{W} + (F_{n} - F_{s} + F_{e} - F_{w})$$
(2.30)

3) Second order upwind scheme

2

1

Second order upwind scheme เป็นการประมาณค่า **\$** โดยใช้การประมาณเชิงเส้นของค่าที่ต้น กระแสของการไหลต้นน้ำ วิธีนี้จะให้ความแม่นยำสูงกว่า First order upwind scheme เพราะได้มี การนำจุดของค่าที่นำมาใช้คำนวณมากขึ้น ดังนี้

$$\phi_e = \frac{3}{2}\phi_P - \frac{1}{2}\phi_w \qquad \qquad F_e > 0 \tag{2.31}$$

$$\phi_{e} = \frac{3}{2}\phi_{E} - \frac{1}{2}\phi_{EE} \qquad F_{e} < 0$$
(2.32)

$$\phi_{w} = \frac{3}{2}\phi_{W} - \frac{1}{2}\phi_{WW} \qquad \qquad F_{w} > 0$$
(2.33)

$$\phi_{w} = \frac{3}{2}\phi_{P} - \frac{1}{2}\phi_{E} \qquad \qquad F_{w} > 0$$
(2.34)

4) Power-law differencing scheme

วิธีนี้เป็นการประมาณพจน์การแพร่กระจายความร้อน แบบโพลิโนเมียล และจะมีค่าเป็นศูนย์ เมื่อ Pe (Peclet number) มีค่ามากกว่า 10 และ สามารถเขียนสมการพีชคณิตได้เป็น โดยที่ $Pe=rac{F}{D}$

$$a_{P}\phi_{P} = a_{W}\phi_{W} + a_{E}\phi_{E} + a_{S}\phi_{S} + a_{N}\phi_{N} + S_{\phi}V$$

$$a_{N} = D_{n}\max\left[0,(1-0.1|F_{n}/D_{n}|)^{5}\right] + \max[-F_{n},0]$$

$$a_{S} = D_{s}\max\left[0,(1-0.1|F_{s}/D_{s}|)^{5}\right] + \max[F_{s},0]$$

$$a_{E} = D_{e}\max\left[0,(1-0.1|F_{e}/D_{e}|)^{5}\right] + \max[-F_{e},0]$$

$$a_{W} = D_{w}\max\left[0,(1-0.1|F_{w}/D_{w}|)^{5}\right] + \max[F_{w},0]$$

$$a_{P} = a_{N} + a_{S} + a_{E} + a_{W} + (F_{n} - F_{s} + F_{e} - F_{w})$$
(2.36)

2.5 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

Shuai และคณะ [12] จำลองกระบวนการเคมิคอลลูปิงในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง โดยใช้ พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณจำลองปฏิกิริยาเคมี และอุทกพลศาสตร์ เครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงแบบ ฟองแก๊สในเคมิคอลลูปิง แบบ 2 มิติ ซึ่งได้ทำการป้อนแก๊สมีเทน ทำปฏิกิริยากับ โลหะนิกเกิลออกไซด์ (NiO) โดยใช้ เบนโตไนต์ เป็นตัวรองรับ อนุภาคขนาด 120 ไมครอน ความสูงเบดเริ่มต้น 0.25 เมตร จำลองในเครื่องปฏิกรณ์ ความสูง 0.8 เมตร ความกว้าง 0.25 เมตร ความเร็วแก๊สป้อนเข้า 0.1 เมตร ต่อวินาที โดย ช่วง 0 - 2 วินาที จะตั้งค่าให้ป้อนแก๊สไนโตรเจนก่อนเพื่อป้องกันการลู่ออกจากกรณี การเกิดปฏิกิริยา หลังจากนั้นก็จะปรับสัดส่วนแก๊สผสมเป็น มีเทน 0.9 และ ไนโตรเจน 0.1 ผลจาก กราฟสัดส่วนของแก๊สทั้งหมดเทียบกับเวลา พบว่าเมื่อป้อนแก๊สไนโตรเจนเข้าระบบช่วง 2 วินาทีแรก การเปลี่ยนเป็นมีเทน ไอน้ำและแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์นั้นเพิ่มขึ้นในช่วง 2-3วินาที หลังจากเวลา 3.5วินาที สัดส่วนของมีเทนนั้นมีค่าแกว่งอยู่ในช่วง 0.249 คาร์บอนไดออกไซด์อยู่ที่ 0.372 ไอน้ำ
0.301 และค่าการเปลี่ยนของมีเทนคำนวณได้ที่ ร้อยละ 68

Shuai และคณะ [13] ได้ทำการจำลองกระบวนการเคมิคอลลูปิงในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง โดยศึกษาพฤติกรรมอุทกพลศาสตร์เครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้แก๊สมีเทนเป็นเชื้อเพลิง ทำปฏิกิริยากับโลหะ NiO โดยใช้แบบจำลองแรงต้านการไหล EMMS (energy minimization multiscale) ทำนาย สัดส่วนของแก๊สผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้นเทียบกับแบบจำลองแรงต้าน Ergun และ Wen-Yu ผลการ ทดลองจริงพบว่า แบบจำลองแรงต้าน EMMS ให้ผลค่าสัดส่วนโมลของแก๊สผลิตภัณฑ์ที่ใกล้เคียง มากกว่าของ Ergun

Loha และคณะ [3] ศึกษาผลของแบบจำลองแรงต้าน และ แบบจำลองการไหลแบบ ราบเรียบและปั่นป่วนต่อพฤติกรรมทางอุทกพลศาสตร์ โดยจะทำการเทียบกับผลการทดลองจริง ใน เครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊สที่ไม่มีการพิจารณาผลของปฏิกิริยาเคมี หรือการไหลแบบ cold flow จากแบบจำลองแรงต้านที่เลือกมา 4 แบบ Gidaspow Syamlal EMMS และ McKeen ผลกราฟสัดส่วนของของแข็งในแนวรัศมีพบว่ามีเพียงแบบจำลองของ Gidaspow และ Syamlal เท่านั้นที่ได้ผลรูปแบบการไหล เป็นการไหลแบบแกนในวงนอก ผลของความเร็วอนุภาคในแนวแกน พบว่า แบบจำลอง Gidaspow ให้ผลใกล้เคียงกับการทดลองของ Jung et al. (2005)มากที่สุด ผล Granular temperature ในแนวรัศมีนั้น แบบจำลอง EMMS ให้ผลที่ใกล้เคียงที่สุด

Esmaili และ Mahinpey [14] จำลองระบบฟลูอิไดเซชันแบบฟองแก๊สในระบบ 2 มิติ และ 3 มิติ เพื่อศึกษาผลของแบบจำลองแรงต้าน โดยตั้งวัตถุประสงค์ไว้ให้ ได้ผลต่างความเร็วต่ำสุดที่ทำให้ เกิดฟลูอิไดเซชันในการทดลองกับความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชันในแบบจำลอง มีค่าเป็นศูนย์ และใช้แบบจำลองแรงต้าน 10 แบบที่ได้พัฒนาขึ้น Wen-Yu Gibilaro Gidaspow Syamlal Arastoopour RUC Di-Felice Hill Koch Ladd และ Zhang โดย ปรับค่าความเร็วเป็น 1.6 3.2 5.8 และ 7 Umf ผลของความดันลด มีค่าแตกต่างกันทุกแบบ และแบบจำลองของ Di Felice ให้ผล ใกล้เคียงกับการทดลองจริงที่สุด ในส่วนของการขยายตัวของเบด แบบจำลอง Di Felice ก็ให้ผลที่ดี ที่สุด

Ghaly และ MacDonald [15] ศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่า residence time ของของแข็งในเครื่องปฏิกรณ์แบบฟองแก๊สในห้องปฏิบัติการ ตัวแปรดำเนินการที่ศึกษา 5 ตัว คือ ขนาดอนุภาคทราย รูปร่างของแผ่นกระจายอากาศ มุมยกของแผ่นกระจายอากาศ ความสูงเบด เริ่มต้น และความเร็วแก๊สป้อนเข้า ที่ส่งผลกระทบต่อรูปแบบการผสมและเวลาที่ทรายอยู่ในเครื่อง ปฏิกรณ์ เทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลที่ใช้ คือ การวิเคราะห์ความแปรปรวน เป็นการวิเคราะห์ทางสถิติ เพื่อลดความแปรปรวนจากการทดลอง ทำให้เห็นผลกระทบและผลกระทบร่วมกันของตัวแปร ดำเนินการที่ชัดเจนและมีความถูกต้องเชื่อถือได้ พบว่า อนุภาคทรายละเอียดจะให้ residence time นานกว่าทรายหยาบ การเพิ่มมุมเอียงของแผ่นกระจายอากาศแบบเว้า หรือ การลดมุมเอียงของ แผ่นกระจายอากาศแบบนูนจะทำให้ค่า residence time เพิ่มขึ้น โดยการปรับมุมและชนิดแผ่น กระจายอากาศจะทำให้เกิดการลอยขึ้นและตกกลับลงมาที่ผนังทำให้เกิดการผสมทั่วถึงเป็นเนื้อ เดียวกันของสารตั้งต้น ทำให้ได้ค่าการเปลี่ยนของปฏิกิริยาเคมีที่สูงขึ้น ส่วนการเพิ่มความเร็วแก๊ส ป้อนเข้าจะทำให้ residence time ของอนุภาคทรายในเครื่องลดต่ำลง

Harichandan และ Shamim [16] ศึกษาพฤติกรรมอุทกพลศาสตร์ในเครื่องปฏิกรณ์ เชื้อเพลิง และปฏิกิริยาเคมีระหว่าง แก๊สไฮโดรเจน (H₂) และ แคลเซียมซัลเฟต (CaSO₄) เพื่อศึกษา ผลกระทบของขนาดอนุภาคโลหะออกไซด์และขนาดของเครื่องปฏิกรณ์ โดยใช้ โปรแกรม ANSYS Fluent และได้นำผลคำนวณเชิงตัวเลขที่ได้ไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองจริงจากงานวิจัยของ Deng และคณะ [17] ขนาดของเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ กว้าง 0.25 เมตร สูง 1 เมตร และความสูงเบด เริ่มต้นที่บรรจุโลหะออกไซด์ไว้ที่ 0.4 เมตร เลือกใช้แบบจำลองการไหลแบบปั่นป่วน $k - \epsilon$ จาก กราฟผลของสัดส่วนโดยโมลของแก๊สไฮโดรเจน (สารตั้งต้น) และไอน้ำ (ผลิตภัณฑ์) กับเวลา ที่ความ สูงของเครื่องปฏิกรณ์ 2 ตำแหน่ง ที่บริเวณกันเครื่องปฏิกรณ์ x= 0 cm และที่ความสูง x=30 cm พบว่ามีการแกว่งของก๊าซไฮโดรเจน และ ไอน้ำเกิดขึ้นซึ่งเกิดการเคลื่อนที่ของฟองแก๊สและ ปฏิกิริยา เคมีรุนแรงที่เกิดขึ้นบริเวณเบดด้านล่างที่หนาแน่น ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่า ปฏิกริยาเข้าสู่ภาวะ เสมือนคงตัว (quasi steady state) หลังจาก 1 วินาที ที่บริเวณทางออกของเครื่องปฏิกรณ์ รูปแบบ ของค่าสัดส่วนโดยโมลของสารตั้งต้นและผลิตภัณฑ์เข้าสู่ภาวะคงตัวที่ 0.65 และ 0.35 ตามลำดับ หลังจากเวลา 3.8 วินาที ค่าสัดส่วนโดยโมลของแก๊สไฮโดรเจนและไอน้ำที่เกิดขึ้นบริเวณทางออกมีค่า ค่อนข้างคงที่นั้นเป็นไปตามที่คาดไว้เพราะว่า บริเวณด้านบนเครื่องปฏิกรณ์มีสัดส่วนของโลหะ ออกไซด์อยู่น้อย โดยมีอัตราการเปลี่ยนเป็นผลิตภัณฑ์ของแก๊สเซี้อเพลงอยู่ ที่ร้อยละ 35

Sharma และคณะ [18] ศึกษาพฤติกรรมทางอุทกพลศาสตร์ ของผสมระหว่างชีวมวลอัด แท่งและถ่านชาร์ชีวมวลในเครื่องปฏิกรณ์แบบฟองแก๊ส ขนาด 0.45 x 2 x 0.38 m (WxLxH) ทั้งใน ระบบ 2 มิติ และ 3 มิติ เพื่อศึกษาผลกระทบจากความเร็ว Superficial gas velocity ความหนาแน่นชีวมวล และ ขนาดอนุภาค ที่มีต่อการผสมและการแยกชั้นของอนุภาคชีวมวล การ วิเคราะห์ทำโดยใช้แบบจำลองของ Euler-Euler จากผลการทดลองจะพบว่าเมื่อทำการเพิ่ม Superficial gas velocity จนกระทั่งเลยความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชันแล้วจะทำให้เพิ่มการ ผสมกันระหว่างของแข็งและอนุภาคชีวมวล ผลคอนทัวร์ที่ได้ พบว่าแบบจำลอง 2 มิติ และ 3 มิติ ให้ รูปแบบการเกิดฟองอากาศ รวมถึงการกระจายตัวของชีวมวลไม่แตกต่างกัน การทดลองนี้ยังได้ศึกษา ผลกระทบจาก ค่า Specularity coefficient ที่มีผลต่อการผสมกันและการแยกชั้นของของผสม

Mahalatkar และคณะ [19] จำลองอุทกพลศาสตร์การเผาไหม้ของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง รูปทรง Tapered/conical ในกระบวนการเคมิคอลลูปิง ที่ใช้ถ่านชาร์เป็นเชื้อเพลิง และใช้เหล็ก ออกไซด์เป็นตัวพาออกซิเจนโดยทำการเปรียบเทียบผลที่ได้จากการคำนวณเชิงตัวเลขเทียบกับผลการ ทดลองจริง แบบจำลองนี้สามารถทำนายความเข้มข้นของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ คาร์บอนมอนอกไซด์และมีเทนได้ใกล้เคียงกับผลการทดลองจริงในห้องปฏิบัติการ

Guan และคณะ [20] จำลองกระบวนการเคมิคอลลูปิงในระบบ 3 มิติ ที่ ประกอบไปด้วย ไรเซอร์ ดาวเนอร์ พอตซีล และ ไซโคลน โดยศึกษาผลกระทบของ แบบจำลองแรงต้านของ Gidaspow Syamlal และ Yang ศึกษาผลกระทบที่เกิดขึ้นกับพฤติกรรมทางอุทกพลศาสตร์ พบว่า แบบจำลองแรงต้านของ Gidaspow Syamlal ใช้ทำนาย รูปแบบความดัน ได้ค่อนข้างแม่นยำ สอดคล้องกับผลการทดลองในเครื่องปฏิกรณ์ฝั่ง ดาวเนอร์ ที่เดินระบบแบบ ฟองแก๊ส ส่วนฝั่ง ไรเซอร์ ค่าที่ได้ เบี่ยงเบนออกจากค่าการทดลองจริงทั้งหมด

Deng และคณะ [17] จำลองกระบวนการเผาไหม้ในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงโดยใช้โปรแกรม ANSYS FLUENT เพื่อศึกษาปฏิกิริยารีดักชัน ระหว่าง แคลเซียมซัลเฟต และแก๊สไฮโดรเจน และใช้ แบบจำลองแรงต้านของ Wen & Yu และใช้แบบจำลอง Shrinking core อธิบายจลนพลศาสตร์ที่ เกิดขึ้น โดยไม่มีการเปรียบเทียบผลวิเคราะห์เชิงตัวเลขที่ได้กับผลการทดลองจริง พบว่า สัดส่วนโม ลของไอน้ำที่เป็นผลิตภัณฑ์มีค่าเพิ่มขึ้นและมีค่าแกว่งไปมาที่ตำแหน่งชั้นเบดหนาแน่น ซึ่งคาดว่าเกิด จากฟองแก๊สที่เกิดขึ้นในระบบ ส่วนผลสัดส่วนโมลไอน้ำที่บริเวณทางออกของเครื่องปฏิกรณ์มีค่าคงที่ อยู่ที่ 0.32

> จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย Chulalongkorn University

บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย

การจำลองวัฏภาคการไหลของแก๊สและของแข็งจะใช้แนวความคิดของออยเลอเลียนที่จะให้ อนุภาคของแข็งนั้นประพฤติตัวมีสมบัติลักษณะคล้ายของไหลในระบบฟลูอิไดซ์เบด ของแข็งและแก๊ส จะประพฤติมีสมบัติเป็นของไหลเหมือนโมเลกุลแก๊สตามทฤษฎีจลน์ของแก๊ส (Kinetic Theory of gas) นั่นเอง

การจำลองการไหลในเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีในเครื่องปฏิกรณ์ซื้อเพลิงใน งานวิจัยนี้ จะแบ่งการทดลองออกเป็นสองส่วน ส่วนแรกเป็นการจำลองเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบด แบบฟองแก๊ส (Bubbling fluidized bed) และเดินระบบแบบกะ (Batch) แบบไม่มีการพิจารณา เกิดปฏิกิริยาเคมี (Cold flow) ของ Jung และคณะ (2005) [4] ส่วนที่สองเป็นการจำลองเครื่อง ปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี (Chemical looping combustion) โดยพิจารณาการ เกิดปฏิกิริยาเคมี (Hot flow) และเดินระบบแบบต่อเนื่อง (Continuous) โดยจะทำการสอบเทียบ ความถูกต้องของแบบจำลอง (Model validation) จากงานของ Johansson และคณะ (2003) [21]

งานส่วนแรก เครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดไดซ์เบดแบบฟองแก๊สระบบสองมิติ มีเส้นผ่านศูนย์กลาง ขนาด 0.155 เมตรและความสูง 0.4 เมตร ดังรูปที่ 3.1 อนุภาคของแข็งที่ใช้มีขนาด 530 ไมโครเมตร ความหนาแน่น 2500 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร และเมื่อพิจารณาอนุภาคนี้จากหลักการแบ่งชนิด ของเจลดารท์ (Geldart classification) อนุภาคจะจัดอยู่ Geldart group B ซึ่งอนุภาคกลุ่มนี้เกิด ฟลูอิไดซ์ได้ง่ายและยังเกิดฟองขึ้นในระบบอีกด้วย ตัวแปรที่นำมาสอบเทียบความถูกต้องของ แบบจำลอง มี ความเร็วของของแข็งในแนวแกน (Solid velocity in axial direction), ความเร็ว ของของแข็งในแนวรัศมี (Solid velocity in radial direction) , อุณหภูมิแกรนูลาร์ (Granular temperature), ความเร็วของของแข็งในแนวแกนที่ช่วงระยะเวลาหนึ่ง (Instantaneous lateral particle velocity) และ ความเร็วของของแข็งในแนวรัศมีที่ช่วงระยะเวลาหนึ่ง (Instantaneous raidial particle velocity)



รูปที่ 3.1 เครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง ในงานวิจัย ของ Jung และคณะ (2012) [4] (ก) แบบจำลอง2มิติ [3] (ข) ชุดอุปกรณ์ที่ใช้ในการทดลองในห้องปฏิบัติการจริง [4]

งานส่วนที่สอง เครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีระบบสองมิติ หรือ เครื่องปฏิกรณ์ ฟลูอิไดซ์เบดแบบหมุนเวียน ที่มีส่วนประกอบทั้งหมด 4 ส่วนหลักๆ คือ ไรเซอร์ ดาวเนอร์ พอตซีล และไซโคลน ไรเซอร์ หรือ เครื่องปฏิกรณ์อากาศ มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางภายใน 0.19 เมตร ความ สูง 1.9 เมตร ดาวเนอร์ หรือ เครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงมีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.19 เมตร ความสูง 0.5 เมตร และระหว่างเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงและเครื่องปฏิกรณ์อากาศจะมี พอตซีล (Pot seal) ทำ หน้าที่ป้องกันไม่ให้แก๊สของทั้งสองเครื่องไหลเข้ามาผสมกันได้ พอตซีลมีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.14 เมตร และความสูง 0.15 เมตร ดาวคัมเมอร์มีเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.04 เมตรดังรูปที่ 3.2 อนุภาค ของแข็งที่ใช้มีขนาด 150 ไมโครเมตร ความหนาแน่น 2,600 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร ตัวแปรที่ นำมาสอบเทียบความถูกต้องของแบบจำลอง คือ ค่าความดันสมบูรณ์ในแนวความสูง (Absolute pressure in axial direction) ของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ และ เครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง ใน งานวิจัยส่วนี้จะตั้งสมมุติฐานไว้ว่า รูปทรงทางเรขาคณิตของไซโคลนไม่มีผลต่อการตกกลับลงมาของ อนุภาคและความดันลดในเครื่องปฏิกรณ์

งานวิจัยในการทดลองนี้จะแบ่งหัวข้อการวิจัยออกเป็น 5 ส่วน คือ 1. การจำลองอุทก พลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง เทียบกับงานวิจัย ของ Jung และคณะ [4] 2. การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อดัชนีการผสมในเครื่อง ปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส 3. การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวง ปฏิกิริยาเคมี เทียบกับงานวิจัย ของ Johansson และคณะ [21] 4. แบบจำลองการเกิดปฏิกิริยาเคมี (Chemical reaction model) และ 5. ศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการ เปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิงภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง





3.1 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง

Chulalongkorn Universit

ในส่วนการสร้างแบบจำลองการไหลภายในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง จะแบ่งได้เป็นสอง ส่วนคือ การทดสอบความเป็นอิสระของจำนวนกริดที่เหมาะสมในการคำนวณ (Grid independency test) และ การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ (Mathematical model)

3.1.1 การหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ (Mathematical model)

แบบจำลองที่ใช้ในงานนี้จะใช้แนวคิดออยเลอเรียน-ออยเลอเรียน แบบหลายวัฏภาค วัฏภาค ของแก๊สและของแข็งจะพิจารณาให้เป็นของไหลที่ต่อเนื่องโดยใช้สมการ Navier-Strokes ทำการแก้ สมการคู่ควบกันไประหว่างสัมประสิทธิ์การแลกเปลี่ยนระหว่างวัฏภาคและความดัน และการไหลของ ของแข็งจะประยุกต์ใช้กับสมการเสริม โดยให้การเคลื่อนที่ของของแข็งเหมือนกับการเคลื่อนที่ของ โมเลกุลแก๊ส โดยใช้ทฤษฎีจลน์ของแก๊ส ดังนั้นสำหรับของแข็งจะใช้ทฤษฎีจลน์การไหลของแข็ง (Kinetic Theory of Granular Flow: KTGF) สมการนี้จะใช้คำนวณความหนืดของของแข็งและความ ดันของของของแข็ง การที่ของแข็งเคลื่อนที่แบบสุ่มและความเร็วไม่คงที่ไร้ทิศทางและไร้ระเบียบนี้ โมเลกุลของแข็งจะวิ่งกระทบกับผนังหรือเกิดการชนกันเองระหว่างอนุภาคบ้าง ทำให้เกิดการถ่ายโอน โมเมนตัมและมีการเปลี่ยนทิศทาง ตามกฎทรงพลังงานกรณีที่เป็นการชนแบบไม่สูญเสียพลังงานหรือ การชนแบบยืดหยุ่น (Elastic collision) นั้น พลังงานจลน์ของโมเลกุลของของแข็งและความเร็วมี ค่าคงที่ และอีกกรณีหนึ่งคือการชนแบบไม่ยืดหยุ่น (Inelastic collision) ซึ่งการชนกันเองระหว่าง อนุภาคและการชนกับผนังนั้นจะมีการถ่ายโอนพลังงานให้กันและสูญเสียพลังงานไป ทำให้ความเร็ว ลดลงและพลังงานจลน์ของของแข็งมีค่าลดลง โดยพลังงานที่สูญเสียไปจะอยู่ในรูปของพลังงานความ ร้อน

การคำนวณการไหลจะใช้ชุดสมการอนุรักษ์อันได้แก่ สมการอนุรักษ์มวล สมการอนุรักษ์ โมเมนตัม สมการอนุรักษ์พลังงาน และสมการสปีชีส์ของทั้งสองวัฏภาค การแก้สมการจะใช้ระเบียบวิธี เชิงตัวเลข เปลี่ยนสมการให้อยู่ในรูปสมการพืชคณิตที่เคยอธิบายไว้แล้ว และกำหนดภาวะขอบเขต ของแบบจำลอง เวกเตอร์ทิศทางและค่าของแรงดึงดูดเนื่องจากแรงโน้มถ่วงของโลก อุณหภูมิที่ สภาวะเดินระบบ และความดันที่ความดันบรรยากาศ 101325 Pa

3.1.1.1 สมการอนุรักษ์ (Conservation equations)

ชุดสมการเหล่านี้ประกอบไปด้วย สมการอนุรักษ์มวล สมการอนุรักษ์โมเมนตัมและสมการอนุรักษ์ พลังงาน และแบ่งออกเป็นสองชุด คือ ของของแข็งและของแก๊ส [23]

3.1.1.1.1 สมการอนุรักษ์มวล (Mass conservation equations)

วัฏภาคแก๊ส , g
$$\frac{\partial(\varepsilon_{g}\rho_{g})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_{g}\rho_{g}v_{g}) = 0$$

(3.1)

วัฏภาคของแข็ง , s

$$\frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s v_s) = 0$$
(3.2)

ผลรวมของสัดส่วนเชิงปริมาตรของของแข็งแก๊สเท่ากับหนึ่ง $arepsilon_{_{S}}+arepsilon_{_{S}}~=~1$

- \mathcal{E}_s คือ สัดส่วนเชิงปริมาตรของวัฏภาคของแข็ง (-)
- ^E คือ สัดส่วนเชิงปริมาตรของวัฏภาคแก๊ส (-)
- คือ ความหนาแน่นของวัฏภาคของแข็ง (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร)
- คือ ความหนาแน่นของวัฏภาคของแก๊ส (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร)
- ^v,
 คือ ความเร็วของวัฏภาคของแข็ง (เมตรต่อวินาที)
- ^v_s คือ ความเร็วของวัฏภาคของแก๊ส (เมตรต่อวินาที)
- t คือ เวลา (วินาที)

3.1.1.1.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัม (Momentum conservation equations)

วัฏภาคแก๊ส , g

$$\frac{\partial(\varepsilon_{g}\rho_{g}v_{g})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_{g}\rho_{g}v_{g}v_{g}) = \nabla \cdot \tau_{g} - \varepsilon_{g}\nabla P + \varepsilon_{g}\rho_{g}g + \beta(v_{g} - v_{s})$$
(3.3)

วัฏภาคของแข็ง , s

สาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

$$\frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s v_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s v_s v_s) = \nabla \cdot \tau_s - \varepsilon_s \nabla P_s + \varepsilon_s \rho_s g - \beta(v_g - v_s)$$
(3.4)

- ^{*τ_s*} คือ ความเค้นเทนเซอร์ของแก๊ส (ปาสคาล)
- au_s คือ ความเค้นเทนเซอร์ของของแข็ง (ปาสคาล)
- P_s คือ ความดันของวัฏภาคแก๊ส(ปาสคาล)
- *P*s คือ ความดันของวัฏภาคของแข็ง(ปาสคาล)
- ศือ แบบจำลองการต้านการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาค (กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสามวินาที)
- 8 คือ ความเร่งเนื่องจากแรงโน้มถ่วง (เมตรต่อวินาทีกำลังสอง)

3.1.1.1.3 สมการอนุรักษ์พลังงานจลน์เนื่องจากการกวัดแกว่งของของแข็ง (Fluctuating kinetic energy conservation equation)

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \theta_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s v_s \theta_s) \right] = \left(-\nabla P_s I + \tau_s \right) : \nabla v_s + \nabla \cdot (\kappa_s \nabla \theta) - \gamma_s$$
(3.5)

I คือ เทนเซอร์เอกลักษณ์ (-)

θ, คือ พลังงานจลน์จากการกวัดแกว่งของอนุภาค (เมตรกำลังสองต่อวินาทีกำลังสอง)

*K*_s คือ พลังงานกวัดแกว่งเนื่องจากการนำ (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที)

^Ys คือ พลังงานกวัดแกว่งเนื่องจากการชนแบบไม่ยืดหยุ่น (กิโลกรัมต่อเมตรวินาทีกำลังสาม)
 พลังงานจลน์เนื่องจากการกวัดแกว่งของอนุภาคหรืออุณหภูมิของอนุภาค (Granular temperature)
 จะถูกใช้เป็นตัวแปรสำคัญสำหรับการคำนวณด้วยทฤษฎีจลน์การไหลของอนุภาค เช่น ความดันของ
 อนุภาค และความหนืดของอนุภาคเป็นต้น

3.1.1.1.4 สมการอนุรักษ์พลังงาน

งานวิจัยนี้การคำนวณการถ่ายโอนความร้อนระหว่างวัฏภาคที่เกิดขึ้นโดยใช้สมการอนุรักษ์ พลังงานนี้

Chulalongkorn University

วัฏภาคของแข็ง

$$\frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s h_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s v_s v h_s) = -\varepsilon_s \frac{\partial P}{\partial t} + \tau_s : \nabla \cdot \tau_s$$
(3.6)

วัฏภาคของแก๊ส

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g h_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g v_g v h_g) = -\varepsilon_g \frac{\partial P}{\partial t} + \tau_g : \nabla \cdot \tau_g$$
(3.7)

 h_{g} คือ ค่าเอนทัลปีจำเพาะของแก๊ส (Specific enthalpy of gas)

h, คือ ค่าเอนทัลปีจำเพาะของของแข็ง (Specific enthalpy of solid)

3.1.1.1.5 สมการอนุรักษ์การไหลและสปีชีส์

แบบจำลองที่ทำการแก้สมการอนุรักษ์การไหลและสปีชีส์นี้จะใช้คำนวณแต่ละองค์ประกอบ ของแก๊สแต่ละสปีชีส์ในวัฏภาคแก๊สตามสมการ

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g Y_i v) = -\nabla \varepsilon_g J_i + \varepsilon R_{i,h_o} + R_{i,het}$$
(3.8)

R_{i,ho} คือ อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของปฏิกิริยาเคมีแบบเอกพันธ์ของสปีชีส์ i

 $oldsymbol{R}_{i,h_{het}}$ คือ อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของปฏิกิริยาเคมีแบบวิวิธพันธ์ของสปีชีส์ i

- Y_i คือ สัดส่วนโดยมวลของสปีชีส์ i
- J_i คือ ฟลักซ์การแพร่ของของสปีชีส์ i

โดยที่ ^Ji คือฟลักซ์ของการแพร่สปีชีส์ i ซึ่งคำนวณได้ดังสมการ ที่

$$J_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i \tag{3.9}$$

*D*_{*i.m.*} คือ สัมประสิทธิ์การแพร่ของสปีชีส์ i

3.1.1.2 สมการเสริม (Constitutive equations)

ชุดสมการนี้จะนำมาใช้อธิบายพฤติกรรมของวัฏภาคของแข็ง อธิบายความสัมพันธ์ ระหว่างค่าความ หนืดของของแข็ง ความเค้น และความดัน ความเค้นเทนเซอร์ (Stress tensor)

วัฏภาคแก๊ส, g

$$\tau_{g} = \varepsilon_{g} \mu_{g} \left[\frac{1}{2} \left[\nabla \cdot v_{g} + (\nabla \cdot v_{g})^{T} \right] - \frac{2}{3} (\nabla \cdot v_{g}) \mathbf{I} \right]$$
(3.10)

วัฏภาคของแข็ง, s

$$\tau_{s} = \varepsilon_{s} \mu_{s} \left[\nabla \cdot v_{s} + \left(\nabla \cdot v_{s} \right)^{T} \right] - \varepsilon_{s} \left(\xi_{s} - \frac{2}{3} \mu_{s} \right) \nabla \cdot v_{s}$$
(3.11)

⁵ s คือ ความหนืดรวม (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที)

สมการความดันของอนุภาคจะประกอบด้วยสองพจน์ พจน์ที่หนึ่งจะเกี่ยวข้องกับจลนศาสตร์ของ อนุภาค และพจน์ที่สองจะเกี่ยวเนื่องกับการชนกันของอนุภาค

$$P_{s} = \varepsilon_{s} \rho_{s} \theta_{s} + 2\rho_{s} (1+e)\varepsilon_{s}^{2} g_{o} \theta_{s}$$
(3.12)

⁸0 คือ ฟังก์ชันการกระจายของอนุภาคในแนวรัศมีซึ่งจะมีค่ามากเมื่อสัดส่วนปริมาตรของแข็งมีค่า
 เข้าใกล้สัดส่วนปริมาตรของแข็งขณะที่อัดตัวแน่น ([€]_{s,max} =0.60)

ความหนืดเนื่องจากความเค้นจะประกอบด้วยพจน์ของจลนศาสตร์ การชน และแรงเสียด ทานซึ่งเกิดจากการแลกเปลี่ยนโมเมนตัมของอนุภาคของแข็ง

$$\mu_{s} = \frac{4}{5} \varepsilon_{s} \rho_{s} d_{p} \,^{g_{o}} (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10 \rho_{s} d_{p} \sqrt{\pi \theta}}{96(1+e)^{g_{o}} \varepsilon_{s}} \left[1 + \frac{4}{5} \varepsilon_{s} \,^{g_{o}} (1+e) \right]^{2} \quad (3.14)$$

 d_p คือ เส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาคของแข็ง (เมตร)

ความหนึดรวมของอนุภาคเป็นตัววัดความต้านทานของอัดและการขยายตัว

$$\xi_s = \frac{4}{3} \varepsilon_s \rho_s d_p g_o (1+e) \left(\frac{\theta_s}{\pi}\right)^{1/2}$$
(3.15)

พลังงานกวัดแกว่งเนื่องจากการชนแบบไม่ยืดหยุ่น (${\mathcal Y}_{{}_{s}}$)

$$\gamma_s = 3\varepsilon_s^2 \rho_s g_o \theta_s (1 - e^2) \left[\frac{4}{d_p} \left(\frac{\theta_s}{\pi} \right)^{1/2} \right]$$
(3.16)

จหาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พลังงานกวัดแกว่งเนื่องจากการนำ (${}^{K_{s}}$)

$$\kappa_{s} = \frac{150\rho_{s}d_{p}\sqrt{\theta_{s}\pi}}{384(1+e)g_{o}} \left[1 + \frac{6}{5}g_{o}\varepsilon_{s}(1+e)\right]^{2} + 2\varepsilon_{s}^{2}\rho_{s}d_{p}g_{o}(1+e)\left(\frac{\theta_{s}}{\pi}\right)^{1/2}$$
(3.17)

แบบจำลองแรงต้านการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาคแก๊สและของแข็งที่เลือกมาใช้ในงานวิจัยนี้ คือ แบบจำลองแรงต้านของ Gidaspow แบ่งช่วงการคำนวณ เป็น 2 ช่วง แบบเบาบางและหนาแน่น แบบจำลอง Wen และ Yu ใช้สำหรับทำนายในบริเวณที่มีสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งเบาบาง และช่วงความหนาแน่นของของแข็งหนาแน่น ใช้สมการ Ergun

$$\varepsilon_{g} \leq 0.8, \beta_{gs} = 150 \frac{(1 - \varepsilon_{g})^{2} \mu_{g}}{\varepsilon_{g} d_{p}^{2}} + 1.75 \frac{(1 - \varepsilon_{g}) \rho_{g} |v_{g} - v_{s}|}{d_{p}}$$
(3.18)

$$\varepsilon_{g} > 0.8, \beta_{gs} = \frac{3}{4} \frac{(1 - \varepsilon_{g})\varepsilon_{g}}{d_{p}} \rho_{g} | v_{g} - v_{s} | C_{D0} \ \omega \varepsilon_{g}^{-2.65}$$

$$(3.19)$$

โดยที่ $C_{\scriptscriptstyle D0}$ คือ ค่าสัมประสิทธิ์การต้านทานการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาค (-)

3.1.2 การทดสอบความเป็นอิสระของจำนวนกริดที่เหมาะสมในการคำนวณ (Grid independency test)

เนื่องจากพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณนั้นการคำนวณต้องใช้ระยะเวลาค่อนข้างนานซึ่งการทดลองนี้ จะวัดความถูกต้องของผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณที่จะไม่ขึ้นกับจำนวนของเซลล์ เพื่อทำการหาขนาด จำนวนเซลล์ที่เหมาะสมที่สุดได้ผลลัพธ์ที่ถูกต้องและใช้เวลาน้อยที่สุด ในงานวิจัยส่วนแรกนี้ได้เลือกใช้ เซลล์ที่มีระยะห่างของช่องกริดเท่ากัน (Uniform) ซึ่งค่าที่เลือกมานั้นมีทั้งหมด 1,900 เซลล์(38x50), 7,500 เซลล์ (75x100) และ 30,000 เซลล์ (150x200) แสดงดังรูปที่ 3.3



รูปที่ 3.3 แสดงการแบ่งเซลล์คำนวณ (ก) 1,900 (ข) 7,500 (ค) 30,000 เซลล์

3.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อดัชนีการผสมใน เครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส

ในขั้นตอนนี้จะอธิบายการตั้งค่าแบบจำลองอย่างคร่าวๆ ซึ่งจะใช้โปรแกรม 2 โปรแกรม คือ GAMBIT และ ANSYS FLUENT

ขั้นตอนของโปรแกรม GAMBIT 1. สร้างรูปทรงแบบจำลอง (Geometry) 2. กำหนดจำนวนกริดที่ใช้ ในการคำนวณ (Mesh) 3. กำหนดชนิดขอบเขต (Boundary) 4. กำหนดช่วงขอบเขต (Continuum type)

ขั้นตอนของโปรแกรม ANSYS FLUENT 1. เลือกสมการอนุรักษ์(Conservation) และสมการเสริม ที่ใช้ในการคำนวณ เลือกชนิดของแบบจำลองการไหล วัฏภาคเดียว หรือ หลายวัฏภาค (Multiphase) คำนวณที่สภาวะคงตัว (Steady state) หรือสภาวะไม่คงตัว (Unsteady state)

2. เลือกสารที่ใช้ในแบบจำลอง (Materials) 3. กำหนดเงื่อนขอบเขตของแบบจำลอง (Boundary condition) 4. กำหนดค่าเริ่มต้น (Initial condition) 5. กำหนดจำนวนรอบการคำนวณซ้ำ (Iteration)

ขั้นตอนการจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดไดซ์เบดแบบฟอง จำลองโดยใช้โปรแกรม ANSYS FLUENT มีการกำหนดค่าตัวแปรต่างๆที่ใช้ในแบบจำลองแสดงดังตารางที่ 3.1 [3]

โดยขั้นแรกจะทำการสอบเทียบความถูกต้องของแบบจำลองคณิตศาสตร์ กับ ผลการทดลองจริงของ Jung และคณะ โดยกำหนดขั้นเวลาที่ใช้ในการคำนวณ (Time step) 0.0001 วินาที คำนวณซ้ำ 20 ครั้งต่อหนึ่งเวลา ใช้เวลาคำนวณทั้งหมด 20 วินาที ผลคำนวณเชิงตัวเลขที่ได้นี้จะถูกนำไป เปรียบเทียบกับผลการทดลองจริงแบบที่ไม่มีการเกิดปฏิกริยาเคมีขึ้นในระบบ (Cold flow model) เพื่อหาแบบจำลองคณิตศาสตร์ที่จะใช้สำหรับอธิบายพฤติกรรม และปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในเครื่อง ปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส หลังจากนั้นจะนำแบบจำลองคณิตศาสตร์นี้ไปวิเคราะห์ผลของตัว แปรดำเนินการที่ส่งต่อดัชนีการผสมภายในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส (Bubbling fluidized bed) โดยตัวแปรที่ทำการศึกษามีดังนี้

 ของแข็งที่เลือกมาใช้ในงานวิจัยนี้ คือ นิกเกิลออกไซด์ ซึ่งมีความว่องไวต่อปฏิกิริยา โดยขนาดของ อนุภาคที่เลือกมาศึกษาแบ่งเป็น 2 ขนาด คือ 0.00020 และ 0.00060 เมตร [24] ความหนาแน่นของอนุภาคของนิกเกิลออกไซด์ ที่ค่า 1,350 และ 2,350 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร
 [24]

 ความสูงเบดเริ่มต้นต่อเส้นผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ ที่อัตราส่วน 0.5 ถึง 0.75 เท่าของเส้นผ่าน ศูนย์กลางเครื่องปฏิกรณ์ [25]

 ความเร็วแก๊สป้อนเข้า ป้อนเข้าด้านล่างเครื่องปฏิกรณ์ ที่ความเร็ว 1.5 ถึง 1.75 เท่าของความร็ว ต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน (Minimum fluidization velocity) [25]

การทดลองนี้จะออกแบบการทดลองแบบ 24 หรือมีการทดลองทั้งหมด 16 การทดลอง สรุปได้ดัง ตารางที่ 3.2 และตัวแปรตอบสนองที่จะมาใช้วัดระดับการผสม (Degree of mixing) ภายในเครื่อง ปฏิกรณ์ คือ ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของของแข็งทั้งในแนวแกน และแนวรัศมี

Description	Value
ความดันที่ใช้ดำเนินการ (Pa)	101325
ความหนาแน่นของแก๊ส (kg/m³)	1.22
ความหนืดของแก๊ส (kg/m·s)	1.82×10 ⁻⁵
ความหนาแน่นของอนุภาคของแข็ง (kg/m³)	2500
ขนาดอนุภาคของแข็ง (µ m)	530
สัมประสิทธิ์การชนกันระหว่างอนุภาคของแข็งและของแข็ง (-)	0.99
สัมประสิทธิ์การชนกันระหว่างอนุภาคของแข็งและผนัง (-)	1
Specularity coefficient (-)	0.60
Solid inlet volume fraction at maximum packing limit (-)	0.63
ความเร็วแก๊สที่ป้อนเข้าระบบ (m/s)	0.59

ตารางที่ 3.1 ค่าตัวแปรต่างๆที่ใช้ในการทดลองในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส [3]

	ขนาดของอนุภาค	ความสูงเบด	ความหนาแน่นของ	ความเร็วแก๊ส
กรณี	(micron)	เริ่มต้น(m)	ของแข็ง(kg/m³)	ป้อนเข้า(m/s)
1	200	0.50D	1,300	1.5Umf
а	600	0.50D	1,300	1.5Umf
b	200	0.75D	1,300	1.5Umf
ab	600	0.75D	1,300	1.5Umf
С	200	0.50D	2,350	1.5Umf
ас	600	0.50D	2,350	1.5Umf
bc	200	0.75D	2,350	1.5Umf
abc	600	0.75D	2,350	1.5Umf
d	200	0.50D	1,300	1.75Umf
ad	600	0.50D	1,300	1.75Umf
bd	200	0.75D	1,300	1.75Umf
abd	600	0.75D	1,300	1.75Umf
cd	200	0.50D	2,350	1.75Umf
acd	600	0.50D	2,350	1.75Umf
bcd	200	0.75D	2,350	1.75Umf
abcd	600	0.75D	2,350	1.75Umf

ตารางที่ 3.2 การออกแบบการทดลอง 2⁴ ของการศึกษาตัวแปรดำเนินการ กรณีไม่เกิดปฏิกิริยาเคมี

3.3 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี

ในส่วนการหาแบบจำลองการไหลภายในเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีจะทำการ ทดสอบความเป็นอิสระของจำนวนกริดที่เหมาะสมในการคำนวณ (Grid independency test)

3.3.1 การทดสอบความเป็นอิสระของจำนวนกริดที่เหมาะสมในการคำนวณ (Grid independency test)

เนื่องจากพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณนั้นการคำนวณต้องใช้ระยะเวลาค่อนข้างนานซึ่งการ ทดลองนี้จะวัดความถูกต้องของผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณที่จะไม่ขึ้นกับจำนวนของเซลล์ เพื่อทำการ หาขนาดจำนวนเซลล์ที่เหมาะสมที่สุดได้ผลลัพธ์ที่ถูกต้องและใช้เวลาน้อยที่สุด ในงานวิจัยส่วนแรกนี้ ได้เลือกใช้เซลล์ที่มีระยะห่างของช่องกริดไม่เท่ากัน (Non-Uniform) ซึ่งค่าที่เลือกมานั้นมีทั้งหมด 8,334 เซลล์, 17,732 เซลล์ และ 35,979 เซลล์ แสดงดังรูปที่ 3.4



รูปที่ 3.4 แสดงการแบ่งเซลล์คำนวณ (ก) 8,334 (ข) 17,732 (ค) 35,979 เซลล์

3.4 แบบจำลองการเกิดปฏิกิริยาเคมี (Chemical reaction model)

เนื่องจากงานวิจัยนี้การจำลองภาวะการไหลในส่วนที่มีการเกิดปฏิกิริยาเคมีนั้น จะต้องทำการ เขียนโปรแกรมเพิ่มชุดสมการที่ใช้ในการเกิดปฏิกิริยาเคมี โดยมีปฏิกิริยาออกซิเดชันของแก๊ส ออกซิเจนกับโลหะนิกเกิล ปฏิกิริยารีดักชันของแก๊สเชื้อเพลิงกับโลหะนิกเกิลออกไซด์ แก๊สเชื้อเพลิง มี

้องค์ประกอบสัดส่วนร้อยละโดยปริมาตร คือ คาร์บอนมอนอกไซด์ 44.5 % ไฮโดรเจน 22.22 % คาร์บอนไดออกไซด์ 11.11 % และ ไอน้ำ 22.22% อ้างอิงจากงานวิจัยของ Wang และคณะ [26] และปฏิกิริยาวอเตอร์แก๊สซิฟต์ (Water gas shift) เนื่องมาจากในปฏิกิริยานี้แบ่งเป็น 2 ประเภท คือ ปฏิกิริยาเคมีแบบเอกพันธ์ (Homogenous reactions) และ ปฏิกิริยาเคมีแบบวิวิธพันธ์ (Heterogeneous reactions) ค่าคงที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี (Rate constant) นั้น อ้างอิงจาก ้งานวิจัยของ Wang และคณะ [27] แสดงดังตารางที่ 3.3 และเนื่องจากเป็นปฏิกิริยาวิวิธพันธ์ โลหะ ออกไซด์จะถูกออกซิไดซ์ด้วยแก๊สเชื้อเพลิงและรีดิวซ์ด้วยออกซิเจนกลับเป็นโลหะออกไซด์อีกครั้ง ปฏิกิริยาออกซิเดชันด้วยแก๊สเซื้อเพลิงในฝั่งเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง เป็นปฏิกิริยาดูดความร้อน (Endothermic reaction) หรือคายความร้อน (Exothermic reaction) ก็ได้ขึ้นกับชนิดของโลหะ ออกไซด์ และปฏิกิริยารีดักชันด้วยแก๊สออกซิเจนในฝั่งเครื่องปฏิกรณ์อากาศเป็นปฏิกิริยาคายความ ร้อน (Exothermic reaction) ในงานวิจัยนี้เลือกแบบจำลองแกนกลางหดตัว (Shrinking core model, SCM) มาใช้ในการจำลองการเกิดปฏิกิริยาเคมีในกระบวนการเผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี ระหว่างวัฏภาคของแข็งและแก๊สซึ่งเป็นปฏิกิริยาวิวิธพันธ์ โดยสมการจะแสดงดังนี้

$$(-r)_{j} = \frac{\alpha_{p} Y_{NiO}}{r_{g,NiO}} k_{j} C^{n} \quad (mol \ m^{-3} s^{-1})$$
(3.20)

โดย j , C , n และ rg สัญลักษณ์เหล่านี้คือ จำนวนของปฏิกิริยาเคมี (j=1,2) , ความเข้มข้นของแก๊ส เชื้อเพลิง , อันดับของปฏิกิริยา (Order of reaction) และรัศมีเฉลี่ยของอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ ตามลำดับ และค่าคงที่การเกิดปฏิกิริยานั้นสมมุติว่าให้เป็นไปตามสมการ Arrhenius ขึ้นกับอุณหภูมิ **α**_P สัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็ง และ Yi คือ สัดส่วนโดยโมลของโลหะออกไซด์ [28]

ตารางที่ 3.3 อัตราการเกิดปฏิกิริยา และค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา [27]

	H2	СО	O2
k ₀ (mol ¹⁻ⁿ m3 ⁿ⁻² s ⁻¹)	0.15	0.059	0.84
E ₀ (kJ/mol)	5	5	22
n	0.4	0.6	0.7

สมการปฏิกิริยาเคมีฝั่งเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง 3 ปฏิกิริยา

$$H_2(g) + NiO(s) \longrightarrow Ni(s) + H_2O(g)$$

1). $\Delta H_{r1} = -2.1kJ / mol$ ปฏิกิริยาวิวิธพันธ์

3).

$$\begin{array}{l}
CO(g) + H_2O(g) \longleftrightarrow CO_2(g) + H_2 \\
\Delta H_{r2} = -41.1.kJ / mol
\end{array}$$
Uฏิกิริยาเอกพันธ์

สมการปฏิกิริยาเคมีฝั่งเครื่องปฏิกรณ์อากาศ 1 ปฏิกิริยา

$$O_2(g) + 2Ni(s) \longrightarrow 2NiO(s)$$

4). $\Delta H_{r2} = -479kJ/mol$ ปฏิกิริยาวิวิธพันธ์

สำหรับปฏิกิริยาที่ (2) เป็นปฏิกริยาแบบเอกพันธ์ คือ ปฏิกิริยาวอเตอร์แก๊สซิฟต์ $CO(g) + H_2O(g) \longrightarrow CO_2(g) + H_2(g)$ $\Delta H_{r4} = -41.09 \ kJ / mol$

CHULALONGKONN UNIVERSITY เขียนเป็นสมการอัตราการเกิดปฏิกิริยาไปข้างหน้า (Forward rate) และค่าคงที่สมดุล ได้ $r(kmol/m^3 \cdot s)) = d[CO]/dt = k_0 e^{-E_{RT}} [H_2]^{\alpha} [CO_2]^{\beta}$ (3.21) $K_{eq} = \exp(-4.33 + 4577.8/T)$

เมื่อเขียนเป็นสมการที่สภาวะสมดุลเคมี (Chemical equilibrium) $r = d[CO]/dt = k_0 e^{-E_{RT}} [H_2]^{\alpha} [CO_2]^{\beta} - \frac{1}{K_{eq}} e^{-Ea_{RT}'} [H_2O][CO](kmol/m^3 \cdot s)$ (3.22)

โดยค่าสัมประสิทธิ์และสมการ นั้นอ้างอิงจากงานวิจัย ของ Bustamante และคณะ [29] ดังตารางที่ 3.4 ตารางที่ 3.4 ค่าสัมประสิทธิ์ของปฏิกิริยาวอเตอร์แก๊สชิฟต์ [29]

k ₀ (mol ¹⁻ⁿ m ³ⁿ⁻² s ⁻¹)	2.17×10 ⁻⁷
E ₀ (kJ/mol)	192.9
α	1/2
β	1

การเขียนสมการอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีทั้ง เอกพันธ์และวิวิธพันธ์ เพิ่มลงไปใน ANSYS FLUENT นั้นต้องเขียนโดยใช้โปรแกรมภาษา C ลงในฟังก์ชันเพิ่มเติม User Define Function (UDF) รายละเอียดของการเขียนฟังก์ชันอยู่ใน ภาคผนวก ค

3.5 ศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameters) ที่ส่งผลต่ออัตราการ เกิดปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง

3.5.1 การกำหนดคุณสมบัติของแต่ละวัฏภาคที่ใช้ในการจำลองภาวะ

ขั้นตอนการจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง หลังจากสร้างรูปทรงทาง เรขาคณิตของแบบจำลองด้วยโปรแกรม GAMBIT แล้วจะทำการจำลองโดยใช้โปรแกรม ANSYS FLUENT มีการกำหนดค่าตัวแปรต่างๆที่ใช้ในแบบจำลองทั้งนี้ ทั้งภาวะการไหลแบบไม่เกิดปฏิกิริยา (Cold flow) และภาวะการไหลแบบเกิดปฏิกิริยา จะใช้คุณสมบัติทางกายภาพแต่ละวัฏภาค เหมือนกัน แสดงดังตารางที่ 3.5 และสำหรับแบบจำลองการไหลแบบไม่เกิดปฏิกิริยา (Cold flow) จะกำหนดวัฏภาคแก๊ส ประกอบไปด้วยอากาศที่มีองค์ประกอบประกอบด้วย ไนโตรเจนร้อยละ 71 % โดยมวล ออกซิเจน 22 % โดยมวล แก๊สเฉื่อย อื่นๆ 1 % และ วัฏภาคของแข็งกำหนดเป็นนิกเกิล ออกไซด์ (NiO:NiAlO4) และแบบจำลองการไหลแบบเกิดปฏิกิริยาเคมี (Hot flow) วัฏภาคแก๊ส ประกอบด้วย แก๊สออกซิเจน , แก๊สไนโตรเจน , น้ำ , แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ , แก๊สไฮโดรเจน , แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ วัฏภาคของแข็ง ประกอบด้วย นิกเกิล (Ni) และนิกเกิลออกไซด์ (NiO:NiAlO4)

3.5.2 การกำหนดภาวะขอบที่ใช้ในการจำลองภาวะ

ในการจำลองอุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง ในการเผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี โดย จะกำหนดภาวะขอบที่ใช้ในการจำลองโดยกำหนด ความเร่งเนืองจากแรงโน้มถ่วงของโลก 9.81 เมตร ต่อวินาทีกำลังสองในทิศทางติดลบแกน Y (แกน Y ทำมุมตั้งฉากกับพื้นผิวโลก) และค่าความดันใน ระบบเท่ากับ 101325 Pa อุณหภูมิในระบบ 300 K กรณีระบบการไหลแบบไม่เกิดปฏิกิริยา และ อุณหภูมิในระบบ 773 K และ 873 K สำหรับกรณีระบบการไหลแบบเกิดปฏิกิริยา โดยภาวะขอบ สรุปไว้ดังตารางที่ 3.6 และ 3.7

สมมุติฐานที่ใช้ในกรณีศึกษาการไหลแบบไม่เกิดปฏิกิริยาเคมี (Cold flow) ภายในเครื่อง ปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี

 แบบจำลองการไหลสองวัฏภาคแก๊สและของแข็ง เป็นแบบ 2 มิติ กำหนดความเร่ง เนื่องจากแรงโน้มถ่วงของโลก 9.81 เมตรต่อวินาทีกำลังสองในทิศทางลบของแกน Y

 2. ของแข็งที่ใช้ในแบบจำลองมีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางและคุณสมบัติทางกายภาพเหมือนกัน หมด

 ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์อากาศจะถูกป้อนด้วยอากาศความเร็ว 1.1 เมตรต่อวินาที และ ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงจะถูกป้อนเข้าด้วยอากาศความเร็ว 0.19 เมตรต่อวินาที ทางเข้าพอต ซีลจะป้อนอากาศที่ความเร็ว 0.087 เมตรต่อวินาที ซึ่งจะมีนิกเกิลออกไซด์อัดตัวอยู่ในเครื่องทั้งสอง ดังรูปที่ 3.5 ซึ่งแสดงคอนทัวร์ของสัดส่วนปริมาตรของแข็งเริ่มต้น 0.45 ความดันบริเวณทางออกของ ไซโคลนและความดันที่ทางออกเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงมีค่าเท่ากับความดันบรรยากาศ

 4. ที่ผนังกำหนดให้ผนังของเครื่องปฏิกรณ์ เป็นสภาวะที่ความเร็วในแนวสัมผัสและความเร็ว ในแนวปกติของของไหลตั้งค่าเป้นเงื่อนไขไม่ลื่นไถล (Non-slip condition) หรือความเร็วเท่ากับศูนย์ ค่าสัมประสิทธิ์การชนกันระหว่างอนุภาคของแข็ง เท่ากับ 0.95 ค่าสัมประสิทธิ์การชนกันระหว่าง อนุภาคของแข็งและผนังเท่ากับ 0.95 และค่าสัมประสิทธิ์สเปคิวลาริตี เท่ากับ 0.6

5. จำนวนเซลล์ทั้งหมดในการจำลองภาวะการไหล เท่ากับ 8,334 เซลล์ 17,732 เซลล์ และ
 35,979 เซลล์

 รูปทรงทางเรขาคณิตของไซโคลนไม่มีผลต่อความเร็วการตกกลับลงมาของอนุภาคและ ความดันลดในเครื่องปฏิกรณ์

จากนั้นจะทำการสอบเทียบความถูกต้องของแบบจำลองคณิตศาสตร์ กับ ผลการทดลองจริง ของ Johansson และคณะ [21] โดยกำหนดขั้นเวลาที่ใช้ในการคำนวณ (Time step) 0.001 วินาที คำนวณซ้ำ 20 ครั้งต่อหนึ่งเวลา ใช้เวลาคำนวณทั้งหมด 30 วินาที ผลคำนวณเชิงตัวเลขที่ได้นี้จะถูก นำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองจริงแบบที่ไม่มีการเกิดปฏิกิริยาเคมีขึ้นในระบบ (Cold flow model) เพื่อหาแบบจำลองคณิตศาสตร์ที่จะใช้สำหรับอธิบายพฤติกรรม และปรากฎการณ์ที่เกิดขึ้น ในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง หลังจากนั้นจะนำแบบจำลองคณิตศาสตร์นี้ไปวิเคราะห์ผลของตัวแปร ดำเนินการที่ส่งต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง เครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง (Fuel reactor) โดยตัวแปรที่ทำการศึกษามีดังนี้

 ของแข็งที่เลือกมาใช้ในงานวิจัยนี้ คือ นิกเกิลออกไซด์ ซึ่งมีความว่องไวต่อปฏิกิริยา โดยขนาดของ อนุภาคที่ศึกษา คือ 0.00015 และ 0.000175เมตร [21]

2. อุณหภูมิของแก๊สเชื้อเพลิง ที่ป้อนเข้าเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง 773 และ 873 K [30]

ความสูงเบดเริ่มต้น ที่อัตราส่วน 0.75 ถึง 1 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง
 [25]

 ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า ที่ป้อนเข้าด้านล่างเครื่องปฏิกรณ์ ที่ความเร็ว 1.25 ถึง 1.5 เท่า ของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน (Minimum fluidization velocity) [31]

สมมุติฐานที่ใช้ในกรณีศึกษาการไหลแบบเกิดปฏิกิริยาเคมี(Hot flow) ภายในเครื่องปฏิกรณ์ เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี

 แบบจำลองการไหลสองวัฏภาคแก๊สและของแข็ง เป็นแบบ 2 มิติ กำหนดความเร่ง เนื่องจากแรงโน้มถ่วงของโลก 9.81 เมตรต่อวินาทีกำลังสองในทิศทางลบของแกน Y

 2. ของแข็งที่ใช้ในแบบจำลองมีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางและคุณสมบัติทางกายภาพเหมือนกัน หมด

3. ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์อากาศจะถูกป้อนด้วยอากาศความเร็ว 1.73 เมตรต่อวินาที โดยมี สัดส่วนโดยมวลของออกซิเจนร้อยละ 0.22 และไนโตรเจน 0.78 โดยมวล ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์ เชื้อเพลิงจะถูกป้อนเข้าด้วยแก๊สเชื้อเพลิง ที่มีองค์ประกอบ คาร์บอนมอนอกไซด์ 0.445 % ไฮโดรเจน 0.2222 คาร์บอนไดออกไซด์ 0.111 % และ ไอน้ำ 0.222 % โดยปริมาตร อ้างอิงจากงานวิจัยของ Wang และคณะ [26] ทางเข้าพอตซีลจะป้อนแก๊สไนโตรเจนที่ 100 % โดยมวล ซึ่งจะมีนิเกิลออกไซด์ อัดตัวอยู่ในเครื่องเผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีมีสัดส่วนปริมาตรของแข็งเริ่มต้น 0.45 ค่าความดัน บริเวณทางออกของไซโคลนมีค่าเท่ากับความดันบรรยากาศ และความดันที่ทางออกเครื่องปฏิกรณ์ เชื้อเพลิงมีค่าเท่ากับ -800 Pa สาเหตุที่ตั้งค่าที่ความดันติดลบที่ทางออก เพราะต้องการให้แก๊ส ผลิตภัณฑ์ที่ได้จากแก๊สเซื้อเพลิงที่ทำปฏิกิริยากันนั้น ถูกดูดออกจากเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง ไม่เกิด การรั่วไหลกลับไปยังพอตซีลและดาวคัมเมอร์ อ้างอิงจากงานของ Gullichsen [32]

4. ที่ผนังกำหนดให้ผนังของเครื่องปฏิกรณ์ เป็นสภาวะที่ความเร็วในแนวสัมผัสและความเร็ว ในแนวปกติของแก๊สตั้งเงื่อนไข ไม่ลื่นไถล (Non-slip condition) หรือความเร็วเท่ากับศูนย์ ค่า สัมประสิทธิ์การชนกันระหว่างอนุภาคของแข็ง เท่ากับ 0.95 ค่าสัมประสิทธิ์การชนกันระหว่าง อนุภาคของแข็งและผนังเท่ากับ 0.95 และค่าสัมประสิทธิ์สเปคิวลาริตี เท่ากับ 0.6

5. กำหนดให้อุณหภูมิ ภายในเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี และ ที่ทางออก ของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง และ ไซโคลนมีค่าเท่ากันทั้งหมดในแต่ละกรณีที่ศึกษานั้นๆ

 รูปทรงทางเรขาคณิตของไซโคลนไม่มีผลต่อความเร็วการตกกลับลงมาของอนุภาคและ ความดันลดในเครื่องปฏิกรณ์

การทดลองนี้จะออกแบบการทดลองแบบ 2⁴ หรือมีการทดลองทั้งหมด 16 การทดลอง สรุป ได้ดังตารางที่ 3.8 และตัวแปรตอบสนองที่จะมาใช้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์ เชื้อเพลิง คือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง



รูปที่ 3.5 คอนทัวร์แสดงสัดส่วนโดยปริมาตรของแข็งเริ่มต้น ในเครื่องเผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี

ตารางที่ 3.5 ค่าตัวแปรต่างๆที่ใช้ในการทดลองในเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้วงปฏิกิริยาเคมีในการไหล แบบไม่เกิดปฏิกิริยา (Cold flow) [22]

คำอธิบาย	หน่วย	ข้อมูลจากการ	ข้อมูลที่ใช้ใน
		ทดลอง	แบบจำลอง
ความสูงเครื่อง	m	1.9	1.9
ปฏิกรณ์อากาศ			
ขนาดเส้นผ่าน	mm	0.15	0.15
ศูนย์กลางของของแข็ง	_ SS/M/72		
ความหนาแน่นของ	Kg/m ³	2,600	2,600
ของแข็ง			
ฟลักซ์ของของแข็ง	Kg/m ² s	26.0-162.5	89.07
อุณหภูมิที่ใช้เดินระบบ	°C	20	30
ความหนาแน่นของ	Kg/m ³	1.18	1.17
แก๊ส			
ความหนืดของแก๊ส	Pa.S	1.81×10 ⁻⁵	1.82×10 ⁻⁵
ความเร็วแก๊สป้อนเข้า	m/s	0.75-1.15	1.1
เครื่องปฏิกรณ์อากาศ			
ความเร็วแก๊สป้อนเข้า	m/s	0.09-0.31	0.19
เครื่องปฏิกรณ์			
เชื้อเพลิง			
ความเร็วแก๊สป้อนเข้า	m/s	0.065-0.097	0.087
พอตซีล			
สัมประสิทธิ์การชน	-	ไม่มี	0.95
ระหว่างอนุภาค-			
อนุภาค			
สัมประสิทธิ์การชน	-	ไม่มี	0.95
ระหว่างอนุภาค-ผนัง			

คำอธิบาย	หน่วย	ข้อมูลจากการ	ข้อมูลที่ใช้ใน
		ทดลอง	แบบจำลอง
น้ำหนักของของแข็ง	kg	9.0	Case1 : 9 kg
ทั้งหมดในเครื่อง			Case2 : 15 kg
ความสูงเบดฝั่งเครื่อง	cm	ไม่อื่	Case1 : 15 cm
ปฏิกรณ์อากาศ			(4.9kg)
			Case2 : 25 cm
			(8.3kg)
ความสูงเบด ฝั่งเครื่อง	cm	ไม่มี	Case1 : 10 cm
ปฏิกรณ์เชื้อเพลิง		10 -	(3.2kg)
			Case2 : 15 cm
			(5.0kg)
ความสูงเบด	cm bas	ไม่มี	Case1 : 3 cm
ในพอทซีล			(0.9kg)
			Case2 : 5 cm
	The second		(1.7kg)
สัดส่วนโดยปริมาตร			0.45
ของของแข็งเริ่มต้น			
Time steps	sec	วิทย ไม่มี	1×10 ⁻⁵
แบบจำลองแรงต้าน	CHULALONGKORN	University	Gidaspow drag
การเคลื่อนที่			model
ระหว่างวัฏภาค			

Boundary condition	Values
Gas velocity in Pot seal	0.087 m/s
Gas velocity in air reactor	1.1 m/s
Pressure guage	
Outlet of fuel reactor	0 Pa
Outlet of cyclone	0 Pa

ตารางที่ 3.6 ภาวะขอบที่ใช้ในแบบจำลองอุทกพลศาสตร์เครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้วงปฏิกิริยาเคมี [22]

ตารางที่ 3.7 ภาวะขอบที่ใช้ในแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้วงปฏิกิริยาเคมีแบบเกิดปฏิกิริยาเคมี

Boundary condition	Values
Gas velocity in Pot seal	0.087m/s
Gas velocity in air reactor	1.73 m/s
Pressure gauge	
Outlet of fuel reactor (Hot flow)	-800 Pa
Outlet of cyclone	0 Pa

CHULALONGKORN UNIVERSITY

		ความสูงเบดใน	อุณหภูมิแก๊ส	ความเร็วแก๊ส
	ขนาดของอนุภาค	เครื่องปฏิกรณ์	เชื้อเพลิง	เชื้อเพลิงป้อนเข้า
กรณี	(micron)	เชื้อเพลิง(m)	ป้อนเข้า (K)	(m/s)
1	150	0.75D	773	1.25Umf
а	175	0.75D	773	1.25Umf
b	150	1.0D	773	1.25Umf
ab	175	1.0D	773	1.25Umf
С	150	0.75D	873	1.25Umf
ас	175	0.75D	873	1.25Umf
bc	150	1.0D	873	1.25Umf
abc	175	1.0D	873	1.25Umf
d	150	0.75D	773	1.5Umf
ad	175	0.75D	773	1.5Umf
bd	150	1.0D	773	1.5Umf
abd	175	1.0D	SITY 773	1.5Umf
cd	150	0.75D	873	1.5Umf
acd	175	0.75D	873	1.5Umf
bcd	150	1.0D	873	1.5Umf
abcd	175	1.0D	873	1.5Umf

ตารางที่ 3.8 การออกแบบการทดลอง 2⁴ ของการศึกษาตัวแปรดำเนินการ กรณีเกิดปฏิกิริยาเคมี

บทที่ 4 ผลการทดลองและอภิปรายผลการทดลอง

ในส่วนนี้จะแสดงผลที่ได้ใน บทที่ 3 ได้แก่ การจำลองการคำนวณเชิงอุทกพลศาสตร์แบบสองมิติ ภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงในการเผาไหม้แบบเคมิคอลลูปปิง โดยการหาขนาดของเซลล์คำนวณ การคำนวณที่เหมาะสม (Grid independency test) ที่สามารถทำนายค่าได้ถูกต้องและใช้เวลาใน การคำนวณน้อยที่สุด และการหาเวลาที่ระบบเข้าสู่สภาวะคงตัว (Steady state) เพื่อนำผลคำนวณ เชิงตัวเลขที่ได้ไปเปรียบเทียบกับผลการทดลอง ซึ่งผลการจำลองกระบวนการการไหลแบบไม่ เกิดปฏิกิริยา (Cold flow) นี้จะแบ่งออกเป็นสองส่วน คือ การศึกษาอุทกพลศาสตร์ภายในเครื่อง ปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก้สระบบแบบกะ (Batch operation) ของ Jung และคณะ [4] และมี การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อดัชนีการผสมภายในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบ ฟองแก้ส การศึกษาอุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์วงปฏิกิริยาเคมีระบบแบบต่อเนื่อง (Continuous operation) ของ Johansson และคณะ [21] สุดท้ายยังมีการศึกษาผลของตัวแปร ดำเนินการที่ส่งผลร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเซื้อเพลิงในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง

4.1 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส

4.1.1 ผลการจำนวนเซลล์ที่เหมาะสมกับการคำนวณ (Grid independency test) และหาเวลา ที่ภาวะคงตัว (Steady state)

ในการคำนวณขนาดเซลล์ที่เหมาะสมกับการคำนวณนั้น โดยจำนวนเซลล์นั้นจะส่งผลต่อ ความถูกต้องของคำตอบที่ได้ หากจำนวนเซลล์น้อย หรือกริดไม่ละเอียดพอจะทำให้คำตอบที่ได้นั้นมี ความคลาดเคลื่อนออกจากคำตอบที่ถูกต้อง หากจำนวนเซลล์มาก หรือกริดมีความละเอียดสูงคำตอบ ที่ได้ก็จะมีความถูกต้องแม่นยำมากขึ้น แต่ก็ต้องใช้เวลาในการคำนวณนานขึ้นตามไปด้วย ดังนั้นจึงต้อง หาจำนวนเซลล์ที่เหมาะสมไปใช้ในงานวิจัยส่วนถัดๆไป ในงานวิจัยนี้จะใช้จำนวนเซลล์ ทั้งหมด 3ค่า 1,900 เซลล์ (38x50) 7,500 เซลล์ (75x100) และ 30,000 เซลล์ (150x200)

รูปที่ 4.1 แสดงผลการจำลองค่าสัดส่วนของของแข็ง ในแนวรัศมีเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบด แบบฟองแก๊ส ที่ความสูง 0.14 เมตร จะเห็นได้ว่าที่จำนวนเซลล์ 1,900 เซลล์นั้นมีค่าค่อนข้าง คลาดเคลื่อนออกจาก 7,500 และ 30,000 จำนวนเซลล์ ค่อนข้างมาก แสดงว่า จำนวนเซลล์ 1,900 เซลล์นั้น ไม่เหมาะสมที่จะนำมาใช้ทำนายอุทกพลศาสตร์ในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง และ พิจารณา ที่ 7,500 และ 30,000เซลล์ นั้น ค่าที่ได้มีค่าที่ไม่แตกต่างกันมากนัก ดังนั้นจึงเลือกจำนวน เซลล์ที่ 7,500 เซลล์ (75x100) มาใช้ในงานวิจัยถัดไป

ในการคำนวณหาค่าตัวแปรทางอุทกพลศาสตร์ต่างๆในการทดลองนั้น ต้องมีการหาช่วงเวลา ที่ระบบเข้าสู่สภาวะคงตัว หรือ ภาวะที่ระบบไม่ขึ้นกับเวลา (Steady state) เพื่อจะทำการเฉลี่ยค่าตัว แปรที่จะหาเพื่อใช้ในการเปรียบเทียบผลคำนวณเชิงตัวเลขและผลการทดลองในห้องปฏิบัติการจริง เมื่อพิจารณาจากรูปที่ 4.2 แสดงความดันลดคร่อมเบด ที่ระยะเวลาต่างๆ ซึ่งพบว่าความดันลดจะมีค่า ลดลงและแกว่งไปมา ตั้งแต่เวลา 0-25 วินาที และความดันลดคร่อมเบดเริ่มมีค่าคงที่ตั้งแต่ 5 วินาที เป็นต้นไป ดังนั้น จึงเลือก ช่วงเวลา 5-20 วินาที มาหาค่าเฉลี่ยของตัวแปรทางอุทกพลศาสตร์ทุกตัว



รูปที่ 4.1 ค่าสัดส่วนของของแข็ง ในแนวรัศมีเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส ที่ความสูง 0.14 เมตร ที่จำนวนเซลล์ต่างๆ



รูปที่ 4.2 ค่าความดันลดคร่อมเบด ที่ระยะเวลา 0-25 วินาที

4.1.2 การเปรียบเทียบผลการจำลองและผลการทดลอง

ผลการจำลองการไหลภายในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง เทียบกับผลการทดลอง ของ Jung และคณะ พบว่า ผลจากการใช้แบบจำลองแรงต้านการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาคของ Gidaspow ให้ผลการจำลองที่ใกล้เคียงกับการทดลอง [4] แสดงดังรูปที่ 4.3 ซึ่งแสดงความเร็วของ ของแข็งแนวแกน ในแนวรัศมีของเครื่องปฏิกรณ์ที่ความสูง 0.14 เมตร จะเห็นได้ว่าอนุภาคของแข็งมี ความเร็วมากกว่าบริเวณแกนกลางเครื่องและความเร็วมีค่าลดลงบริเวณผนังเครื่องปฏิกรณ์ หาก สังเกตค่าสัดส่วนของของแข็ง ในแนวรัศมีที่ความสูง 0.14 เมตร จะพบว่าความหนาแน่นของอนุภาค ของแข็งจะมีค่ามากบริเวณผนังเครื่องและ เบาบางบริเวณแกนกลางเครื่อง ซึ่งเป็นลักษณะการไหลที่ เรียกว่า การไหลแบบแกนในวงนอก (Core-annulus) ผลการเปรียบเทียบ อื่นๆ เช่น อุณหภูมิแกรนู ลาร์ ในแนวรัศมี ที่ความสูง 0.14 เมตร แสดงดังรูปที่ 4.4 ความเร็วของของแข็งในแนวแกนที่ความ สูง 0.14 เมตร ที่เวลาช่วง 20-30 วินาที แสดงดังรูปที่ 4.5 และความเร็วของของแข็งในแนวรัศมีที่ความ สูง 0.14 เมตร ที่เวลา 20-30 วินาที แสดงดังรูปที่ 4.6 จะพบว่าผลการทำนายพฤติกรรมทางอุทก พลศาสตร์ด้วยแบบจำลองคณิตศาสตร์นั้นสามารถทำนายผลการทดลองได้อย่างถูกต้องและแม่นยำ ดังนั้น จึงเลือกใช้แบบจำลองคณิตศาสตร์ชุดนี้เพื่อทำการศึกษาผลกระทบของตัวแปรดำเนินการใน การทดลองขั้นต่อไป



รูปที่ 4.4 อุณหภูมิแกรนูลาร์ ตามแนวรัศมี ที่ความสูง 0.14 เมตร



Experimental data by Jung [4]

รูปที่ 4.5 ความเร็วของของแข็งในแนวแกนที่ความสูง 0.14 เมตร ที่เวลาช่วง 20-28 วินาที



รูปที่ 4.6 ความเร็วของของแข็งในแนวรัศมีที่ความสูง 0.14 เมตร ที่เวลาช่วง 20-27 วินาที
4.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อดัชนีการผสมใน เครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง

เนื่องมาจากปฏิกิริยาแบบวิวิธพันธ์ (Heterogeneous reaction) การที่จะเกิดปฏิกิริยาได้ดี และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีสูง แก๊สและของแข็งที่เป็นสารตั้งต้นในการเกิดปฏิกิริยาจะต้องมีการ สัมผัสกันที่ทั่วถึงและมีเวลาสัมผัสกัน (Contact time) ที่นานมากพอเพื่อที่จะให้เกิดการถ่ายโอนมวล ระหว่างผ่านฟิลม์ต้านทานระหว่างเฟส (film resistance in mass transfer) จนกระทั่งสารตั้งต้นคู่ ้นั้นเกิดปฏิกิริยากันได้อย่างสมบูรณ์ ในการทดลองส่วนนี้มีจุดประสงค์เพื่อทำการศึกษาพฤติกรรมทาง อุทกพลศาสตร์ และ ศึกษาผลกระทบของตัวแปรดำเนินการที่จะส่งผลต่อดัชนีการผสมในเครื่อง ปฏิกรณ์ ทั้งแนวแกนและแนวรัศมี และหาการกระจายตัวของของแข็งที่มีความสม่ำเสมอเป็นเนื้อ เดียวกัน ซึ่งตัวแปรที่เลือกมาศึกษามีทั้งหมด 4 ตัวแปร คือ ขนาดอนุภาคของแข็ง (Particle diameter) ความหนาแน่นของของแข็ง(Bulk density) , อัตราส่วนของความสูงเบดเริ่มต้น ต่อเส้น ผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ (Ratio of initial static bed height to column diameter) และ ความเร็ว แก๊สป้อนเข้า (Fluidization velocity) ซึ่งจะมีจำนวนการทดลองทั้งหมด 16 การทดลอง และจะ พิจารณาตัวแปรตอบสนอง (Response surface) ทั้งหมด 2 ตัวแปร คือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ในแนวแกนและแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็ง (Standard deviation of solid volume fraction in axial and radial directions) หรือเรียกว่าเป็นตัวชี้วัดการกระจายตัวของ ของแข็งภายในเครื่องปฏิกรณ์ (Mixing index) ซึ่งหากเกิดการกระจายตัวของของแข็งในเครื่องไม่มี ความสม่ำเสมอ ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานจะมีค่าสูง แต่กลับกัน หากการกระจายตัวมีความสม่ำเสมอ ของอนุภาคของแข็งและแก๊สเป็นเนื้อเดียวกัน ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานก็จะมีค่าต่ำ ซึ่งการกระจายตัว ของของแข็งเป็นปัจจัยสำคัญที่ทำให้เกิดการสัมผัสกันอย่างทั่วถึงภายในเครื่องปฏิกรณ์

ผลการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ ทั้ง 4 ตัวแปร และ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานใน แนวแกนและแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็ง แสดงในตารางที่ 4.1 ซึ่งหากพิจารณาใน แนวแกน พบว่า กรณีที่ 14 ที่ใช้ขนาดอนุภาคของของแข็ง 0.0006 เมตร อัตราส่วนระหว่างความสูง เบดเริ่มต้น ต่อ เส้นผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ 0.5 เท่า ความหนาแน่นของของแข็ง 2,350 กิโลกรัมต่อ ลูกบาศก์เมตร และความเร็วแก๊ส 1.75 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน จะให้ค่าส่วน ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนที่มีค่าต่ำที่สุด แสดงว่ากรณีนี้จะให้การกระจายตัวของของแข็งที่ สม่ำเสมอเป็นเนื้อเดียวกันภายในเครื่องปฏิกรณ์ตลอดแนวความสูง ซึ่งจะเกิดปฏิกิริยากับก๊าซที่ ป้อนเข้ามาได้อย่างสมบูรณ์ และ กรณีที่ 7 ใช้ขนาดอนุภาคของของแข็ง 0.0002 เมตร อัตราส่วน ระหว่างความสูงเบดเริ่มต้น ต่อ เส้นผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ 0.75 เท่า ความหนาแน่นของของแข็ง 2,350 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร และความเร็วแก๊ส 1.5 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซ ชัน จะให้ค่า ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนที่มีค่าสูงที่สุด ซึ่งตามความหมายเชิงกายภาพ คือ ของแข็งมีการรวมตัวกันอยู่ที่บริเวณใดบริเวณหนึ่งในเครื่องปฏิกรณ์ การผสมกันของอนุภาคของแข็ง ไม่สม่ำเสมอตลอดแนวความสูงเครื่องปฏิกรณ์ หากมองในมุมของปฏิกิริยาเอกพันธ์ (Homogenous reactions) นั่นคือเกิดจุดอับนิ่ง (Dead zone) ขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์นั่นเอง ทำ ให้สารตั้งต้นที่เป็นของไหลทำปฏิกิริยากับสารตั้งต้นอีกตัวที่เป็นของไหลได้ไม่หมด ในปฏิกิริยาวิวิธ พันธ์นั้น จะทำให้ของแข็งที่บริเวณนั้นบางส่วนไม่เกิดปฏิกิริยากับก๊าซสารตั้งต้นที่ป้อนเข้ามา ซึ่งผลที่ ตามมาจะทำให้ค่าร้อยละการเปลี่ยน (Conversion) ของแก๊สที่เป็นสารตั้งต้นน้อยลง

ตารางที่ 4.1 การออกแบบการทดลองแฟกทอเรียล 2⁴ ของการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการและ ค่าดัชนีการผสมในแนวแกนและแนวรัศมี

				2	SD axial	SD radial
Case	A (micron)	B (m)	C (kg/m ³)	D (m/s)	direction	direction
1	200	0.50D	1,300	1.5Umf	0.1844	4.29E-05
2	600	0.50D	1,300	1.5Umf	0.1774	4.51E-04
3	200	0.75D	1,300	1,300 1.5Umf		1.17E-03
4	600	0.75D	1,300	1.5Umf	0.2334	1.01E-03
5	200	0.50D	2,350	1.5Umf	0.1846	4.66E-03
6	600 0.50D 2,350 1.5Ur		1.5Umf	0.1701	5.72E-04	
7	200 C I	0.75D	2,350	1.5Umf	0.2464	3.94E-03
8	600	0.75D	2,350	1.5Umf	0.2235	3.40E-03
9	200	0.50D	1,300	1.75Umf	0.1800	8.35E-04
10	600	0.50D	1,300	1.75Umf	0.1687	3.04E-04
11	200	0.75D	1,300	1.75Umf	0.2377	2.17E-03
12	600	0.75D	1,300	1.75Umf	0.2223	2.29E-03
13	200	0.50D	2,350	1.75Umf	0.1817	1.96E-03
14	600	0.50D	2,350	1.75Umf	0.1594	1.67E-03
15	200	0.75D	2,350	1.75Umf	0.2400	6.42E-03
16	600	0.75D	2,350	1.75Umf	0.2072	3.69E-03

ส่วนกรณีศึกษาการผสมในแนวรัศมีจากตารางที่ 4.1 จะพบว่า กรณีที่ 1 ขนาดอนุภาคของ ของแข็ง 0.0002 เมตร อัตราส่วนระหว่างความสูงเบดเริ่มต้น ต่อ เส้นผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ 0.5 เท่า ความหนาแน่นของของแข็ง 1,300 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร และความเร็วแก๊ส 1.5 เท่าของความเร็ว ต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน นั้นจะให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของ ของแข็งในแนวรัศมีที่มีค่าต่ำที่สุด นั่นหมายถึงการกระจายตัวของของแข็งในแนวรัศมีมีค่าสม่ำเสมอ และกรณีที่ 4 ขนาดอนุภาคของของแข็ง 0.0006 เมตร อัตราส่วนระหว่างความสูงเบดเริ่มต้น ต่อ เส้น ผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ 0.75 เท่า ความหนาแน่นของของแข็ง 1,300 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร และ ความเร็วแก๊ส 1.5 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน จะได้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของ สัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งสูงสุด นั่นคือ การกระจายตัวของของแข็งในแนวรัศมีมีค่าลดลงหาก เทียบกับ กรณีที่ 1 ที่มีการกระจายตัวสม่ำเสมอดีที่สุด

ดังนั้นจึงเลือกค่าตัวแปรตอบสนอง ทั้ง 2 ค่า คือ ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดย ปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมีและแนวแกน ในแต่ละกรณีที่มีค่าสูงสุดและต่ำสุดในแต่ละกรณี มา สร้างคอนทัวร์ของสัดส่วนเชิงปริมาตรของของแข็งที่เวลา 20 วินาที เพื่อแสดงการกระจายตัวของ ของแข็งภายในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง ดังรูปที่ 4.7 คอนทัวร์ของสัดส่วนเชิงปริมาตรของ อนุภาคของแข็ง (ก) กรณีที่ 14 (ข) กรณีที่ 7 (ค) กรณีที่ 1 (ง) กรณีที่ 4 และหากจะอธิบาย โดย เปรียบเทียบค่าดัชนีการผสมในแนวแกน ด้วย คอนทัวร์ของสัดส่วนเชิงปริมาตรของอนุภาคของแข็ง ระหว่าง กรณี 14 และ 7 จากคอนทัวร์จะสังเกตเห็นว่าเบด ของกรณี ที่ 7 มีสีแดงเข้มมากกว่า 14 ใน ความหมายเชิงกายภาพ คือ มีอนุภาคของแข็งอยู่อย่างหนาแน่นที่บริเวณนั้น ทำให้หากคิดค่าส่วน เบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนเชิงปริมาตรของอนุภาคของแข็งในแนวแกนทั้งสองกรณีเล้ว กรณี 14 จะมีค่าน้อยกว่ากรณี 7 ทำให้ค่าการกระจายตัวของของแข็งในแนวแกนทั้งสองกรณีเล้ว กรณี 14 จะมีค่าน้อยกว่ากรณี 7 ทำให้ค่าการกระจายตัวของของแข็งในแนวแกนมีค่าต่ำที่สุด หากเทียบกันทั้ง 4 กรณี และอธิบายค่าดัชนีการผสมในแนวรัศมี ระหว่างกรณี 1 และ 4 จากคอนทัวร์จะสังเกตเห็นว่า กรณีที่ 1 สีส้มมีความสม่ำเสมอกันทั่วทั้งเบด แต่ กรณี 4 สีแดงเข้มปนอยู่ด้วยเล็กน้อย ทำให้การ กระจายตัวของของแข็งทั้งในแนวรัศมีและแนวแกนของกรณี 1 นั้นมีค่าต่ำกว่ากรณี 4 ทั้งหมด ซึ่งผล การคำนวณด้วยค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งนั้นก็สอดคล้องกับผล คอนทัวร์ของสัดส่วนเงิงปริมาตรของอนุภาคของแข็ง



รูปที่ 4.7 คอนทัวร์ของสัดส่วนเชิงปริมาตรของอนุภาคของแข็งที่ เวลา 20 วินาที

ในการวิเคราะห์ส่วนสุดท้ายของการศึกษานี้ เป็นการวิเคราะห์ความแปรปรวน (Analysis of Variance , ANOVA) จากการนำค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็ง ใน แนวรัศมีและแนวแกนภายในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊สไปสร้างตารางที่ 4.2 ซึ่งเป็น การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งใน แนวแกน ซึ่งผลได้ว่าตัวแปรดำเนินการที่มีผลอย่างมีนัยสำคัญคือ ตัวแปรดำเนินการหลัก ทั้ง 4 ตัว ขนาดอนุภาคของแข็ง (A) ความสูงเบด (B) ความหนาแน่นของอนุภาคของแข็ง (C) ความเร็วแก๊ส ป้อนเข้า (D) อันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคของแข็งและความสูงเบด(AB) อันตรกิริยาระหว่าง ขนาดอนุภาคของแข็งและความหนาแน่นของแข็ง (AC) อันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดและความเร็ว แก๊สป้อนเข้า (BD) อันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้า (AD) ตัวแปร เหล่านี้มีผลนัยสำคัญเพราะ ค่า p-value < 0.05 ซึ่งตามทฤษฎี ถ้าตัวแปรใดที่มีค่า p-value ต่ำ กว่า 0.05 โดยกำหนด ค่าความเชื่อมั่นร้อยละ 95 ตัวแปรนั้นจะมีผลอย่างมีนัยสำคัญในทางสถิติ หรือ มีผลต่อตัวแปรตอบสนอง เรียงลำดับผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกนจากมากไปน้อยดังนี้ เฉพาะตัวแปรหลัก ความสูงเบด เริ่มต้น ขนาดอนุภาคของแข็ง ความเร็วแก็สป้อนเข้า และ ความหนาแน่นของของแข็ง

กล่าวโดยสรุป คือ ผลของตัวแปรหลักทุกตัว และ อันตรกิริยาทุกคู่มีผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบน มาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน และการวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมี ซึ่งจากการวิเคราะห์จะได้ ว่าตัวแปรดำเนินการที่มีผลอย่างมีนัยสำคัญคือ ตัวแปรดำเนินการหลัก ทั้ง 3 ตัว ขนาดอนุภาค ของแข็ง (A) ความสูงเบด (B) ความหนาแน่นของอนุภาคของแข็ง (C) อันตรกิริยาระหว่างขนาด อนุภาคของแข็งและความหนาแน่นของแข็ง (AC) และ อันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดและความเร็ว แก๊สป้อนเข้า (BD) มีผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมี โดยเรียงลำดับผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตร ของของแข็งในแนวรัศมีจากมากไปน้อยดังนี้ เฉพาะตัวแปรหลัก ความหนาแน่นของแข็ง ความสูงเบด เริ่มต้น และ ขนาดอนุภาคของแข็ง ในกรณีการวิเคราะห์ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดย ปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมีเนื่องจาก อันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดและความเร็ว (BD) มี ค่า p-value < 0.05 จึงต้องนำผลกระทบจากตัวแปรหลักทั้งสองตัวนี้ ความสูงเบด (B) ความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D) มาพิจารณาร่วมด้วย

ตารางที่ 4.2 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของของแข็งในแนวแกน เป็นค่าตอบสนอง

	Sum of		Mean	F	
Source	Squares	DF	Square	Value	Prob > F
Model	0.014411836	10	0.001441184	1272.4279	< 0.0001
А	0.001185081	1	0.001185081	1046.3133	< 0.0001
В	0.012605676	1	0.012605676	11129.611	< 0.0001
С	8.05506E-05	1	8.05506E-05	71.11853	0.0004
D	0.000286456	1	0.000286456	252.91303	< 0.0001
AB	4.72656E-05	1	4.72656E-05	41.731045	0.0013
AC	0.000139831	1	0.000139831	123.45712	0.0001
AD	4.19256E-05	1	4.19256E-05	37.016334	0.0017
BD	1.27806E-05	1	1.27806E-05	11.284075	0.0201
ABC	6.63063E-06	งกาณ์ม	6.63063E-06	5.8542104	0.0602
ACD	5.64063E-06	ONGKOR	5.64063E-06	4.9801346	0.0760
Residual	5.66313E-06	5	1.13263E-06		
Cor Total	0.014417499	15			

 R-Squared
 0.9996

 Adj R-Squared
 0.9988

 Pred R-Squared
 0.9960

ตารางที่ 4.3	การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้	์ ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานขอ _ง	งของแข็งในแนวรัศมี
เป็นค่าตอบส	นอง		

	Sum of		Mean	F	
Source	Squares	DF	Square	Value	Prob > F
Model	4.85662E-05	12	4.04719E-06	20.140708	0.0153
А	3.81313E-06	1	3.81313E-06	18.975963	0.0224
В	1.15517E-05	1	1.15517E-05	57.48658	0.0048
С	2.03381E-05	1	2.03381E-05	101.21186	0.0021
D	1.04709E-06	1	1.04709E-06	5.2108236	0.1067
AC	3.50167E-06	1	3.50167E-06	17.425966	0.0250
AD	5.62757E-08	1	5.62757E-08	0.2800545	0.6333
BC	8.01428E-07	1	8.01428E-07	3.9882837	0.1397
BD	2.25518E-06	1	2.25518E-06	11.222832	0.0441
ABC	6.56769E-08	หาล <u>1</u> กรณ์	6.56769E-08	0.3268392	0.6076
ABD	1.4214E-06	JLALONGKO	1.4214E-06	7.0735608	0.0764
BCD	4.68232E-07	1	4.68232E-07	2.3301452	0.2243
ABCD	3.24639E-06	1	3.24639E-06	16.155587	0.0277
Residual	6.02837E-07	3	2.00946E-07		
Cor Total	4.91691E-05	15			

R-Squared 0.9877

Adj R-Squared 0.9387

Pred R-Squared 0.6513



รูปที่ 4.8 ผลของตัวแปรหลักและผลของอันตรกิริยาที่มีผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วน โดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน (ก) ผลของตัวแปรหลัก (ข) ผลของอันตรกิริยาระหว่าง ขนาด อนุภาคของแข็ง (A) และความสูงเบดเริ่มต้น (B) (ค) ผลของอันตรกิริยาระหว่าง ขนาดอนุภาค ของแข็ง (A) และความหนาแน่นของแข็ง (C) (ง) ผลของอันตรกิริยาระหว่าง ขนาดอนุภาคของแข็ง (A) และความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D) (จ) ผลของอันตรกิริยาระหว่าง ความสูงเบดเริ่มต้น (B) และ ความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D)

รูปที่ 4.8 เป็นกราฟแสดงผลของตัวแปรหลักและผลของอันตรกิริยา รูป 4.8 (ก) ผลของตัว แปรหลักที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน โดยจะ เห็นได้ว่าตัวแปร B ให้ค่าตัวแปรตอบสนองเพิ่มขึ้น คือ การเพิ่มความสูงเบดเริ่มต้นจะมีผลทำให้ค่า ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกนเพิ่มขึ้นหรือความสม่ำเสมอ ของของแข็งในเครื่องปฏิกรณ์ลดลง อธิบายได้ว่าการเพิ่มปริมาณของแข็งให้มากขึ้นในระบบ และเมื่อ ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน ทำให้เกิดการฟุ้งกระจายของอนุภาคของแข็งมากขึ้นในแนวแกน ความ สม่ำเสมอของอนุภาคของแข็งลดลง ตัวแปรที่เหลืออีก 3 ตัวแปร A C D นั้นมีค่าตัวแปรตอบสนองที่ ลดลง การเพิ่มขนาดอนุภาคของแข็ง ความหนาแน่นของของแข็ง และความเร็วแก๊สป้อนเข้า มีผลทำ ให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกนลดลง อธิบายได้ว่าการ เพิ่มความเร็วแก๊สป้อนเข้าจะทำให้เกิดกระแสนหมุนวน (Circulation) ที่เกิดจากการเหนี่ยวนำของ ฟองอากาศ ทำให้อนุภาคของแข็งเกิดการหมุนวนรอบฟองอากาศขึ้น การเพิ่มขนาดอนุภาคและความ หนาแน่นของแข็งจะลดโอกาสที่อนุภาคจะเกิดการรวมตัวของอนุภาคเป็นกลุ่มก้อน ดังนั้นความ สม่ำเสมอขององเข็งในระบบในแนวแกนจะมีมากขึ้น

รูป 4.8 (ข) ผลของคู่อันตรกิริยาระหว่าง ขนาดอนุภาคของแข็ง (A) และความสูงเบดเริ่มต้น (B) ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน พบว่า เมื่อ ความสูงเบดเริ่มต้นมีค่าสูงและขนาดอนุภาคมีค่าต่ำ จะมีผลให้ค่าตอบสนองมีค่าลดลงคือความ สม่ำเสมอของของแข็งในแนวแกนมีค่าเพิ่มขึ้น และถ้าความสูงเบดเริ่มต้นมีค่าต่ำ และ ขนาดอนุภาคมี ค่าสูง ก็จะมีผลให้ค่าตอบสนองมีค่าลดลงมากขึ้นเช่นกันคือมีค่าความสม่ำเสมอในแนวแกนมีมากขึ้น กว่าเดิม อธิบายได้จากผลของขนาดอนุภาค เมื่อขนาดใหญ่ขึ้นโอกาสการรวมตัวกันของอนุภาคก็จะ ลดลง

รูป 4.8 (ค) ผลของคู่อันตรกิริยาระหว่าง ขนาดอนุภาคของแข็ง (A) และความหนาแน่น ของแข็ง (C) ที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน เมื่อความหนาแน่นของแข็งมีค่าต่ำ (-) และ เมื่อเพิ่มขนาดอนุภาค (+) จะมีผลให้ค่าตอบสนองลดลง หรือ ค่าดัชนีการผสมในแนวแกนเพิ่มขึ้น และเมื่อความหนาแน่นของแข็งมีค่าสูง (+) และ ขนาด อนุภาคมีค่าสูง (+) พบว่ามีผลให้ค่าตอบสนองลดลงมากขึ้น หรือ ให้ค่าดัชนีการผสมในแนวแกนมาก กว่าเดิม

รูป 4.8 (ง) ผลของคู่อันตรกิริยาระหว่าง ขนาดอนุภาคของแข็ง (A) และความเร็วแก๊ส ป้อนเข้า (D) ที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน พบว่า เมื่อค่าความเร็วแก๊สป้อนเข้ามีค่าต่ำ (-) และ ขนาดอนุภาคของแข็งมีค่าสูง (+) จะมีผลให้ค่า ตอบสนองลดลงหรือความสม่ำเสมอของแข็งในแนวแกนมีค่าเพิ่มขึ้น กลับกัน ถ้าความเร็วแก๊สป้อนเข้า มีค่าสูง (+) และขนาดอนุภาคของแข็งมีค่าสูง (+) จะมีผลทำให้ค่าตอบสนองลดลงมากขึ้น การผสมกัน เป็นเนื้อเดียวกันของแข็งในระบบมีค่าสูงขึ้นกว่าเดิม อธิบายได้ว่าผลของกระแสหมุนวนของ ฟองอากาศที่ทำให้ของแข็งเคลื่อนที่ได้ดีขึ้น

รูป 4.8 (จ) ผลของคู่อันตรกิริยาระหว่าง ความสูงเบดเริ่มต้น (B) และความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D) ที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน จะได้ว่า ความเร็วแก๊สป้อนเข้าเริ่มต้นมีค่าสูง (+) และ ความสูงเบดเริ่มต้นมีค่าสูง (+) จะมีผลให้ตัวแปร ตอบสนองมากขึ้น หรือ ค่าดัชนีการผสมในแนวแกนมีค่าลดลง ส่งผลให้ ความสม่ำเสมอของแข็งใน แนวแกนจะลดลงและ ความเร็วแก๊สป้อนเข้ามีค่าต่ำ (-) และ เพิ่มความสูงเบดให้มีค่าสูง (+) ก็มีผลทำ ให้ตัวแปรตอบสนองมากขึ้นเช่นเดียวกันและมีผลมากกว่าเดิม หรือ ความสม่ำเสมอของแข็งใน แนวแกนลดลงมากกว่าเดิม ซึ่งอธิบายได้ว่า ผลจากปริมาณของแข็งที่เพิ่มมากขึ้นทำให้เกิดการฟุ้ง กระจายของแข็งในแนวแกนมากขึ้น และ ในกรณีความเร็วแก๊สป้อนเข้าตัวแปรเดียวจะมีผลทำให้ ค่า ดัชนีการผสมในแนวแกนเพิ่มขึ้น จากรูป (จ) จะเห็นได้ว่า การเพิ่มความสูงของแข็งและเพิ่มความเร็ว แก๊ส จะมีค่าดัชนีการผสมดีกว่าการเพิ่มความสูงของแข็งเพียงอย่างเดียว





รูปที่ 4.9 แสดงผลของตัวแปรหลักและผลของอันตรกิริยา

รูป 4.9 (ก) ผลของตัวแปรหลักที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตร ของของแข็งในแนวรัศมี ซึ่งจากผลจะเห็นได้ว่า ผลของขนาดอนุภาค (A) มีผลให้ตัวแปรตอบสนอง ลดลง เมื่อเพิ่มขนาดอนุภาคของแข็งจะมีผลทำให้ดัชนีการผสมในแนวรัศมีค่าสูงขึ้น และตัวแปร 2 ตัว ที่เหลือ ความสูงเบดเริ่มต้น (B) และความหนาแน่นของแข็ง (C) มีผลทำให้ตัวแปรตอบสนองเพิ่มขึ้น ทั้งหมด ทำให้ดัชนีการผสมในแนวรัศมีลดลง

รูป 4.9 (ข) ผลของอันตรกิริยาระหว่าง ขนาดอนุภาคของแข็ง (A) และความหนาแน่นของ ของแข็ง (C) ที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมี พบว่า เมื่อความหนาแน่นของของแข็งมีค่าสูง และขนาดอนุภาคมีค่าต่ำ นั้นจะมีตัวแปรตอบสนองมีค่า ลดลงจะทำให้ความสม่ำเสมอของของแข็งในแนวรัศมี มีค่ามากขึ้น

รูป 4.9 (ค) ผลของอันตรกิริยาระหว่าง ความสูงเบดเริ่มต้น (B) และความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D) ที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมี ผลการ ทดลองพบว่า เมื่อความเร็วแก๊สป้อนเข้า (+) และ ความสูงเบดเริ่มต้นมีค่าสูง (+) พบว่ามีผลทำให้ตัว แปรตอบสนองมีค่าเพิ่มขึ้นหรือ ให้ค่าดัชนีการผสมในแนวรัศมีลดลง และเมื่อความเร็วแก๊สป้อนเข้ามี ค่าต่ำ (-) และ เมื่อเพิ่มความสูงเบดเริ่มต้น(+) จะมีผลทำให้ตัวแปรตอบสนองมีค่าเพิ่มขึ้นมากกว่าเดิม หรือ ค่าดัชนีการผสมในแนวรัศมีลดลงมากขึ้น

าลงกรณ์มหาวิทยาลั

หลังจากนั้นทำการหาแบบจำลองสมการถดถอยเชิงเส้น (Linear regression model) เพื่อ นำไปใช้ในการหาภาวะเหมาะสมที่สุดในการเดินระบบ และสะดวกในการนำไปใช้เป็นสมการ สหสัมพันธ์ (Correlation) ในงานวิจัยต่อไป ตัวแปรตอบสนองที่เราศึกษาในงานวิจัยนี้มี 2 ตัวแปร คือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมีและแนวแกน ได้ สมการ แบบจำลอง สองสมการดังนี้ สมการ (4.1) คือแบบจำลองถดถอยสำหรับ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน (Standard deviation of solid volume fraction in axial diection) และสมการที่ (4.2) ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของ ของแข็งในแนวรัศมี (Standard deviation of solid volume fraction) $Y_{1} = 0.2 - 0.008356 X_{A} + 0.028 X_{B} - 0.001994 X_{C} - 0.004481 X_{D} - 0.001469 X_{A} X_{B} - 0.003206 X_{A} X_{C} - 0.001369 X_{A} X_{D}$ (4.1)

$$\begin{split} Y_2 &= 0.002162 - 0.0004882 \; X_A + 0.0008497 X_B + 0.001127 X_C \; - \; 0.0004678 X_A X_C \; + \\ & 0.000375 X_B X_D - 0.0004504 \; X_A X_B X_C X_D \end{split}$$

กำหนดให้

Y₁ คือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกน
 Y₂ คือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมี
 X_A X_B X_C X_D คือค่ารหัสเข้าตัวแปร (Coded variable) A B C D

หลังจากนั้นทำการทดสอบความถูกต้องของเศษส่วนตกค้าง (Residual) ว่ามีการกระจายตัวแบบ ไม่มี รูปแบบ และมีความแปรปรวนคงที่ เพื่อทดสอบว่าแบบจำลองสมการถดถอยที่ได้มานั้นมีความถูกต้อง ซึ่งแสดงไว้อยู่ใน ภาคผนวก ข1 และ ข2 และเมื่อแบบจำลองที่ได้เหมาะสมน่าเชื่อถือแล้ว จึงเริ่มทำ การสร้างพื้นที่ผิวตอบสนอง (Response surface) จากแบบจำลองสมการถดถอยนี้ แสดงดังรูป ที่ 4.10 แสดงกราฟพื้นที่ผิวตอบสนอง ของ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของ ของแข็งในแนวแกน รูป 4.10 (ก) แสดง ขนาดอนุภาคของแข็งและความหนาแน่นของแข็งต่างๆกัน พบว่าภาวะที่เหมาะสมที่สุดที่ให้ดัชนีการผสมในแนวแกนดีที่สุด ที่ความหนาแน่นของของแข็ง 2,350 kg/m3 และขนาดอนุภาค 0.0006 เมตร จะให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของ ของแข็งในแนวแกนต่ำที่สุดหรือการผสมในแนวแกนดีที่สุด รูป 4.10 (ข) ชนาดอนุภาคของแข็งและ ความสูงเริ่มต้นของของแข็งต่างๆกัน พบว่าขนาดอนุภาค 0.0006 เมตร และ ที่อัตราส่วนความสูง เบดเริ่มต้นต่อ ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ 0.5 เท่า จะให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วน โดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกนต่ำที่สุดหรือการผสมในแนวแกนดีที่สุด รูป 4.10 (ค) ขนาด อนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าต่างๆกัน พบว่าขนาดอนุภาค 0.0006 เมตร และ ท่อัตราส่วนความสูง เก็สป้อนเข้า 1.75 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน จะให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกนต่ำที่สุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน จะให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวแกนต่าที่สุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน จะให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน

(4.2)



รูปที่ 4.10 (ก) พื้นที่ผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตร ของของแข็ง เมื่อขนาดอนุภาคและความหนาแน่นของของแข็งแตกต่างกัน

(ข) พื้นที่ผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตร ของของแข็ง เมื่อความสูงเบดเริ่มต้นและขนาดอนุภาคของแข็งแตกต่างกัน

(ค) พื้นที่ผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตร ของของแข็ง เมื่อขนาดอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน



72

รูปที่ 4.11 (ก) พื้นที่ผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดย ปริมาตรของของแข็ง เมื่อขนาดอนุภาคและความหนาแน่นของของแข็งแตกต่างกัน

(ข) พื้นที่ผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดย ปริมาตรของของแข็ง เมื่อความสูงเบดเริ่มต้นและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน

รูปที่ 4.11 แสดงกราฟพื้นที่ผิวตอบสนอง ของ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดย ปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมี รูปที่ 4.11 (ก) ขนาดอนุภาคของแข็งและความหนาแน่นของแข็ง ต่างๆกัน ที่ความหนาแน่นของของแข็ง 1,300 kg/m³ และขนาดอนุภาค 0.0006 เมตร จะให้ค่าส่วน เบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในแนวรัศมีต่ำที่สุดหรือการผสมในแนวรัศมีดี ที่สุด

รูปที่ 4.11 (ข) ความเร็วแก๊สป้อนเข้าและความสูงเริ่มต้นของแข็งต่างๆกัน พบว่าที่อัตราส่วน ความสูงเบดเริ่มต้นต่อ ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ 0.5 เท่า และ ความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1.5 เท่า ของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน จะให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตร ของของแข็งในแนวรัศมีต่ำที่สุดหรือการผสมในแนวรัศมีดีที่สุด

4.3 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี

4.3.1 ผลการจำนวนเซลล์ที่เหมาะสมกับการคำนวณ (Grid independency test) และหาเวลา ที่ภาวะคงตัว (Steady state)

ในการทดลองนี้จะหาจำนวนเซลล์ที่เหมาะสมไปใช้ในงานวิจัยส่วนศึกษาผลกระทบของตัว แปรดำเนินการต่อ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิงต่อไป ซึ่งในงานวิจัยส่วนนี้จะใช้จำนวน เซลล์ ทั้งหมด 3 ค่า 8,334 เซลล์ 17,732 เซลล์ และ 35,979 เซลล์

รูปที่ 4.12 แสดงผลการจำลองค่าความดันสมบูรณ์ (Absolute pressure) ของเครื่อง ปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีฝั่งเครื่องปฏิกรณ์อากาศตลอดแนวความสูง จะเห็นได้ว่าที่จำนวน เซลล์ 8,334 เซลล์นั้นมีค่าค่อนข้างคลาดเคลื่อนออกจาก 17,732 และ 35,979 เซลล์ ค่อนข้างมาก แสดงว่า จำนวนเซลล์ 8,334 เซลล์นั้น ไม่เหมาะสมที่จะนำมาใช้ทำนายอุทกพลศาสตร์ในเครื่อง ปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส และพิจารณา ที่ 17,732 และ 35,979 เซลล์ นั้น ค่าที่ได้มีค่าที่ ไม่แตกต่างกันมากนัก ดังนั้นจึงเลือกจำนวนเซลล์ที่ 17,732 เซลล์ มาใช้ในงานวิจัยส่วนถัดไป สำหรับการหาช่วงเวลาที่ระบบเข้าสู่ภาวะคงตัว หรือ ภาวะที่ระบบไม่ขึ้นกับเวลา (Steady state) เมื่อ พิจารณาจากรูปที่ 4.13 แสดงความดันสมบูรณ์ ที่ระยะเวลาต่างๆ ซึ่งพบว่าความดันสมบูรณ์มีค่า ลดลงและแกว่งไปมา ตั้งแต่เวลา 0-25 วินาที และความดันสัมบูรณ์เริ่มมีค่าคงที่ตั้งแต่ 15 วินาทีเป็น ต้นไป ดังนั้น จึงเลือก ช่วงเวลา 15-25 วินาที มาหาค่าเฉลี่ยของตัวแปรทางอุทกพลศาสตร์



รูปที่ 4.12 ค่าความดันสมบูรณ์ ของ เครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี ฝั่งเครื่องปฏิกรณ์ อากาศ ตลอดแนวความสูงเครื่อง ที่จำนวนเซลล์ต่างๆ



รูปที่ 4.13 ค่าความดันสมบูรณ์ฝั่งเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ที่ระยะเวลา 0-25 วินาที

4.3.2 การเปรียบเทียบผลการจำลองและผลการทดลอง

ผลการจำลองการไหลภายในเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีกรณีการไหลแบบไม่ เกิดปฏิกิริยา เทียบกับผลการทดลองในห้องปฏิบัติการจริงพบว่า ผลจากการใช้แบบจำลองแรงต้าน การเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาคของ Gidaspow นั้นสามารถให้ผลการจำลองใกล้เคียงกับการทดลองของ Johansson และคณะ [21] แสดงดังรูปที่ 4.14 ซึ่งแสดงความดันลดตลอดแนวความสูงเครื่องปฏิกรณ์ อากาศ และรูปที่ 4.15 ซึ่งแสดงความดันลดตลอดแนวความสูงเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง พบว่าผลการ ทำนายพฤติกรรมทางอุทกพลศาสตร์ด้วยแบบจำลองคณิตศาสตร์นั้น ความดันลดฝั่งเครื่องปฏิกรณ์ เชื้อเพลิงให้ผลที่สอดคล้องกับผลการทดลองในห้องฏิบัติการ แต่ความดันลดตลอดแนวความสูงเครื่อง ปฏิกรณ์อากาศไม่สอดคล้องกับผลการทดลองในห้องปฏิบัติการนั้น อธิบายได้จากผลของการเลือกใช้ แบบจำลองแรงต้านระหว่างวัฏภาค (Drag model) ดังนั้น จึงเลือกใช้แบบจำลองคณิตศาสตร์ชุดนี้ เพื่อทำการศึกษาผลกระทบของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิงใน เครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง







รูปที่ 4.15 ค่าความดันลดตลอดแนวความสูงเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง 4.4 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการ เปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง

4.4.1 การหาเวลาที่ภาวะเสมือนคงตัว (Quasi steady state)

การศึกษาในส่วนนี้จะศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิรยาเคมี ภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง การหาช่วงเวลาที่ระบบเข้าสู่ภาวะเสมือนคงตัว (quasi steady state) แสดงดังรูปที่ 4.16 แสดงอุณหภูมิแก๊สที่ เวลา 0 - 35 วินาที พบว่า กรณี ที่อุณหภูมิดำเนินการ 873 K อุณหภูมิมีค่าแกว่งไปมาน้อยมากไม่เกิน 10 K และ อุณหภูมิดำเนินการ 773 K อุณหภูมิมีค่า แกว่งไปมาน้อยมากไม่เกิน 20 K ดังนั้นในการหาค่าเฉลี่ยของค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง ทุกกรณี จะหาในช่วงเวลาที่ 25 – 35 วินาที ในการคำนวณต่อไป สาเหตุที่อุณหภูมิที่ทางออกของ เครื่องปฏิกรณ์มีค่าเพิ่มขึ้นน้อย เพราะที่อุณหภูมิสูง ค่าคงที่สมดุลของปฏิกิริยาวอเตอร์แก๊สชิฟต์จะมี ค่าลดลงทำให้ปฏิกิริยาผันกลับ ปฏิกิริยาวอเตอร์แก๊สซิฟต์จึงเป็นปฏิกิริยาคายความร้อนส่วนใหญ่ และ ปฏิกิริยารีดักชันระหว่างแก๊สเชื้อเพลิงและโลหะออกไซด์เป็นปฏิกิริยาคายความร้อน [33]



รูปที่ 4.16 อุณหภูมิของแก๊สที่ทางออกครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง ที่กรณีต่างๆ ช่วงเวลา 0 - 40 วินาที

4.4.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการ เปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง

การศึกษาผลกระทบของตัวแปรดำเนินการที่จะส่งผลต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง จะ ศึกษาร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์และ แก๊สไฮโดรเจน ซึ่งตัวแปรที่เลือกมาศึกษา มีทั้งหมด 4 ตัวแปร คือ ขนาดอนุภาคของแข็ง (Particle diameter) , อัตราส่วนของความสูงเบด เริ่มต้น ต่อเส้นผ่านศูนย์กลางคอล์มน์ (Ratio of initial static bed height to column diameter) อุณหภูมิเชื้อเพลิงแก๊สป้อนเข้า (Syngas temperature) และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าป้อนเข้า (Fluidization velocity) ซึ่งจะมีจำนวนการทดลองทั้งหมด 16 การทดลอง และจะพิจารณาตัวแปร ตอบสนอง (Response surface) ทั้งหมด 2 ตัวแปร คือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊ส คาร์บอนมอนอกไซด์ (Conversion of carbonmonoxide) และ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊ส ไฮโดรเจน (Conversion of hydrogen) ซึ่งผลของตัวแปรดำเนินการและค่าตัวแปรตอบสนองจาก การจำลองปฏิกิริยาเคมี แสดงดังตารางที่ 4.4 พบว่า กรณีที่ 13 ที่ใช้ขนาดอนุภาคของของแข็ง 0.00015เมตร อัตราส่วนระหว่างความสูงเบดเริ่มต้น ต่อ เส้นผ่านศูนย์กลางคอล้มน์ 0.75 เท่า อุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า 873 K และความเร็วแก๊ส 1.5 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิ ไดเซชัน จะให้ได้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์และแก๊สไฮโดรเจนสูงที่สุด และ กรณีที่ 2 ใช้ขนาดอนุภาคของของแข็ง 0.000175 เมตร อัตราส่วนระหว่างความสูงเบดเริ่มต้น ต่อ เส้นผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ 0.75 เท่า อุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิง 773 K และความเร็วแก๊ส 1.25 เท่าของ ความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน จะได้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์และ แก๊สไฮโดรเจนต่ำที่สุด

ตารางที่ 4.4 การออกแบบการทดลองแฟกทอเรียล 2⁴ ของการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการและ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง

		ความสูง			ค่าร้อยละ	ค่าร้อยละการ
		เบดเริ่มต้น			การเปลี่ยน	เปลี่ยนของ
		ในเครื่อง		l'and a start	ของแก๊ส	แก๊สไฮโดรเจน
	ขนาดของ	ปฏิกรณ์	อุณหภูมิแก๊ส	ความเร็วแก๊ส	คาร์บอนมอน	(-)
	อนุภาค	เชื้อเพลิง	เชื้อเพลิง	เชื้อเพลิง	อกไซด์	
กรณี	(micron)	(m)	ป้อนเข้า (K)	ป้อนเข้า(m/s)	(-)	
1	150	0.75D	773	1.25Umf	44.381	42.221
2	175	0.75D	773	1.25Umf	34.462	34.357
3	150	1.0D	773	1.25Umf	69.676	68.746
4	175	1.0D	773	1.25Umf	64.402	60.104
5	150	0.75D	873	1.25Umf	48.781	47.722
6	175	0.75D	873	1.25Umf	84.177	83.855
7	150	1.0D	873	1.25Umf	54.540	53.765
8	175	1.0D	873	1.25Umf	72.622	71.748
9	150	0.75D	773	1.5Umf	72.420	71.775
10	175	0.75D	773	1.5Umf	58.761	73.106
11	150	1.0D	773	1.5Umf	84.054	83.836
12	175	1.0D	773	1.5Umf	63.882	62.514
13	150	0.75D	873	1.5Umf	85.840	85.533
14	175	0.75D	873	1.5Umf	72.802	71.944
15	150	1.0D	873	1.5Umf	85.201	86.591
16	175	1.0D	873	1.5Umf	49.464	48.374

จากนั้นจึงเลือกค่าตัวแปรตอบสนอง ทั้ง 2 ค่า คือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิงทั้งสองชนิด ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนนอกไซด์และ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจน ใน แต่ละกรณีที่ มีค่าสูงสุดและต่ำสุด มาสร้างคอนทัวร์ของโมลฟลักซ์ (Mole flux) ของ แก๊สคาร์บอน มอนนอกไซด์ ที่เวลา 25 วินาที เพื่อเปรียบเทียบกัน ของกรณี 13 และ 2 ดังรูปที่ 4.17





(ก) กรณี 13 คอนทัวร์ของโมลฟลักซ์ของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ พบว่าโมลฟลักซ์ของ แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ที่บริเวณทางออกของเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงมีค่าค่อนข้างลดลงมากจากการ เกิดปฏิกิริยารีดักชันกับโลหะนิกเกิลออกไซด์ บริเวณที่มีสีฟ้าอ่อนที่บริเวณทางออกคือแสดงว่าโมล ฟลักซ์ต่ำหรือ กิโลโมลของคาร์บอนมอนอกไซด์ต่อตารางเมตรวินาทีลดลงมาก แต่ก็ยังมีเหลือหลุด ออกไปจากเครื่องปฏิกรณ์เล็กน้อย อธิบายได้จากผลกระทบร่วมของอุณหภูมิแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้า และความเร็วแก๊สป้อนเข้า เมื่ออุณหภูมิของแก๊สเซื้อเพลิงสูงขึ้นอัตราการเกิดปฏิกิริยาจะมีค่ามากขึ้น และความเร็วแก๊สที่เพิ่มขึ้นทำให้ จำนวนโมลของแก๊สเซื้อเพลิงที่จะทำปฏิกิริยามีค่าสูงขึ้น อธิบายผล ของการเพิ่มความเข้มข้นของคาร์บอนมอนอกไซด์จากแบบจำลองอัตราการเกิดปฏิกิริยาแบบ แกนกลางหดตัวจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงขึ้น และผลของการเพิ่มอุณหภูมิสูงทำให้อัตราการ เกิดปฏิกิริยาเคมีสูง ขณะเดียวกันเมื่อเทียบกับรูปที่ 4.17 (ข) กรณี 2 คอนทัวร์ของโมลฟลักซ์ของ แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ พบว่าโมลฟลักซ์ของคาร์บอนมอนอกไซด์ที่หลุดไปบริเวณทางออกเครื่อง ปฏิกรณ์เชื้อเพลิงมีค่อนข้างมาก สังเกตจากคอนทัวร์ที่เป็นสีฟ้าอ่อนคือแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์มี โมลฟลักซ์ต่ำกว่า 10⁻⁴ กิโลโมลต่อตารางเมตรวินาที นั่นคือแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ที่ทำปฏิกิริยาไม่ หมดหลุดออกไปมากกว่าเมื่อเทียบกับกรณี 13 ซึ่งอธิบายได้จากผลของอนุภาคโลหะนิกเกิลออกไซด์ เมื่ออนุภาคนิกเกิลออกไซด์มีขนาดใหญ่ขึ้นจะทำให้พื้นที่ผิวสัมผัสระหว่างแก๊สและอนุภาคโลหะ ออกไซด์ลดลง ทำให้เกิดปฏิกิริยาได้ไม่ดี

จากตารางที่ 4.5 เป็นการวิเคราะห์ความแปรปรวนของผลกระทบจากตัวแปรดำเนินการ ตัว แปรตอบสนองคือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ จากตารางวิเคราะห์ความ แปรปรวนจะพบว่า ตัวแปรหลักที่มีผลอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ คือ p-value < 0.05 มีตัวแปร ความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้าระบบ (D) อันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ และ ความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้าระบบ (AD) อันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดเริ่มต้นและอุณหภูมิแก๊ส เซื้อเพลิงป้อนเข้า (BC) และอันตรกิริยาร่วมระหว่างขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ อุณหภูมิแก๊ส เซื้อเพลิงป้อนเข้า (BC) และอันตรกิริยาร่วมระหว่างขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ อุณหภูมิแก๊ส เซื้อเพลิงป้อนเข้า (BC) และอันตรกิริยาร่วมระหว่างขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ อุณหภูมิแก๊ส เซื้อเพลิงป้อนเข้า (BC) และอันตรกิริยาร่วมระหว่างขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ อุณหภูมิแก๊ส เชื้อเพลิงป้อนเข้า (BC) และอันตรกิริยาร่วมระหว่างขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ อุณหภูมิแก๊ส เชื้อเพลิงป้อนเข้า (BC) และอันตรกิริยาร่วมระหว่างขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ อุณหภูมิแก๊ส เชื้อเพลิงป้อนเข้า (BC) และอันตรกิริยาร่วมระหว่างขนาดอนุภารงที่ 4.6 เป็นการวิเคราะห์ความ แปรปรวนของผลกระทบจากตัวแปรดำเนินการ ตัวแปรตอบสนองคือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊ส ไฮโดรเจน จะพบว่า ตัวแปรหลักที่มีผลคือ ความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้าระบบ (D) และอันตรกิริยา ระหว่าง ขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ และความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้าระบบ (AD) และอันตร กิริยาร่วมระหว่างขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ อุณหภูมิแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้าและความเร็วแก๊ส เซื้อเพลิงป้อนเข้า (ACD)

	Sum of		Mean	F	
Source	Squares	DF	Square	Value	Prob > F
Model	3704.24	12	308.69	10.39	0.0394
А	139.96	1	139.96	4.71	0.1184
В	96.12	1	96.12	3.24	0.1699
С	259.11	1	259.11	8.72	0.0599
D	655.13	10	655.13	22.05	0.0183
AB	125.89	1	125.89	4.24	0.1317
AC	201.11	1	201.11	6.77	0.0803
AD	868.67	1	868.67	29.24	0.0124
BC	609.63	1	609.62	20.52	0.0201
BD	179.99	1	179.99	6.06	0.0908
CD	81.03	1	81.03	2.73	0.1972
ACD	468.89	5	468.89	15.78	0.0285
BCD	18.7	1	18.70	0.63	0.4855
Residual	89.14	3	29.71		
Cor Total	3793.38	15			

ตารางที่ 4.5 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ เป็นตัวแปรตอบสนอง

> R-Squared 0.9765 Adj R-Squared 0.8825

ตารางที่ 4.6 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนเป็นตัวแปร ตอบสนอง

	Sum of		Mean	F	
Source	Squares	DF	Square	Value	Prob > F
Model	3944.53	13	303.43	9.73	0.0969
A	72.59	1	72.59	2.33	0.2666
С	173.99	1	173.99	5.58	0.1420
D	919.08	1	919.08	29.47	0.0323
AB	273.08	1	273.08	8.76	0.0977
AC	94.65	1	94.65	3.04	0.2236
AD	749.64	1	749.64	24.04	0.0392
BC	424.64	1	424.64	13.62	0.0662
BD	281.74	1	281.74	9.04	0.0951
CD	158.39	1	158.39	5.08	0.1530
ABD	50.63	1	50.63	1.62	0.3306
ACD	657.26	ณมหาว 1 KORN	657.26	21.08	0.0443
BCD	74.23	4	74.23	2.38	0.2628
ABCD	14.61	1	14.61	0.47	0.5644
Residual	62.36	2	31.18		
Cor total	4006.89	15			

R-Squared 0.9844 Adj R-Squared 0.8833







(ค)

รูปที่ 4.18 (ก) ผลของตัวแปรหลัก (ข) ผลของอันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคของโลหะนิกเกิล ออกไซด์ และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า (ค) ผลของอันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดเริ่มต้น และ อุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า

รูปที่ 4.18 (ก) กราฟที่แสดงผลของผลกระทบจากตัวแปรหลักที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการ เปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ ซึ่งพบว่าตัวแปร A ให้ผลเชิงลบ อธิบายได้ว่า การเพิ่มขนาด ้อนุภาคของโลหะออกไซด์จะเป็นการลดพื้นที่ผิวต่อปริมาตรลง จะไปลดพื้นที่ผิวสัมผัสระหว่างแก๊ส เชื้อเพลิงและโลหะออกไซด์ลง ส่งผลให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวง ้ปฏิกิริยาเคมีฝั่งเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงมีค่าลดลง ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ จึงลดลงตามไปด้วย ส่วนผลกระทบจากความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า ความสูงเบดเริ่มต้น และ ้อุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้ามีผลเชิงบวก อธิบายได้ว่า การเพิ่มความเร็วแก๊สขาเข้าจะส่งผลต่อค่า ้อัตราการไหลของสารตั้งต้นที่ทำปฏิกิริยา หากเทียบกับกฎอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี เปรียบเสมือน การเพิ่มความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่ใช้ทำปฏิกิริยา จะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีเพิ่มขึ้น ค่าร้อย ละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ที่ได้จึงมีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า เพิ่มขึ้น ผลของความสูงเบดเริ่มต้นก็อธิบายโดยใช้หลักการเดียวกันกับการเพิ่มปริมาณของสารตั้งต้นที่ ใช้ทำปฏิกิริยา จะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีสูงขึ้น ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊ส คาร์บอนมอนอกไซด์จึงมีค่าเพิ่มขึ้น และตัวแปรสุดท้ายอุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า ซึ่งอุณหภูมิจะมี ผลต่อค่าคงที่ปฏิกริยา เป็นการเพิ่มอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีให้สูงขึ้น ทั้งนี้แนวโน้มผลกระทบของ ตัวแปรหลักในงานวิจัยนี้ยังได้ผลสอดคล้องกับงานวิจัยของ Wang และคณะ [28] ซึ่งได้ศึกษา ผลกระทบของตัวแปรดำเนินการ สองตัวแปร คือ ขนาดอนุภาค และความเร็วแก๊สป้อนเข้า ที่มีผลต่อ สัดส่วนองค์ประกอบของแก๊สสังเคราะห์ที่บริเวณทางออกเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงแบบกะ (Batch fuel reacor) การเพิ่มขนาดอนุภาคโลหะออกไซด์และเพิ่มความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าจะทำให้ค่า ร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิงมีค่าลดลง งานของ Harichandan และคณะ [16] เป็น การศึกษาผลกระทบของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนที่เป็น สารตั้งต้นในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงแบบกะ ได้แนวโน้มเดียวกับงานก่อนหน้า คือ การเพิ่มขนาดโลหะ ้ออกไซด์จะทำให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนมีค่าลดลง และการเพิ่มอุณหภูมิ การเพิ่ม ้ความสูงเบดเริ่มต้นจะทำให้ได้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนเพิ่มขึ้น Wang และคณะ [27] ได้ศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่าสัดส่วนองค์ประกอบของแก๊สผลิตภัณฑ์ที่ทางออก เครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี (Chemical looping combustion) พบว่าการเพิ่ม ความเร็วแก๊สมีเทนจะทำให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สมีเทนลดลง

รูปที่ 4.18 (ข) กราฟแสดงผลกระทบของอันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคของโลหะนิกเกิล ออกไซด์ และความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า ที่ค่าตัวแปร D ผลเชิงบวก และเมื่อค่าตัวแปร A เพิ่มขึ้น จะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์มีค่าลดลง และค่าตัวแปร D ผลเชิงลบ และเมื่อค่าตัวแปร A เพิ่มขึ้นจะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์มีค่าเพิ่มขึ้น ซึ่งอธิบายได้จากผลของขนาดอนุภาคที่มีผลต่อพื้นที่ผิวสัมผัส (Contact area) ระหว่าง แก๊สเชื้อเพลิง และโลหะนิกเกิลออกไซด์ เมื่อเพิ่มขนาดอนุภาคทำให้พื้นที่ผิวสัมผัสลดลง ค่าร้อยละการเปลี่ยนของ แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์จึงลดลง และผลจากความเร็วแก๊สป้อนเข้าถ้าใช้ความเร็วแก๊สป้อนเข้าสูงจะ ทำให้สารตั้งต้นคู่ที่ทำปฏิกิริยากับแก๊สเซื้อเพลิง มีความเข้มข้นสูงขึ้นทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี สูงขึ้น ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์จึงเพิ่มขึ้น

รูปที่ 4.18 (ค) กราฟแสดงผลกระทบของผลของอันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดเริ่มต้น และ อุณหภูมิแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้า ที่ค่าตัวแปร C ผลเชิงบวกและเมื่อค่าตัวแปร B เพิ่มขึ้นจะส่งผลให้ค่า ร้อยละการเปลี่ยนแปลงของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์มีค่าลดลงและค่าตัวแปร C ผลเชิงลบและเมื่อ ค่าตัวแปร B เพิ่มขึ้นจะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์มีค่าเพิ่มขึ้น อธิบาย ได้จากผลของผลของปริมาณของโลหะออกไซด์ทีเพิ่มขึ้นทำให้สารตั้งต้นคู่ที่ทำปฏิกิริยามีปริมาณมาก ขึ้นจากกฎอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีสูงขึ้น ค่าร้อยละการเปลี่ยนของ แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์จึงเพิ่มขึ้น และผลของอุณหภูมิแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้ามีผลต่อค่าคงที่การ เกิดปฏิกิริยาเคมี อุณหภูมิแก๊สป้อนเข้าสูงจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีสูงขึ้น ค่าร้อยละการ เปลี่ยนของแก๊สเซื้อเพลิงจึงมีค่าสูงขึ้นตามไปด้วย



รูปที่ 4.19 (ก) ผลของตัวแปรหลัก (ข) ผลของอันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคของโลหะนิกเกิล ออกไซด์ และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า

รูปที่ 4.19 (ก) กราฟที่แสดงผลของผลกระทบจากตัวแปรหลักที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการ เปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจน ซึ่งพบว่าตัวแปร A ให้ผลเชิงลบ อธิบายได้ว่า การเพิ่มขนาดอนุภาคของ โลหะออกไซด์จะเป็นการลดพื้นที่ผิวต่อปริมาตร และลดพื้นที่ผิวสัมผัสระหว่างแก๊สเซื้อเพลิงและโลหะ ออกไซด์ลง ส่งผลให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีฝั่งเครื่อง ปฏิกรณ์เชื้อเพลิงมีค่าลดลง ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนจึงลดลงตามไปด้วย ส่วน ผลกระทบจากความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้า และอุณหภูมิแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้ามีผลเชิงบวก อธิบาย ได้ว่า การเพิ่มความเร็วแก๊สซาเข้าจะส่งผลค่าอัตราการไหลของสารตั้งต้นที่ทำปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น หาก เทียบกับกฎอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี เปรียบเสมือนการเพิ่มความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่ใช้ทำ ปฏิกิริยา จะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีเพิ่มขึ้น ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนที่ได้จึงมี ค่าเพิ่มขึ้นเมื่อความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้าเพิ่มขึ้น และตัวแปรสุดท้ายอุณหภูมิแก๊สเซื้อเพลิง ป้อนเข้า ซึ่งอุณหภูมิจะมีผลต่อค่าคงที่ปฏิกิริยา เป็นการเพิ่มอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีให้สูงขึ้น

รูปที่ 4.19 (ข) กราฟแสดงผลกระทบของอันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคของโลหะนิกเกิล ออกไซด์ และความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้า ที่ค่าตัวแปร D ผลเชิงบวก และเมื่อค่าตัวแปร A เพิ่มขึ้น จะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนมีค่าลดลง และค่าตัวแปร D ผลเชิงลบ และเมื่อ ค่าตัวแปร A เพิ่มขึ้นจะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์มีค่าเพิ่มขึ้น ซึ่ง อธิบายได้จากผลของขนาดอนุภาคที่มีผลต่อพื้นที่ผิวสัมผัส (Contact area) ระหว่าง แก๊สเซื้อเพลิง และโลหะนิกเกิลออกไซด์ เมื่อเพิ่มขนาดอนุภาคทำให้พื้นที่ผิวสัมผัสลดลง ค่าร้อยละการเปลี่ยนของ แก๊สไฮโดรเจนจึงลดลง และผลจากความเร็วแก๊สป้อนเข้าถ้าใช้ความเร็วแก๊สป้อนเข้าสูงจะทำให้สาร ตั้งต้นคู่ที่ทำปฏิกิริยากับแก๊สเซื้อเพลิง มีความเข้มข้นสูงขึ้นทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีสูงขึ้น ค่า ร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนจึงเพิ่มขึ้น

จากผลการวิเคราะห์ความแปรปรวนนี้นำไปสร้างสมการถดถอยโดยมีค่าตัวแปรตอบสนอง คือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ และ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจน คือ สมการ (4.3) และสมการที่ (4.4) ตามลำดับ และทำการตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลอง ด้วยการหาส่วนตกค้างจากแบบสมการแบบจำลองถดถอย ในภาคผนวก ข3 และ ข4 ซึ่งมีความ ถูกต้องน่าเชื่อถือ เพราะมีการกระจายตัวอย่างไร้รูปแบบ และความแปรปรวนคงที่

$$Y_{3} = 65.15 - 2.96 X_{A} + 2.45 X_{B} + 4.02 X_{C} + 6.4 X_{D} - 2.81X_{A}X_{B} + 3.55 X_{A}X_{C} - 7.37X_{A}X_{D}$$

- 6.17 X_BX_C - 3.35X_BX_D - 2.25X_CX_D - 5.41X_AX_CX_D + 1.08 X_BX_CX_D (4.3)

$$Y_{4} = 65.38 - 2.13 X_{A} + 3.3 X_{C} + 7.58 X_{D} - 4.13 X_{A} X_{B} + 2.43 X_{A} X_{C} - 6.84 X_{A} X_{D} - 5.15 X_{B} X_{C} - 4.2 X_{B} X_{D} - 3.15 X_{C} X_{D} - 1.78 X_{A} X_{B} X_{D} - 6.41 X_{A} X_{C} X_{D} + 2.15 X_{B} X_{C} X_{D} + 0.96 X_{A} X_{B} X_{C} X_{D}$$

$$(4.4)$$

กำหนดให้

Y₃ คือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์

Y4 คือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจน

 $X_A X_B X_C X_D$ คือค่ารหัสเข้าตัวแปร (Coded variable) A B C D

จากกราฟพื้นที่ผิวตอบสนอง (Response surface) ในรูปที่ 4.20 (ก) แสดงผลค่าร้อยละ การเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ เมื่อทำการเปลี่ยนค่าขนาดอนุภาคของโลหะนิกเกิลออกไซด์ และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า พบว่าเมื่อทำการเพิ่มความเร็วแก๊สป้อนเข้าและลดขนาดอนุภาค ของโลหะนิกเกิลออกไซด์ จะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์เพิ่มขึ้น ซึ่ง ้อธิบายได้จากผลอันตกิริยาร่วมระหว่างขนาดอนุภาคและความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงป้อนเข้า คือการลด ขนาดอนุภาคของโลหะนิกเกิลออกไซด์และเพิ่มความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า จะเป็นการเพิ่มความ เข้มข้นของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ที่ใช้ทำปฏิกิริยากับโลหะนิกเกิลออกไซด์ และการลดขนาด ้อนุภาคนิกเกิลออกไซด์จะเพิ่มพื้นที่ผิวสัมผัสระหว่างวัฏภาค ค่าที่สภาวะเหมาะสม ที่ขนาดอนุภาค ้นิกเกิลออกไซด์ 0.00015 เมตร และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า 1.5 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำ ให้เกิดฟลูอิไดเซชันจะให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์สูงที่สุด และกราฟพื้นที่ผิว ตอบสนอง ในรูปที่ 4.20 (ข) แสดงผลค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ เมื่อทำการ เปลี่ยนค่าความสูงเบดเริ่มต้น และ อุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าพบว่าเมื่อเพิ่มความสูงเบดเริ่มต้น และเพิ่มอุณหภูมิแก๊สป้อนเข้าจะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์เพิ่มขึ้น ซึ่งอธิบายได้จากผลอันตกิริยาร่วมระหว่างความสูงเบดเริ่มต้นและอุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า การ เพิ่มอุณหภูมิของแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าจะเป็นการเพิ่มค่าคงที่ปฏิกิริยาทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี สูงและการเพิ่มความสูงเบดเริ่มต้นทำให้สารตั้งต้นที่ใช้ทำปฏิกิริยาเคมีมีปริมาณมากขึ้น ในรูปที่ 4.20



รูปที่ 4.20 พื้นผิวตอบสนองของค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ (ก) เมื่อขนาด อนุภาคของนิกเกิลออกไซด์และความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าแตกต่างกัน (ข) เมื่อความสูงเบด เริ่มต้นและอุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าแตกต่างกัน



รูปที่ 4.21 พื้นผิวตอบสนองของค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจน เมื่อขนาดอนุภาคของ นิกเกิลออกไซด์และความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าแตกต่างกัน

กราฟพื้นที่ผิวตอบสนองรูปที่ 4.21 แสดงผลค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจน เมื่อทำ การเปลี่ยนค่าขนาดอนุภาคของโลหะนิกเกิลออกไซด์และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าผลที่ได้นั้นมี แนวโน้มแบบเดียวกับ ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ นั่นคือ การลดขนาดอนุภาค โลหะนิกเกิลออกไซด์และเพิ่มความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า จะทำให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊ส ไฮโดรเจนมากขึ้น ค่าที่สภาวะเหมาะสม ที่ขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ 0.00015 เมตร และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า 1.5 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชันจะให้ค่าร้อยละ การเปลี่ยนของแก๊สไฮโดรเจนสูงที่สุด

บทที่ 5 สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการวิจัย

การสรุปผลการวิจัยแบ่งออกเป็น 4 ส่วน คือ 1. การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง 2. การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ที่ส่งผลต่อ ดัชนีการผสมในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟอง 3. การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี 4. ศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี ภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง

5.1.1 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส

การหาแบบจำลองคณิตศาสตร์ที่จะใช้อธิบายพฤติกรรมทางอุทกพลศาสตร์ของเครื่อง ปฏิกรณ์ฟลูอิดไดซ์เบดแบบฟองแก๊สได้นั้น จะต้องหาพื้นที่ในการคำนวณที่มีจำนวนเซลล์ 7,500 เซลล์ ซึ่งสามารถใช้ทำนายค่าได้ถูกต้องและใช้เวลาน้อยที่สุด และการหาค่าเฉลี่ยจะเวลาที่ใช้คำนวณเข้าสู่ สภาวะคงตัว 5-20 วินาที เลือกใช้แบบจำลองแรงต้านการเคลื่อนที่ของ Gidaspow drag model ใช้ค่า restitution coefficient between particle and particle เท่ากับ 0.99 restitution coefficient between particle and wall เท่ากับ 1 และค่า specularity coefficient เท่ากับ 0.6 จะคำนวณผลคำนวณเชิงตัวได้ใกล้เคียงกับผลการทดลอง ของ Jung และคณะ (2012) [4] มากที่สุด

Chulalongkorn University

5.1.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameters) ที่ส่งผลต่อดัชนีการผสม ในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส

จากผลการจำลองเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส พบว่ากรณีศึกษาทั้งหมด 16 กรณี กรณีศึกษาที่ให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งที่ต่ำ ที่สุด คือ กรณีศึกษาที่ 14 อนุภาคของแข็งขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.0006 เมตร ความสูงเบดเริ่มต้น ต่อเส้นผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ 0.5 เท่า ความหนาแน่นของแข็ง 2,350 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร ความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน 1.75 เท่า และผลจากการวิเคราะห์ความแปรปรวน พบว่า คุณสมบัติทางกายภาพของของแข็ง ทั้งขนาดอนุภาคและความหนาแน่นของแข็ง ความสูงของแข็ง เริ่มต้น ความเร็วแก๊สป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคและความสูงของแข็งเริ่มต้น อันตร กิริยาระหว่างขนาดอนุภาคและความหนาแน่นของแข็ง อันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคของแข็งและ ความเร็วแก๊สป้อนเข้า และอันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดเริ่มต้นและความเร็วแก๊สป้อนเข้า ทั้งหมด ล้วนมีผลต่อส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในเครื่องปฏิกรณ์ ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊ส และได้สมการถดถอยเชิงเส้นเพื่อความสะดวกในการนำสมการนี้ไปใช้ งานวิจัยในอนาคตต่อไป และจากกราฟพื้นผิวตอบสนอง ของขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางและความ หนาแน่นของนิกเกิลออกไซด์ กรณีที่ต้องการให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตร ของของแข็งในแนวแกนต่ำที่สุด จะต้องเลือกใช้อนุภาคของนิกเกิลออกไซด์ที่มีคุณสมบัติทางกายภาพ ความหนาแน่น 2,600 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร และขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.0006 เมตร จึงจะ ทำให้ดัชนีการผสมของแข็งในแนวแกนมีค่าต่ำที่สุด

สำหรับการผสมของอนุภาคของของแข็งในแนวรัศมี กรณีศึกษาที่ 1 อนุภาคของแข็งขนาด เส้นผ่านศูนย์กลาง 0.0002 เมตร ความสูงเบดเริ่มต้นต่อเส้นผ่านศูนย์กลางคอลัมน์ 0.5 เท่า ความ หนาแน่นของแข็ง 1,300 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร ความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน 1.5 เท่า จะให้ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งที่ต่ำที่สุด และผลจา การวิเคราะห์ความแปรปรวน พบว่าคุณสมบัติทางกายภาพของของแข็ง ทั้งขนาดอนุภาคและความ หนาแน่นของแข็ง ความสูงของแข็งเริ่มต้น อันตรกิริยาระหว่างขนาดอนุภาคและความหนาแน่น ของแข็ง และอันตรกิริยาระหว่างความสูงของแข็งเริ่มต้นและความเร็วแก๊สป้อนเข้า มีผลต่อส่วน เบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็งในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบ ฟองแก๊ส สมการถดถอยเชิงเส้น และกราฟพื้นที่ตอบสนอง ของขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางและความ หนาแน่นของนิกเกิลออกไซด์ กรณีที่ต้องการค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของ ของแข็งในแนวรัศมีต่ำที่สุด จะต้องเลือกใช้อนุภาคของโลหะนิกเกิลออกไซด์ที่มีคุณสมบัติทางกายภาพ ความหนาแน่น 1,300 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร และขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.0002 เมตร จึงจะ ทำให้ดัชนีการผสมของแข็งในแนวแกนมีค่าต่ำที่สุด กรณีที่จะนำไปใช้งานจริงๆในระบบผู้ทำวิจัยเสนอ ้ว่า ควรจะเลือกกรณีศึกษาที่ 14 ไปใช้งาน เพราะจากค่าส่วนส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีจะ พบว่า มีค่าที่น้อยมากในแต่ละกรณีซึ่งเป็นลักษณะเด่นเฉพาะของช่วงการไหลเบดแบบฟองแก๊สอยู่ ้แล้ว ผลต่างของค่าส่วนส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีในแต่ละกรณีมีค่าแตกต่างกันน้อยมากๆ จึง ควรให้ความสำคัญกับดัชนีการผสมในแนวแกนแทน ดังนั้นสรุปสำหรับการเลือกอนุภาคของนิกเกิล ้ออกไซด์ให้ได้ดัชนีการผสมดีที่สุดในการเดินระบบควรเลือกใช้ นิกเกิลออกไซด์ ที่มีสมบัติทางกายภาพ ที่ความหนาแน่น 2,600 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร และขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.0006 เมตร

5.1.3 การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมี

การหาแบบจำลองคณิตศาสตร์ที่จะใช้อธิบายพฤติกรรมทางอุทกพลศาสตร์ของเครื่อง ปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีนั้น จะต้องหาพื้นที่ในการคำนวณที่มีจำนวนเซลล์ 17,732 เซลล์ ซึ่งสามารถใช้ทำนายค่าได้ถูกต้องและใช้เวลาน้อยที่สุด และการหาค่าเฉลี่ยจะเวลาที่ใช้คำนวณเข้าสู่ ภาวะคงตัว 15-25 วินาที เลือกใช้แบบจำลองแรงต้านการเคลื่อนที่ของ Gidaspow drag model ใช้ค่า restitution coefficient between particle and particle เท่ากับ 0.95 restitution coefficient between particle and wall เท่ากับ 0.95 และค่า specularity coefficient เท่ากับ 0.6 จะคำนวณผลคำนวณเชิงตัวได้ใกล้เคียงกับผลการทดลอง ของ Johansson และคณะ (2013) [21] มากที่สุด ผลคำนวณเชิงตัวเลข ความดันลดฝั่งเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงให้ผลที่สอดคล้องกับผล การทดลองในห้องฏิบัติการ แต่ความดันลดตลอดแนวความสูงเครื่องปฏิกรณ์อากาศไม่สอดคล้องกับ ผลการทดลองให้องปฏิบัติการนั้นเป็นเพราะ ผลของการเลือกใช้แบบจำลองแรงต้านระหว่างวัฏภาค (Drag model) หากต้องการจำลองในภาวะที่มีอนุภาคของแข็งระบบอยู่กันอย่างหนาแน่นควร เลือกใช้แบบจำลองแรงต้านการไหล EMMS (energy minimization multiscale)

5.1.4 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่อง ปฏิกรณ์เชื้อเพลิง

จากผลการศึกษาผลกระทบของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี ภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง พบว่า กรณีที่ 13 ขนาดอนุภาคโลหะนิกเกิลออกไซด์ 0.00015 เมตร อัตราส่วนความสูงของแข็งเริ่มต้นต่อ ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางเครื่องปฏิกรณ์ 0.75 อุณหภูมิแก๊ส เชื้อเพลิงป้อนเข้า 873 K และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า 1.5 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิด ฟลูอิไดเซชัน นั้นจะให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิงของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ และ แก๊ส ไฮโดรเจน สูงที่สุด และจากการวิเคราะห์ผลความแปรปรวนเพื่อศึกษา ตัวแปรที่มีผลกระทบต่อค่า ร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเชื้อเพลิง คือ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างขนาด อนุภาคและความเร็วแก๊สเชื้อเพลิง คือ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างขนาด อนุภาคและความเร็วแก๊สเชื้อเพลิง คือ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างขนาด อนุภาคและความเร็วแก๊สเชื้อเพลิง คือ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างขนาด อนุภาคและความเร็วแก๊สเชื้อเพลิง ป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างความสูงเบดเริ่มต้น และ อุณหภูมิแก๊ส เชื้อเพลิง ป้อนเข้าระบบ สำหรับการหาค่าที่ภาวะเหมาะสม เมื่อขนาดอนุภาคของนิกเกิลออกไซด์ และความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้าแตกต่างกัน ที่ขนาดอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ 0.00015 เมตร อัตราส่วน ความสูงเบดเริ่มต้น ต่อขนาดเส้นผ่านศุนย์กลางคอลัมน์ 0.75 เท่า อุณหภูมิแก๊สเชื้อเพลิง ป้อนเข้า 873 K และ ความเร็วแก๊สเชื้อเพลิงป้อนเข้า 1.5 เท่าของความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซ ขันจะให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเซื้อเพลิงสูงที่สุด ทั้งนี้หากพิจารณาสมการ แบบจำลอง แกนกลางหดตัว (shrinking core model) จะพบว่าผลกระทบของตัวแปรหลักนั้นเป็นไปตามตัวแปร ในสมการผลกระทบของตัวแปรหลักในงานวิจัยนี้ยังได้ผลการทดลองที่สอดคล้องกับงานวิจัยของ Wang และคณะ [27] / [28] Harichandan และคณะ [16] Adenz และคณะ [34]

ในการเดินระบบเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง ซึ่งช่วงการไหลอยู่ในช่วงรูปแบบการไหลแบบฟอง แก๊ส (Bubbling bed) นั้น หากต้องการค่าร้อยละการเปลี่ยนที่สูง ผู้ทำวิจัยแนะนำให้ใช้อนุภาคโลหะ ออกไซด์ขนาดเล็ก เพิ่มความเร็วแก๊สเซื้อเพลิงและเพิ่มอุณหภูมิแก๊สเซื้อเพลิงที่ป้อนเข้าระบบ

5.2 ข้อเสนอแนะ

งานวิจัยนี้เป็นการจำลองอุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิไดซ์เบดแบบฟองแก๊สเพื่อ ศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่าดัชนีการผสมในแนวแกนและแนวรัศมี นั้นอาจต้องทำ การจำลองเป็นระบบ 3 มิติ เพื่อที่จะนำผลที่ได้มาเปรียบเทียบกันระหว่างผลการจำลองในระบบ 2 มิติ และ 3 มิติว่ามีความแตกต่างกันของผลของตัวแปรดำเนินการมากน้อยเพียงใด ส่วนผลการ จำลองเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีนั้น เนื่องมากความยุ่งยากซับซ้อนในการสร้าง แบบจำลอง 3 มิติ และการใช้เวลาในการคำนวณที่ใช้เวลานาน ผู้วิจัยจึงเลือกที่จะจำลองในระบบ 2 มิติแทน การจำลองในระบบ 2 มิตินี้ไม่ได้คิดผลกระทบที่เกิดขึ้นกับการทำงานของไซโคลนจริงๆ โดยอาจจะส่งผลกระทบต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนของแก๊สเซื้อเพลิงได้ ในการพัฒนางานวิจัยนี้ให้ สมบูรณ์มากขึ้นจึงควรทำการจำลองเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีในระบบ3มิติเพื่อ เปรียบเทียบผลของตัวแปรดำเนินการว่าแตกต่างกับ 2 มิติ

> จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย Chulalongkorn University

รายการอ้างอิง

- Stolten, D. and V. Scherer, *Efficient carbon capture for coal power plants*, ed.
 Edition. 2011, Weinheim: John Wiley & Sons. 640
- 2. Versteeg, H.K. and W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamic*. 2 ed. 2007, England: Pearson Education. 503.
- 3. Loha, C., H. Chattopadhyay, and P.K. Chatterjee, *Assessment of drag models in simulating bubbling fluidized bed hydrodynamics.* Chemical Engineering Science, 2012. 75(0): p. 400-407.
- Jung, J., D. Gidaspow, and I.K. Gamwo, Measurement of Two Kinds of Granular Temperatures, Stresses, and Dispersion in Bubbling Beds. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2005. 44(5): p. 1329-1341.
- 5. Li, B., et al., *Advances in CO2 capture technology: A patent review.* Applied Energy, 2013. 102(0): p. 1439-1447.
- 6. Fan, L.S., *Chemical looping systems for fossil energy conversions*. 2010, New Jersey: John Wiley & Sons. 448.
- 7. Ryden, M., et al., *NiO supported on Mg-ZrO2 as oxygen carrier for chemicallooping combustion and chemical-looping reforming.* Energy & Environmental Science, 2009. 2(9): p. 970-981.
- Montgomery, D.C., DESIGN AND ANALYSIS OF EXPERIMENTS. 5 th ed. 2001: John Wiley & Sons. 680.
- Patra, C., CFD SIMULATIONS OF FLUIDIZED BED BIOMASS GASIFICATION, in Chemical Engineering. 2010, National Institute of Technology, Rourkela. p. p. 81.
- 10. Dogan, T., et al., Simulation of Laminar Pipe Flows : Mechanics of Fluids and Transport Processes CFD PRELAB 1, T.U.o. Iowa, Editor. 2010.
- Patankar, S.V., Numerical Heat transfer and fluid flow. computational methods in mechanics and thermal sciences. 1980, New York: McGRAW-HILL BOOK COMPANY. 205.
- Shuai, W., et al., *Hydrodynamic simulation of fuel-reactor in chemical looping combustion process.* Chemical Engineering Research and Design, 2011. 89(9):
 p. 1501-1510.
- Wang, S., et al., Simulation of the Chemical Looping Reforming Process in the Fuel Reactor with a Bubble-Based Energy Minimization Multiscale Model. Energy & Fuels, 2013. 27(8): p. 5008-5015.
- Esmaili, E. and N. Mahinpey, Adjustment of drag coefficient correlations in three dimensional CFD simulation of gas-solid bubbling fluidized bed.
 Advances in Engineering Software, 2011. 42(6): p. 375-386.
- Yas, Mixing Patterns and Residence Time Determination in a Bubbling Fluidized Bed System. American Journal of Engineering and Applied Sciences, 2012. 5(2): p. 170-183.
- Harichandan, A.B. and T. Shamim, CFD analysis of bubble hydrodynamics in a fuel reactor for a hydrogen-fueled chemical looping combustion system.
 Energy Conversion and Management, 2014. 86(0): p. 1010-1022.
- Deng, Z., et al., Numerical simulation of chemical looping combustion process with CaSO4 oxygen carrier. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2009. 3(4): p. 368-375.
- Sharma, A., et al., CFD modeling of mixing/segregation behavior of biomass and biochar particles in a bubbling fluidized bed. Chemical Engineering Science, 2014. 106(0): p. 264-274.
- 19. Mahalatkar, K., et al., *CFD simulation of a chemical-looping fuel reactor utilizing solid fuel.* Chemical Engineering Science, 2011. 66(16): p. 3617-3627.
- 20. Guan, Y., et al., *Three-dimensional CFD simulation of hydrodynamics in an interconnected fluidized bed for chemical looping combustion.* Powder Technology, 2014. 268(0): p. 316-328.
- Johansson, E., et al., Gas leakage measurements in a cold model of an interconnected fluidized bed for chemical-looping combustion. Powder Technology, 2003. 134(3): p. 210-217.

- Shuai, W., et al., *Fluid dynamic simulation in a chemical looping combustion with two interconnected fluidized beds.* Fuel Processing Technology, 2011.
 92(3): p. 385-393.
- 23. FLUENT User's Guide, in FLUENT. 2003.
- 24. Kolbeinsen, L., et al., *Chemical Looping Combustion Reduction of nickel oxide/nickel aluminate with hydrogen.* 2003.
- 25. Escudero, D.R., *Bed height and material density*, in *Mechanical engineering*.2010, Iowa State University. p. 117.
- Wang, X., et al., Multiphase Computational Fluid Dynamics (CFD) Modeling of Chemical Looping Combustion Using a CuO/Al2O3Oxygen Carrier: Effect of Operating Conditions on Coal Gas Combustion. Energy & Fuels, 2011. 25(8): p. 3815-3824.
- Wang, S., et al., Numerical Simulation of Hydrogen Production via Chemical Looping Reforming in Interconnected Fluidized Bed Reactor. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2014. 53(11): p. 4182-4191.
- Wang, X., et al., *Three-dimensional simulation of a coal gas fueled chemical looping combustion process.* International Journal of Greenhouse Gas Control, 2011. 5(6): p. 1498-1506.
- 29. Bustamante, F., et al., *High-temperature kinetics of the homogeneous reverse water-gas shift reaction.* AIChE Journal, 2004. 50(5): p. 1028-1041.
- 30. Galvita, V.V., et al., *Catalyst-assisted chemical looping for CO2 conversion to CO.* Applied Catalysis B: Environmental, 2015. 164(0): p. 184-191.
- 31. Jin, G.T., et al., *GAS AND SOLID MIXING IN A THREE PARTITIONED FLUIDIZED BED*, in *The* 13 *th International Conference on Fluidization - New Pardigm in Fluidization Engineering*. 2010.
- 32. Gullichsen, J., *Combined fluidizing and vacuum pump*. 1988, Google Patents.
- Byron SImtj R J , M.L., Murthy Shekhar Shantha, A Review of the Water Gas
 Shift Reaction Kinetics. International Journal of Chemical Reactor Engineering,
 2010. 8.
- 34. Adánez, J., et al., Chemical Looping Combustion in a 10 kWth Prototype Using a CuO/Al2O3 Oxygen Carrier: Effect of Operating Conditions on Methane

Combustion. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2006. 45(17): p. 6075-6080.



จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย Chulalongkorn University



ภาคผนวก ก

การคำนวณความเร็วที่น้อยที่สุดที่ทำให้เกิดช่วงการไหลแบบปั่นป่วน (Minimum turbulent fluidization velocity : U_c)

$$\frac{U_c}{\sqrt{gd_p}} = \left(\frac{\mu_{f20}}{\mu_f}\right)^{0.2} \left[K\left(\frac{\rho_{f20}}{\rho_f}\right) \left(\frac{\rho_{p-\rho_f}}{\rho_f}\right) \left(\frac{D_f}{d_p}\right) \right]^{0.27}$$
$$K = \left[\left(\frac{0.211}{D_f^{0.27}}\right) + \frac{2.42x10^{-3}}{D_f^{1.27}} \right]^{1/0.27}$$

คือ ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของเครื่องปฏิกรณ์ (เมตร) D_f คือ ความหนาแน่นของของแก๊ส ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร) ρ_{f20} คือ ความหนืดของของแก๊ส ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที) μ_{f20} คือ ความหนาแน่นของของแก๊ส ที่อุณหภูมิดำเนินการ (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร) ρ_f คือ ความหนืดของของแก๊ส ที่อุณหภูมิดำเนินการ (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที) μ_f คือ ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค (เมตร) d_p คือ ความหนาแน่นของอนุภาค (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร) ρ_p คือ ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค (เมตรต่อวินาทีกำลังสอง) g

ที่อุณหภูมิ 773 K
$$\mu_f$$
 = 3.62×10^{-5} กิโลกรัมต่อเมตรวินาที
 μ_{f20} = 1.8×10^{-5} กิโลกรัมต่อเมตรวินาที
 ρ_p = 2,600 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร
 ρ_{f20} = 1.17 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร
 ρ_f = 0.452443 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร
 d_p = 150×10^{-6} เมตร
 \mathbf{g} = 9.8 เมตรต่อวินาทีกำลังสอง
 D_f = 0.19 เมตร

$$\mathbf{K} = \left[\left(\frac{0.211}{0.19^{0.27}} \right) + \frac{2.42 \times 10^{-3}}{0.19^{1.27}} \right]^{1/0.27}$$

$$\frac{U_c}{\sqrt{9.8x150x10^{-6}}} = \left(\frac{1.8}{3.62}\right)^{0.2} \left[K\left(\frac{1.17}{0.452443}\right) \left(\frac{2600 - 0.452443}{0.452443}\right) \left(\frac{0.19}{150x10^{-6}}\right) \right]^{0.27}$$

$$U_c = 1.0769012 \text{ m/s}$$

การคำนวณความเร็วต่ำสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิไดเซชัน (Minimum fluidization velocity : U_{mf})

$$u_{mf} = \frac{\left(\phi d_p\right)^2}{150\mu} g(\rho_p - \rho_f) \frac{\epsilon_{mf}^3}{1 - \epsilon_{mf}}$$
$$Re = \frac{\rho_f d_p U}{\mu_f} < 10$$

- Ø = คือ ค่าความกลมของอนุภาค Sphericity (ไร้หน่วย)
- dp คือ ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค (เมตร)
- ho_{p} คือ ความหนาแน่นของอนุภาค (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร)

 ho_f คือ ความหนาแน่นของแก๊ส (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร)

 $igoplus_{mf}$ คือ สัดส่วนช่องว่างโดยปริมาตร (ไร้หน่วย)

μ_f คือ ความหนืดของของแก๊ส ที่อุณหภูมิดำเนินการ (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที)

U คือ ความเร็วแก๊สป้อนเข้า (เมตรต่อวินาที)

$$u_{mf} = \frac{(1x0.0000150)^2}{150x0.000018} x9.8x(2600 - 1.17) \frac{0.45^3}{1 - 0.45}$$

$$u_{mf} = 0.0785 \text{ m/s}$$





รูปที่ ข1(ก) กราฟความน่าจะเป็นแบบปกติของส่วนตกค้าง (ข) กราฟความสัมพันธ์ระหว่างส่วน ตกค้างกับค่าทำนายได้จาก สมการ (4.1)



รูปที่ ข2(ก) กราฟความน่าจะเป็นแบบปกติของส่วนตกค้าง (ข) กราฟความสัมพันธ์ระหว่างส่วน ตกค้างกับค่าทำนายได้จาก สมการ (4.2)



รูปที่ ข3(ก) กราฟความน่าจะเป็นแบบปกติของส่วนตกค้าง (ข) กราฟความสัมพันธ์ระหว่างส่วน ตกค้างกับค่าทำนายได้จาก สมการ (4.3)



รูปที่ ข4(ก) กราฟความน่าจะเป็นแบบปกติของส่วนตกค้าง (ข) กราฟความสัมพันธ์ระหว่างส่วน ตกค้างกับค่าทำนายได้จาก สมการ (4.4)

ภาคผนวก ค

้โปรแกรมเพิ่มเติมที่ใช้ในการจำลองภาวะบนโปรแกรม ANSYS FLUENT 6.3.26

งานวิจัยในส่วนนี้เป็นการจำลองภาวะของเครื่องปฏิกรณ์เผาไหม้แบบวงปฏิกิริยาเคมีในส่วน ของการคำนวณปฏิกิริยาเคมีนั้น สำหรับในงานวิจัยนี้จะมีทั้ง ปฏิกิริยาเคมีแบบวิวิธพันธ์ และปฏิกิริยา เคมีแบบเอกพันธ์ ซึ่งจะทำการเขียนฟังก์ซันเพิ่มเติม ในส่วนของปฏิกิริยาที่ 1 2 3 และ 4 ที่กล่าวไว้ ในบทที่ 3 ในการจำลองการเกิดปฏิกิริยาเคมีด้วยโปรแกรม ANSYS FLUENT ผู้ใช้งานสามารถเขียน คำสั่ง และสมการนอกเหนือจากสมการพื้นฐานที่มีอยู่ในโปรแกรม ลงไปในโปรแกรมให้ทำการคำนวณ อัตราการเกิดปฏิริยาเคมีได้

โปรแกรมที่ผู้ใช้งานเขียนขึ้นมาจะเรียกว่า User Define Function หรือ UDF ซึ่งการเขียน จะเขียนโดยใช้ภาษา C และใช้ฟังก์ชันที่ โปรแกรม ANSYS FLUENT กำหนดไว้อยู่ก่อนแล้ว ซึ่งคำสั่ง เหล่านี้จะถูกเก็บไว้ใน udf.h ดังนั้นทุกครั้งที่ต้องการใช้คำสั่งจะต้องเขียนคำสั่ง #include udf.h ขึ้น ต้นหัวข้อแฟ้ม UDF ทุกครั้ง ผู้ใช้สามารถเขียน UDF จากโปรแกรมแก้ไขข้อความ (Text Editor) หรือ โปรแกรมที่ใช้แปลโปรแกรมภาษา ซี (Dev C++) และต้องบันทึกแฟ้มนามสกุล C เช่น code _a.c หลังจากนั้นจะนำไปแปลโปรแกรม (Interpreted) ให้อยู่ในรูปของ udfconfig ซึ่งเป็น C Header File รายละเอียดการใช้งานนั้นสามารถศึกษาได้จาก คู่มือ Fluent User's Guide

ขั้นตอนการแปลโปรแกรมของรหัสต้นฉบับ

 สร้างแฟ้มรหัสต้นฉบับของ UDF ใน Directory เดียวกับแฟ้มที่ใช้ดำเนินงานของ ANSYS FLUENT 6.3.26

2. เริ่มโปรแกรม ANSYS FLUENT ภายใน Directory เดียวกับแฟ้ม UDF

3. โหลดแฟ้มที่ต้องการใช้งานเข้าสู่โปรแกรม Fluent

 เปิดหน้าต่างการแปลโปรแกรม UDF (Interpreted UDF) ในโปรแกรม ANSYS FLUENT
 Define → User-Defined → Functions → Interpreted
 เลือกแฟ้มรหัสต้นฉบับที่หน้าต่าง Interpreted UDFs (รูปที่ ค1) โดยกดปุ่ม Browse ที่จะเป็น การเปิดหน้าต่างเลือกแฟ้ม (Select File) ขึ้นมา (รูปที่ ค2)

Interpreted UDFs
Source File Name
D:\GOLF_Thesis_Fuel_t Browse
CPP Command Name
срр
Stack Size
Display Assembly Listing
✓ Use Contributed CPP
Interpret Close Help

รูปที่ ค1 หน้าต่างการแปลโปรแกรม UDF (Interpreted UDFs)

Select File					X
Look in:	🔒 ad		•	🗈 💣 🎟	
Ga	Name	<u>^</u>	Date modifi	ied Type	
Recent Places	code_ad.c		7/4/2558 1	14:27 C File	•
Desktop					
Libraries					
Computer					
Network					
	<	m			
	UDF Source File	code_ad		•	ОК
	Files of type:	UDF Source Files		▼	Cancel

รูปที่ ค2 หน้าต่างเลือกแฟ้ม (Select File)

6. เลือกแฟ้มที่ต้องการแปลโปรแกรม รหัสต้นฉบับ UDF แล้วกด Interpreted

 หลังจากทำการแปลแฟ้มรหัส และนำเข้ามาเรียบร้อยแล้ว ผู้ใช้สามารถเรียกใช้งาน User define function จากหน้าต่างในโปรแกรม ANSYS FLUENT ในงานวิจัยนี้จะทำการกำหนดค่า อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี และค่าคงที่ของปฏิกิริยาเคมีแบบวิวิธพันธ์โดยเลือกจาก

Define ----> Phase ----> Interaction

และทำการกำหนดสมการฏิกิริยาเคมีแบบวิวิธพันธ์ในหน้าต่าง Phase Interaction (รูป ค3) เลือก Reactions และทำการใส่สมการปฏิกิริยาเคมีลงไป ในส่วนของ Reaction Rate Function ให้เลือก แฟ้มรหัสที่เราทำการแปล โปรแกรม UDF ไว้ เช่น ปฏิกิริยาเคมีแบบวิวิธพันธ์แสดงดังปฏิกิริยาที่ (1) (2) (3) และ (4) โดยปฏิกิริยาที่ (1) เลือกแฟ้มรหัสเป็น Rate_CO ปฏิกิริยาที่ (2) เลือกแฟ้มรหัสเป็น Rate_H2 ปฏิกิริยาที่ (3) เลือกแฟ้มรหัสเป็น Rate_NiO และปฏิกิริยาที่ 4 เลือกแฟ้มรหัสเป็น Rate_Water_Gas

$H_2(g) + NiO(s) \longrightarrow Ni(s) + H_2O(g)$	ปฏิกิริยา (1)
$\Delta H_{r1} = -2.1 kJ / mol$	
$CO(g) + NiO(s) \longrightarrow Ni(s) + CO_2(g)$	ปฏิกิริยา (2)
$\Delta H_{r2} = -43.3 kJ / mol$	
$O_2(g) + 2Ni(s) \longrightarrow 2NiO(s)$	ปฏิกิริยา (3)
$\Delta H_{r2} = -479 kJ / mol$	64
$CO(g) + H_2O(g) \longrightarrow CO_2(g) + H_2(g)$	ปฏิกิริยา (4)
$\Delta H_{r4} = -41.09 \ kJ \ / \ mol$	

้โดยสมการอัตรการเกิดปฏิกิรยาเคมี และค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาเคมีแสดงตามลำดับดังนี้

$$(-r)_{j} = \frac{\alpha_{p} Y_{NiO}}{r_{g,NiO}} k_{j} C^{n} \quad (mol \ m^{-3} s^{-1})$$

โดย j, C , n และ r_sสัญลักษณ์เหล่านี้คือ จำนวนของปฏิกิริยาเคมี (j=1,2,3,4) , ความเข้มข้นของแก๊ส เชื้อเพลิง , อันดับของปฏิกิริยา (Order of reaction)และรัศมีเฉลี่ยของอนุภาคนิกเกิลออกไซด์ ตามลำดับ และค่าคงที่การเกิดปฏิกิริยานั้นสมมุติว่าให้เป็นไปตามสมการ Arrhenius ขึ้นกับอุณหภูมิ **α**_Pสัดส่วนโดยปริมาตรของของแข็ง และ Y_iคือ สัดส่วนโดยโมลของโลหะออกไซด์

	H ₂	СО	O ₂
$k_0 (mol^{1-n}m^{3n-2}s^{-1})$	0.15	0.059	0.84
E ₀ (kJ/mol) 5		5	22
n 0.4		0.6	0.7

แฟ้มรหัสที่ใช้ในการคำนวณค่าอัตราการการเกิดปฏิกิริยาเคมี และค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาเคมีใน งานวิจัยนี้ แสดงดังรูปที่ ค4 ค5 ค6 และ ค7

Phase Interaction	din a a a			X	
🗌 Virtual Mass					
Drag Lift Collisions Slip He	eat Mass	Reactions	Surface Tension		
Total Number of Heterogeneous Reaction	ons 4 🔺				
Reaction Name Rate_CO	D 1 🔺				
Number of Reactants 2	N	lumber of Pr	oducts 2		
Phase Species Sta Co	oich. Defficient	Phase	Species	Stoich. Coefficient	
tp v co v 1		tp	• co2	• 1	
ts v nio v 1		ts	▼ ni	• 1 ·	
Reaction Rate Function Rate_CO					
OK Cancel Help					

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

รูปที่ ค3 หน้าต่างในการเพิ่มสมการปฏิกิริยาแบบวิวิธพันธ์ (Phase Interaction)

```
#include"udf.h"
DEFINE_HET_RXN_RATE(Rate_CO,c,t,hr,mw,yi,rr,rr_t)
£
Thread**pt = THREAD_SUB_THREADS(t);
Thread *tp = pt[0];
Thread *ts = pt[1];
real MW_ox_NiO,MW_red_Ni,m_ox,m_red,m,x_CO,MW_O2,X,a,dp ;
real T = C_T(c,tp);
MW_ox_NiO = 74.6928;
MW_red_Ni = 58.6934;
MW_02 = 32.0;
dp = C_PHASE_DIAMETER(c,ts);
*rr = 0.0;
a = 0.059*exp(-5000/8.314/T);
 m_ox = C_R(c,ts)*C_VOF(c,ts)*C_VOLUME(c,ts)*(yi[1][0]+yi[1][1]*MW_ox_NiO/MW_red_Ni);
m_red =C_R(c,ts)*C_VOF(c,ts)*C_VOLUME(c,ts)*(yi[1][0]*MW_red_Ni/MW_ox_NiO+yi[1][1]);
 m = C_R(c,ts) *C_VOF(c,ts) *C_VOLUME(c,ts) *(yi[1][0]+yi[1][1]);
X=0.0;
X= (m-m_red)/(m_ox-m_red);
x_CO = C_R(c,tp)*C_VOF(c,tp)*yi[0][0]/28.0*1000;
if(C_VOF(c,ts)>1e-6&& (X)>0.0)
*rr=a*pow((x_C0),(0.6))*C_VOF(c,ts)*(yi[1][0]/MW_ox_NiO)/dp/2/1000;
else *rr=0.0;
}
```

รูปที่ ค4 แสดงแฟ้มรหัสที่ใช้ในการคำนวณค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี และค่าคงที่ของการ

```
เกิดปฏิกิริยา Rate CO
```

```
DEFINE_HET_RXN_RATE(Rate_H2,c,t,hr,mw,yi,rr,rr_t)
{
Thread**pt = THREAD_SUB_THREADS(t);
Thread *tp = pt[0];
Thread *ts = pt[1];
real MW_ox_NiO,MW_red_Ni,m_ox,m_red,m,x_H2,MW_O2,X,a ,dp;
real T = C_T(c,tp);
MW_ox_NiO = 74.6928;
MW_red_Ni = 58.6934;
MW 02 = 32.0;
dp = C_PHASE_DIAMETER(c,ts);
*rr = 0.0;
a = 0.15 * exp(-5000/8.314/T);
 m_ox = C_R(c,ts)*C_VOF(c,ts)*C_VOLUME(c,ts)*(yi[1][0]+yi[1][1]*MW_ox_NiO/MW_red_Ni);
m_red =C_R(c,ts)*C_VOF(c,ts)*C_VOLUME(c,ts)*(yi[1][0]*MW_red_Ni/MW_ox_NiO+yi[1][1]);
 m = C_R(c,ts) *C_VOF(c,ts) *C_VOLUME(c,ts) *(yi[1][0]+yi[1][1]);
X=0.0;
X= (m-m_red) / (m_ox-m_red);
x_H2 = C_R(c,tp)*C_VOF(c,tp)*yi[0][1]/2*1000;
if(C_VOF(c,ts)>1e-6ss (X)>0.0)
*rr=a*pow((x_H2),(0.4))*C_VOF(c,ts)*(yi[1][0]/MW_ox_NiO)/dp/2/1000;
else *rr=0.0;
- }
  รูปที่ ค5 แสดงแฟ้มรหัสที่ใช้ในการคำนวณค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี และค่าคงที่ของการ
```

```
เกิดปฏิกิริยา Rate H2
```

```
DEFINE_HET_RXN_RATE(Rate_NiO,c,t,hr,mw,yi,rr,rr_t)
    Thread**pt = THREAD SUB THREADS(t);
    Thread *tp = pt[0];
   Thread *ts = pt[1];
   real MW_ox_NiO,MW_red_Ni,m_ox,m_red,m,x_02,MW_02,X,a,dp ;
   real T = C_T(c,tp);
MW_ox_NiO = 74.6928;
   MW_red_Ni = 58.6934;
   MW 02 = 32.0;
    dp = C_PHASE_DIAMETER(c,ts);
    *rr = 0.0;
    a = 0.84*exp(-22000/8.314/T);
    m_ox = C_R(c,ts) *C_VOF(c,ts) *C_VOLUME(c,ts) *(yi[1][1]+yi[1][0] *MW_red_Ni/MW_ox_NiO);
m_red =C_R(c,ts) *C_VOF(c,ts) *C_VOLUME(c,ts) *(yi[1][1] *MW_ox_NiO/MW_red_Ni+yi[1][0]);
    m = C_R(c,ts) *C_VOF(c,ts) *C_VOLUME(c,ts) *(yi[1][0]+yi[1][1]);
    X=0.0;
   X= (m-m_red) / (m_ox-m_red);
   x_02 = C_R(c,tp) *C_VOF(c,tp) *yi[0][2]/32.0*1000;
    if (C VOF(c,ts)>1e-666 (X)>0.0)
    *rr=a*pow((x_02),(0.7))*C_VOF(c,ts)*(yi[1][1]/MW_red_Ni)/dp/2/1000;
    else *rr=0.0;
    รูปที่ ค6 แสดงแฟ้มรหัสที่ใช้ในการคำนวณค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี และค่าคงที่ของการ
                                   เกิดปฏิกิริยา Rate NiO
DEFINE_HET_RXN_RATE(Rate_Water_Gas,c,t,hr,mw,yi,rr,rr_t)
Thread **pt = THREAD SUB THREADS(t);
Thread *tp = pt[0]; /* gas phase */
real T = C_T(c,tp);
real k , K_eq , x_H2 , x_CO , x_H2O , x_CO2;
*rr = 0.0;
k = 2.17E + 7 \exp(-192900./8.314/T);
K_eq = exp(-4.33+4577.8/T);
x_H2 = C_R(c,tp)*C_VOF(c,tp)*yi[0][1]/2.0; /*Cencentration of C0 in kmol/m3*/
x_CO = C_R(c,tp)*C_VOF(c,tp)*yi[0][0]/28.0; /*Cencentration of CO in kmol/m3*/
x_CO2 = C_R(c,tp)*C_VOF(c,tp)*yi[0][3]/44.0; /*Concentration of H20 in kmol/m3*/
x_H2O = C_R(c,tp)*C_VOF(c,tp)*yi[0][4]/18.0; /*Concentration of H2O in kmol/m3*/
*rr= (-k*x CO2*pow(x H2,0.5))+(k/K eq*x CO*x H2O);
```

{

3

รูปที่ ค7 แสดงแฟ้มรหัสที่ใช้ในการคำนวณค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี และค่าคงที่ของการ

```
เกิดปฏิกิริยาRate Water Gas
```

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นายรติกร ศรอำพล เกิดเมื่อวันอังคารที่ 26 มกราคม พ.ศ. 2531 สำเร็จการศึกษา ปริญญาตรีวิศวกรรมศาสตร์บัณฑิต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัย พระจอมเกล้าธนบุรี ในปีการศึกษา 2552 และเข้าศึกษาต่อในหลักสูตรวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาเคมีเทคนิค ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เมื่อ พ.ศ. 2555



จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย Chulalongkorn University