

การจำลองซีเอฟดีของเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง



นางสาวพริยา ไหลอาภาธร

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาเคมีเทคนิค ภาควิชาเคมีเทคนิค

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อและแฟ้มข้อมูลฉบับเต็มของวิทยานิพนธ์ตั้งแต่ปีการศึกษา 2554 ที่ให้บริการในคลังปัญญาจุฬาฯ (CUIR)

ปีการศึกษา 2556

เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตภาควิชาเคมีเทคนิค จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

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.

CFD SIMULATION OF AIR REACTOR IN CHEMICAL LOOPING COMBUSTION

Miss Piriya Laiapatorn

The logo of Chulalongkorn University, featuring a central emblem with a sunburst and a tiered structure, set against a light background.

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

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 2013

Copyright of Chulalongkorn University

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การจำลองซีเอฟดีของเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง
โดย	นางสาวพิริยา ไหลอาภาธร
สาขาวิชา	เคมีเทคนิค
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก	ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เบญจพล เฉลิมสินสุวรรณ
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม	รองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้บัณฑิตวิทยาลัยเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

.....คณบดีคณะวิทยาศาสตร์
(ศาสตราจารย์ ดร. สุพจน์ หารหนองบัว)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

.....ประธานกรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร. เกี้ยวลี พุกษาทร)
.....อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เบญจพล เฉลิมสินสุวรรณ)
.....อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม
(รองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์)
.....กรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ประพันธ์ คูชลธारा)
.....กรรมการภายนอกมหาวิทยาลัย
(อาจารย์ ดร. บุญรอด สัจกุลนุกิจ)

พิธียา ไหลอากาศ : การจำลองซีเอฟดีของเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง. (CFD SIMULATION OF AIR REACTOR IN CHEMICAL LOOPING COMBUSTION) อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: ผศ. ดร. เบญจพล เฉลิมสินสุวรรณ, อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม: รศ. ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์, 81 หน้า.

ปัจจุบัน ปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์ที่ถูกปล่อยออกสู่บรรยากาศเป็นสาเหตุหลักของปัญหาโลกร้อนโดยมีสาเหตุหลักหนึ่งมาจากการเผาไหม้ภายในภาคอุตสาหกรรม กระบวนการเคมีคอลลูบิงจึงเป็นทางเลือกหนึ่งที่มีความเหมาะสมต่อการจับยึดคาร์บอนไดออกไซด์ก่อนปล่อยออกสู่บรรยากาศ ในงานวิจัยนี้ ทำการศึกษาหาแบบจำลองอุทกพลศาสตร์และปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเคมีคอลลูบิงที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.0762 เมตรและความสูง 6.1 เมตร ด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณในระบบสองมิติ เปรียบเทียบกับผลการทดลองจริง จากนั้นวิเคราะห์ตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่ออุทกพลศาสตร์และปฏิกิริยาเคมีด้วยวิธีการออกแบบการทดลอง ผลจากการศึกษาพบว่า แบบจำลอง EMMS ที่มีค่า specularity coefficient เท่ากับ 0.5 และค่า restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็งเท่ากับ 0.97 ให้ผลการจำลองใกล้เคียงกับการทดลองจริงมากที่สุด และผลของตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่อค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรรวมของอนุภาคของแข็งคือ ชนิดของอนุภาคของแข็ง อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง ความเร็วแก๊สป้อนเข้า และอันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งกับความเร็วก๊าซป้อนเข้า ตัวแปรที่ส่งผลกระทบต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีคือ ชนิดของอนุภาคของแข็ง ความเร็วแก๊สป้อนเข้า และอันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งกับความเร็วก๊าซป้อนเข้า และตัวแปรที่ส่งผลกระทบต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนมีเพียงตัวแปรเดียวคือ ความเร็วแก๊สป้อนเข้า การเกิดปฏิกิริยาเคมีระหว่างโลหะกับออกซิเจนกลายเป็นโลหะออกไซด์โดยใช้แบบจำลองแกนกลางหดตัว (shrinking core model) ที่มีความสัมพันธ์แบบอาร์เรเนียสของการแพร่และปฏิกิริยาเคมี (Arrhenius diffusion and reaction) ให้ผลที่สอดคล้องกับผลการทดลองจริงมากที่สุด โดยพบว่า ชนิดของอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิ ความเร็วแก๊สป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งและอุณหภูมิ อันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างอุณหภูมิและความเร็วแก๊สป้อนเข้า และอันตรกิริยาร่วมระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิและความเร็วแก๊สป้อนเข้า ส่งผลกระทบต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนของออกซิเจน โดยภาวะที่เหมาะสมทางอุทกพลศาสตร์และส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนของออกซิเจนมากที่สุดคือ อนุภาคของแข็งชนิดนิกเกิล ที่มีอัตราการไหลหมุนเวียนของอนุภาคของแข็ง 300 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาที ณ อุณหภูมิ 1273 เคลวินและความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาที

ภาควิชา	เคมีเทคนิค	ลายมือชื่อนิสิต
สาขาวิชา	เคมีเทคนิค	ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก
ปีการศึกษา	2556	ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม

5572065523 : MAJOR CHEMICAL TECHNOLOGY

KEYWORDS: COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS / CHEMICAL LOOPING
COMBUSTION / OPERATING PARAMETER / MULTIPHASE FLOW

PIRIYA LAIAPATORN: CFD SIMULATION OF AIR REACTOR IN CHEMICAL LOOPING COMBUSTION. ADVISOR: ASST. PROF. BENJAPON CHALERMSINSUWAN, Ph.D., CO-ADVISOR: ASSOC. PROF. PORNPOTE PIUMSOMBOON, Ph.D., 81 pp.

Nowadays, the amount of released carbon dioxide to the atmosphere from industrial combustion process is the main reason for global warming problem. One of the technologies for carbon dioxide capture before releasing to the atmosphere is chemical looping combustion (CLC). In this study, the hydrodynamics and chemical reaction models inside air reactor of CLC were developed based on two-dimensional computational fluid dynamics. The air reactor in CLC had 0.0762 m diameter and 6.10 m height. The results were compared with the experimental data and the effects of operating parameters were analyzed using experimental design. From the results, the EMMS model, the specular coefficient of 0.5 and the restitution coefficient between solid particles of 0.97 gave the consistent results to the experimental data. The results also showed that particle diameter, solid circulating flux, inlet gas velocity and interaction between particle diameter and inlet gas velocity were the effect parameters on the averaged solid volume fraction. The particle diameter, inlet gas velocity and interaction between particle diameter and inlet gas velocity had an effect on radial standard deviation of solid volume fraction while only inlet gas velocity had an effect on axial standard deviation of solid volume fraction. The chemical reaction which converts the metal and oxygen to metal oxide using Arrhenius diffusion and reaction shrinking core model was consistent with the experimental data. The operating parameters that had an effect on oxygen conversion were particle diameter, temperature, inlet gas velocity, the interaction between particle diameter and temperature, interaction between particle diameter and inlet gas velocity, interaction between temperature and inlet gas velocity and the interaction between particle diameter, temperature and inlet gas velocity. The optimum condition was nickel particle, solid circulating flux of $300 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$, temperature of 1273 K and inlet gas velocity of 1 m/s.

Department: Chemical Technology Student's Signature

Field of Study: Chemical Technology Advisor's Signature

Academic Year: 2013 Co-Advisor's Signature

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์การจำลองซีเอฟดีของเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิงฉบับนี้ สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยความช่วยเหลืออย่างดียิ่งจากบุคคลหลายฝ่าย ผู้จัดทำขอกราบขอบพระคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.เบญจพล เฉลิมสินสุวรรณ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก และรองศาสตราจารย์ ดร.พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม ที่กรุณาให้คำแนะนำและข้อเสนอแนะ ตลอดจนการแก้ไขปรับปรุงงานวิจัยฉบับนี้ให้สมบูรณ์มากขึ้น

ขอกราบขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.เก็จวลี พุกษาทร ประธานกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ประพันธ์ คูชลธारा กรรมการสอบวิทยานิพนธ์ และ อาจารย์ ดร.บุญรอด สัจจกุลนุกิจ กรรมการจากภายนอกมหาวิทยาลัย ที่กรุณารับเชิญเป็นกรรมการสอบ ตลอดจนให้คำแนะนำ และเสนอแนะความคิดเห็นที่เป็นประโยชน์ต่อการทำวิทยานิพนธ์ให้มีความสมบูรณ์

ขอขอบคุณการสนับสนุนทุนจากโครงการพัฒนามหาวิทยาลัยวิจัยแห่งชาติ ประจำปี 2557 สำนักงานคณะกรรมการอุดมศึกษา (WCU-044-CC-57) ทุนการศึกษาจากศูนย์ความเป็นเลิศด้านเทคโนโลยีปิโตรเคมีและวัสดุ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย และทุนอุดหนุนวิทยานิพนธ์สำหรับนิสิต ครั้งที่ 2 ภาคการศึกษาปลาย ปีการศึกษา 2556 ปีงบประมาณ 2557 จากบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ขอขอบคุณคณาจารย์และเจ้าหน้าที่ทุกท่านในภาควิชาเคมีเทคนิคที่ได้ให้คำแนะนำช่วยเหลือและอำนวยความสะดวกในการวิจัยครั้งนี้

ขอขอบคุณพี่ๆ เพื่อนๆ และน้องๆ ในภาควิชาเคมีเทคนิคที่ให้การสนับสนุน ให้คำปรึกษา และเป็นกำลังใจในการทำวิทยานิพนธ์มาโดยตลอด

สุดท้ายนี้ขอกราบขอบพระคุณบิดา มารดา รวมถึงผู้มีพระคุณทุกท่านที่อยู่เบื้องหลังที่ได้ให้กำลังใจ ให้คำปรึกษา คำแนะนำ และการสนับสนุนด้านต่างๆ เสมอมาจนสำเร็จการศึกษา

CHULALONGKORN UNIVERSITY

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย.....	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ.....	ช
สารบัญตาราง.....	ญ
สารบัญรูป.....	ฎ
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา	1
1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย.....	2
1.3 ขอบเขตของการวิจัย	3
1.4 ข้อยกเว้นของการวิจัย	3
1.5 คำจำกัดความที่ใช้ในการวิจัย.....	3
1.6 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	3
1.7 วิธีดำเนินการวิจัย	3
1.8 ลำดับขั้นตอนในการเสนอผลการวิจัย	4
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	5
2.1 การเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง	5
2.1.1 ตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็ง (Solid-oxygen carrier).....	6
2.1.2 ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้น.....	7
2.1.3 ข้อดีของการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง.....	7
2.2 การออกแบบการทดลอง (Design of experiment).....	8
2.2.1 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลแบบ 2^k	8
2.2.2 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลแบบ 2^4	8
2.2.3 การวิเคราะห์ความแปรปรวน (Analysis of Variance, ANOVA).....	9
2.3 การจำลองด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (Computational fluid dynamics, CFD)12	
2.3.1 ระเบียบวิธีการแบ่งช่วง (Discretization method)	12
2.3.2 การแก้ปัญหาด้วยวิธี SIMPLE.....	17

2.4 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	19
บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย	22
3.1 ข้อมูลเบื้องต้นในงานวิจัย	22
3.2 การจำลองอุทกพลศาสตร์ในงานวิจัย	23
3.2.1 การหาพื้นที่คำนวณที่เหมาะสม (Grid independency test).....	23
3.2.2 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ (Mathematic model).....	24
3.3 การจำลองปฏิกิริยาเคมีในงานวิจัย	31
3.4 ขั้นตอนการจำลอง	32
บทที่ 4 ผลการวิจัยและการวิเคราะห์ผล	36
4.1 ผลของขนาดเซลล์คำนวณและเวลาที่ระบบเข้าสู่ภาวะเสถียร 36	
4.2 การหาแบบจำลองอุทกพลศาสตร์ที่เหมาะสม	38
4.2.1 ผลของแบบจำลองแรงต้านทานการเคลื่อนที่ระหว่างภูมิภาค	38
4.2.2 ผลของ Specularity coefficient.....	39
4.2.3 ผลของ Restitution coefficient.....	40
4.2.4 การเปรียบเทียบผลการจำลองพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ.....	40
4.3 ผลของตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่ออุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ	46
4.4 การหาแบบจำลองปฏิกิริยาเคมีที่เหมาะสม.....	56
4.5 ผลของตัวแปรดำเนินการที่มีต่อปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์	58
บทที่ 5 สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ	68
5.1 สรุปผลการวิจัย.....	68
5.1.1 การหาแบบจำลองการไหลที่เหมาะสมในงานวิจัย	68
5.1.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่มีต่ออุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ	68
5.1.3 การหาแบบจำลองของปฏิกิริยาเคมีที่เหมาะสมในงานวิจัย	69
5.1.4 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่มีต่อปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ..	69
5.2 ข้อเสนอแนะ	70
รายการอ้างอิง	71

ภาคผนวก ก.....	75
ภาคผนวก ข.....	77
ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์.....	81



จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

สารบัญตาราง

	หน้า
ตารางที่ 2.1 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียล 2^4	11
ตารางที่ 3.1 ข้อมูลและตัวแปรที่ใช้ในการจำลอง.....	34
ตารางที่ 3.2 การออกแบบการทดลองแบบ 2^4 ของการศึกษาตัวแปรดำเนินการ	35
ตารางที่ 4.1 การออกแบบการทดลองแบบ 2^4 ของการศึกษาผลตัวแปรดำเนินการและค่าตัวแปร ตอบสนองที่ได้จากการจำลองอุทกพลศาสตร์	48
ตารางที่ 4.2 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ค่าตอบสนองเป็นค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของ อนุภาคของแข็ง	50
ตารางที่ 4.3 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ค่าตอบสนองเป็นค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของ สัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมี	50
ตารางที่ 4.4 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ค่าตอบสนองเป็นค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของ สัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งในแนวแกน	50
ตารางที่ 4.5 การออกแบบการทดลองแบบ 2^4 ของการศึกษาผลตัวแปรดำเนินการและค่าตัวแปร ตอบสนองที่ได้จากการจำลองที่เกิดปฏิกิริยาเคมี	63
ตารางที่ 4.6 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ค่าตอบสนองเป็นค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของ ออกซิเจน	64

สารบัญรูป

หน้า

รูปที่ 2.1	องค์ประกอบของกระบวนการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง.....	6
รูปที่ 2.2	ขอบเขตของปัญหาที่ถูกแบ่งออกเป็นปริมาตรควบคุมเล็กๆ ด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม	13
รูปที่ 2.3	การประมาณค่าด้วยระเบียบวิธี First order upwind differencing scheme	16
รูปที่ 2.4	การประมาณค่าด้วยระเบียบวิธี Second order upwind differencing scheme	17
รูปที่ 2.5	ขั้นตอนวิธี SIMPLE	18
รูปที่ 3.1	แผนภาพเครื่องปฏิกรณ์อากาศที่ใช้ในการจำลอง.....	23
รูปที่ 3.2	การแบ่งพื้นที่คำนวณ (ก) 3,500 (ข) 6,500 (ค) 9,500 และ (ง) 12,500 เซลล์	24
รูปที่ 4.1	การกระจายตัวของความดันสัมบูรณ์ต่อความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศที่พื้นที่การคำนวณต่างๆ.....	37
รูปที่ 4.2	การกระจายตัวของความดันสัมบูรณ์ ที่เวลาการทดลองต่างๆ.....	38
รูปที่ 4.3	การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากแบบจำลองสัมประสิทธิ์แรงต้านทานการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาคแบบต่างๆ.....	41
รูปที่ 4.4	การกระจายตัวในแนวแกนของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากแบบจำลองสัมประสิทธิ์แรงต้านทานการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาคแบบต่างๆ.....	42
รูปที่ 4.5	การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากค่า specularity coefficient ต่างๆ	42
รูปที่ 4.6	การกระจายตัวในแนวแกนของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากค่า specularity coefficient ต่างๆ.....	43
รูปที่ 4.7	การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากค่า restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็งต่างๆ	43
รูปที่ 4.8	การกระจายตัวในแนวแกนของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากค่า restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็งต่างๆ	44
รูปที่ 4.9	การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่ความสูงของ เครื่องปฏิกรณ์อากาศเท่ากับ 3.5 เมตร	44
รูปที่ 4.10	การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่ความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศเท่ากับ 4.5 เมตร	45
รูปที่ 4.11	การกระจายตัวของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งตามความสูงของ เครื่องปฏิกรณ์อากาศ.....	45

รูปที่ 4.12 คอนทัวร์ของสัดส่วนเชิงปริมาตรของอนุภาคของแข็งที่เวลา 30 วินาที (ก) กรณีที่ 3 (ข) กรณีที่ 11 (ค) กรณีที่ 13 (ง) กรณีที่ 15..... 49

รูปที่ 4.13 ผลของตัวแปรหลักและผลของอันตรกิริยา (ก) ผลของตัวแปรหลักที่มีต่อค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง (ข) ผลของอันตรกิริยาที่มีต่อค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง (ค) ผลของตัวแปรหลักที่มีต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง (ง) ผลของอันตรกิริยาที่มีต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง และ (จ) ผลของตัวแปรหลักที่มีต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง 52

รูปที่ 4.14 พื้นผิวตอบสนองของค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เมื่ออัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน (ก) อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร ส่วนในรูป (ข) อนุภาคของแข็งนิกเกิล ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00020 เมตร 53

รูปที่ 4.15 พื้นผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เมื่อชนิดของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน 54

รูปที่ 4.16 พื้นผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เมื่อชนิดของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน 54

รูปที่ 4.17 การกระจายตัวของอุณหภูมิของแก๊ส ที่เวลาการทดลองต่างๆ 56

รูปที่ 4.18 ร้อยละการเปลี่ยนแปลงของนิกเกิลกับออกซิเจนที่สมการของการเกิดปฏิกิริยาเคมีแตกต่างกัน..... 61

รูปที่ 4.19 ร้อยละการเปลี่ยนแปลงของนิกเกิลกับออกซิเจน ณ อุณหภูมิ 1273 เคลวิน ที่อัตราส่วนโดยโมลของแก๊สแตกต่างกัน 62

รูปที่ 4.20 ร้อยละการเปลี่ยนแปลงของนิกเกิลออกซิเจนที่อัตราส่วนโดยโมลของแก๊สเท่ากับ 0.1 ณ อุณหภูมิแตกต่างกัน 62

รูปที่ 4.21 คอนทัวร์ของความเข้มข้นของออกซิเจนที่วินาทีที่ 30 (ก) กรณีที่ 6 และ (ข) กรณีที่ 11 65

รูปที่ 4.22 (ก) ผลของตัวแปรหลัก (ข) ผลของอันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้า และ (ค) ผลของอันตรกิริยาร่วมระหว่างชนิดอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิ และความเร็วแก๊สป้อนเข้า ต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน..... 66

รูปที่ 4.23 พื้นผิวตอบสนองของค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน เมื่ออุณหภูมิและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน (ก) อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร ส่วนในรูป (ข) อนุภาคของแข็งนิกเกิลที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00020 เมตร 67

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

ในปัจจุบัน ปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์กว่า 30 พันล้านตันต่อปีถูกปล่อยสู่บรรยากาศ [1] เป็นสาเหตุหลักของปัญหาโลกร้อน อันเกิดจากกิจกรรมในการดำรงชีวิตของมนุษย์เพื่อตอบสนองความต้องการในด้านต่างๆ เช่น อุตสาหกรรมการเผาไหม้ถ่านหินหรือแก๊สธรรมชาติ กระบวนการหมัก วัตถุประสงค์พวกคาร์โบไฮเดรตและน้ำตาล การผลิตปูนซีเมนต์และปูนขาว ฯลฯ โดยกิจกรรมของมนุษย์ที่ก่อให้เกิดการเพิ่มปริมาณของคาร์บอนไดออกไซด์ในปริมาณมากคือ การเผาไหม้เชื้อเพลิงฟอสซิลเพื่อนำไปผลิตกระแสไฟฟ้า ซึ่งมีความจำเป็นอย่างมากในอุตสาหกรรม เนื่องจากเชื้อเพลิงฟอสซิลให้ผลผลิตพลังงานที่สูง มีราคาถูก ในปัจจุบันกว่าร้อยละ 80 ของความต้องการพลังงานก็ยังคงได้มาจากการเผาไหม้ของเชื้อเพลิงฟอสซิล เพราะฉะนั้นการพัฒนากระบวนการเพื่อกำจัดหรือแยกคาร์บอนไดออกไซด์เหล่านี้จึงเป็นสิ่งจำเป็น โดยส่วนใหญ่แบ่งออกได้เป็นสามกระบวนการหลักคือการกำจัดก่อนการเผาไหม้ (pre-combustion) การกำจัดผ่านการเผาไหม้ด้วยเชื้อเพลิงที่มีออกซิเจนสูง (oxy-fuel combustion) และการกำจัดหลังการเผาไหม้ (post-combustion) [2-4]

กระบวนการเคมีคอลลูปีง (chemical looping) เป็นทางเลือกหนึ่งที่เหมาะสมต่อกระบวนการเผาไหม้ที่สามารถแยกคาร์บอนไดออกไซด์ได้ภายในระบบ [5-8] กระบวนการนี้แบ่งออกได้เป็น 2 ประเภทหลักคือ กรณีที่มีออกซิเจน (oxygen) และกรณีที่มีคาร์บอนไดออกไซด์เป็นสารที่ถูกส่งผ่านในกระบวนการ โดยส่วนใหญ่ในกระบวนการเผาไหม้เชื้อเพลิงฟอสซิลจะเป็นกรณีที่สารส่งผ่านเป็นออกซิเจน กระบวนการเคมีคอลลูปีงจะมีลักษณะพื้นฐานคล้ายกับเครื่องปฏิกรณ์แบบฟลูอิดเบดแบบหมุนเวียน ประกอบด้วยเครื่องปฏิกรณ์ 2 ชนิดเชื่อมต่อเข้าด้วยกันคือ เครื่องปฏิกรณ์อากาศและเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง การเผาไหม้แบบเคมีคอลลูปีงจะใช้อุณหภูมิของแข็งทำหน้าที่เป็นตัวพาสารที่ถูกส่งผ่าน ซึ่งโดยส่วนใหญ่จะอยู่ในรูปโลหะออกไซด์หรือสารประกอบของโลหะที่มีออกซิเจนเป็นองค์ประกอบ เช่น เหล็ก ทองแดง นิกเกิล ฯลฯ เพื่อคอยป้อนออกซิเจนให้มีปริมาณเพียงพอต่อการเกิดปฏิกิริยาภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ อุณหภูมิของแข็งจะเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันก่อนส่งไปใช้ในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงและภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงจะเกิดปฏิกิริยารีดักชันกับเชื้อเพลิงทำให้อากาศที่ได้มาจากอุณหภูมิของแข็งในกระบวนการที่จะทำหน้าที่เกิดปฏิกิริยารีดักชันกับเชื้อเพลิงทำให้อากาศไม่สัมผัสกับเชื้อเพลิงโดยตรงและผลิตภัณฑ์หลักที่ได้คือ คาร์บอนไดออกไซด์จะไม่ถูกทำให้เจือจางกับแก๊สที่งอกจากกระบวนการ เมื่อทำการพิจารณาถึงปฏิกิริยาเคมีรวมของทั้งกระบวนการ พบว่า ปฏิกิริยาการเผาไหม้ที่เกิดขึ้นในกระบวนการนี้มีความสอดคล้องกับการเผาไหม้ของเชื้อเพลิงโดยตรงด้วยอากาศ ความร้อนที่ได้รับมีปริมาณเท่ากับความร้อนที่ได้จากกระบวนการเผาไหม้ปกติ แต่ไม่มีการสูญเสียความร้อนจากไนโตรเจนที่ปนพร้อมไปกับอากาศ ทำให้อุณหภูมิการเผาไหม้สูงขึ้น ส่งผลให้ประสิทธิภาพการเผาไหม้สูงตามไปด้วย ดังนั้น ข้อดีของการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูปีงเมื่อเปรียบเทียบกับกระบวนการเผาไหม้ทั่วไปคือคาร์บอนไดออกไซด์ที่ได้ไม่จำเป็นต้องพลังงานในการแยกออกจากกระบวนการ

วิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (computational fluid dynamics) [9] เป็นวิธีการที่ได้รับความนิยมอย่างแพร่หลาย วิธีนี้เป็นเครื่องมือหนึ่งสำหรับอธิบายพฤติกรรมเคลื่อนที่ของของไหลที่เกิดปฏิกิริยาภายในเครื่องปฏิกรณ์ซึ่งไม่สามารถมองเห็นได้ด้วยตาเปล่าและการวิเคราะห์แรงที่กระทำภายในกระบวนการ สมการทางคณิตศาสตร์จะถูกใช้ในการจำลองพฤติกรรมของไหลของของไหลและอนุภาคของแข็ง โดยสมการคำนวณพื้นฐานที่ใช้ ได้แก่ สมการอนุรักษ์มวล สมการอนุรักษ์โมเมนตัม และสมการอนุรักษ์พลังงาน แรงกระทำระหว่างของไหลและอนุภาคของแข็งจะอธิบายโดยทฤษฎีจลนศาสตร์ของอนุภาคของแข็ง (kinetic theory of granular flow, KTGF) ซึ่งสามารถใช้ได้ดีกับการศึกษาอุทกพลศาสตร์ของอนุภาคของแข็งในกระบวนการ การใช้วิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณสามารถคำนวณได้ทั้งในระบบสองมิติและสามมิติ การจำลองในระบบสามมิติจะให้ข้อมูลในการจำลองอุทกพลศาสตร์ที่ละเอียดและใกล้เคียงกับการทดลอง แต่มีข้อเสียคือ ใช้เวลาในการคำนวณที่นานกว่าเพราะมีขั้นตอนที่ซับซ้อนจึงไม่เป็นที่นิยม จากการจำลองโดยทั่วไป เครื่องปฏิกรณ์อากาศจะออกแบบให้มีความเร็วแก๊สสูงและพบอนุภาคของแข็งแบบเกาะกลุ่ม ส่วนเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงมีความเร็วของแก๊สต่ำส่งผลทำให้เกิดการไหลแบบฟองแก๊ส

จากที่ได้กล่าวมาข้างต้น ถึงแม้ว่าเครื่องปฏิกรณ์ชนิดนี้จะมีข้อดีแต่ก็ยังมีปัญหาอยู่เช่นเดียวกัน ข้อมูลที่ได้จากการทดลองนั้นยังมีไม่เพียงพอที่จะดำเนินการในระดับอุตสาหกรรมที่ใหญ่ขึ้น และจากค่าใช้จ่ายของการสร้างเครื่องปฏิกรณ์ [10] แสดงให้เห็นว่าความรู้ความเข้าใจเกี่ยวกับอุทกพลศาสตร์และปฏิกิริยาเคมีของเครื่องปฏิกรณ์นั้นเป็นสิ่งสำคัญในการออกแบบกระบวนการจำลองทางคณิตศาสตร์ได้เข้ามามีบทบาทสำคัญในการแก้ไขปัญหา ในงานวิจัยนี้มีแนวคิดที่จะพัฒนาและปรับปรุงกระบวนการเคมีคอลลูบิงเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการผลิตและลดปริมาณความเข้มข้นของคาร์บอนไดออกไซด์ที่ปลดปล่อยสู่บรรยากาศอีกทั้งในปัจจุบันงานวิจัยที่ศึกษาแบบจำลองเพื่อใช้อธิบายอุทกพลศาสตร์ของกระบวนการเคมีคอลลูบิงยังไม่แพร่หลายนัก ดังนั้น จึงได้มีการหาแบบจำลองเพื่อจำลองอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเคมีคอลลูบิงและเปรียบเทียบตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อการเกิดปฏิกิริยาเคมีภายในระบบ

1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย

1. หาแบบจำลองอุทกพลศาสตร์และปฏิกิริยาเคมีสำหรับเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเคมีคอลลูบิงในระบบสองมิติด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณและเปรียบเทียบผลที่ได้กับผลการทดลองจริง
2. วิเคราะห์ผลของตัวแปรดำเนินการที่มีต่ออุทกพลศาสตร์และปฏิกิริยาเคมีในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง

1.3 ขอบเขตของการวิจัย

1. จำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเคมีคอลลูบิงเพื่อหาแบบจำลองที่ทำนายผลได้ใกล้เคียงกับการทดลองมากที่สุด
2. นำแบบจำลองอุทกพลศาสตร์ในข้อแรกมาทำการศึกษาค่าของตัวแปรดำเนินการ (operating parameters) เพื่อทำนายพฤติกรรมของไหลที่ให้การผสมที่ดีที่สุด
3. จำลองปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศและศึกษาค่าของตัวแปรดำเนินการ เช่นเดียวกับข้อสองเพื่อทำนายการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่สูงที่สุด

1.4 ข้อจำกัดของการวิจัย

1. แบบจำลองการไหลที่ใช้ในการวิจัยนี้เป็นแบบ 2 มิติ
2. เป็นการจำลองส่วนเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเคมีคอลลูบิง

1.5 คำจำกัดความที่ใช้ในการวิจัย

อุทกพลศาสตร์ พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ การเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง ตัวแปรดำเนินการ การไหลแบบหลายวัฏภาค

1.6 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. ได้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์อากาศที่ทำนายผลทางอุทกพลศาสตร์ภายในได้ใกล้เคียงกับผลการทดลองจริง
2. ทราบถึงตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่ออุทกพลศาสตร์และปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ

1.7 วิธีดำเนินการวิจัย

1. ศึกษาค้นคว้าเอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องดังรายละเอียดต่อไปนี้ กระบวนการเคมีคอลลูบิงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ อุทกพลศาสตร์ในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นระหว่างออกซิเจนกับตัวพาสารที่ถูกส่งผ่าน วิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณรวมทั้งโปรแกรม ANSYS® FLUENT®
2. ออกแบบและวางแผนการทดลอง
3. จำลองอุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเคมีคอลลูบิงด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณในระบบสองมิติ โดยใช้โปรแกรมจำลองกระบวนการสำเร็จรูป

ANSYS® FLUENT® และทำการเปรียบเทียบผลกับงานวิจัยของ Shuai และคณะ [11] และ Issangya และคณะ [12] ซึ่งมีขนาดความสูงเท่ากับ 6.1 เมตร และเส้นผ่านศูนย์กลางเท่ากับ 0.0762 เมตร เพื่อหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่เหมาะสมกับการจำลองกระบวนการ

4. วิเคราะห์ผลของตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่ออุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเคมีคอลลูบิง
5. จำลองปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณในระบบสองมิติโดยใช้โปรแกรมจำลองกระบวนการสำเร็จรูป ANSYS® FLUENT® เครื่องปฏิกรณ์อากาศที่ใช้มีขนาดความสูงเท่ากับ 6.1 เมตรและเส้นผ่านศูนย์กลางเท่ากับ 0.0762 เมตร
6. วิเคราะห์ผลของตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่อปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเคมีคอลลูบิง
7. ประมวล วิเคราะห์ สรุปผลการทดลอง เขียนบทความและวิทยานิพนธ์

1.8 ลำดับขั้นตอนในการเสนอผลการวิจัย

ลำดับขั้นตอนในการนำเสนอผลการวิจัยนี้ประกอบด้วยเนื้อหาต่างๆ ดังนี้

- บทที่ 1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา วัตถุประสงค์ของการวิจัย ขอบเขตการวิจัย ข้อจำกัดของการวิจัย คำจำกัดความที่ใช้ในการวิจัย ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ วิธีดำเนินการวิจัย และลำดับขั้นตอนในการเสนอผลการวิจัย
- บทที่ 2 การเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง การออกแบบการทดลอง (design of experiment) การจำลองด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (computational fluid dynamics) และงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง
- บทที่ 3 ข้อมูลเบื้องต้นในการวิจัย การจำลองอุทกพลศาสตร์ในงานวิจัย การจำลองปฏิกิริยาเคมีในงานวิจัย ขั้นตอนการจำลอง
- บทที่ 4 ผลการหาแบบจำลองอุทกพลศาสตร์ที่เหมาะสม ผลของตัวแปรดำเนินการภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ การหาแบบจำลองปฏิกิริยาเคมีที่เหมาะสม และผลของตัวแปรดำเนินการต่อปฏิกิริยาเคมี
- บทที่ 5 สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ

บทที่ 2

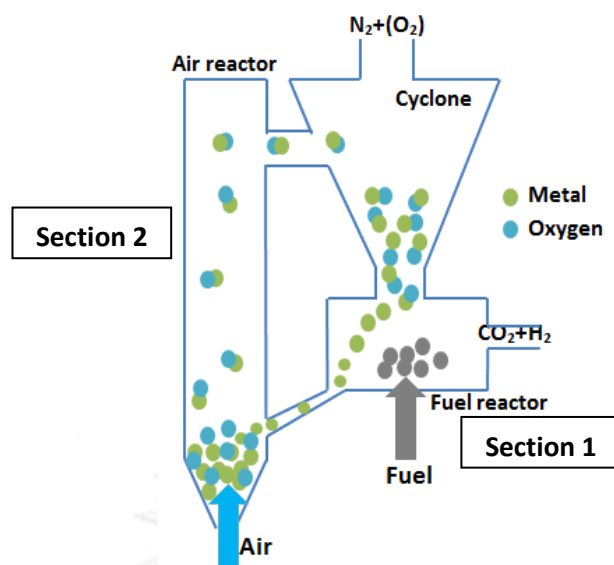
ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1 การเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง

การควบคุมการปล่อยของแก๊สเรือนกระจกมีความสำคัญ เนื่องจากความต้องการเพิ่มประสิทธิภาพในการเปลี่ยนรูปพลังงานหรือเชื้อเพลิงในปัจจุบันที่มีอยู่สูง เพราะฉะนั้นการพัฒนากระบวนการเพื่อกำจัดหรือแยกคาร์บอนไดออกไซด์ จึงเป็นสิ่งจำเป็น โดยส่วนใหญ่แบ่งออกได้เป็นสามกระบวนการหลักคือ การกำจัดก่อนการเผาไหม้ (Pre-combustion) การกำจัดผ่านการเผาไหม้ด้วยเชื้อเพลิงที่มีออกซิเจนสูง (Oxy-fuel combustion) และการกำจัดหลังการเผาไหม้ (Post-combustion) การเผาไหม้ด้วยออกซิเจนของกระบวนการเคมีคอลลูบิง เป็นเทคโนโลยีใหม่สำหรับการเผาไหม้แบบสะอาด มีความแตกต่างจากการเผาไหม้ด้วยออกซิเจนแบบปกติเพราะไม่ต้องแยกออกซิเจนออกจากอากาศ ซึ่งเป็นกระบวนการที่ต้องเสียค่าใช้จ่ายสูง

การเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง (Chemical Looping Combustion) เป็นทฤษฎีพื้นฐานใหม่ของการเผาไหม้ มีลักษณะเป็นแบบวงจร นิยมใช้ในกระบวนการผลิตพลังงานที่ต้องการแยกคาร์บอนไดออกไซด์จากเชื้อเพลิงชนิดต่างๆ เช่น เชื้อเพลิงแก๊ส ของเหลว ถ่านหินและชีวมวล ฯลฯ [13] ภายในกระบวนการเคมีคอลลูบิง อากาศและเชื้อเพลิงถูกแยกออกจากกัน ออกซิเจนจะเกิดการเผาไหม้กับเชื้อเพลิงผ่านตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็ง (Solid-oxygen carrier) เพื่อหลีกเลี่ยงการเกิดปฏิกิริยาโดยตรงระหว่างเชื้อเพลิงกับอากาศ ตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็งจะประกอบด้วยออกไซด์ของโลหะ (M) หรือสารประกอบของโลหะที่มีออกซิเจนเป็นองค์ประกอบ (M_yO_x) ที่เหมาะสมและตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็งจะหมุนเวียนระหว่างเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดเบดแบบหมุนเวียน [14] แสดงดังรูปที่ 2.1 ภายในเครื่องปฏิกรณ์ส่วนที่หนึ่ง เรียกว่า เครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง (Fuel reactor) ตัวพาออกซิเจนจะเกิดปฏิกิริยากับเชื้อเพลิง ของแข็งจะถูกรีดิวซ์ กลายเป็นโลหะบริสุทธิ์หรือมีปริมาณของออกซิเจนลดลง (M_yO_{x-1}) และเชื้อเพลิงจะถูกเปลี่ยนเป็นแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และไอน้ำ ปฏิกิริยานี้จะเกิดที่อุณหภูมิต่ำเนื่องจากการดูดซับพลังงานจากภายนอก แก๊สทั้งหมดที่เป็นผลิตภัณฑ์จะถูกแยกโดยควบแน่นไอน้ำออกจากคาร์บอนไดออกไซด์ ซึ่งสามารถกักเก็บได้ง่ายเพื่อเคลื่อนย้ายไปยังที่จัดเก็บหรือนำไปใช้ประโยชน์เป็นสารตั้งต้นผลิตเป็นสารเคมีอื่นต่อไป เช่นเดียวกับของแข็งจะถูกเคลื่อนย้ายไปยังเครื่องปฏิกรณ์ส่วนที่สอง เรียกว่า เครื่องปฏิกรณ์อากาศ (Air reactor) ที่จะเกิดการออกซิไดซ์ที่อุณหภูมิสูงและออกซิเจนใหม่จะถูกเติมให้กับตัวพาออกซิเจนพร้อมป้อนกลับไปใช้ในกระบวนการ

ปริมาณความร้อนที่ถูกผลิตจากการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง จะมีค่าเท่ากับปริมาณของความร้อนที่ถูกปล่อยเมื่อเกิดการเผาด้วยอากาศของเชื้อเพลิงชนิดเดียวกัน เนื่องจาก ไม่มีพลังงานที่สูญเสียไปในการแยกคาร์บอนไดออกไซด์และผลิตภัณฑ์ จึงเป็นทางเลือกที่เหมาะสมสำหรับการลดคาร์บอนไดออกไซด์ที่ปลดปล่อยสู่บรรยากาศในภาวะต้นทุนต่ำ



รูปที่ 2.1 องค์ประกอบของกระบวนการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูปีง

2.1.1 ตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็ง (Solid-oxygen carrier)

การใช้งานของกระบวนการเคมีคอลลูปีง จะต้องพิจารณาตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็งที่ใช้ งาน โลหะออกไซด์ที่นิยมใช้ เช่น เหล็ก คอปเปอร์ นิกเกิล แมงกานีส ออกไซด์ ฯลฯ ตัวส่งแก๊สออกซิเจนนี้จะต้องมีคุณลักษณะพิเศษทั้งทางกายภาพ เคมี เศรษฐศาสตร์หรือสิ่งแวดล้อม โดยหลักในการพิจารณาตัวพาออกซิเจนที่เหมาะสมกับกระบวนการเคมีคอลลูปีง แสดงดังนี้

1. มีความสามารถในการแลกเปลี่ยนออกซิเจนสูง
2. สามารถเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนเชื้อเพลิงให้อยู่ในรูปคาร์บอนไดออกไซด์และไอน้ำได้อย่างสมบูรณ์
3. มีความว่องไวสูง
4. มีสมบัติเกิดฟลูอิดไอเซชันได้ดี ด้านทานการเกาะกลุ่ม มีความแข็งแรงและทนต่อการสึกกร่อนเมื่ออุณหภูมิเกิดการไหลหมุนเวียนสูง
5. เกิดคาร์บอนน้อยเพื่อลดการปล่อยคาร์บอนไดออกไซด์ในระหว่างการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศและปรับปรุงประสิทธิภาพในการดักจับทั้งหมด
6. สามารถเผาได้ที่อุณหภูมิสูง
7. มีราคาถูกและเป็นมิตรต่อสิ่งแวดล้อม
8. มีช่วงอายุของการใช้งานที่เหมาะสม

การเลือกใช้ตัวพาออกซิเจนมีความสำคัญและมีอิทธิพลต่อการออกแบบโรงงานที่มีการใช้กระบวนการเคมีคอลลูบิง ตัวอย่างของตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็งที่จะใช้ในงานวิจัยคือ นิกเกิลออกไซด์ (NiO) ซึ่งเป็นตัวพาออกซิเจนที่ดีที่สุดต่อการนำไปใช้ในกระบวนการเคมีคอลลูบิง เพราะว่ามีความสามารถในการแลกเปลี่ยนออกซิเจนสูง มีอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่สูงกับเชื้อเพลิงทั้งปฏิกิริยาการเผาไหม้และปฏิกิริยาการเกิดออกซิเดชัน มีความคงทนและมีจุดหลอมเหลวที่สูงส่งผลให้สามารถเผาได้ที่อุณหภูมิสูง เมื่อเปรียบเทียบกับตัวพาออกซิเจนตัวอื่น เช่น คอปเปอร์ออกไซด์ (CuO) ที่มีข้อจำกัดที่เสี่ยงต่อการเกิดการรวมตัวเป็นกลุ่มก้อนของของแข็งภายในเครื่องปฏิกรณ์ในช่วงอุณหภูมิที่สนใจของกระบวนการเคมีคอลลูบิงนี้ ดังนั้น นิกเกิลออกไซด์จะถูกนำมาเลือกใช้ให้เป็นวัสดุอ้างอิงที่นิยมใช้ ถึงแม้ว่าจะมีราคาแพงและความสามารถในการเกิดปฏิกิริยากับแก๊สสังเคราะห์ต่ำกว่าวัสดุชนิดอื่นก็ตาม [6, 15] โดยตัวพาออกซิเจนชนิดนิกเกิลบนตัวรองรับอะลูมินา เป็นวัสดุที่นิยมใช้เพราะมีสมบัติเหมาะสมต่อการเกิดฟลูอิดเซชันและมีเสถียรภาพทางด้านความร้อนที่ดี

2.1.2 ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้น

ภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง เชื้อเพลิงที่อยู่ในรูปแก๊สจะถูกออกซิไดซ์ด้วยตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็ง [16] แสดงปฏิกิริยาเคมีดังนี้



เมื่อ M_yO_x คือตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็งที่อยู่ในรูปที่ถูกออกซิไดซ์ M_yO_{x-1} คือตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็งที่อยู่ในรูปที่ถูกรีดิวซ์ และ C_nH_{2m} คือเชื้อเพลิง

ส่วนภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ตัวส่งแก๊สออกซิเจนของแข็งจะถูกรีดิวซ์ด้วยอากาศ แสดงปฏิกิริยาเคมีดังนี้



2.1.3 ข้อดีของการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง

1. ลดการปล่อยแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และแก๊สจำพวก NO_x ออกสู่สภาวะแวดล้อม เนื่องจากการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิงนี้อากาศไม่ได้สัมผัสกับเชื้อเพลิงโดยตรง

2. เพิ่มประสิทธิภาพในการเกิดปฏิกิริยาระหว่างอากาศและเชื้อเพลิงเกิดได้สูงขึ้นเมื่อเปรียบเทียบการเผาไหม้แบบธรรมดา
3. ลดต้นทุนในขั้นตอนการกำจัดหรือแยกแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์

2.2 การออกแบบการทดลอง (Design of experiment)

2.2.1 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลแบบ 2^k

การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลนิยมใช้กันมากในการทดลองเพื่อศึกษาถึงปัจจัยอันตรกิริยาต่างๆ ที่มีผลต่อค่าที่ต้องการศึกษา เพื่อสามารถควบคุมตัวแปรที่มีผลได้ถูกต้อง ส่งผลให้การทดลองนั้นมีประสิทธิภาพมากยิ่งขึ้น สิ่งสำคัญของการออกแบบในกรณีนี้คือ ปัจจัย k ที่นำมาพิจารณาจะประกอบด้วยช่วงของค่าตัวแปรที่ต้องการศึกษา 2 ระดับคือ ค่าสูง (+) และค่าต่ำ (-) ซึ่งตัวแปรในเชิงปริมาณ เช่น อุณหภูมิ ความดัน และเวลา หรือในเชิงคุณภาพ เช่น ชนิดเครื่องปฏิกรณ์ การควบคุมการทำให้แห้งในการออกแบบการทดลองนั้นจะมีข้อมูลทั้งหมด $2 \times 2 \times \dots \times 2 = 2^k$ ข้อมูลเรียกการออกแบบลักษณะนี้ว่า การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลแบบ 2^k

2.2.2 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลแบบ 2^4

การออกแบบเชิงแฟกทอเรียลแบบ 2^4 นี้คือ การออกแบบการทดลองที่ประกอบด้วยปัจจัยทั้งหมด 4 ปัจจัย แต่ละปัจจัยมี 2 ระดับคือ ระดับสูงและระดับต่ำ รวมข้อมูลทั้งหมด 16 การทดลอง ดังตารางที่ 2.1

การหาค่าคอนทราสต์ (Contrast) คือค่าที่เกิดจากผลการเปลี่ยนแปลงของปัจจัยหลัก ที่แสดงด้วยตารางเครื่องหมายของการเปลี่ยนแปลงที่มีทั้งค่าบวกและค่าลบที่ได้กำหนดไว้ ดังตารางที่ 2.1 ซึ่งมีการกำหนดเครื่องหมายไว้ที่ปัจจัยหลักแล้ว ดังนั้น ผลในคอลัมน์อื่นจะถูกกำหนดด้วยเครื่องหมายเช่นเดียวกัน โดยกำหนดจากการคูณเครื่องหมายแต่ละคอลัมน์ที่เกี่ยวข้องกันทีละแถวแบบตัวต่อตัว อย่างเช่น เครื่องหมายของคอลัมน์ AB คือ ผลคูณเครื่องหมายในคอลัมน์ทั้ง A และ B ของแต่ละแถว และค่าคอนทราสต์จะสามารถคำนวณออกมาได้

ตัวอย่างการประมาณผลของปัจจัยหลัก

$$A = \frac{1}{8n} \begin{bmatrix} a - 1 - b + ab - c + ac - bc + abc - d + ad \\ -bd + abd - cd + acd - bcd + abcd \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

ตัวอย่างการประมาณผลของอันตรกิริยา

$$AB = \frac{1}{8n} \begin{bmatrix} -a-1-b+ab-c-ac-bc+abc-d-ad \\ -bd+abd-cd-acd-bcd+abcd \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

จากตัวอย่างข้างต้นนี้สามารถสรุปเป็นสูตรทั่วไป ดังนี้

$$AB...K = \frac{2}{n2^k} (\text{contrast}_{AB...K}) \quad (2.5)$$

จากนั้น หาค่าผลรวมกำลังสองของตัวแปรแต่ละตัว

$$SS_{AB...K} = \frac{1}{n2^k} (\text{contrast}_{AB...K})^2 \quad (2.6)$$

เมื่อ k คือจำนวนในการทดลองซ้ำ

จากการคำนวณข้างต้นที่กล่าวมาทั้งหมดจะนำไปทำการวิเคราะห์หาความแปรปรวนหรือที่เรียกว่า ตาราง ANOVA เพื่อคำนวณหาค่า p -Value หรือค่า F_0 ที่สามารถบ่งบอกได้ว่าตัวแปรหลักตัวใดที่ส่งผลต่อผลที่ได้จากการทดลอง นำไปสู่การออกแบบการทดลองที่มีความแม่นยำของผลข้อมูลสูงขึ้น

2.2.3 การวิเคราะห์ความแปรปรวน (Analysis of Variance, ANOVA)

การวิเคราะห์ความแปรปรวน วิเคราะห์ได้จากการแบ่งแยกความแปรปรวนทั้งหมดออกเป็น ส่วนย่อยๆ โดยเริ่มต้นจากการหาค่าผลรวมกำลังสองทั้งหมดหรือ Total corrected sum of squares (SS_T)

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2 \quad (2.7)$$

สูตรนี้ใช้สำหรับวิเคราะห์ความแปรปรวนของข้อมูลทั้งหมด ซึ่งจากผลที่ได้นี้สามารถแบ่งออกเป็นผลรวมกำลังสองของความแตกต่างระหว่างค่าเฉลี่ยของแต่ละระดับกับค่าเฉลี่ยรวมบวกกับผลรวมกำลังสองของความแตกต่างที่วิเคราะห์ภายในแต่ละระดับจากค่าเฉลี่ยของแต่ละระดับ โดยความแตกต่างระหว่างค่าเฉลี่ยแต่ละระดับที่วิเคราะห์และค่าเฉลี่ยรวมจะเป็นตัววัดของความแตกต่างระหว่างค่าเฉลี่ยแต่ละระดับ ในทางตรงกันข้ามความแตกต่างของค่าที่วิเคราะห์ภายในแต่ละระดับจากค่าเฉลี่ยแต่ละระดับคือ ความผิดพลาดสุ่ม (random error) แสดงสมการดังนี้

$$SS_T = SS_{Treatment} + SS_E \quad (2.8)$$

$$SS_{Treatment} = n \sum_{i=1}^a (\bar{y}_i - \bar{y}_{..})^2 \quad (2.9)$$

$$SS_E = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_i)^2 \quad (2.10)$$

เมื่อ $SS_{Treatment}$ คือ ผลรวมกำลังสองเนื่องจากระดับ (ระหว่างแต่ละระดับ) และ SS_E คือ ผลรวมกำลังสองเนื่องจากความผิดพลาด (ภายในแต่ละระดับ) โดยตัวแปร $an=N$ คือ จำนวนข้อมูลที่วิเคราะห์ a คือ จำนวนของปัจจัย และ n คือ จำนวนข้อมูลที่ซ้ำ ซึ่ง $SS_{Treatment}$ มีระดับขั้นความเสรีเท่ากับ $a-1$ และ SS_E มีระดับขั้นความเสรีเท่ากับ $N-a$ เมื่อนำค่าผลรวมกำลังสอง (sum of square) ของแต่ละตัวหารด้วยระดับขั้นความเสรีจะได้ค่า Mean Square (MS) แสดงการคำนวณดังนี้

$$MS_{Treatment} = \frac{SS_{Treatment}}{a-1} \quad (2.11)$$

$$MS_E = \frac{SS_E}{N-a} \quad (2.12)$$

จากทฤษฎีที่กล่าวมาข้างต้น จะทำการหาอัตราส่วนของค่า F_0 ที่เป็นค่าของการทดสอบ F (F test) เพื่อทดสอบสมมติฐานความเหมือนของความแปรปรวนในค่าเฉลี่ยแต่ละระดับ แสดงสัดส่วนดังนี้

$$F_0 = \frac{MS_{Treatment}}{MS_E} \quad (2.13)$$

จากค่าที่ได้จากการคำนวณ F_0 นี้ ภายใต้สมมติฐานที่เลือก หากค่าที่ต้องการมีตัวเลขมากกว่าตัวส่วนจะปฏิเสธสมมติฐานหลัก (H_0) นั้นเพราะมีค่าความแตกต่างของข้อมูลสูงเกินไปหรือเมื่อ $F_0 > F_{\alpha, a-1, N-a}$ และถ้าหาก $F_0 < F_{\alpha, a-1, N-a}$ แสดงว่ามีความแตกต่างของข้อมูลที่น้อยหรือไม่มีความแตกต่างกันของข้อมูล นอกจากนี้สามารถใช้ค่า P -value สำหรับการวิเคราะห์ได้เช่นเดียวกัน ซึ่งเป็นค่าแสดงความน่าจะเป็นที่ค่าทดสอบทางสถิติจะมีค่าน้อยที่จะทำให้ค่าที่ต้องการมีค่าเท่ากับค่าสังเกตในทางสถิติเมื่อสมมติฐานหลักเป็นจริง ซึ่งมักกำหนดให้เท่ากับ 0.05 หรือมีค่าความเชื่อมั่นร้อยละ 95 ดังนั้น ถ้าค่า P -value มีค่าน้อยกว่า 0.05 สมมติฐานหลักนั้นจะถูกปฏิเสธหรือในการวิเคราะห์ ตัวแปรนั้นจะส่งผลต่อค่าที่ได้จากการทดลอง

ตารางที่ 2.1 การออกแบบเชิงแฟกทอเรียล 2^4

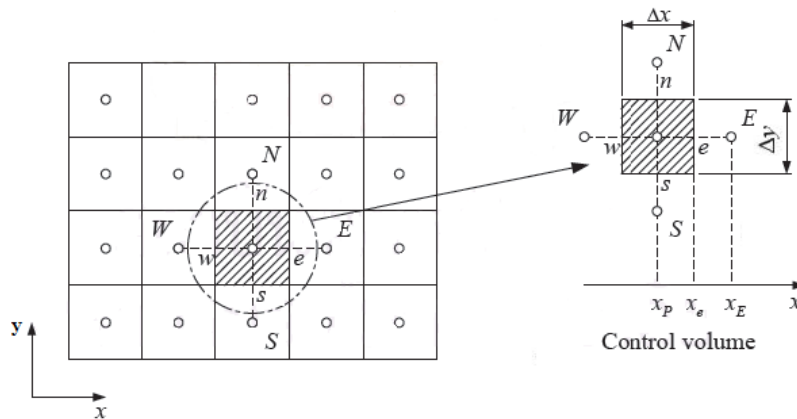
Run	A	B	C	D	Combination
1	+	-	-	-	a
2	-	-	-	-	1
3	+	+	-	-	ab
4	-	+	-	-	b
5	+	-	+	-	ac
6	-	-	+	-	c
7	+	+	+	-	abc
8	-	+	+	-	bc
9	+	-	-	+	ad
10	-	-	-	+	d
11	+	+	-	+	abd
12	-	+	-	+	bd
13	+	-	+	+	acd
14	-	-	+	+	cd
15	+	+	+	+	abcd
16	-	+	+	+	bcd

2.3 การจำลองด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (Computational fluid dynamics, CFD)

ลักษณะทางกายภาพของการไหลของของไหลแต่ละชนิดถูกกำหนดด้วยชุดของสมการอนุรักษ์ (Conservation equations) 3 สมการคือ 1. สมการอนุรักษ์มวลหรือสมการความต่อเนื่อง (Continuity equations) 2. สมการอนุรักษ์โมเมนตัม (Momentum equations) และ 3. สมการอนุรักษ์พลังงาน (Energy equations) ซึ่งชุดสมการอนุรักษ์เหล่านี้สามารถแสดงให้อยู่ในรูปสมการทางคณิตศาสตร์อย่างง่าย ที่ส่วนใหญ่จะอยู่ในรูปของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial differential equation) การจำลองด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (CFD) จะใช้สมการเชิงตัวเลขแทนสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยของการไหลของของไหลในส่วนของเวลาหรือพื้นที่ที่เราสนใจ และนำไปคำนวณเพื่ออธิบายลักษณะของของไหลที่เกิดขึ้น ในบางกรณีวิธีการคำนวณจากที่กล่าวข้างต้นยังไม่สามารถใช้อธิบายปัญหาได้ครอบคลุมทั้งหมด จำเป็นต้องมีสมการเพิ่มเติมเข้ามาช่วยอธิบาย นอกเหนือจากสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย เช่น สมการอินทิกรัล แต่อย่างไรก็ตามในทุกกรณีจะต้องมีการจัดการปรับให้เหมาะสมเพื่อให้ได้ผลลัพธ์ที่เป็นเชิงตัวเลข ผลลัพธ์สุดท้ายของ CFD แท้จริงแล้วคือการเก็บรวบรวมผลลัพธ์ที่เป็นเชิงตัวเลข ในทางวิศวกรรมเพื่ออธิบายวิธีในการแก้ปัญหา (Algorithm) ในเชิงปริมาณหรือจำนวน อุปกรณ์ในการคำนวณหรือวิเคราะห์ผลของ CFD จะใช้คอมพิวเตอร์ความเร็วสูง ได้ผลลัพธ์ออกมาเป็นตัวเลขที่เกิดการวิเคราะห์ซ้ำหลายๆครั้ง ซึ่งเป็นค่าที่มนุษย์ไม่สามารถคำนวณได้เพราะมีจำนวนของข้อมูลที่มากเกินไป จึงต้องใช้คอมพิวเตอร์ในการช่วยคำนวณ ดังนั้นความก้าวหน้าของ CFD และการนำไปใช้งานแก้ปัญหาที่มากและมีความละเอียดสูงจึงต้องใช้งานกับคอมพิวเตอร์ที่ทันสมัย โดยเฉพาะเกี่ยวกับความสามารถในการจัดเก็บข้อมูลและการดำเนินการของโปรแกรมที่รวดเร็ว

2.3.1 ระเบียบวิธีการแบ่งช่วง (Discretization method)

ระเบียบวิธีการแบ่งช่วง (Discretization method) เป็นการแก้สมการด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข (Numerical solution) ซึ่งใช้ในการเปลี่ยนสมการเชิงอนุพันธ์ให้อยู่ในรูปสมการพีชคณิต (Arithmetic equation) โดยส่วนใหญ่จะใช้ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม เป็นระเบียบวิธีที่ใช้หลักการทางด้านพลศาสตร์ของไหลแบ่งปัญหาของปริมาตรควบคุม (Control volume) ที่สนใจออกเป็นส่วนๆ (Cell) ดังรูปที่ 2.2 ซึ่งมีความเหมาะสมต่อการแก้ปัญหาที่เกี่ยวข้องกับของไหลเช่นเดียวกับในงานวิจัยนี้



รูปที่ 2.2 ขอบเขตของปัญหาที่ถูกแบ่งออกเป็นปริมาตรควบคุมเล็กๆ ด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม [17]

ระเบียบวิธีการแบ่งช่วงนี้ จะแบ่งการพิจารณาออกเป็นเทอมของการพา (Convection) และการแพร่ (Diffusion) ของของไหล โดยจะอินทิเกรตสมการอนุรักษ์บนปริมาตรควบคุมที่ถูกแบ่งแยกออกมา แสดงสมการควบคุมพื้นฐาน (Governing equation) ในรูปของตัวแปร ϕ ได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho\phi\mathbf{u}) = \text{div}(\Gamma \text{grad} \phi) + S_\phi \quad (2.14)$$

จากสมการ (2.12) นี้เรียกว่า สมการการเคลื่อนที่ที่อยู่ในรูปของตัวแปร ϕ ประกอบด้วยเทอมที่อธิบายถึงอัตราของการเปลี่ยนแปลงกับเวลาและเทอมของการพาทางซ้ายของสมการ ส่วนทางขวาคือ เทอมของการแพร่ (Γ คือสัมประสิทธิ์การแพร่) และเทอมที่เหลืออื่น (Source term) สมการนี้จะใช้เป็นจุดเริ่มต้นสำหรับการคำนวณในระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม เมื่อทำการอินทิเกรตปริมาตรควบคุมทั้งหมดจะได้

$$\int_{CV} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{CV} \text{div}(\rho\phi\mathbf{u}) dV = \int_{CV} \text{div}(\Gamma \text{grad} \phi) dV + \int_{CV} S_\phi dV \quad (2.15)$$

ในงานวิจัยนี้วิเคราะห์การไหลภาวะไม่คงตัวสองมิติ เขียนเป็นสมการได้ดังนี้

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV + \int_{CV} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) dV + \int_{CV} \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) dV = \int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV + \int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV + \int_{CV} S_\phi dV \quad (2.16)$$

จากสมการข้างต้นสามารถแยกวิเคราะห์ที่ละเทอม กำหนดให้ $A_e = A_w = 1 \times \Delta y$ และ $A_n = A_s = 1 \times \Delta x$

แทนในเทอมที่อธิบายถึงอัตราของการเปลี่ยนแปลงกับเวลาดังนี้

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV = \rho^0 \phi_p \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (2.17)$$

แทนในเทอมของการพา ดังนี้

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) dV = (\rho u A)_e \phi_e - (\rho u A)_w \phi_w = F_e \phi_e - F_w \phi_w \quad (2.18)$$

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \phi) dV = (\rho v A)_n \phi_n - (\rho v A)_s \phi_s = F_n \phi_n - F_s \phi_s \quad (2.19)$$

แทนในเทอมของการแพร่ ดังนี้

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_w = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad (2.20)$$

$$\int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} A \right)_n - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} A \right)_s = D_n (\phi_N - \phi_P) - D_s (\phi_P - \phi_S) \quad (2.21)$$

และ Source term ดังนี้

$$\int_{CV} S_\phi dV = S_\phi V \quad (2.22)$$

เมื่อ F คือสัมประสิทธิ์ของการพา $(\rho u A)$ และ D คือ สัมประสิทธิ์ของการแพร่ $(\Gamma A / \delta)$

จากสมการทั้งหมดที่กล่าวมาข้างต้น สามารถหาค่าตัวแปร ϕ บนผิวปริมาตรควบคุมทั้งหมดได้จาก Discretization scheme แบบต่างๆ โดยในงานวิจัยนี้ใช้ระเบียบวิธีการแบ่งช่วงแบบ Upwind differencing scheme ซึ่งเป็นวิธีหนึ่งที่ใช้แก้ปัญหาของ Central differencing scheme ที่ไม่สามารถระบุทิศทางของการไหลของของไหลได้ การแบ่งช่วงแบบ Upwind differencing scheme นี้จะนำเอาทิศทางในการไหลเข้าไปวิเคราะห์ทำให้ได้ผลที่ถูกต้องและแม่นยำมากยิ่งขึ้น สามารถแบ่งออกได้เป็น 2 แบบคือ First order upwind differencing scheme และ Second order upwind differencing scheme แสดงรายละเอียดแต่ละแบบดังนี้

1. First order upwind differencing scheme

เนื่องจากในวิธีแบบ Center differencing scheme มีตัวแปรบางตัวในสมการที่มีค่าเป็นลบ ทำให้ผลเฉลยที่ได้จากการวิเคราะห์นั้นไม่ลู่เข้าสู่ค่าใดๆ วิธีนี้จึงมีการแก้ไขโดยไม่คิดเทอมของการแพร่ ส่วนในเทอมของการพาจะคำนวณค่า ϕ จาก interface ให้มีค่าเท่ากับที่ Grid point ของผิวปริมาตรควบคุมด้านต้นกระแสนของการไหล (Upstream) ดังแสดงในรูปที่ 2.3 มีข้อดีคือ การลู่เข้าของคำตอบที่มากกว่า แสดงสมการดังนี้

$$\phi_e = \phi_P \quad \text{เมื่อ} \quad F_e > 0$$

$$\phi_e = \phi_E \quad \text{เมื่อ} \quad F_e < 0$$

$$\phi_w = \phi_W \quad \text{เมื่อ} \quad F_w > 0$$

$$\phi_w = \phi_P \quad \text{เมื่อ} \quad F_w < 0$$

โดยค่าตัวแปรของ ϕ_n และ ϕ_s สามารถหาได้ในทำนองเดียวกัน และสมการทั่วไปในรูปสมการพีชคณิตสามารถเขียนได้ดังนี้

$$a_P \phi_P = a_w \phi_w + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_\phi V \quad (2.23)$$

เมื่อ

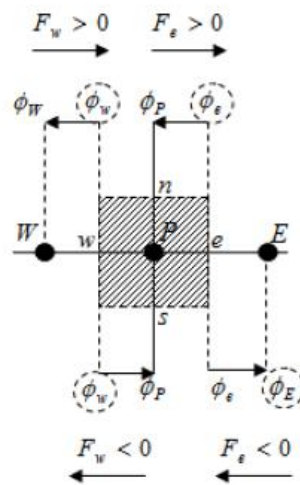
$$a_N = \max[-F_n, 0]$$

$$a_S = \max[F_s, 0]$$

$$a_E = \max[-F_e, 0]$$

$$a_W = \max[F_w, 0]$$

ที่ $\max[A, B]$ คือ ค่าสูงสุดของการเปรียบเทียบระหว่างค่า A และ B



รูปที่ 2.3 การประมาณค่าด้วยระเบียบวิธี First order upwind differencing scheme [17]

2. Second order upwind differencing scheme

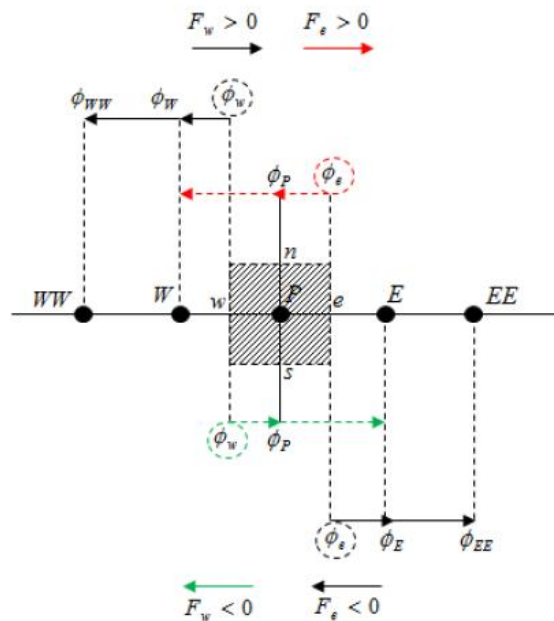
วิธีนี้ใช้หลักการเช่นเดียวกับในวิธี First order upwind differencing scheme คือ คำนวณค่า ϕ ของเทอมการพาที่ผิวปริมาตรควบคุมด้านต้นกระแสของการไหลแต่ค่าที่นำมาคำนวณจะเลือกที่สองตำแหน่งถัดออกไป ดังแสดงในรูปที่ 2.4 และจากการเลือกจุดข้อมูลที่มากขึ้นทำให้มีข้อดีคือ ผลของคำตอบจะมีความแม่นยำมากขึ้น แสดงสมการดังนี้

$$\phi_e = \frac{3}{2}\phi_P - \frac{1}{2}\phi_w \quad \text{เมื่อ} \quad F_e > 0$$

$$\phi_e = \frac{3}{2}\phi_E - \frac{1}{2}\phi_{EE} \quad \text{เมื่อ} \quad F_e < 0$$

$$\phi_w = \frac{3}{2}\phi_w - \frac{1}{2}\phi_{ww} \quad \text{เมื่อ} \quad F_w > 0$$

$$\phi_w = \frac{3}{2}\phi_P - \frac{1}{2}\phi_E \quad \text{เมื่อ} \quad F_w < 0$$



รูปที่ 2.4 การประมาณค่าด้วยระเบียบวิธี Second order upwind differencing scheme [17]

2.3.2 การแก้ปัญหาด้วยวิธี SIMPLE

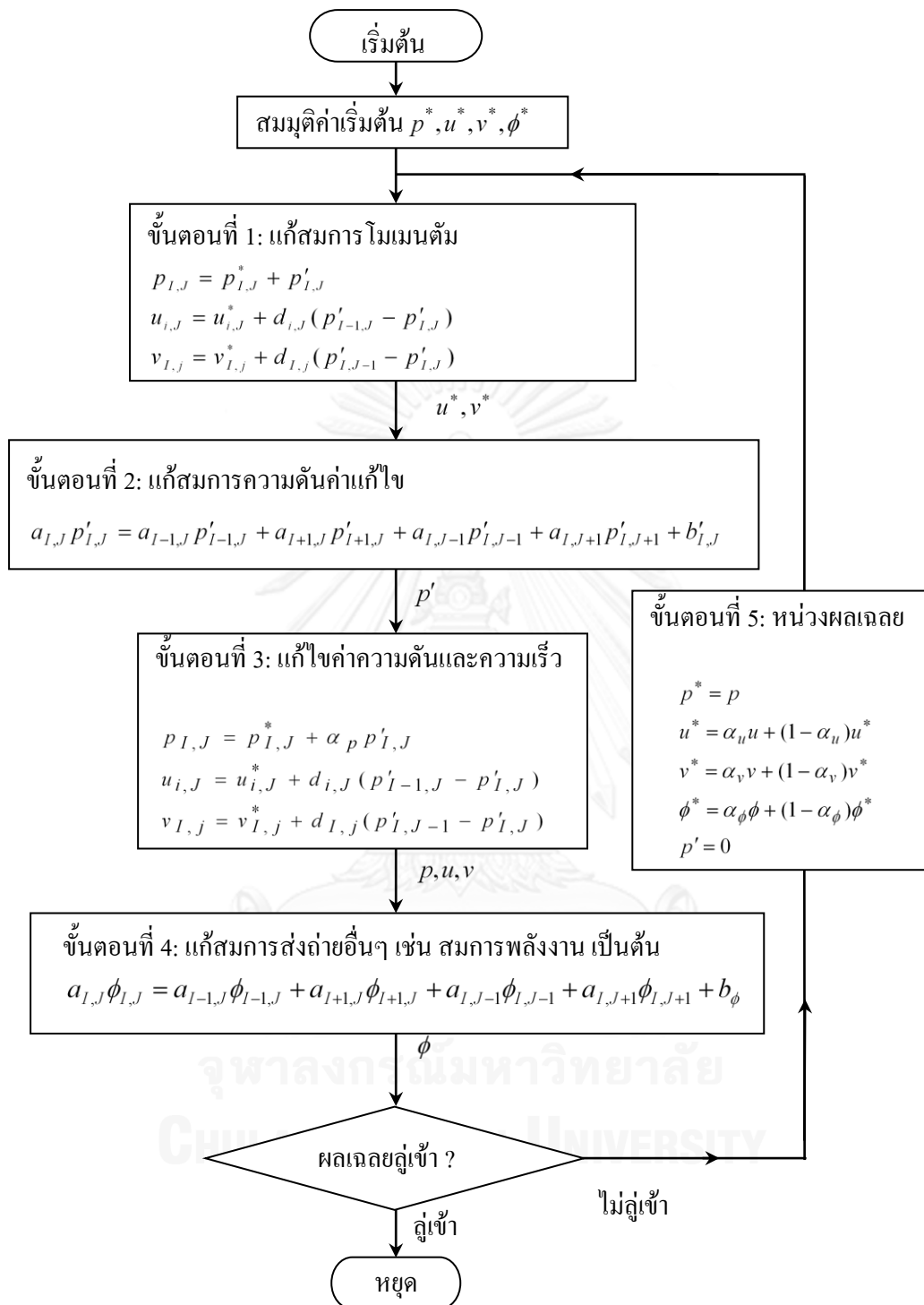
วิธี SIMPLE หรือ Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations มีขั้นตอนคือ การคำนวณแบบลองผิดลองถูกสำหรับหาค่าความดัน ซึ่งแสดงตัวอย่างด้วยสมการการไหลคงตัวแบบราบเรียบ (Laminar) สองมิติ เริ่มต้นจากการกำหนดค่าความดันแรกค่าหนึ่งเพื่อคำนวณค่าความเร็ว (จากสมการ Momentum conservation) และนำค่าความเร็วนี้ย้อนกลับไปหาค่าความดันอีกครั้ง (จากสมการ Mass conservation) ซึ่งค่าความดันที่ได้จะต้องมีความถูกต้องเพื่อนำไปสู่การคำนวณค่าความเร็วที่ถูกต้องโดยมี Pressure-correction method ช่วยคำนวณค่าความดันให้มีความแม่นยำมากขึ้น และจะทำซ้ำขั้นตอนทั้งหมด จนผลเฉลยลู่เข้าสู่ค่าหนึ่ง แสดงดังรูปที่ 2.5 การแก้ปัญหาด้วยวิธีนี้จะช่วยให้ค่าความดันและความเร็วที่ได้มีความสัมพันธ์กันตามสมการอนุรักษ์มวลและโมเมนตัม

การคำนวณค่าความดันและความเร็วข้างต้น โดยทั่วไปจะเป็นแบบไม่เชิงเส้น ซึ่งทำให้คำตอบที่ได้ออกมาไม่มีความแปรปรวนหรือมีการเปลี่ยนแปลงต่อการคำนวณแต่ละครั้งสูง ดังนั้น จึงมีการใส่ค่าตัวแปร relaxation เพื่อแก้ไขปัญหานี้ มีผลให้การคำนวณได้ลู่เข้าสู่คำตอบได้ดีขึ้น ค่า relaxation มีค่าระหว่างศูนย์ถึงหนึ่ง แสดงสมการหาค่าตัวแปร relaxation ดังนี้

$$\phi = \phi_{old} + \alpha \Delta \phi \quad (2.24)$$

เมื่อ ϕ_{old} คือ ตัวแปรจากการคำนวณในครั้งที่แล้ว

α คือ relaxation factor มีค่า $(0 \leq \alpha \leq 1)$



รูปที่ 2.5 ขั้นตอนวิธี SIMPLE

2.4 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

สำหรับงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการจำลองอุทกพลศาสตร์ของไหลภายในกระบวนการเคมีคอลลูบิง มีดังนี้

Cruz และคณะ [18] ทดสอบแบบจำลองใหม่เพื่อใช้ในการทำนายอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดเบดแบบหมุนเวียนในท่อไรเซอร์ที่มีความหนาแน่นสูง โดยได้พัฒนาในส่วนของสัมประสิทธิ์แรงต้าน (drag coefficient) และความหนืดของของผสมระหว่างแก๊สและอนุภาคของแข็ง อนุภาคของแข็งที่ใช้เป็นชนิดเจลดาร์ทเอ (Galdart A) พบว่า แบบจำลองใหม่ที่พัฒนาขึ้นนี้สามารถใช้ทำนายพฤติกรรมการไหลของแก๊สและอนุภาคของแข็งได้ โดยจะมีผลมากเมื่อใช้ทำนายที่บริเวณใกล้กับผนังที่จะมีความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งสูงที่สุด ผลที่ได้ใกล้เคียงกับผลจากการทดลองของงานวิจัยที่ผ่านมาที่มีโครงสร้างการไหลที่เบาบางตรงแกนกลางและหนาแน่นที่ผนัง นอกจากนี้ ยังได้ทำการเปรียบเทียบกับผลจากการทดลองอื่นในท่อไรเซอร์ แบบจำลองก็ยังทำนายค่าใกล้เคียงกับข้อมูลจากการทดลองเช่นเดียวกัน คือ ความเร็วของอนุภาคของแข็งสูงที่บริเวณตรงกลางและลดลงที่บริเวณใกล้บริเวณผนัง ซึ่งสอดคล้องกับการทดลองที่นำมาเปรียบเทียบในข้างต้น ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า แบบจำลองที่พัฒนาขึ้นมาใหม่นี้ เหมาะกับการทำนายเครื่องฟลูอิดเบดแบบหมุนเวียนในท่อไรเซอร์ที่มีความหนาแน่นสูงและอนุภาคของแข็งที่จัดอยู่ในกลุ่มเจลดาร์ทเอ

Mahalatkar และคณะ [2] จำลองอุทกพลศาสตร์การเผาไหม้ของกระบวนการเคมีคอลลูบิงในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงโดยใช้เหล็กออกไซด์เป็นตัวพาออกซิเจน เพื่อทำปฏิกิริยากับเชื้อเพลิงถ่านหินซึ่งมีสมการทางคณิตศาสตร์คำนวณเพื่ออธิบายพฤติกรรมของทั้งในส่วนแก๊สและอนุภาคของแข็ง โดยเปรียบเทียบผลที่ได้กับผลจากการทดลอง ในงานวิจัยนี้ พบว่าแบบจำลองสามารถทำนายความเข้มข้นของคาร์บอนไดออกไซด์ คาร์บอนมอนอกไซด์และมีเทน ได้ใกล้เคียงกับผลจากการทดลอง ลักษณะการไหลที่เกิดขึ้น จะพบฟองอากาศที่แกนกลางและมีอนุภาคของแข็งจำพวกเหล็กออกไซด์ตลอดความยาวของผนังของเครื่องปฏิกรณ์ นอกจากนี้ Mahalatkar และคณะ [19] ยังได้ทำการจำลองอุทกพลศาสตร์ในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงที่มีการเผาไหม้กับเชื้อเพลิงมีเทน ซึ่งพบว่าแบบจำลองสามารถทำนายได้ใกล้เคียงกับผลการทดลองเช่นเดียวกันสำหรับลักษณะการไหลเกิดฟองอากาศภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง บริเวณที่เกิดฟองอากาศมีปริมาณของมีเทนสูงแต่มีปริมาณของโลหะออกไซด์ในปริมาณต่ำจึงทำให้บริเวณนั้นมีอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ต่ำอันส่งผลให้มีคาร์บอนไดออกไซด์ที่ต่ำด้วย โดยปริมาณความเข้มข้นของคาร์บอนไดออกไซด์ก็จะเพิ่มขึ้นตามความสูงของเครื่องปฏิกรณ์

Shuai และคณะ [20] พิจารณาพฤติกรรมการไหลของแก๊สและอนุภาคของแข็งจากการจำลองอุทกพลศาสตร์ของปฏิกิริยาการเผาไหม้ในกระบวนการเคมีคอลลูบิง ที่ประกอบด้วยเครื่องปฏิกรณ์อากาศและเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง ในระบบสองมิติ โดยใช้แบบจำลองอีเอ็มเอ็มเอส (energy minimization multi scale, EMMS) ในการทำนายพฤติกรรมของแก๊สและอนุภาคของแข็ง พบว่า ในเครื่องปฏิกรณ์อากาศมีความเร็วของแก๊สสูงและอนุภาคของแข็งไหลขึ้นด้านบนอนุภาคของแข็งชนกับผนังตกกลับสู่ด้านล่าง อนุภาคของแข็งรวมตัวเกาะกลุ่มที่บริเวณใกล้กับผนังจึงมีความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งสูง ส่วนในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิงจะพบฟองอากาศขนาดเล็กใกล้กับ

ทางเข้าและตรงบริเวณส่วนกลางของเบตเกิดการรวมตัวเกิดเป็นฟองอากาศขนาดใหญ่ทำให้ความเข้มข้นอนุภาคของแข็งลดลง ซึ่งสอดคล้องกับผลจากการทดลองที่ศึกษาในอดีต นอกจากนี้ Shuai และคณะ [11] ยังได้ทำการศึกษาพฤติกรรมการไหลของแก๊สและอนุภาคของแข็ง ด้วยวิธีการทำนายอุทกพลศาสตร์ของเครื่องฟลูอิดซ์เบตแบบหมุนเวียน โดยใช้แบบจำลองสัมประสิทธิ์แรงต้านการเคลื่อนที่แบบไม่เป็นอิสระต่อโครงสร้างกลุ่มอนุภาคหรือซีเอสดี (cluster structure-dependent drag coefficient model, CSD) ร่วมกันกับสมการออยเลอร์ พบว่า แบบจำลองนี้ สามารถใช้อธิบายการไหลของกลุ่มอนุภาคของแข็ง โดยการกระจายตัวของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมี มีความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งต่ำบริเวณตรงกลางและสูงที่บริเวณใกล้กับผนังซึ่งมีค่าใกล้เคียงกับผลจากการทดลองส่วนการกระจายตัวของอนุภาคของแข็งในแนวแกนของท่อไรเซอร์ ความเร็วของอนุภาคของแข็งบริเวณตรงกลางมีค่าเป็นบวกและลบที่บริเวณผนัง แสดงว่าอนุภาคของแข็งเคลื่อนที่ด้วยความเร็วสูงที่บริเวณตรงกลางของท่อไรเซอร์และมีการไหลตกกลับของอนุภาคของแข็งที่บริเวณผนัง ซึ่งจากผลที่ได้ทั้งในแนวรัศมีและแนวแกน สามารถสรุปได้ว่าโครงสร้างที่ทำนายได้มีลักษณะเป็นแบบแกนใน-วงนอก (core-annulus)

Shuai และคณะ [7] ศึกษาการจำลองอุทกพลศาสตร์การเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิงในเครื่องปฏิกรณ์อากาศโดยแบบจำลองซีเอสดี สมดุลโมเมนตัมจะถูกนำมาใช้ในการอธิบายคุณสมบัติของอนุภาคของแข็งที่เกาะกลุ่มทั้งในส่วนที่หนาแน่นและส่วนที่เบาบาง จากผลการวิเคราะห์การกระจายของความเข้มข้นของอนุภาคของแข็ง พบว่า การกระจายตัวในแนวรัศมีของอนุภาคของแข็งหนาแน่นที่บริเวณผนังและเบาบางที่แกนกลางของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ส่วนการกระจายตัวในแนวแกน พบว่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งมีปริมาณสูงที่ด้านล่างและมีปริมาณของอนุภาคของแข็งต่ำที่ด้านบนของเครื่องปฏิกรณ์ ซึ่งสอดคล้องกับผลจากการทดลองของ Shuai และคณะ [11] และ Issangya และคณะ [12] และจากการทำนายโดยใช้แบบจำลองนี้ พบว่าปฏิกิริยาเคมีที่เกิดคือปฏิกิริยาออกซิเดชันในเครื่องปฏิกรณ์อากาศมีอิทธิพลต่อการทำนายพฤติกรรมการไหลของอนุภาคของแข็งที่เกาะกลุ่ม เพราะสามารถอธิบายแรงกระทำระหว่างแก๊สและอนุภาคของแข็งได้ใกล้เคียงกับการทดลองจริงจึงส่งผลให้การทำนายความเข้มข้นของออกซิเจนและอุณหภูมิทั้งส่วนแก๊สและอนุภาคของแข็งได้อย่างถูกต้องโดยใช้โค้ดเปอร์ออกไซด์เป็นตัวพาออกซิเจนที่ใช้ศึกษาภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศนี้

Loha และคณะ [21] ศึกษาการจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดซ์เบตที่มีการไหลแบบฟองอากาศโดยเปรียบเทียบค่าสเปกคิวลาริตี (specularity coefficient) ที่มีอิทธิพลต่อพฤติกรรมการไหลของแก๊สและอนุภาคของแข็ง พบว่า ที่ความสูงต่างๆ สัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมี มีลักษณะเหมือนกันคือมีอนุภาคของแข็งหนาแน่นบริเวณผนังและแกนกลาง โดยที่ค่าสเปกคิวลาริตี เท่ากับ 0 และ 0.01 พบสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งสูงกว่าเมื่อเปรียบเทียบกับค่าอื่น จากค่าสเปกคิวลาริตี เท่ากับ 0 หรือที่ค่าต่ำ แสดงให้เห็นว่าระหว่างอนุภาคของแข็งและผนังไม่มีแรงเสียดทานระหว่างกันทำให้อนุภาคของแข็งไหลลงจำนวนมาก จากผลนี้ทำให้มีความเร็วของอนุภาคของแข็งสูงและอนุภาคของแข็งมีการตกกลับที่บริเวณผนังอย่างมากแต่สำหรับค่าสเปกคิวลาริตี เท่ากับ 1 หรือที่ค่าสูงแสดงว่าระหว่างอนุภาคของแข็งและผนังมีแรงเสียดทานอยู่สูง ส่งผลให้เกิดแรงต้านทานการไหลของอนุภาคของแข็งจึงทำให้ความเร็วของอนุภาค

ของแข็งใกล้บริเวณผนังมีค่าที่ต่ำ ส่วนการกระจายอนุภาคของแข็งในแนวแกนพบว่าที่ค่าสเปกคิวลาริตีแตกต่างกันมีแนวโน้มเดียวกันคือ อนุภาคของแข็งหนาแน่นที่ด้านล่างโดยเฉพาะผนังและลดลงตามความสูงของเบต

Zhou และคณะ [22] วิเคราะห์ตัวแปรต่างๆที่ส่งผลในท่อโรเตอร์ของเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดซ์เบตด้วยวิธีจำลองอุทกพลศาสตร์โดยพิจารณาแบบจำลอง 2 แบบจำลองคือ แบบจำลองจีดาสพาว (Gidaspow drag model) และ อีเอ็มเอ็มเอส โดยตัวแปรที่ศึกษาคือ สเปกคิวลาริตี และสัมประสิทธิ์แรงยึดหยุ่นของอนุภาคของแข็งและผนัง (particle-wall restitution coefficient) พบว่าในแนวแกน ค่าของช่องว่างระหว่างอนุภาคของแข็งที่ค่าสเปกคิวลาริตี ที่แตกต่างกันมีแนวโน้มเป็นลักษณะตัวเอสซึ่งแบบจำลองอีเอ็มเอ็มเอสให้ผลการทำนายที่ใกล้เคียงกับผลจากการทดลองมากกว่าแบบจำลองจีดาสพาวโดยค่าสเปกคิวลาริตี เท่ากับ 0 และ 0.00005 ให้ผลใกล้เคียงกับผลจากการทดลองที่สุด และการวิเคราะห์สัมประสิทธิ์แรงยึดหยุ่นของอนุภาคของแข็งและผนังพบว่าแนวโน้มของช่องว่างระหว่างอนุภาคของแข็งที่ค่าสัมประสิทธิ์แรงยึดหยุ่นของอนุภาคของแข็งและผนังแตกต่างกันในแนวแกนมีค่าแตกต่างกันเล็กน้อยซึ่งสามารถพบลักษณะเช่นเดียวกันนี้ ได้ในงานวิจัยที่ผ่านมา จึงสรุปได้ว่าค่าสัมประสิทธิ์แรงยึดหยุ่นของอนุภาคของแข็งและผนังมีผลเล็กน้อยต่อการจำลองอุทกพลศาสตร์ในท่อโรเตอร์

บทที่ 3

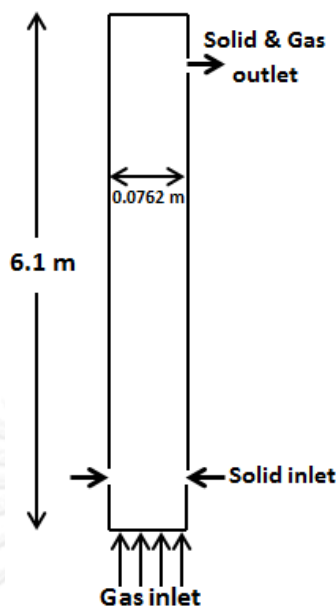
วิธีดำเนินการวิจัย

3.1 ข้อมูลเบื้องต้นในงานวิจัย

การจำลองอุทกพลศาสตร์ของของไหลภายในวิทยานิพนธ์นี้ จะศึกษาการจำลองการไหลภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง เปรียบเทียบกับการทดลองของ Shuai และคณะ [11] และ Issangya และคณะ (2000) [12] โดยมีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ 0.0762 เมตรและมีความสูง 6.1 เมตร ดังรูปที่ 3.1 อนุภาคของแข็งที่ใช้เมื่อยึดหลักการแบ่งชนิดของเจลดาร์ท (Geldart classification) แล้วจัดอยู่ในกลุ่มเจลดาร์ทเอ (Geldart A) ที่เป็นชนิดที่มีขนาดเหมาะแก่การเกิดฟลูอิดไอส์ โดยมีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางประมาณ 170 ไมโครเมตร และความหนาแน่น 1600 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร ค่าจากการจำลองที่นำมาเปรียบเทียบกับผลการทดลองคือ ค่าความเข้มข้นโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งทั้งในแนวแกนและแนวรัศมี

การจำลองการไหลของของไหลแบบสองวัฏภาคคือ จะตั้งสมมติฐานให้อนุภาคของแข็งและแก๊สประพฤติตัวคล้ายของไหล ภายใต้สภาวะทั้งที่ไม่มีการเกิดปฏิกิริยาเคมี (Cold flow condition) และมีปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นภายในระบบ (Hot flow condition) โดยอนุภาคของแข็งจะถูกป้อนเข้าเครื่องปฏิกรณ์อากาศทางด้านข้าง ซึ่งเป็นอนุภาคของแข็งที่ยังไม่เกิดปฏิกิริยา อนุภาคของแข็งหลังเกิดปฏิกิริยาแล้วที่ผ่านการฟื้นฟูสภาพจะถูกส่งกลับมาใช้ใหม่ต่อไป เนื่องจากเป็นลักษณะของกระบวนการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง ส่วนแก๊สจะถูกป้อนเข้าทางด้านล่างด้วยความเร็วที่สม่ำเสมอ

ภายในงานวิจัยนี้จะแบ่งการจำลองการไหลออกเป็น 4 ส่วนคือ 1. การจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์อากาศเปรียบเทียบกับงานวิจัยที่ผ่านมา (Shuai และคณะ [11] และ Issangya และคณะ [12]) 2. การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ (Operating parameter) ต่ออุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ 3. การจำลองปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ และ 4. การวิเคราะห์ผลของตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่อปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ



รูปที่ 3.1 แผนภาพเครื่องปฏิกรณ์อากาศที่ใช้ในการจำลอง

3.2 การจำลองอุทกพลศาสตร์ในงานวิจัย

การหาแบบจำลองการไหลด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลของเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง จะประกอบด้วย 2 ส่วนคือ การหาพื้นที่คำนวณที่เหมาะสม (Grid independency test) และการหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ (Mathematical model)

3.2.1 การหาพื้นที่คำนวณที่เหมาะสม (Grid independency test)

การหาพื้นที่คำนวณที่เหมาะสม (Grid independency test) เป็นวิธีการทดสอบเพื่อวัดความถูกต้องของผลจากการคำนวณที่จะไม่ขึ้นกับขนาดของช่องหรือจำนวนเซลล์ที่ใช้ในการคำนวณ ในการจำลองมีความจำเป็นที่จะต้องกำหนดขนาดของเซลล์เพื่อกำหนดพื้นที่ที่จะใช้ในการคำนวณ ซึ่งขนาดของแต่ละช่องที่มีความถี่ที่มากขึ้นนั้นจะช่วยส่งผลให้การคำนวณมีความละเอียดมากขึ้นได้ อย่างไรก็ตามค่าที่แม่นยำมากขึ้นจะส่งผลให้ใช้เวลาในการจำลองที่มากขึ้นตามไปด้วย สำหรับงานวิจัยนี้ใช้เซลล์ในการคำนวณที่มีระยะห่างของแต่ละช่อง (Grid) การคำนวณที่ไม่เท่ากัน (Non-uniform) ทั้งหมด 4 ค่าคือ 3500, 6500, 9500 และ 12500 เซลล์ ตามลำดับ แสดงดังรูปที่ 3.2



รูปที่ 3.2 การแบ่งพื้นที่จำนวน (ก) 3,500 (ข) 6,500 (ค) 9,500 และ (ง) 12,500 เซลล์

3.2.2 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ (Mathematic model)

ในงานวิจัยนี้ ใช้ทฤษฎีในการสร้างแบบจำลองการไหลของสองวัฏภาคแก๊ส-ของแข็ง ด้วยแนวคิดการคำนวณแบบออยเลอร์-ออยเลอร์ (Eulerian-Eulerian method) ซึ่งเป็นวิธีที่จะพิจารณาของไหลทั้งสองวัฏภาคที่เกิดการไหลอย่างต่อเนื่อง โดยจะนำเอาสมการอนุรักษ์มาคำนวณพร้อมกัน แต่จะพิจารณาแยกกันตามสมบัติพื้นฐานของการไหลแต่ละวัฏภาค สมการอนุรักษ์มวล โมเมนตัม และพลังงานจลน์การกวัดแกว่งของของแข็งถูกเสนออยู่ในสมการอนุรักษ์แสดงในหัวข้อถัดไป สมการอนุรักษ์เพิ่มเติมมีพื้นฐานมาจากทฤษฎีจลน์การไหลของของแข็ง (Kinetic Theory of Granular Flow: KTGF) เพื่อนำมาช่วยในการกำหนดค่าความดันและความหนืดของของแข็ง ซึ่งสมมติให้ของแข็งมีการไหลคล้ายแก๊ส คือมีการชนกันแบบไร้ทิศทางหรือไม่เป็นระเบียบ ทั้งชนกันเองระหว่างอนุภาคของและชนกันระหว่างอนุภาคของแข็งกับผนัง ค่าที่เกี่ยวข้องกับพฤติกรรมเหล่านี้ ได้แก่ ค่า specularity coefficient ที่เป็นค่าตัวแปรที่ใช้อธิบายสัดส่วนในการชนกันของอนุภาคของแข็งที่มีการถ่ายโอนพลังงานไปยังผนัง มีค่าอยู่ระหว่างศูนย์ถึงหนึ่ง ถ้ามีค่าเข้าใกล้ศูนย์แสดงว่าผนังมีความเรียบ ไม่เกิดการสูญเสียพลังงานจลน์ในการชน ในทางตรงกันข้าม ค่าเข้าใกล้หนึ่ง แสดงว่าผนังมีความขรุขระ เกิดการสูญเสียเนื่องจากพลังงานจลน์ และอีกค่าที่มีความเกี่ยวข้องคือ ค่า restitution coefficient ที่อธิบายถึงสัดส่วนการสูญเสียพลังงานที่เกิดจากการชนกันเองระหว่างอนุภาคของแข็งหรือระหว่างอนุภาคของแข็งกับผนัง ส่งผลต่อการคำนวณของสมการอนุรักษ์โมเมนตัม

มีค่าอยู่ระหว่างศูนย์ถึงหนึ่ง เมื่อค่าเข้าใกล้ศูนย์ แสดงว่าเกิดการชนกันแบบไม่ยืดหยุ่น (Inelastic collision) มีการสูญเสียทั้งความเร็วและพลังงานจลน์ ในขณะที่ค่าเข้าใกล้หนึ่ง จะเกิดการชนแบบยืดหยุ่น (Elastic collision) ไม่มีการสูญเสียความเร็วและพลังงานจลน์

3.2.2.1 สมการอนุรักษ์ (Conservation equations)

3.2.2.1.1 สมการอนุรักษ์มวล (Mass conservation equations)

วิญภาคแก๊ส ,

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g v_g) = 0 \quad (3.1)$$

วิญภาคของแข็ง ,

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

เมื่อ

ε_s คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของวิญภาคของแข็ง (-)

ε_g คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของวิญภาคแก๊ส (-)

ρ_s คือ ความหนาแน่นของวิญภาคของแข็ง (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร)

ρ_g คือ ความหนาแน่นของวิญภาคแก๊ส (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร)

v_s คือ ความเร็วของวิญภาคของแข็ง (เมตรต่อวินาที)

v_g คือ ความเร็วของวิญภาคแก๊ส (เมตรต่อวินาที)

t คือ เวลา (วินาที)

3.2.2.1.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัม (Momentum conservation equations)

วิญภาคแก๊ส ,

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g v_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g v_g v_g) = \nabla \cdot \tau_g - \varepsilon_g \nabla P + \varepsilon_g \rho_g g + \beta(v_g - v_s) \quad (3.3)$$

วิญภาคของแข็ง ,

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

- เมื่อ τ_g คือ ความเค้นเทนเซอร์ของแก๊ส (พาสคาล)
 τ_s คือ ความเค้นเทนเซอร์ของของแข็ง (พาสคาล)
 P_g คือ ความดันของวิภูภาคแก๊ส (พาสคาล)
 P_s คือ ความดันของวิภูภาคของแข็ง (พาสคาล)
 β คือ แบบจำลองการต้านการเคลื่อนที่ระหว่างวิภูภาค (กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสามวินาที)
 g คือ ความเร่งเนื่องจากแรงโน้มถ่วง (เมตรต่อวินาทีกำลังสอง)

3.2.2.1.3 สมการอนุรักษ์พลังงานจลน์เนื่องจากการกวัดแกว่ง (Fluctuating kinetic energy conservation equation) ของวิภูภาคของแข็ง

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

- เมื่อ I คือ เทนเซอร์เอกลักษณ์ (-)
 θ_s คือ พลังงานจลน์เนื่องจากการกวัดแกว่งของอนุภาค (เมตรกำลังสองต่อวินาทีกำลังสอง)
 K_s คือ พลังงานกวัดแกว่งเนื่องจากการนำ (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที)
 γ_s คือ พลังงานกวัดแกว่งเนื่องจากการชนแบบไม่ยืดหยุ่น (กิโลกรัมต่อเมตรวินาทีกำลังสาม)

3.2.2.2 สมการเสริม (Constitutive equations)

สมการเสริมนี้มีพื้นฐานจากทฤษฎีจลน์การไหลของของแข็ง ซึ่งจะเข้ามาช่วยในการคำนวณหาคำตอบของสมการอนุรักษ์ที่ได้กล่าวข้างต้น ความเค้นเทนเซอร์สำหรับทั้งสองวิภูภาคแสดงดังนี้

วิภูภาคแก๊ส,

$$\tau_g = \varepsilon_g \mu_g \left[\frac{1}{2} [\nabla \cdot v_g + (\nabla \cdot v_g)^T] - \frac{2}{3} (\nabla \cdot v_g) I \right] \quad (3.6)$$

วิภูภาคของแข็ง,

$$\tau_s = \varepsilon_s \mu_s [\nabla \cdot v_s + (\nabla \cdot v_s)^T] - \varepsilon_s \left(\xi_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot v_s \quad (3.7)$$

เมื่อ ξ_s คือ ความหนืดรวม (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที)

μ_s คือ ความหนืดเนื่องจากความเค้น (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที)

ความดันของอนุภาคสามารถแบ่งออกได้เป็นสองส่วนคือ ส่วนที่เป็นจลนพลศาสตร์แสดงถึงอิทธิพลที่มีต่อการเคลื่อนที่ของอนุภาค และส่วนที่สองเป็นส่วนที่เกิดการชนกันของอนุภาคโดยตรงแล้วเกิดการถ่ายโอนโมเมนตัม

$$P_s = \varepsilon_s \rho_s \theta_s + 2\rho_s(1+e)\varepsilon_s^2 g_0 \theta_s \quad (3.8)$$

เมื่อ g_0 คือ ฟังก์ชันการกระจายในแนวรัศมีของอนุภาคของแข็ง (-)

e คือ ค่า Restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็ง (-)

ความหนืดเนื่องจากความดันที่อยู่ในแนวสัมผัส สามารถคำนวณได้ดังสมการด้านล่าง

$$\mu_s = \frac{4}{5} \varepsilon_s \rho_s d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10\rho_s d_p \sqrt{\pi\theta}}{96(1+e)g_0 \varepsilon_s} \left[1 + \frac{4}{5} \varepsilon_s g_0 (1+e) \right]^2 \quad (3.9)$$

เมื่อ d_p คือ เส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาคของแข็ง (เมตร)

ความหนืดรวมกำหนดจากค่าความต้านทานการอัดของอนุภาคของแข็งเปรียบเทียบกับค่าการขยายตัวของอนุภาคของแข็ง

$$\xi_s = \frac{4}{3} \varepsilon_s \rho_s d_p g_0 (1+e) \left(\frac{\theta_s}{\pi} \right)^{1/2} \quad (3.10)$$

ฟังก์ชันการกระจายในแนวรัศมีของอนุภาคของแข็ง เป็นความน่าจะเป็นของการชนกันระหว่างอนุภาคของแข็ง เมื่อสัดส่วนของอนุภาคของแข็งนั้นอัดตัวกันอย่างหนาแน่น ($\varepsilon_{s,\max} = 0.60$)

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (3.11)$$

เมื่อ $\varepsilon_{s,\max}$ คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของวัฏภาคของแข็งที่สภาวะที่มีการอัดตัวหนาแน่นที่สุด

พลังงานกวัดแกว่งเนื่องจากการนำถูกกำหนดโดยค่าพลังงานการแพร่กระจายของอนุภาคขนาดเล็ก

$$K_s = \frac{150\rho_s d_p \sqrt{\theta_s \pi}}{384(1+e)g_0} \left[1 + \frac{6}{5} g_0 \varepsilon_s (1+e) \right]^2 + 2\varepsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1+e) \left(\frac{\theta_s}{\pi} \right)^{1/2} \quad (3.12)$$

อัตราการกระจายตัวของพลังงานจลน์การกวัดแกว่งที่เกิดจากการชนกันของอนุภาคของแข็งที่ไม่ยึดหยุ่น แสดงดังนี้

$$\gamma_s = 3\varepsilon_s^2 \rho_s g_0 \theta (1-e^2) \left[\frac{4}{d_p} \left(\frac{\theta}{\pi} \right) \right] \quad (3.13)$$

3.2.2.3 แบบจำลองสัมประสิทธิ์แรงต้านการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาค (Interphase exchange coefficient model, β_{gs})

ในงานวิจัยนี้ศึกษาการจำลองอุทกพลศาสตร์ด้วยโปรแกรมสำเร็จรูป ANSYS FLUENT 14.0 ที่ประกอบด้วยแบบจำลองสัมประสิทธิ์แรงต้านการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาคทั้งหมด 6 แบบจำลอง ซึ่งเป็นฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์ที่ใช้อธิบายการเคลื่อนที่ของอนุภาคของแข็งในของไหล ค่าที่ได้สูงหรือต่ำนั้น จะแสดงถึงแรงต้านทานการพาของอนุภาคของแข็งภายในระบบ โดยแบบจำลองที่ใช้ศึกษาแสดงดังนี้

3.2.2.3.1 แบบจำลอง Syamlal-O'Brien

หาได้จากการวัดความเร็วสุดท้าย (Terminal velocity) ของอนุภาคของแข็งในการเกิดฟลูอิดซ์หรือการตกตะกอนของเบด ที่เป็นความสัมพันธ์ระหว่างฟังก์ชันสัดส่วนโดยปริมาตรและความสัมพันธ์ของตัวเลขเรย์โนลด์ (Reynolds number)

$$\beta_{gs} = \frac{3(1-\varepsilon_g)\varepsilon_g}{4} \frac{\rho_g}{v_{r,s}^2 d_p} \frac{\text{Re}_s}{v_{r,s}} C_D |v_g - v_s| \quad (3.14)$$

เมื่อ $v_{r,s}$ คือ ความเร็วสุดท้ายของอนุภาคของแข็ง (เมตรต่อวินาที)

$$v_{r,s} = 0.5 \left(A - 0.06 \text{Re}_s + \sqrt{(0.06 \text{Re}_s)^2 + 0.12 \text{Re}_s (2B - A) + A^2} \right) \quad (3.15)$$

Re_s คือ ตัวเลขไรหน่วยเรย์โนลด์ (-)

$$\text{Re}_s = \frac{\varepsilon_g |v_g - v_s| d_p}{\mu_g} \quad (3.16)$$

C_D คือ ค่าสัมประสิทธิ์การต้านทานการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาค (-)

$$C_D = \left(0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{\text{Re}_s / v_{r,s}}} \right)^2 \quad (3.17)$$

$$A = \varepsilon_g^{4.14} \quad (3.18)$$

สำหรับ $\varepsilon_g \leq 0.85$, $B = 0.8 \varepsilon_g^{1.28}$ (3.19)

และ $\varepsilon_g > 0.85$, $B = \varepsilon_g^{2.65}$ (3.20)

3.2.2.3.2 แบบจำลอง Wen และ Yu

เหมาะสมกับระบบการจำลองที่มีสัดส่วนของอนุภาคของแข็งแบบเบาบาง

$$\beta_{gs} = \frac{3(1-\varepsilon_g)\varepsilon_g}{4d_p} \rho_g |v_g - v_s| C_{D0} \varepsilon_g^{-2.65} \quad (3.21)$$

เมื่อ $C_D = \frac{24}{\varepsilon_g \text{Re}_s} \left[1 + 0.15 \left((1-\varepsilon_g) \text{Re}_s \right)^{0.687} \right]$ (3.22)

$$\text{Re}_s = \frac{\rho_g d_p |v_s - v_g|}{\mu_g} \quad (3.23)$$

3.2.2.3.3 แบบจำลอง Gidaspow

เป็นแบบจำลองที่เกิดจากการรวมกันของ สมการในแบบจำลองของ Wen และ Yu สำหรับทำนายในบริเวณที่มีสัดส่วนของอนุภาคของแข็งเบาบาง และ สมการของ Ergun สำหรับคำนวณในส่วนที่มีอนุภาคของแข็งหนาแน่น

สำหรับ $\varepsilon_g > 0.8$,

$$\beta_{gs} = \frac{3(1-\varepsilon_g)\varepsilon_g}{4d_p} \rho_g |v_g - v_s| C_{D0} \varepsilon_g^{-2.65} \quad (3.24)$$

และ $\varepsilon_g \leq 0.8$,

$$\beta_{gs} = \frac{150(1-\varepsilon_g)^2 \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + \frac{1.75(1-\varepsilon_g) |v_s - v_g|}{d_p} \quad (3.25)$$

3.2.2.3.4 แบบจำลอง Huilin-Gidaspow

เป็นจำลองที่เกิดจากการรวมกันระหว่างสมการของ Wen and Yu และ Ergun เช่นเดียวกัน แต่อย่างไรก็ตาม การใช้งานแบบจำลองทั้งสองจะคำนวณผ่านฟังก์ชัน

$$\beta_{gs} = \psi \beta_{gs-Ergun} + (1-\psi) \beta_{gs-WenandYu} \quad (3.26)$$

เมื่อ
$$\psi = \frac{1}{2} + \frac{\arctan(262.5(1-\varepsilon_g) - 0.2)}{\pi} \quad (3.27)$$

3.2.2.3.5 แบบจำลอง Gibilaro

เป็นแบบจำลองที่พัฒนาจากสมการความต่อเนื่องของอนุภาคของแข็ง ที่ศึกษาจากตำแหน่งเหนือบริเวณช่องว่างระหว่างอนุภาคของแข็งหรือเมื่ออนุภาคของแข็งเกิดการขยายตัว สำหรับในระบบฟลูอิดซ์เบดทั้งการไหลแบบราบเรียบ (laminar) และแบบปั่นป่วน (turbulent) [23]

$$\beta_{gs} = \left(\frac{18}{\text{Re}} + 0.33 \right) \frac{\rho_f |v_s - v_g|}{d_p} (1 - \varepsilon_g) \varepsilon_g - 1.8 \quad (3.28)$$

เมื่อ
$$\text{Re} = \frac{\varepsilon_g \rho_g d_p |v_s - v_g|}{\mu_g} \quad (3.29)$$

3.2.2.3.6 แบบจำลอง Energy Minimization Multi-Scale (EMMS)

เป็นแบบจำลองของ Yang และคณะ [24] ที่ได้พัฒนาขึ้นมีแนวความคิดหลักคือ พิจารณาในส่วนที่อนุภาคของแข็งเกิดการเกาะกลุ่มกันเป็นก้อน รวมไปถึงผลของตัวแปรที่มีโครงสร้างของภูมิภาคแตกต่างกันต่อแบบจำลองสัมประสิทธิ์ของโมเมนตัมระหว่างภูมิภาค โดยงานวิจัยของ Chalermsinuwan และคณะ [25, 26] พบว่าแบบจำลองอีเอ็มเอ็มเอสมีความเหมาะสมต่อการ

จำลองการไหลของของไหลในช่วงการไหลฟลูอิดซ์เบดแบบความเร็วสูง (Fast fluidization) ที่บริเวณผนังมีอนุภาคของแข็งสูง

$$\text{สำหรับ } \varepsilon_g \leq 0.74, \quad \beta_{gs} = \frac{150(1-\varepsilon_g)^2 \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + \frac{1.75(1-\varepsilon_g) |v_s - v_g| \rho_g}{d_p} \quad (3.30)$$

$$\text{และ } \varepsilon_g > 0.74, \quad \beta_{gs} = \frac{3(1-\varepsilon_g)\varepsilon_g}{4} \rho_g |v_g - v_s| C_{D0} \omega(\varepsilon_g) \quad (3.31)$$

$$\text{เมื่อ } 0.74 < \varepsilon_g \leq 0.82, \quad \omega(\varepsilon_g) = -0.5769 + \frac{0.0214}{4(\varepsilon_g - 0.7463)^2 + 0.0044} \quad (3.32)$$

$$0.82 < \varepsilon_g \leq 0.97, \quad \omega(\varepsilon_g) = -0.0101 + \frac{0.0038}{4(\varepsilon_g - 0.7789)^2 + 0.0040} \quad (3.33)$$

$$\varepsilon_g > 0.97, \quad \omega(\varepsilon_g) = -31.8295 + 32.8295 \varepsilon_g \quad (3.34)$$

$$\text{และ } \text{Re} < 1000, \quad C_{D0} = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0.15 \text{Re}^{0.687}) \quad (3.35)$$

$$\text{Re} = \frac{d_p \rho_g \varepsilon_g |v_g - v_s|}{\mu_g} \quad (3.36)$$

$$\text{Re} \geq 1000, \quad C_{D0} = 0.44$$

3.3 การจำลองปฏิกิริยาเคมีในงานวิจัย

อนุภาคที่ทำหน้าที่เป็นตัวพาออกซิเจนจะถูกกรีดวซ์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศและถูกออกซิไดซ์ด้วยอากาศกลายเป็นโลหะออกไซด์ภายในเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง ปฏิกิริยาออกซิเดชันเป็นปฏิกิริยาคายพลังงานความร้อนออกมา ความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาขึ้นอยู่กับชนิดของโลหะออกไซด์ที่ใช้เป็นตัวพาออกซิเจน ในการวิเคราะห์อุณหพลศาสตร์ของตัวพาออกซิเจนที่ต่างกััน พบว่าออกไซด์ของโลหะนิกเกิลและคอปเปอร์ถูกนำมาเลือกใช้ [15] เนื่องจากโดยปกติทั่วไปนิกเกิลออกไซด์และคอปเปอร์ออกไซด์มีความไวต่อการเกิดปฏิกิริยาสูงและมีความสามารถในการแลกเปลี่ยนออกซิเจนสูง ดังนั้น ตัวพาออกซิเจนที่เลือกใช้ในงานวิจัยนี้คือ นิกเกิลออกไซด์และคอปเปอร์ออกไซด์

ระหว่างการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชัน แรงต้านทานมากมายจะส่งผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยา โดยปฏิกิริยาจะถูกควบคุมด้วยการถ่ายโอนมวลภายนอก (external mass transfer) การแพร่ของแก๊ส (Diffusion) ไปยังรูพรุนของอนุภาค การแพร่ของแก๊สไปยังผิวของของแข็งในส่วนพื้นผิวที่

เกิดปฏิกิริยา และการเกิดปฏิกิริยาเคมี แบบจำลองแกนกลางหดตัว (Shrinking core model, SCM) ถูกนำมาใช้ในการจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง อัตราการเกิดปฏิกิริยาสำหรับแบบจำลองแกนกลางหดตัวของอนุภาครูปร่างทรงกลมแบบต่างๆ ตามขั้นตอนการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่สำคัญ แสดงดังนี้

3.3.1 Reaction

$$\frac{dX}{dt} = bC^n k_0 \exp\left[\frac{-E_D}{RT}\right] [3(1-x)^{2/3}] \quad (3.37)$$

3.3.2 Arrhenius diffusion

$$\frac{dX}{dt} = -\frac{1}{2} bC^n D_0 \exp\left[\frac{-E_D}{RT}\right] / ((1-x)^{1/3} - 1)(1-x)^{1/3} \quad (3.38)$$

3.3.3 Arrhenius diffusion and reaction

$$\frac{dX}{dt} = -\left[\frac{3 \left[\frac{6(1-x)^{2/3} - 6(1-x)^{1/3}}{bC^n D_0 \exp(-E_D/RT)} \right] - \frac{1}{bC^n k_0 \exp(-E_0/RT)}}{1} \right] (1-x)^{2/3} \quad (3.39)$$

3.3.4 Effective diffusion

$$\frac{dX}{dt} = -\frac{bC^n}{2 \left[\frac{1}{D_m T^{1/2}} + \frac{1}{D_k T^{1.75}} \right]} ((1-x)^{1/3} - 1)(1-x)^{1/3} \quad (3.40)$$

3.3.5 Effective diffusion and reaction

$$\frac{dX}{dt} = -\left[\frac{3 \left[\frac{6(1-x)^{2/3} - 6(1-x)^{1/3}}{bC^n \left[\frac{1}{D_m T^{1/2}} + \frac{1}{D_k T^{1.75}} \right]} \right] - \frac{1}{bC^n k_0 \exp(-E_0/RT)}}{1} \right] (1-x)^{2/3} \quad (3.41)$$

3.4 ขั้นตอนการจำลอง

การจำลองอุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิงด้วยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ ใช้โปรแกรมจำลองกระบวนการสำเร็จรูป ANSYS FLUENT 14.0 โดยจะต้องมีข้อมูลของค่าตัวแปรต่างๆที่ต้องการในการจำลอง เพื่อตั้งค่าให้คำนวณการไหลได้อย่าง

ถูกต้อง ในงานวิจัยนี้ใช้วิธีคำนวณแบบ 2 มิติ มีการกำหนดภาวะเริ่มต้น (Initial condition) โดยรายละเอียดของตัวแปรที่ใช้แสดงดังตารางที่ 3.1 ซึ่งมีการปรับเปลี่ยนค่าตัวแปรแบบจำลองที่แตกต่างกันคือ ค่า specularity coefficient และค่า restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็ง เพื่อให้ผลจากการคำนวณลู่เข้าสู่คำตอบหรือใกล้เคียงกับผลจากการทดลองมากที่สุด กำหนดให้ช่วงเวลาในการคำนวณ (Time step) มีค่าเท่ากับ 0.001 วินาที พร้อมทั้งคำนวณซ้ำ 100 ครั้งต่อหนึ่งเวลาคำนวณ ซึ่งจะใช้เวลาในการคำนวณจริงทั้งหมด 7-10 วัน สำหรับการจำลองทั้งหมด 50 วินาที ผลที่ได้จากการคำนวณการจำลองในส่วนที่ไม่เกิดปฏิกิริยาเคมีจะทำการเปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Shuai และคณะ [11] และ Issangya และคณะ [12] เพื่อหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่เหมาะสมกับการจำลองกระบวนการ ส่วนในกรณีที่เกิดปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ จะใช้แบบจำลองแกนกลางหดตัว (shrinking core model) และศึกษาสมการที่เหมาะสมในการอธิบายปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้น จากนั้นนำแบบจำลองทั้งที่ไม่เกิดปฏิกิริยาเคมีและเกิดปฏิกิริยาเคมีไปวิเคราะห์ตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่ออุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ โดยตัวแปรที่ทำการศึกษาแสดงรายละเอียดดังนี้

1. ชนิดของอนุภาคของแข็ง โดยเลือกใช้นิกเกิลและคอปเปอร์ เพราะมีความว่องไวต่อการเกิดปฏิกิริยาและมีความสามารถในการแลกเปลี่ยนออกซิเจนได้ดี [7] โดยนิกเกิลมีขนาดอนุภาค 0.00020 เมตร และคอปเปอร์มีขนาดอนุภาค 0.00015 เมตร
2. อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง ช่วงที่เลือกมาทำการวิเคราะห์คือ 300 และ 400 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาที [27] เพราะเป็นช่วงที่ทำให้เกิดการไหลเวียนของอนุภาคของแข็งในปริมาณมากทั่วทั้งเครื่องปฏิกรณ์อากาศ
3. อุณหภูมิ เลือกวิเคราะห์ที่อุณหภูมิ 1073 และ 1273 เคลวิน [28] เนื่องจากเป็นช่วงที่เกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันภายในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิงในเครื่องปฏิกรณ์อากาศได้ดี
4. ความเร็วแก๊สป้อนเข้า โดยแก๊สจะถูกป้อนเข้าทางด้านล่างของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ที่ความเร็ว 1 และ 3 เมตรต่อวินาที [25] เพราะต้องการให้ระบบที่ศึกษาเกิดฟลูอิดเบดแบบปั่นป่วน (turbulent) ที่มีของแข็งไหลอย่างสม่ำเสมอและทำให้เกิดการผสมที่ดีมากขึ้น

โดยทำการจำลองด้วยวิธีการออกแบบการทดลองแบบ 2^4 แบ่งการทดลองออกเป็น 16 กรณีสรุปได้ดังตารางที่ 3.2 ซึ่งค่าสูงสุดและต่ำสุดที่ใช้พิจารณาจะอยู่ในช่วงที่ครอบคลุมการปฏิบัติงานจริง ค่าของตัวแปรผลลัพธ์ที่ใช้ในการวิเคราะห์ผลของตัวแปรดำเนินการในส่วนที่ไม่เกิดปฏิกิริยาเคมีคือ ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดย

ปริมาณของอนุภาคของแข็งทั้งในแนวรัศมีและแนวแกน ส่วนที่เกิดปฏิกิริยาเคมีตัวแปรผลลัพธ์ที่แสดงการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่ดีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศคือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน

ตารางที่ 3.1 ข้อมูลและตัวแปรที่ใช้ในการจำลอง

No	Description	Value
1	เส้นผ่านศูนย์กลางของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ	0.0762 เมตร
2	ความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ	6.1 เมตร
3	ความหนาแน่นของแก๊ส	1.2 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร
4	ความหนืดของแก๊ส	1.85×10^{-5} กิโลกรัมต่อเมตรวินาที
5	เส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาคของแข็ง	70 ไมโครเมตร
6	ความหนาแน่นของอนุภาคของแข็ง	1600 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร
7	ความดันขาออกกระบวนการ	101,325 พาสคาล
8	อุณหภูมิภายในกระบวนการ	293.15 เคลวิน
9	สัดส่วนปริมาตรอนุภาคของแข็งที่ป้อนเข้า	0.60 (-)
10	Restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็งกับผนัง	0.90
11	Restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็ง	0.92, 0.95, 0.97 และ 0.99
12	Specularity coefficient	0.10, 0.20, 0.30, 0.40 และ 0.50

ตารางที่ 3.2 การออกแบบการทดลองแบบ 2^4 ของการศึกษาตัวแปรดำเนินการ

กรณี	ขนาดอนุภาค ของแข็ง (เมตร) (A)	อัตราการไหลเวียน ของอนุภาค ของแข็ง (กิโลกรัม ต่อเมตรกำลังสอง ต่อวินาที) (B)	อุณหภูมิ (เคลวิน) (C)	ความเร็วแก๊ส ป้อนเข้า (เมตรต่อวินาที) (D)
1	0.00015	300	1073	1
2	0.00020	300	1073	1
3	0.00015	400	1073	1
4	0.00020	400	1073	1
5	0.00015	300	1273	1
6	0.00020	300	1273	1
7	0.00015	400	1273	1
8	0.00020	400	1273	1
9	0.00015	300	1073	3
10	0.00020	300	1073	3
11	0.00015	400	1073	3
12	0.00020	400	1073	3
13	0.00015	300	1273	3
14	0.00020	300	1273	3
15	0.00015	400	1273	3
16	0.00020	400	1273	3

บทที่ 4

ผลการวิจัยและการวิเคราะห์ผล

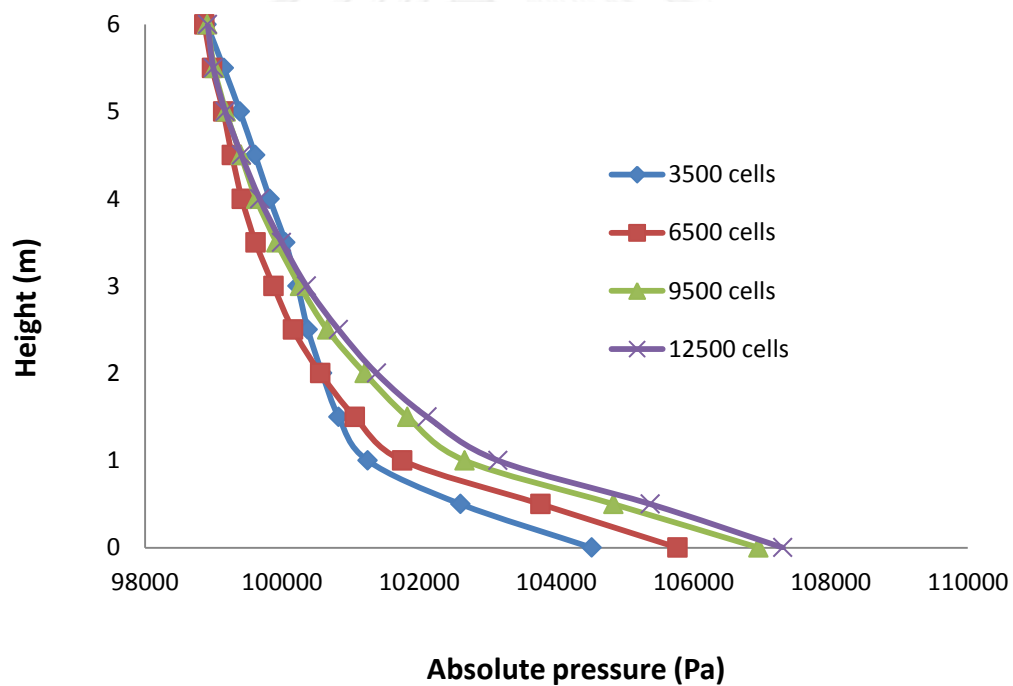
ผลที่จะแสดงในส่วนนี้ ได้แก่ การจำลองการคำนวณเชิงอุทกพลศาสตร์แบบสองมิติภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง โดยมีการคำนวณหาขนาดของเซลล์คำนวณและเวลาที่ระบบเข้าสู่ภาวะเสถียรคงตัว เพื่อนำไปใช้ในการจำลองเปรียบเทียบกับผลจากการทดลองของ Shuai และคณะ [11] และ Issangya และคณะ [12] มีการปรับเปลี่ยนตัวแปรแบบจำลองคือค่า specularity coefficient และค่า restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็ง เพื่อให้การจำลองมีความแม่นยำถูกต้องมากขึ้น นอกจากนี้ มีการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่ออุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ และศึกษาผลของปฏิกิริยาเคมีที่เหมาะสมภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ และมีการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อปฏิกิริยาเคมี โดยผลแต่ละส่วนของงานวิจัยแสดงดังต่อไปนี้

4.1 ผลของขนาดเซลล์คำนวณและเวลาที่ระบบเข้าสู่ภาวะเสถียรคงตัว

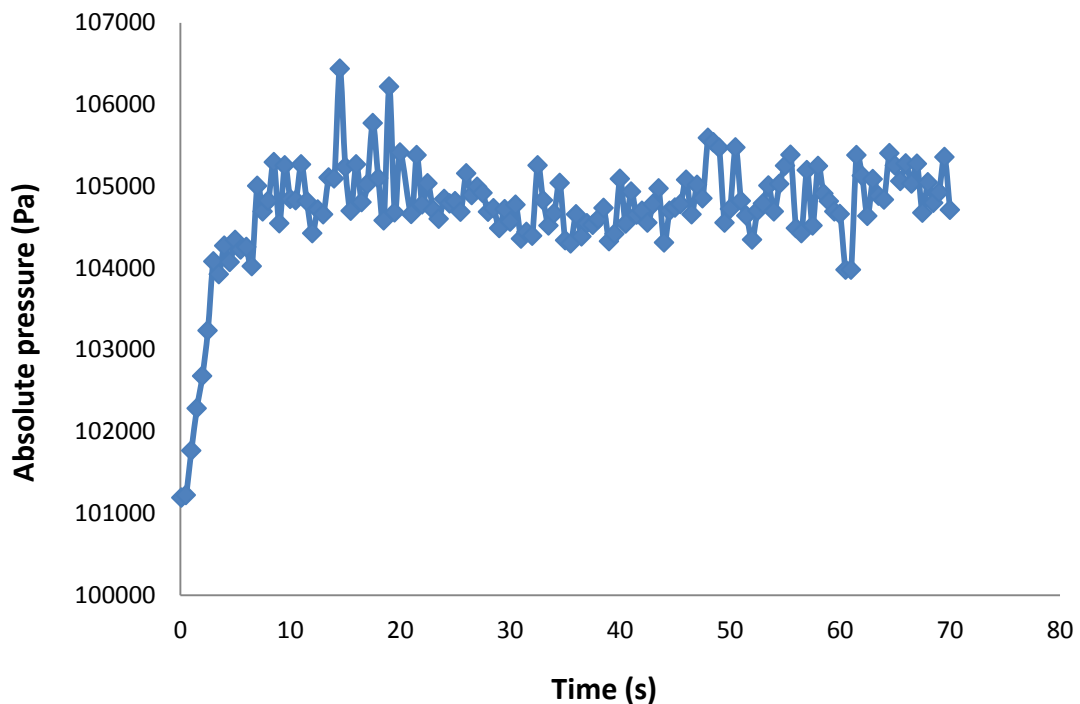
ขนาดพื้นที่คำนวณหรือขนาดเซลล์คำนวณนั้นจะส่งผลต่อผลการคำนวณในการจำลอง โดยถ้าหากกำหนดให้ขนาดเซลล์คำนวณมีความละเอียดน้อย ผลที่ได้จากการจำลองจะมีความไม่ละเอียดเช่นกัน ผลที่ได้ออกมาจึงมีความแม่นยำต่ำ แต่ถ้าหากกำหนดให้ขนาดเซลล์คำนวณมีความละเอียดสูง ผลที่ได้จากการจำลองจะมีความละเอียดมากขึ้น อย่างไรก็ตาม จะใช้ระยะเวลาการคำนวณเพิ่มขึ้นเช่นกัน ดังนั้นจึงมีความจำเป็นที่จะต้องหาขนาดเซลล์คำนวณที่เหมาะสมเพื่อนำไปใช้ทดลองในส่วนต่อไป ในงานวิจัยนี้ ได้ศึกษาผลของเซลล์คำนวณที่แตกต่างกัน 4 ค่า คือ 3500, 6500, 9500 และ 12500 เซลล์

รูปที่ 4.1 แสดงผลการจำลองค่าความดันสัมบูรณ์ต่อความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศที่ขนาดเซลล์คำนวณแตกต่างกัน 4 ค่า จากผลที่ได้แสดงให้เห็นว่าขนาดเซลล์คำนวณ 9500 และ 12500 เซลล์ ให้ค่าความดันสัมบูรณ์ที่ไม่แตกต่างกันเมื่อเปรียบเทียบกับขนาดเซลล์คำนวณ 3500 และ 6500 เซลล์ ที่มีค่าความดันสัมบูรณ์ที่ได้จากการจำลองที่น้อยกว่า ด้วยความแตกต่างของผลในส่วนนี้จึงสามารถวิเคราะห์ได้ว่า ที่ขนาดเซลล์คำนวณ 3500 และ 6500 เซลล์นั้น มีความละเอียดไม่เพียงพอต่อการคำนวณ และเมื่อเพิ่มขนาดเซลล์คำนวณจาก 9500 เป็น 12500 เซลล์ ผลที่ได้มีค่าไม่แตกต่างกันหรือคงที่ และบริเวณด้านล่างของเครื่องปฏิกรณ์พบอนุภาคของแข็งหนาแน่นส่งผลให้มีความดันลดคร่อมเบตที่มากขึ้นด้วย ดังนั้น ในงานวิจัยนี้เลือกใช้ขนาดเซลล์คำนวณ 9500 เซลล์ ในการจำลองส่วนต่อไป

ในการจำลองการไหลเพื่อนำข้อมูลมาเปรียบเทียบกับผลจากการทดลองนั้น จะต้องมีการกำหนดหรือเลือกช่วงระยะเวลาที่เหมาะสม สำหรับการวิเคราะห์ข้อมูลหรือช่วงระยะเวลาที่ระบบเข้าสู่ภาวะเสถียรหรือเกิดการความปั่นป่วนในช่วงคงที่ (Quasi-steady state) เมื่อพิจารณาที่ช่วงเวลา 20-40 และ 50-70 วินาที พบว่าทั้งสองช่วงเวลามีแนวโน้มใกล้เคียงกัน แสดงว่าระบบเริ่มเข้าสู่ภาวะเสถียรแล้ว แสดงได้ดังรูปที่ 4.2 ที่เป็นการแสดงค่าความดันสัมบูรณ์ในช่วงเวลาการทดลองต่างๆ พบว่าที่ช่วงเวลา 0-10 วินาที ค่าความดันสัมบูรณ์เพิ่มขึ้นเรื่อยๆ จนในช่วงเวลา 20-70 วินาที ค่าความดันสัมบูรณ์เริ่มเข้าคงที่หรือมีการเปลี่ยนแปลงน้อย มีความปั่นป่วนภายในกระบวนการน้อยลง ดังนั้นเพื่อความน่าเชื่อถือของผลการจำลองจึงเลือกช่วงเวลา 20-50 วินาทีในการคำนวณต่อไป



รูปที่ 4.1 การกระจายตัวของความดันสัมบูรณ์ต่อความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศที่พื้นที่การคำนวณต่างๆ



รูปที่ 4.2 การกระจายตัวของความดันสัมบูรณ์ ที่เวลาการทดลองต่างๆ

4.2 การหาแบบจำลองอุทกพลศาสตร์ที่เหมาะสม

ในส่วนนี้ จะหาแบบจำลองอุทกพลศาสตร์ที่เหมาะสมโดยการปรับเปลี่ยนตัวแปรแบบจำลองต่างๆ ที่อาจส่งผลต่อการจำลองภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเผาไหม้แบบเคมีคอลลุปีง เพื่อให้ได้ผลที่สอดคล้องกับผลจากการทดลองของ Shuai และคณะ [11] และ Issangya และคณะ [12]

4.2.1 ผลของแบบจำลองแรงต้านทานการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาค

ในส่วนนี้แบบจำลองสัมประสิทธิ์แรงต้านทานการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาคได้ถูกศึกษาโดยแบบจำลองที่ใช้ในงานวิจัยนี้ประกอบด้วย 6 แบบจำลองดังนี้ แบบจำลอง Syamlal-O'Brien แบบจำลอง Wen และ Yu แบบจำลอง Gidaspow แบบจำลอง Huilin-Gidaspow แบบจำลอง Gibilaro และแบบจำลอง Energy Minimization Multi-Scale (EMMS) ผลที่ได้พบว่าแบบจำลอง Energy Minimization Multi-Scale (EMMS) ที่พัฒนาโดย Yang และ คณะ [24] มีความเหมาะสมที่สุด ดังแสดงในรูปที่ 4.3 และ 4.4 ที่แสดงผลของแบบจำลองทั้ง 6 แบบต่อความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมีและแนวแกน ตามลำดับ แบบจำลอง EMMS แสดงค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งสูงที่สุดเมื่อเทียบกับแบบจำลองอื่นๆ โดยมีอนุภาคของแข็งหนาแน่นบริเวณผนังมากกว่าส่วนตรงกลางของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ เป็นการไหลที่เรียกว่า การไหลแบบแกนใน-วงนอก

(core-annulus) ซึ่งแบบจำลองอื่นๆนั้นจะให้ค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่ไม่แตกต่างกันมากนักระหว่างผนังและส่วนตรงกลาง ทั้งนี้เนื่องจากแบบจำลอง EMMS นี้จะทำการคำนวณบริเวณที่อนุภาคของแข็งรวมตัวกันเป็นกลุ่มก้อน (Cluster) ซึ่งโดยปกติอนุภาคของแข็งเจ็ดตัวที่เอนั้นจะเกิดการรวมตัวกันเป็นกลุ่มก้อนเมื่อเกิดฟลูอิดไอเซชัน ส่งผลให้แบบจำลอง EMMS นี้มีความใกล้เคียงหรือเหมาะสมกับการไหลของอนุภาคของแข็งในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของงานวิจัยนี้ เช่นเดียวกันกับในรูปที่ 4.4 แบบจำลองทั้ง 6 แบบแสดงผลความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่หนาแน่นบริเวณด้านล่างของเครื่องปฏิกรณ์อากาศและลดลงตามความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ อีกทั้งแบบจำลอง EMMS นี้ให้ความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งหนาแน่นที่สุดเมื่อเทียบกับแบบจำลองอื่น จากผลที่ได้ในส่วนนี้ จะนำแบบจำลอง EMMS ที่ได้กล่าวข้างต้นทำการจำลอง เพื่อเปรียบเทียบผลของตัวแปรแบบจำลองอื่นๆที่มีต่อการจำลองการไหลของอนุภาคของแข็งภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ

4.2.2 ผลของ Specularity coefficient

ค่า specularity coefficient เป็นตัวแปรควบคุมชนิดหนึ่งที่อยู่เกี่ยวกับสัดส่วนในการชนกันของอนุภาคของแข็งแล้วเกิดการถ่ายโอนโมเมนตัมไปยังผนังของระบบ ถ้าหากค่า specularity coefficient มีค่าเท่ากับ 0.5 แสดงว่ามีส่วนที่สูญเสียพลังงานไปให้กับผนังของระบบครึ่งหนึ่งและอีกครึ่งหนึ่งที่สูญเสียพลังงาน โดยในงานวิจัยนี้ได้เปรียบเทียบค่า specularity coefficient ทั้งหมด 5 ค่าคือ 0.1 0.2 0.3 0.4 และ 0.5 แสดงดังรูป 4.5 โดยเปรียบเทียบกับค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมี จากทฤษฎี ค่า specularity coefficient ที่มีค่าสูงหรือเข้าใกล้หนึ่ง จะมีความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งบริเวณผนังที่เบาบางและหนาแน่นที่บริเวณตรงกลางของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ในขณะที่ค่า specularity coefficient ที่มีค่าต่ำหรือเข้าใกล้ศูนย์ อนุภาคของแข็งจึงเกิดการตกกลับที่บริเวณผนังสูง ส่งผลให้พบอนุภาคของแข็งบริเวณตรงกลางเครื่องปฏิกรณ์อากาศเบาบางตามไปด้วย เนื่องจากเกิดการถ่ายโอนโมเมนตัมของอนุภาคของแข็งไปสู่ผนังของระบบน้อยกว่าหรือผนังมีความเรียบ ในกรณีนี้ ค่า specularity coefficient ที่มีค่าต่ำ ส่วนในรูปที่ 4.6 แสดงค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งในแนวแกน ซึ่งยังพบลักษณะอนุภาคของแข็งสูงที่ด้านล่างและลดลงตามความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ โดยทั้งหมดมีแนวโน้มเดียวกัน สอดคล้องกับงานวิจัยที่ผ่านมาของ Almuttahr และคณะ [29] ที่พบว่าค่า specularity coefficient มีผลกระทบต่อค่าความเร็วของอนุภาคของแข็งในแนวแกน ส่งผลให้ค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งในแนวแกนมีความแตกต่างกันไม่มากนักที่ค่า specularity coefficient แตกต่างกัน ดังนั้นค่า specularity coefficient ส่งผลเล็กน้อยต่ออุทกพลศาสตร์ของของไหลและเป็นเพียงตัวแปรหนึ่งที่ปรับเปลี่ยนเพื่อให้ผลในการจำลองมีค่าใกล้เคียงกับผลจากการทดลองเท่านั้น จากผลการจำลองในส่วนนี้ เลือกใช้ค่า specularity coefficient เท่ากับ 0.5 เนื่องจากต้องการให้มีอนุภาคของแข็งหนาแน่นบริเวณตรงกลางและสม่ำเสมอที่บริเวณผนัง ส่งผลให้เกิดการผสมภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศได้ดียิ่งขึ้น

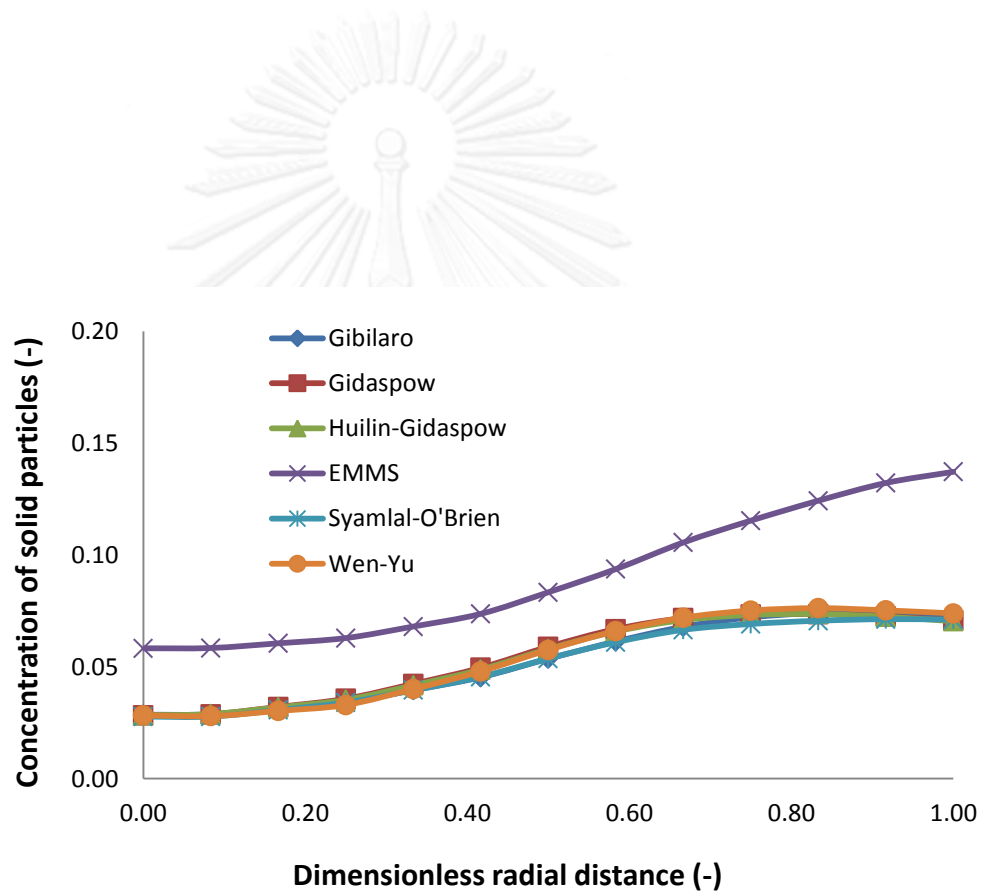
4.2.3 ผลของ Restitution coefficient

Restitution coefficient เป็นตัวแปรแบบจำลองที่ใช้งานควบคู่กับค่า specularity coefficient ที่กล่าวข้างต้น ซึ่งใช้อธิบายพลังงานที่สูญหายเนื่องจากการชนกันโดยแบ่งออกได้เป็น 2 แบบคือ การชนกันระหว่างอนุภาคของแข็งและการชนกันระหว่างอนุภาคของแข็งกับผนัง โดยในงานวิจัยนี้จะศึกษาผลของการชนกันระหว่างอนุภาคของแข็ง ซึ่งสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 ชนิดคือ การชนกันแบบยืดหยุ่นและการชนกันแบบไม่ยืดหยุ่น ค่า restitution coefficient นี้จะมีค่าอยู่ระหว่างศูนย์ถึงหนึ่ง ถ้าหากค่าเข้าใกล้ศูนย์หมายถึง เกิดการชนกันของอนุภาคของแข็งแบบไม่ยืดหยุ่น หรือมีการสูญเสียพลังงานที่สูง แต่หากมีค่าเข้าใกล้หนึ่ง จะเป็นการชนกันของอนุภาคของแข็งแบบยืดหยุ่นหรือมีการสูญเสียพลังงานที่ต่ำ ในงานวิจัยนี้จึงใช้ค่า restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็งทั้งหมด 4 ค่าคือ 0.92 0.95 0.97 และ 0.99 รูปที่ 4.7 และ 4.8 เปรียบเทียบกับค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งทั้งในแนวรัศมีและแนวแกน ตามลำดับ โดยใช้แบบจำลอง EMMS และค่า specularity coefficient เท่ากับ 0.5 พบว่าค่า restitution coefficient ที่มีค่าต่ำ จะเกิดการชนแบบไม่ยืดหยุ่นส่งผลให้ความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งมากหรืออนุภาคของแข็งตกกลับมากบริเวณผนัง เมื่อเทียบกับค่า restitution coefficient ที่มีค่าสูงหรือเพิ่มขึ้น จะเกิดการชนแบบยืดหยุ่น ส่งผลให้ความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่ตกกลับบริเวณผนังน้อยลง และที่บริเวณด้านล่างของเครื่องปฏิกรณ์อากาศพบความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งสูงแล้วลดลงตามความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ รูปที่ 4.8 นี้พบค่า restitution coefficient ที่มีค่าเท่ากับ 0.99 ที่มีค่าแนวโน้มแตกต่างจากค่าอื่น เนื่องจากค่า restitution coefficient ที่มากขึ้นนี้ส่งผลให้อนุภาคของแข็งตกกลับได้น้อยลง อนุภาคของแข็งด้านบนจึงมีความหนาแน่นมากกว่าด้านล่าง โดยมีความสอดคล้องกันกับผลที่ได้จากงานวิจัยของ Loha และคณะ [21] ที่ศึกษาผลของค่า restitution coefficient ในเครื่องฟลูอิดซ์เบดแบบพองแก๊ส พบว่าค่า restitution coefficient ที่มีค่าเข้าใกล้ศูนย์ให้ค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งสูงเนื่องจาก เกิดการชนกันระหว่างอนุภาคของแข็งแบบไม่ยืดหยุ่นทำให้เกิดช่องว่างระหว่างอนุภาคของแข็งภายในและเกิดพองแก๊สขึ้นส่งผลให้เกิดความปั่นป่วนของระบบ รวมทั้งมีการสูญเสียพลังงานทางกลมากขึ้น และจากการเลือกใช้ค่า specularity coefficient เท่ากับ 0.5 ส่งผลให้ค่า restitution coefficient ที่มีค่าเท่ากับ 0.97 มีความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งสูงและสม่ำเสมอทั้งเครื่องปฏิกรณ์อากาศสอดคล้องกับผลการทดลองจริง

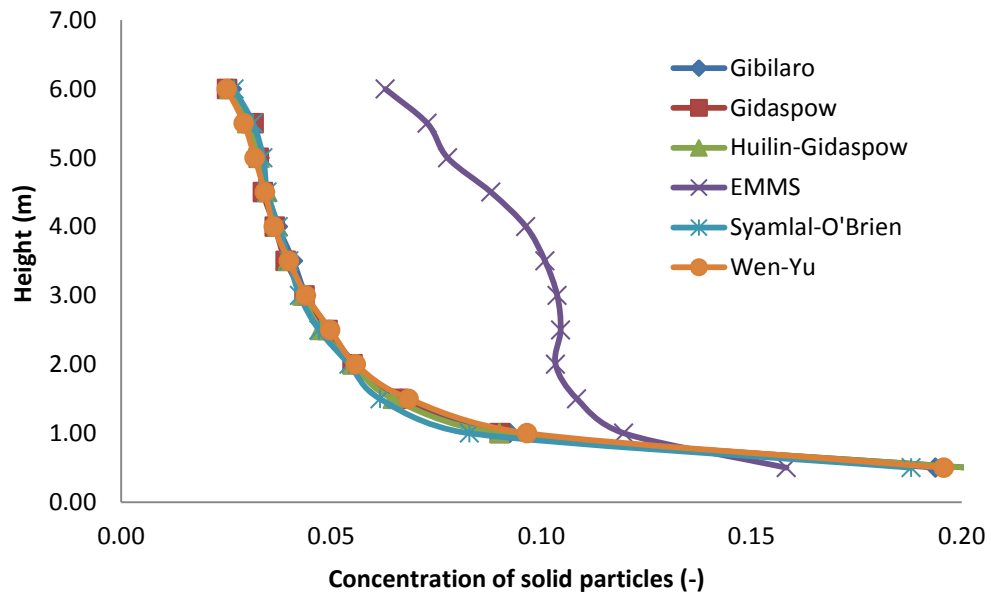
4.2.4 การเปรียบเทียบผลการจำลองพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ

จากผลการจำลองการไหลภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ เปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Shuai และคณะ [11] และ Issangya และคณะ [12] พบว่า การใช้แบบจำลองชนิด EMMS ที่ค่า specularity coefficient เท่ากับ 0.5 และค่า restitution coefficient ที่มีค่าเท่ากับ 0.97 นั้นให้ผลการจำลองที่มีความใกล้เคียงกับผลการทดลองมากที่สุด จากการศึกษาผลการปรับเปลี่ยนตัวแปรแบบจำลองดังที่ได้กล่าวข้างต้น แสดงผลการเปรียบเทียบได้ดังรูปที่ 4.9 และ 4.10 เปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Shuai และคณะ [11] ที่แสดงการกระจายของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมีที่มีความสูงแตกต่างกันที่ 3.5 เมตรและ 4.5 เมตร ตามลำดับ พบว่าทั้งอนุภาคของแข็งจากการทดลองและ

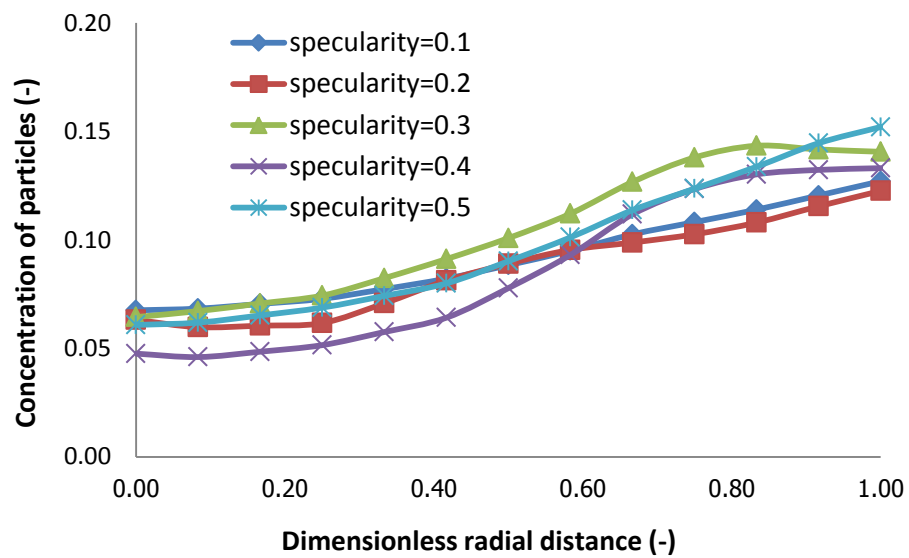
จากการจำลองมีความหนาแน่นที่บริเวณใกล้กับผนังและเบาบางบริเวณตรงกลาง เป็นลักษณะเด่นของการเกิดการไหลที่เรียกว่า การไหลแบบแกนในวงนอก (core-annulus) และในรูปที่ 4.11 เป็นการเปรียบเทียบผลการจำลองกับผลการทดลองของ Issangya และคณะ [12] ที่แสดงการกระจายของอนุภาคของแข็งในแนวแกนตามความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ พบว่า ผลการจำลองที่ได้ให้แนวโน้มที่ใกล้เคียงกับการทดลองเช่นเดียวกัน โดยมีความหนาแน่นของอนุภาคของแข็งบริเวณด้านล่างของเครื่องปฏิกรณ์อากาศและเบาบางตามความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ



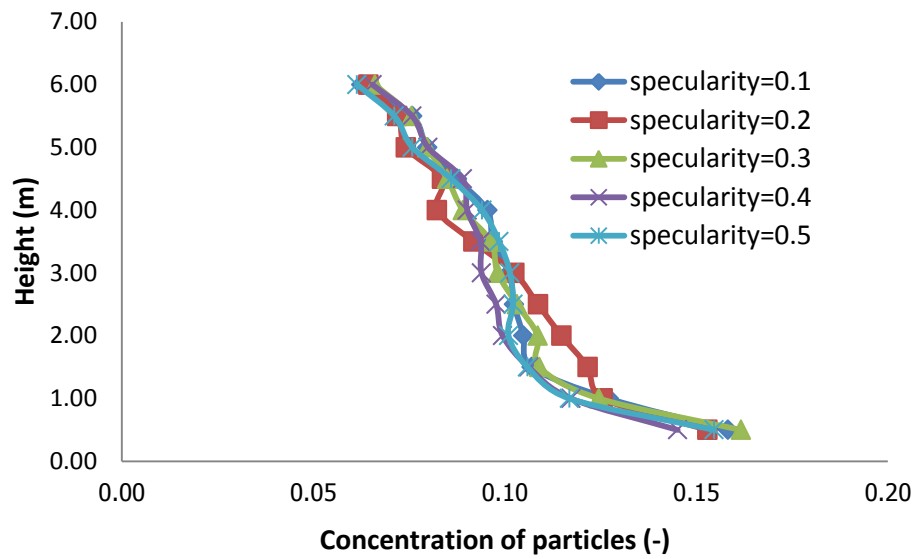
รูปที่ 4.3 การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากแบบจำลองสัมประสิทธิ์แรงต้านทานการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาคแบบต่างๆ



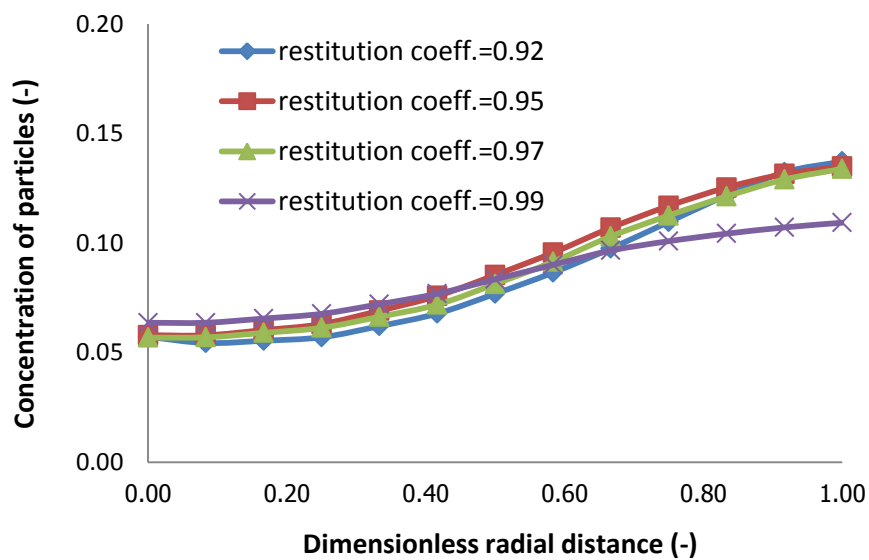
รูปที่ 4.4 การกระจายตัวในแนวแกนของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากแบบจำลองสัมประสิทธิ์แรงต้านทานการเคลื่อนที่ระหว่างวัฏภาคแบบต่างๆ



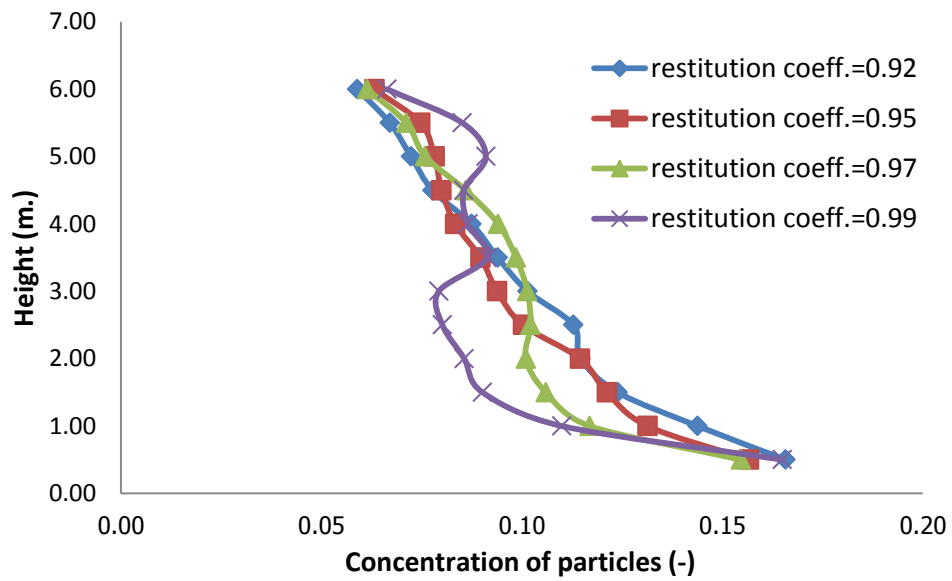
รูปที่ 4.5 การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากค่า specularity coefficient ต่างๆ



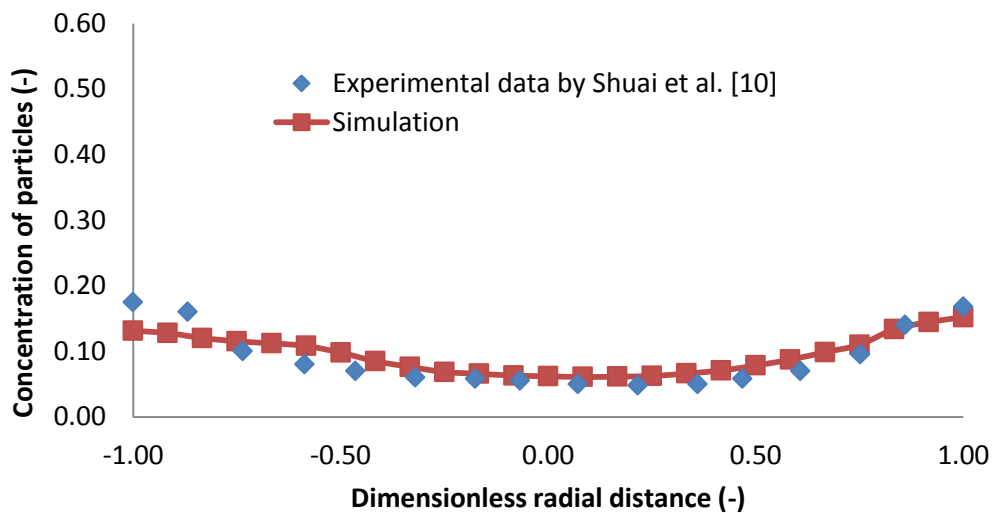
รูปที่ 4.6 การกระจายตัวในแนวแกนของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากค่า specularity coefficient ต่างๆ



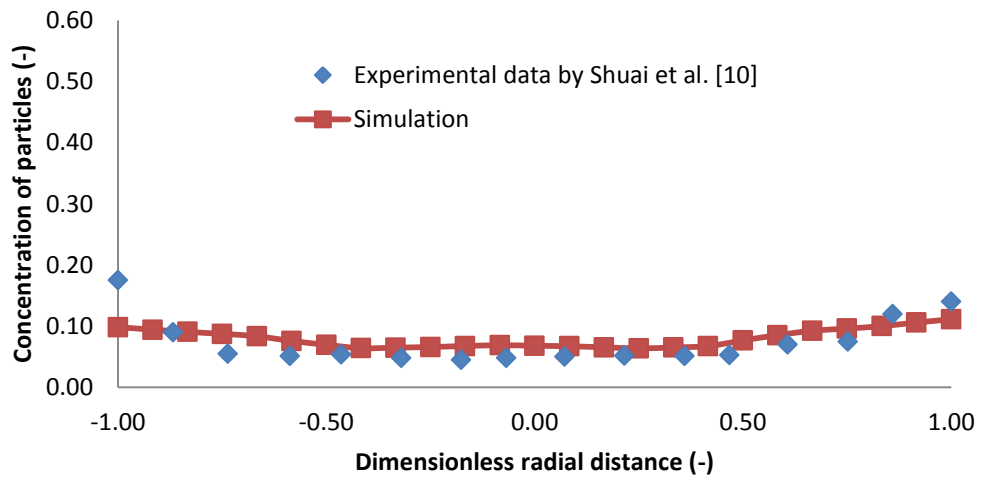
รูปที่ 4.7 การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากค่า restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็งต่างๆ



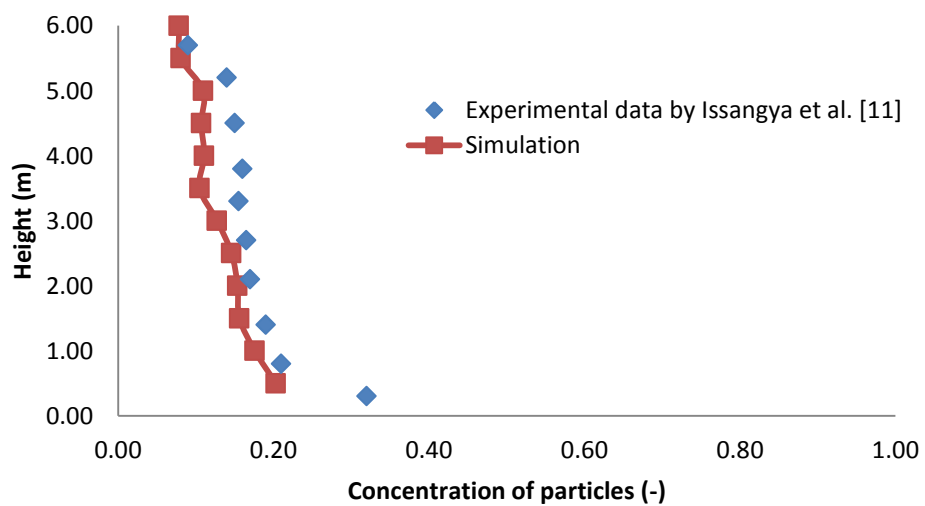
รูปที่ 4.8 การกระจายตัวในแนวแกนของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่คำนวณได้จากค่า restitution coefficient ระหว่างอนุภาคของแข็งต่างๆ



รูปที่ 4.9 การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่ความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศเท่ากับ 3.5 เมตร



รูปที่ 4.10 การกระจายตัวในแนวรัศมีของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งที่ความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศเท่ากับ 4.5 เมตร



รูปที่ 4.11 การกระจายตัวของค่าความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งตามความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ

4.3 ผลของตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่ออุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ

จากการศึกษาในส่วนก่อนหน้า ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศเกิดการไหลเป็นแบบแกนในวงนอกหรือ core-annulus ซึ่งอนุภาคของแข็งภายในเกิดการไหลที่มีความไม่สม่ำเสมอ จึงได้มีแนวความคิดการพัฒนากระบวนการให้สามารถเกิดการผสมของอนุภาคของแข็งภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศอย่างสม่ำเสมอ โดยศึกษาถึงตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อการไหลของอนุภาคของแข็ง ซึ่งในงานวิจัยนี้เลือกใช้การวิเคราะห์ด้วยวิธีการออกแบบการทดลอง 2^4 ซึ่งประกอบด้วยตัวแปรดำเนินการทั้งหมด 4 ตัวแปรคือ ชนิดของอนุภาคของแข็ง อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิ และความเร็วแก๊สป้อนเข้า โดยพิจารณาผลจากตัวแปรตอบสนองทั้งหมด 3 ค่า คือค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เพื่อให้ทราบถึงปริมาณของอนุภาคของแข็งภายในระบบที่เกิดขึ้น ซึ่งปริมาณของแข็งมีความสำคัญต่อความสามารถในการเกิดปฏิกิริยาขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีและแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เพื่อแสดงการกระจายตัวและความสามารถในการผสมกันของอนุภาคของแข็งและแก๊สที่เกิดขึ้นทั้งในแนวรัศมีและแนวแกนตลอดความสูงภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศที่จะส่งผลต่อความสามารถในการเกิดปฏิกิริยาเช่นกัน จากการวิเคราะห์ตัวแปรตอบสนองทั้ง 3 ค่านี้จะช่วยให้ทราบถึงตัวแปรที่มีอิทธิพลต่อการไหลหรือการผสมของอนุภาคของแข็งและแก๊สได้

การจำลองค่าของตัวแปรดำเนินการทั้ง 4 ตัวแปร แสดงดังตารางที่ 3.2 ข้างต้น ผลสรุปของค่าตัวแปรตอบสนองทั้ง 3 ค่า แสดงดังตารางที่ 4.1 พบว่า กรณีศึกษาที่ 3 ที่เป็นอนุภาคของแข็งชนิดคอปเปอร์ ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองต่อวินาที ณ อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ 1073 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาที ส่งผลให้ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีค่าสูงที่สุด แสดงให้เห็นว่า มีปริมาณของอนุภาคของแข็งอยู่มากภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ส่วนที่อนุภาคของแข็งชนิดคอปเปอร์เช่นเดียวกัน ในกรณีศึกษาที่ 13 อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 300 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตรกำลังสองต่อวินาที ณ อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ 1273 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 3 เมตรต่อวินาที ให้ผลค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งต่ำสุด ส่งผลให้มีปริมาณของอนุภาคของแข็งภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศน้อยเมื่อเปรียบเทียบกับกรณีศึกษาที่ 3 ในส่วนของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง กรณีศึกษาที่ 11 อนุภาคของแข็งชนิดคอปเปอร์ ที่อัตราการไหลหมุนเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตรกำลังสองต่อวินาที ณ อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ 1073 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 3 เมตรต่อวินาที ทำให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีค่าน้อยที่สุด สามารถอธิบายได้ว่า อนุภาคของแข็งภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศมีความแปรปรวนที่น้อย อนุภาคของแข็งภายในมีความสม่ำเสมอในแนวรัศมี เกิดการผสมหรือการกระจายตัวที่ดีขึ้น ส่วนกรณีศึกษาที่ให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมากที่สุดคือ กรณีศึกษาที่ 3 อนุภาคของแข็งชนิดคอปเปอร์เช่นเดียวกัน ที่อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตรกำลังสองต่อวินาที โดยอุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์เท่ากับ 1073 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า

ลดลงเป็น 1 เมตรต่อวินาที ทำให้การกระจายตัวของอนุภาคของแข็งไม่สม่ำเสมอในแนวรัศมี ผลของตัวแปรตอบสนองค่าสุดท้ายคือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง กรณีศึกษาที่ 15 อนุภาคชนิดคอปเปอร์ อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตรกำลังสองต่อวินาที ณ อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ 1273 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 3 เมตรต่อวินาที ให้ผลค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานที่มีค่าน้อยที่สุด แสดงให้เห็นว่าเกิดการกระจายและการผสมของอนุภาคของแข็งในแนวแกนที่ดีและสม่ำเสมอตลอดความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ส่วนกรณีศึกษาที่ 3 ให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมากที่สุด เป็นอนุภาคของแข็งชนิดคอปเปอร์ อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตรกำลังสองต่อวินาที ที่อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศลดลงเป็น 1073 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาที

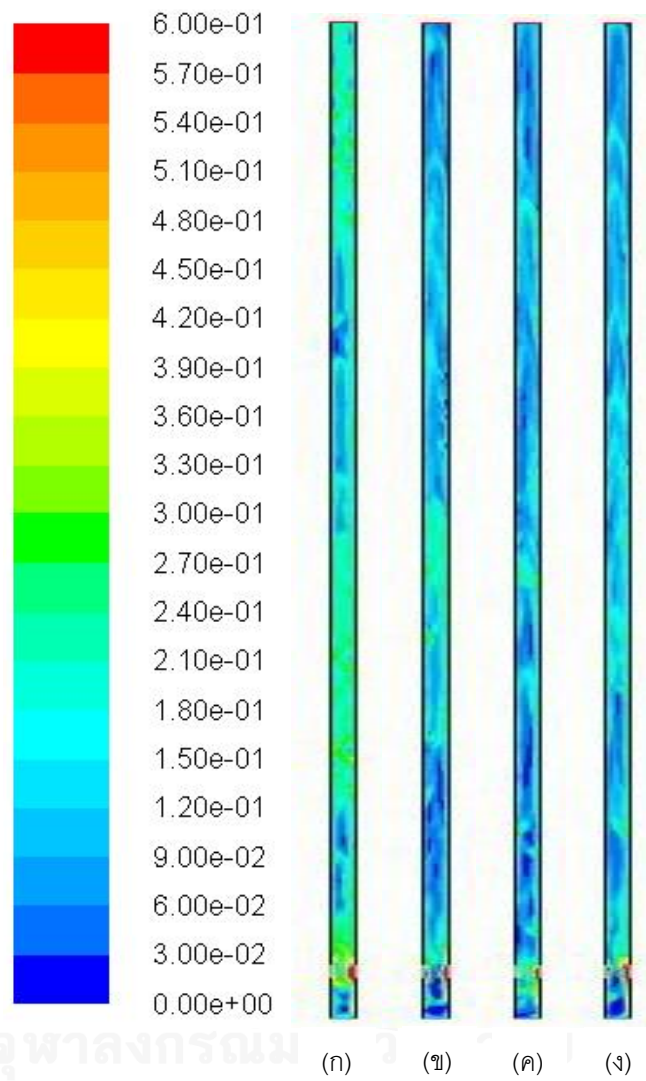
จากผลข้างต้นในแต่ละกรณีศึกษาที่แตกต่างกัน ได้เลือกกรณีศึกษาที่ค่าของตัวแปรตอบสนองทั้ง 3 ค่าที่มีทั้งค่าสูงและค่าต่ำมาศึกษาต่อ โดยนำมาสร้างคอนทัวร์ของสัดส่วนเชิงปริมาตรของอนุภาคของแข็งที่เวลา 30 วินาที เพื่อแสดงตัวอย่างการกระจายตัวของอนุภาคของแข็งภายในของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ รูปที่ 4.12 เป็นการสร้างคอนทัวร์ของสัดส่วนเชิงปริมาตรของอนุภาคของแข็ง (ก) กรณีที่ 3 (ข) กรณีที่ 11 (ค) กรณีที่ 13 (ง) กรณีที่ 15 จะเห็นได้ว่ากรณีที่ 3 มีความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งเฉลี่ยทั้งเครื่องปฏิกรณ์อากาศมากที่สุด สังเกตเห็นได้จากสีเขียวที่แสดงถึงปริมาณของอนุภาคของแข็งที่สูง เมื่อเปรียบเทียบกับกรณีที่ 13 ที่มีความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งเฉลี่ยทั้งเครื่องปฏิกรณ์อากาศน้อยที่สุด แสดงด้วยปริมาณของสีฟ้าที่พบอยู่มาก ส่วนในกรณีที่ 11 มีความแปรปรวนในแนวรัศมีที่ต่ำ ส่งผลให้การกระจายตัวของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมีเกิดอย่างสม่ำเสมอ และในกรณีที่ 15 มีความแปรปรวนในแนวแกนต่ำ ส่งผลให้การกระจายตัวของอนุภาคของแข็งสม่ำเสมอตลอดความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ผลที่ได้จากการสร้างคอนทัวร์นี้สอดคล้องกับผลจากการวิเคราะห์ความแปรปรวนข้างต้น

การวิเคราะห์ความแปรปรวน (Analysis of Variance, ANOVA) ของตัวแปรตอบสนองตารางที่ 4.2 สรุปค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง พบว่า อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง (B) ความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D) และอันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งกับความเร็วแก๊สป้อนเข้า (AD) เป็นตัวแปรที่ส่งผลต่อค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เนื่องจากค่า p-value ที่แสดงในตารางนั้นมีค่าน้อยกว่า 0.05 ซึ่งตามทฤษฎีทางการออกแบบการทดลอง กำหนดไว้ว่าหากตัวแปรใดที่มีค่า p-value น้อยกว่า 0.05 ที่ค่าความเชื่อมั่นร้อยละ 95 ตัวแปรนั้นจะส่งผลต่อค่าของตัวแปรตอบสนอง โดยเมื่ออันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งกับความเร็วแก๊สป้อนเข้า (AD) ส่งผลต่อตัวแปรตอบสนอง ดังนั้น ชนิดของอนุภาคของแข็ง (A) จำเป็นต้องนำมาพิจารณาด้วย ส่วนค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง แสดงดังตารางที่ 4.3 พบว่า ความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D) และอันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งและอัตราการไหลของแก๊ส (AD) มีค่า p-value ต่ำกว่า 0.05 จึงเป็นตัวแปรที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมี ส่งผลให้ ชนิดของอนุภาคของแข็ง (A) ต้องถูกนำมาพิจารณาเช่นเดียวกัน ในตารางที่ 4.4 แสดงการวิเคราะห์ความแปรปรวนของค่าส่วนเบี่ยงเบน

มาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง ที่มีความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D) เป็นตัวแปรเดียวที่ส่งผลต่อค่านี้

ตารางที่ 4.1 การออกแบบการทดลองแบบ 2⁴ ของการศึกษาผลตัวแปรดำเนินการและค่าตัวแปรตอบสนองที่ได้จากการจำลองอุทกพลศาสตร์

Case	Particle diameter (m) (A)	Solid circulating flux (kg/m ² s) (B)	Temperature (K) (C)	Inlet gas velocity (m/s) (D)	Average of solid volume fraction (-)	SD of radial solid volume fraction (-)	SD of axial solid volume fraction (-)
1	0.00015	300	1073	1	0.1651	0.0035	0.0061
2	0.00020	300	1073	1	0.1625	0.0029	0.0058
3	0.00015	400	1073	1	0.1757	0.0076	0.0110
4	0.00020	400	1073	1	0.1671	0.0033	0.0063
5	0.00015	300	1273	1	0.1626	0.0038	0.0052
6	0.00020	300	1273	1	0.1603	0.0022	0.0057
7	0.00015	400	1273	1	0.1738	0.0048	0.0059
8	0.00020	400	1273	1	0.1648	0.0036	0.0060
9	0.00015	300	1073	3	0.1069	0.0016	0.0028
10	0.00020	300	1073	3	0.1096	0.0026	0.0048
11	0.00015	400	1073	3	0.1171	0.0014	0.0027
12	0.00020	400	1073	3	0.1175	0.0028	0.0039
13	0.00015	300	1273	3	0.1036	0.0026	0.0028
14	0.00020	300	1273	3	0.1070	0.0026	0.0044
15	0.00015	400	1273	3	0.1126	0.0024	0.0026
16	0.00020	400	1273	3	0.1154	0.0024	0.0038



รูปที่ 4.12 คอนทัวร์ของสัดส่วนเชิงปริมาตรของอนุภาคของแข็งที่เวลา 30 วินาที (ก) กรณีที่ 3
(ข) กรณีที่ 11 (ค) กรณีที่ 13 (ง) กรณีที่ 15

ตารางที่ 4.2 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ค่าตอบสนองเป็นค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง

Source of variation	Sum of squares	Degree of freedom	Mean square	F Value	p-value
A	1.10E-05	1	1.1E-05	2.26	0.1610
B	2.77E-04	1	2.77E-04	57.13	< 0.0001
D	1.22E-02	1	1.22E-02	2516.62	< 0.0001
AD	6.32E-05	1	6.32E-05	13.02	0.0041
Error	5.34E-05	11	4.85E-06		
Total	1.26E-02	15			

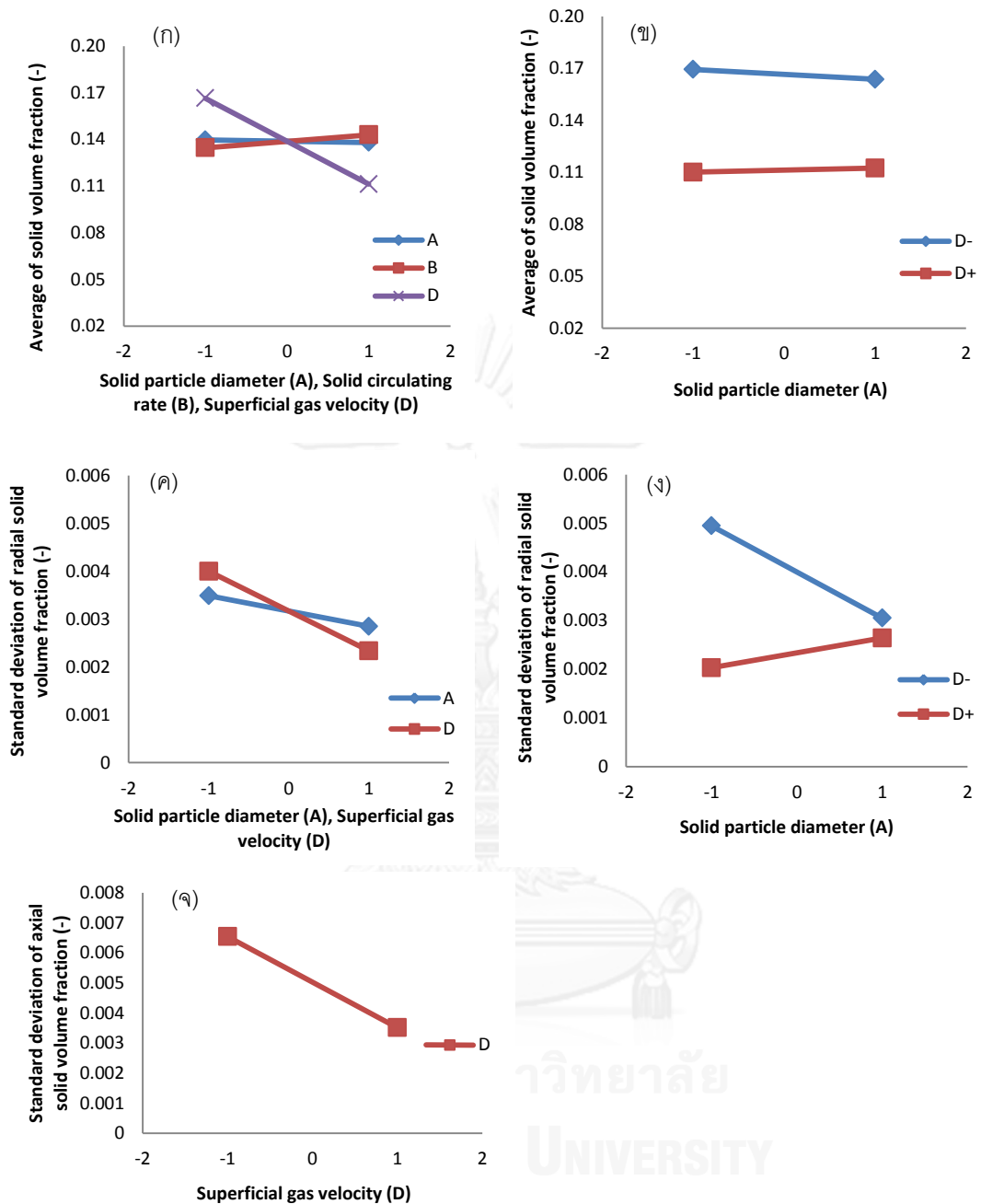
ตารางที่ 4.3 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ค่าตอบสนองเป็นค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมี

Source of variation	Sum of squares	Degree of freedom	Mean square	F Value	p-value
A	1.64E-06	1	1.64E-06	1.56	0.2351
D	1.11E-05	1	1.11E-05	10.52	0.0070
AD	6.27E-06	1	6.27E-06	5.97	0.0310
Error	1.26E-05	12	1.05E-06		
Total	3.16E-05	15			

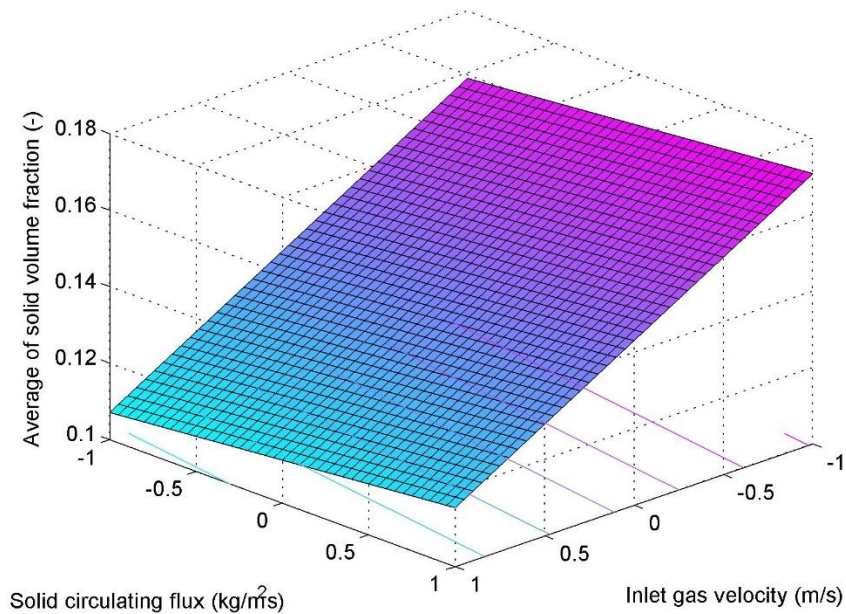
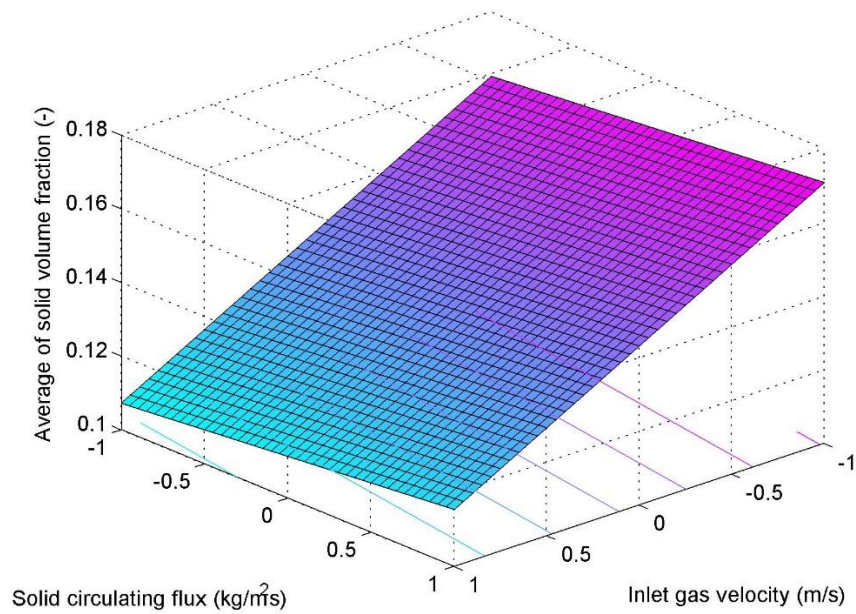
ตารางที่ 4.4 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ค่าตอบสนองเป็นค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งในแนวแกน

Source of variation	Sum of squares	Degree of freedom	Mean square	F Value	p-value
D	3.67E-05	1	3.67E-05	17.59674	0.0009
Error	2.92E-05	14	2.08E-06		
Total	6.58E-05	15			

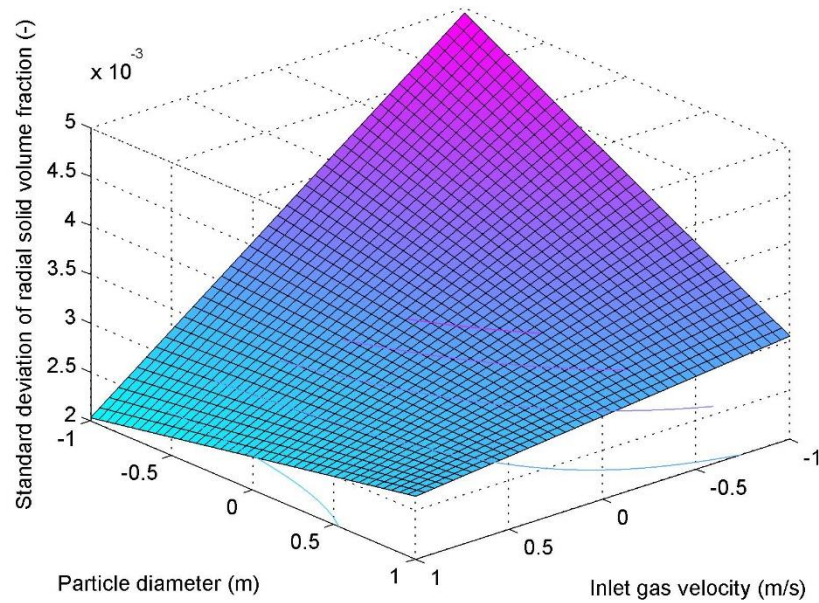
รูปที่ 4.13 เป็นกราฟแสดงผลของตัวแปรหลักและผลของอันตรกิริยา แสดงดังรูป (ก) ผลของตัวแปรหลักที่มีผลต่อค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง พบว่า ตัวแปร A และ D ให้ผลเชิงลบ ส่วนตัวแปร B ให้ผลเชิงบวก หมายความว่า เมื่ออนุภาคของแข็งมีขนาดใหญ่ขึ้นและความเร็วแก๊สป้อนเข้าเพิ่มสูงขึ้น จะส่งผลให้ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งทั้งเครื่องปฏิกรณ์อากาศมีค่าลดลง แต่การเพิ่มขึ้นของอัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็งจะทำให้ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีค่าสูงขึ้น ในส่วนผลของอันตรกิริยาแสดงในรูป (ข) พบว่าเมื่อตัวแปร D มีค่าต่ำ (-) การเพิ่มขึ้นของตัวแปร A จะส่งผลในเชิงลบ หรือเมื่อความเร็วแก๊สป้อนเข้าต่ำ การเพิ่มขึ้นของขนาดอนุภาคของแข็งจะทำให้ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีค่าต่ำลง เพราะเมื่ออนุภาคของแข็งมีขนาดใหญ่ขึ้นเกิดการรวมกันเป็นกลุ่มได้น้อยและความเร็วแก๊สป้อนเข้าต่ำ จะทำให้การเคลื่อนที่ของอนุภาคของแข็งและกระจายตัวภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศลดลง ในทางกลับกัน เมื่อตัวแปร D มีค่ามาก (+) จะส่งผลในเชิงบวกคือ ความเร็วแก๊สป้อนเข้าที่สูงและอนุภาคของแข็งที่มีขนาดเพิ่มขึ้น จะทำให้ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีค่าสูงขึ้น เพราะความเร็วแก๊สป้อนเข้าที่สูงขึ้น จะส่งผลให้เกิดการชนกันระหว่างอนุภาคของแข็งมากขึ้น ทำให้เกิดการรวมตัวกันเป็นกลุ่มก้อนที่มากขึ้นทั่วทั้งเครื่องปฏิกรณ์ พิจารณาที่รูป (ค) เป็นผลของตัวแปรหลักที่มีต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง โดยพบว่า ทั้งตัวแปร A และ D แสดงผลเชิงลบคือ เมื่อเพิ่มขนาดของอนุภาคของแข็งและเพิ่มความเร็วแก๊สป้อนเข้า ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งจะลดลง ซึ่งสามารถอธิบายได้ดังข้างต้นว่า ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งที่ลดลงนี้สามารถบ่งบอกถึงการกระจายตัวอย่างสม่ำเสมอหรือเกิดการผสมที่ดีของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมี เพราะอนุภาคที่มีขนาดใหญ่ขึ้นจะทำให้มีการเกิดกลุ่มก้อนอนุภาคของแข็งลดลงและความเร็วแก๊สเข้าที่สูงขึ้นจะทำให้อนุภาคของแข็งเกิดการเคลื่อนที่ได้ดีขึ้น ส่งผลให้มีการกระจายตัวที่สม่ำเสมอในแนวรัศมี และเมื่อพิจารณาที่รูป (ง) ผลของอันตรกิริยาที่มีต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง จากผลพบว่า เมื่อค่า D เป็นค่าสูง (+) หรือความเร็วแก๊สป้อนเข้าสูงและการเพิ่มของตัวแปร A หรือขนาดของอนุภาคของแข็งที่ใหญ่ขึ้น จะทำให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีความแปรปรวนมากขึ้นจากเดิม ในทางตรงกันข้าม เมื่อค่า D มีค่าต่ำ (-) การเพิ่มขึ้นของตัวแปร A จะส่งผลให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีความแปรปรวนลดน้อยลง เนื่องจาก ความเร็วแก๊สป้อนเข้าต่ำจะทำให้อนุภาคของแข็งขนาดใหญ่เกิดการเคลื่อนที่ได้ช้าหรือเคลื่อนที่เป็นระเบียบมากขึ้น ความแปรปรวนของระบบน้อยลง จึงทำให้เกิดการผสมที่ดีในแนวรัศมีแต่จะเกิดกลุ่มอนุภาคในระบบที่ความเร็วแก๊สสูง ส่วนผลของตัวแปรหลักที่มีผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง แสดงดังรูป (จ) พบตัวแปร D แสดงผลในเชิงลบ คือ การเพิ่มขึ้นของความเร็วแก๊สป้อนเข้าจะทำให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีค่าลดต่ำลง หรือส่งผลให้อนุภาคของแข็งมีความสม่ำเสมอในแนวแกนมากขึ้น เช่นเดียวกับกับผลของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมี จากผลทั้งหมดในส่วนนี้ ตัวแปร D หรือความเร็วแก๊สป้อนเข้าส่งผลมากที่สุดต่อการไหลและการกระจายตัวของอนุภาคของแข็งภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ



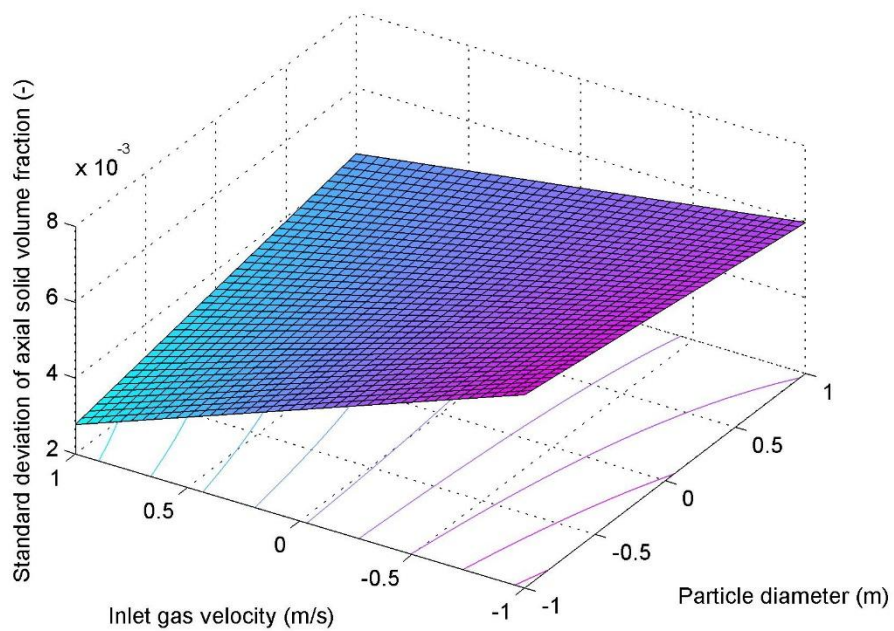
รูปที่ 4.13 ผลของตัวแปรหลักและผลของอันตรกิริยา (ก) ผลของตัวแปรหลักที่มีต่อค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง (ข) ผลของอันตรกิริยาที่มีต่อค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง (ค) ผลของตัวแปรหลักที่มีต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง (ง) ผลของอันตรกิริยาที่มีต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง และ (จ) ผลของตัวแปรหลักที่มีต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง



รูปที่ 4.14 พื้นผิวตอบสนองของค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เมื่ออัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน (ก) อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร ส่วนในรูป (ข) อนุภาคของแข็งนิกเกิล ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00020 เมตร



รูปที่ 4.15 พื้นผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เมื่อชนิดของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน



รูปที่ 4.16 พื้นผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เมื่อชนิดของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน

จากนั้น ได้ทำการหาแบบจำลองการถดถอย (Regression model) เพื่อความสะดวกต่อการนำผลที่ได้ไปใช้งานในการออกแบบการทดลองต่อไป ตัวแปรตอบสนองในงานวิจัยนี้มี 3 ค่า ทำให้ได้แบบจำลองการถดถอยทั้งหมด 3 แบบจำลอง แสดงโดยสมการที่ (4.1) เป็นแบบจำลองการถดถอยโดยมีค่าตอบสนองคือ ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง สมการที่ (4.2) คือแบบจำลองการถดถอยที่มีค่าตอบสนองคือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง และสมการที่ (4.3) เป็นแบบจำลองการถดถอยโดยมีค่าตอบสนองคือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง

$$Y_1 = 0.138889 - 0.00083X_A + 0.004163X_B - 0.02763X_D + 0.001988X_A X_D \quad (4.1)$$

$$Y_2 = 0.003169 - 0.00032X_A - 0.00083X_D + 0.000626X_A X_D \quad (4.2)$$

$$Y_3 = 0.005026 - 0.00151X_D \quad (4.3)$$

โดยตัวแปร Y_1 คือ ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง

Y_2 คือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง

Y_3 คือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง

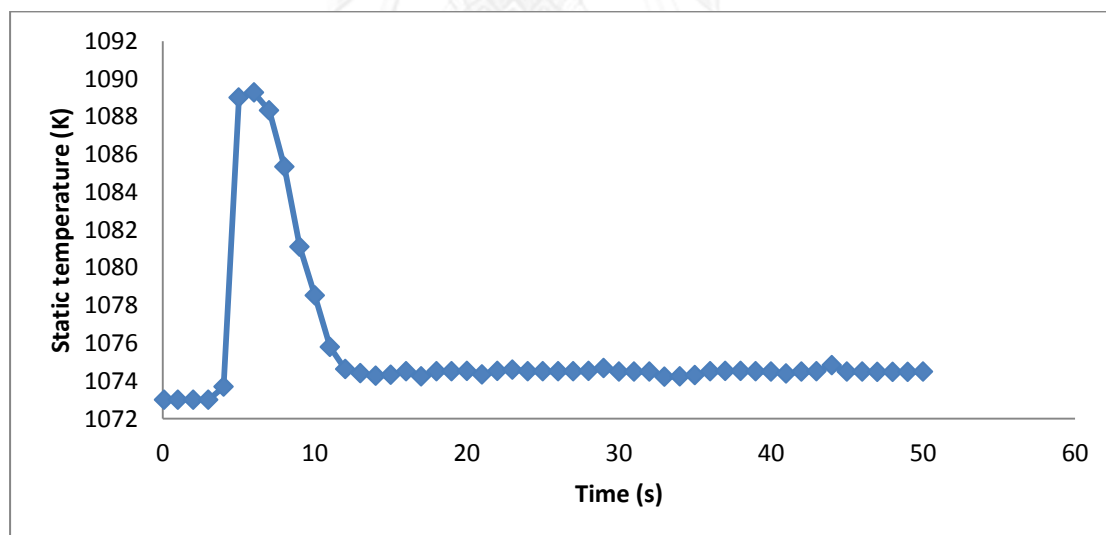
$X_A X_B X_D$ คือ ค่าเข้ารหัสของตัวแปร A B และ D ตามลำดับ

เมื่อทำการทดสอบความถูกต้องของส่วนตกค้างแสดงดังภาคผนวกสามารถสรุปได้ว่า ส่วนตกค้างที่พบมีการกระจายตัวแบบปกติ มีรูปแบบที่ไม่แน่นอนแต่มีความแปรปรวนที่คงที่ แสดงว่าแบบจำลองการถดถอยที่ได้ข้างต้นนี้มีความถูกต้อง เมื่อนำสมการแบบจำลองการถดถอยนี้มาสร้างกราฟพื้นผิวตอบสนอง (Response surface) ดังรูปที่ 4.14 แสดงกราฟพื้นผิวตอบสนองของค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งโดยรูป (ก) อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร ส่วนรูป (ข) อนุภาคของแข็งนิกเกิลที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00020 เมตร เมื่ออัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน พบว่า ทั้งอนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตรและอนุภาคของแข็งนิกเกิลที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00020 เมตร ที่อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาทีและความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาที จะให้ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งสูงที่สุด ส่วนในรูปที่ 4.15 แสดงกราฟพื้นผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบน

มาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง และรูปที่ 4.16 แสดงกราฟพื้นผิวตอบสนองของค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง เมื่อชนิดของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้าต่างๆกัน แสดงให้เห็นว่า จะพบอนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตรและความเร็วแก๊สป้อนเข้า 3 เมตรต่อวินาที จะส่งผลให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานทั้งในแนวรัศมีและแนวแกนของอนุภาคของแข็งต่ำที่สุด แสดงว่าอนุภาคของแข็งทั้งแนวรัศมีและแนวแกนมีความสม่ำเสมอ

4.4 การหาแบบจำลองปฏิกิริยาเคมีที่เหมาะสม

จากการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อการไหลของอนุภาคของแข็งและแก๊ส ในภาวะที่ไม่เกิดปฏิกิริยาเคมีขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศในส่วนที่ผ่านมา ในส่วนนี้จะทำการศึกษาผลของการไหลในภาวะที่เกิดปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ซึ่งการเลือกช่วงระยะเวลาที่เหมาะสมสำหรับวิเคราะห์ข้อมูลที่ระบบเข้าสู่ภาวะเสถียรคงตัว แสดงดังรูปที่ 4.17 เป็นการแสดงค่าอุณหภูมิของแก๊สในช่วงเวลาการทดลองต่างๆ พบว่า ที่ช่วงเวลา 20-50 วินาที ค่าอุณหภูมิของแก๊สภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศมีค่าคงที่หรือเปลี่ยนแปลงน้อย ดังนั้นจึงเลือกช่วงเวลา 20-50 วินาทีในการคำนวณต่อไป



รูปที่ 4.17 การกระจายตัวของอุณหภูมิของแก๊ส ที่เวลาการทดลองต่างๆ

โดยอนุภาคของแข็งชนิดโลหะที่ทำหน้าที่เป็นตัวพาออกซิเจน เกิดการออกซิไดซ์ภายในเครื่องปฏิกรณ์ อากาศ กลายเป็นโลหะออกไซด์ ซึ่งเป็นปฏิกิริยาแบบคายความร้อน โดยการเลือกใช้สมการของ แบบจำลองแกนกลางหดตัว (shrinking core model) พิจารณาการแพร่ของแก๊สไปยังอนุภาค ของแข็ง สำหรับกระบวนการเคมีคอลลูบิงภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศนี้ ได้ศึกษาแบบจำลอง แกนกลางหดตัวของของไหลจากงานวิจัยของ Shuai และคณะ [11] และยึดรูปแบบการเกิดปฏิกิริยา ของอนุภาคของแข็งตามแบบจำลองแกนกลางหดตัวของอนุภาคของแข็งทรงกลม (spherical) ในการ เลือกสมการที่เหมาะสมในงานวิจัยนี้ พิจารณาจากการจำลองสมการทั้งหมด 5 สมการ (สมการที่ (3.37)-(3.41)) และนำผลมาเปรียบเทียบกับผลจากการทดลองจริง ดังรูปที่ 4.18 แสดงร้อยละการ เปลี่ยนแปลงของนิกเกิลและออกซิเจนของสมการที่เกิดปฏิกิริยาต่างๆ พบว่า สมการที่ (3.39) ซึ่งเป็น สมการของความสัมพันธ์อาร์เรเนียส ระหว่างการแพร่และปฏิกิริยาเคมี (Arrhenius diffusion and reaction) มีผลใกล้เคียงและมีแนวโน้มเดียวกันกับผลจากการทดลองมากที่สุด ส่วนในสมการที่ (3.38) เป็นสมการของความสัมพันธ์อาร์เรเนียสของการแพร่ (Arrhenius diffusion) และสมการที่ (3.40) เป็นสมการการแพร่จริง (Effective diffusion) ให้ผลที่แตกต่างจากผลการทดลองมากที่สุด เนื่องจากในสมการนี้อธิบายเฉพาะสัมประสิทธิ์การแพร่ของอนุภาคของแข็งไม่ได้รวมค่าคงที่ของการ เกิดปฏิกิริยาเข้าไปด้วย จึงทำให้มีความคลาดเคลื่อนจากผลการทดลองจริง ซึ่งมีความสอดคล้องกัน กับผลการทดลองของ Kruggel-Emden และคณะ [28] ที่เปรียบเทียบสมการของการเกิดปฏิกิริยา เคมีทั้ง 5 สมการเช่นเดียวกัน และเปรียบเทียบค่าความคลาดเคลื่อนของสมการในแต่ละแบบ พบว่า ทั้งสมการของความสัมพันธ์อาร์เรเนียสของการแพร่และสมการการแพร่จริง มีความคลาดเคลื่อนจาก ผลการทดลองจริงมากที่สุด ดังนั้น ในงานวิจัยนี้เลือกใช้ สมการของความสัมพันธ์อาร์เรเนียสระหว่าง การแพร่และปฏิกิริยาเคมี (Arrhenius diffusion and reaction) สำหรับอธิบายปฏิกิริยาเคมีที่ เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ โดยได้เปรียบเทียบให้เห็นผลชัดเจนขึ้น ดังรูปที่ 4.19 ใช้สมการ ของความสัมพันธ์อาร์เรเนียสระหว่างการแพร่และปฏิกิริยาเคมีในการจำลอง โดยแสดงเป็นค่าร้อยละ การเปลี่ยนแปลงของนิกเกิลกับออกซิเจน ณ อุณหภูมิ 1273 เคลวิน ที่อัตราส่วนโดยโมลของแก๊ส แตกต่างกัน พบว่า เมื่อเปรียบเทียบกับผลจากการทดลอง ผลจากการคำนวณมีความแม่นยำและ ใกล้เคียงกับผลการทดลอง เช่นเดียวกันกับรูปที่ 4.20 แสดงร้อยละการเปลี่ยนแปลงของนิกเกิลกับ ออกซิเจนที่อัตราส่วนโดยโมลของแก๊สเท่ากับ 0.1 ณ อุณหภูมิแตกต่างกัน พบว่า ผลที่ได้จากการ คำนวณของสมการนี้สามารถทำนายอัตราการเกิดปฏิกิริยาได้แม่นยำเมื่อเปรียบเทียบกับผลจากการ ทดลอง ซึ่งในงานวิจัยของ Kruggel-Emden และคณะ [28] ยังได้แสดงอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี ของคอปเปอร์กับออกซิเจนพบว่า สมการของความสัมพันธ์อาร์เรเนียสระหว่างการแพร่และปฏิกิริยา เคมีนี้เหมาะสมสำหรับทำนายอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีมากที่สุด ดังนั้นจึงเลือกใช้สมการของ ความสัมพันธ์อาร์เรเนียสระหว่างการแพร่และปฏิกิริยาเคมี (Arrhenius diffusion and reaction) ใน การทำนายอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีในส่วนต่อไป

4.5 ผลของตัวแปรดำเนินการที่มีต่อปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์

จากแบบจำลองแกนกลางหดตัวเลือกใช้สมการของความสัมพันธ์อาร์เรนีเยสระหว่างการแพร่และปฏิกิริยาเคมี (Arrhenius diffusion and reaction) ในการทำนายปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง และนำมาวิเคราะห์ผลของตัวแปรดำเนินการทั้ง 4 ตัวแปรคือ ชนิดของอนุภาคของแข็ง อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิ และความเร็วแก๊สป้อนเข้า เช่นเดียวกันกับการจำลองข้างต้น ด้วยวิธีการออกแบบการทดลองแบบ 2^4 โดยมีตัวแปรตอบสนองคือ ร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนเฉลี่ยทั้งเครื่องปฏิกรณ์อากาศซึ่งสามารถแสดงถึงการผสมที่ดีภายในเครื่องปฏิกรณ์ที่ได้การเกิดปฏิกิริยาเคมีที่สูงแสดงดังตารางที่ 4.5 พบว่า กรณีศึกษาที่ 6 อนุภาคของแข็งชนิดนิกเกิลที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00020 เมตร อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 300 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาที ที่อุณหภูมิ 1273 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาที มีค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนสูงที่สุด เมื่อเปรียบเทียบกับค่าในการวิเคราะห์ความแปรปรวนของตัวแปรดำเนินการในส่วนข้างต้นที่ไม่เกิดปฏิกิริยา พบว่า มีความสอดคล้องกัน โดยค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งในกรณีนี้มีค่าที่สูงและค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานทั้งในแนวรัศมีและแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีค่าต่ำ ส่งผลให้มีความเข้มข้นอนุภาคของแข็งเฉลี่ยทั้งเครื่องปฏิกรณ์อากาศมีปริมาณของแข็งภายในสูง มีความสม่ำเสมอของอนุภาคของแข็งทั้งในแนวรัศมีและแนวแกนเกิดการผสมที่ดีส่งผลทำให้อนุภาคของแข็งเกิดปฏิกิริยาเคมีกับออกซิเจนได้ดีมากขึ้น ส่วนในกรณีศึกษาที่ 11 อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาที ที่อุณหภูมิ 1073 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 3 เมตรต่อวินาที มีค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนต่ำที่สุด เพราะเมื่อเปรียบเทียบกับค่าในการวิเคราะห์ความแปรปรวนของตัวแปรดำเนินการที่ผ่านมา พบว่าที่กรณีศึกษา นี้ ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งในกรณีนี้มีค่าต่ำ อนุภาคของแข็งจะสามารถเกิดปฏิกิริยาเคมีกับออกซิเจนได้น้อย อีกทั้งอุณหภูมิที่ต่ำส่งผลให้อัตราการในการเกิดปฏิกิริยาไม่ดีตามไปด้วย และเมื่อเปรียบเทียบทั้ง 2 กรณีดังรูปที่ 4.21 (ก) คอนทัวร์ของความเข้มข้นของออกซิเจนที่เวลา 30 วินาที พบว่า กรณีที่ 6 พบความเข้มข้นของออกซิเจนที่เหลืออยู่ในเครื่องปฏิกรณ์อากาศในปริมาณน้อย สังเกตเห็นได้เฉพาะส่วนด้านล่างของเครื่องปฏิกรณ์อากาศและบริเวณส่วนใหญ่เป็นสีน้ำเงินคือบริเวณที่พบออกซิเจนต่ำ มีความสอดคล้องกันกับผลร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนที่มีค่าสูง เปรียบเทียบกับในกรณีที่ 11 รูปที่ 4.21 (ข) ปริมาณความเข้มข้นของออกซิเจนจะมีสีเขียวฟ้ามากกว่าในกรณีที่ 6 ซึ่งมีแนวโน้มไปในทางเดียวกันกับค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนที่มีค่าต่ำ ปริมาณความเข้มข้นของออกซิเจนที่เหลือในเครื่องปฏิกรณ์อากาศจึงเหลืออยู่สูง

จากนั้น ตารางที่ 4.6 เป็นการวิเคราะห์ความแปรปรวนของการศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการ โดยใช้ตัวแปรตอบสนองคือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน พบว่า ชนิดของอนุภาคของแข็ง (A) อุณหภูมิ (C) ความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D) อันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งและอุณหภูมิ (AC) อันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้า (AD) อันตรกิริยาระหว่างอุณหภูมิและความเร็วแก๊สป้อนเข้า (CD) และอันตรกิริยาร่วมระหว่างชนิด

ของอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิและความเร็วแก๊สป้อนเข้า (ACD) ส่งผลต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนที่เกิดปฏิกิริยาภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศของกระบวนการเผาไหม้แบบเคมีคอลลุปีง ซึ่งตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนมากที่สุดคือ ชนิดของอนุภาคของแข็ง (A) อุณหภูมิ (C) และความเร็วแก๊สป้อนเข้า (D)

รูปที่ 4.22 เป็นกราฟแสดงผลของตัวแปรหลักและผลของอันตรกิริยา (ก) ผลของตัวแปรหลักที่มีผลต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน พบว่า ตัวแปร A และ C ให้ผลเชิงบวก ส่วนตัวแปร D ให้ผลเชิงลบ สรุปได้ว่า เมื่อเพิ่มขนาดของอนุภาคของแข็งและเพิ่มอุณหภูมิจะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนมีค่าสูงขึ้น เนื่องจาก อนุภาคของแข็งที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางใหญ่ขึ้นจะส่งผลให้ความเร็วที่น้อยสุดที่ทำให้เกิดฟลูอิดเซชันมีค่าสูงขึ้น และอนุภาคของแข็งบริเวณที่หนาแน่นจะมีการเกิดปฏิกิริยาเคมีได้มากขึ้นนั่นเอง ส่วนอุณหภูมิที่สูงขึ้นจะเร่งให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงขึ้น แต่ถ้าหากเพิ่มความเร็วแก๊สป้อนเข้าจะทำให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนมีค่าต่ำลง เพราะอนุภาคของแข็งและแก๊สจะมีเวลาในการสัมผัสกันน้อยลง เกิดการหลุดลอยของอนุภาคของแข็งออกจากเครื่องปฏิกรณ์อากาศเร็วขึ้น ทำให้เกิดปฏิกิริยาเคมีได้น้อยลง (ข) ที่ค่าตัวแปร D ทั้งในเชิงลบและเชิงบวก เมื่อตัวแปร C เพิ่มขึ้นจะแสดงผลค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนเพิ่มสูงขึ้นเป็นแนวโน้มเดียวกัน ดังที่กล่าวข้างต้นแสดงว่าเมื่อเพิ่มอุณหภูมิจะส่งผลให้ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศเกิดปฏิกิริยาได้ดีขึ้นและ (ค) ทั้งผลในเชิงลบและเชิงบวกของค่าตัวแปร C และ D จะส่งผลให้แนวโน้มของค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนเพิ่มสูงขึ้นที่ค่าตัวแปร A เพิ่มขึ้น หมายความว่า เมื่อเพิ่มขนาดอนุภาคของแข็งแล้วทั้งค่าอุณหภูมิและความเร็วแก๊สป้อนเข้าทั้งค่าสูงและต่ำจะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนเพิ่มขึ้น เนื่องจากขนาดของอนุภาคของแข็งขนาดใหญ่จะส่งผลให้เกิดการฟลูอิดเซชันได้ยากขึ้น จึงส่งผลให้เกิดปฏิกิริยาเคมีได้สูงเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นและความเร็วแก๊สป้อนเข้าที่สูงจะทำให้มีแก๊สที่เป็นสารตั้งต้นมากเกินพอในการเกิดปฏิกิริยาเคมีกับอนุภาคของแข็ง ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนจึงเพิ่มขึ้น จากการวิเคราะห์ความแปรปรวนนี้นำไปสร้างแบบจำลองการถดถอยโดยมีค่าตัวแปรตอบสนองคือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนทั้งเครื่องปฏิกรณ์อากาศ ดังแสดงในสมการที่ (4.4)

$$Y_4 = 84.19525 + 11637.56X_A + 0.006715X_C - 16.8246X_D + 10.98084X_A X_C + 75663.77X_A X_D + 0.01399X_C X_D - 66.8121X_A X_C X_D \quad (4.4)$$

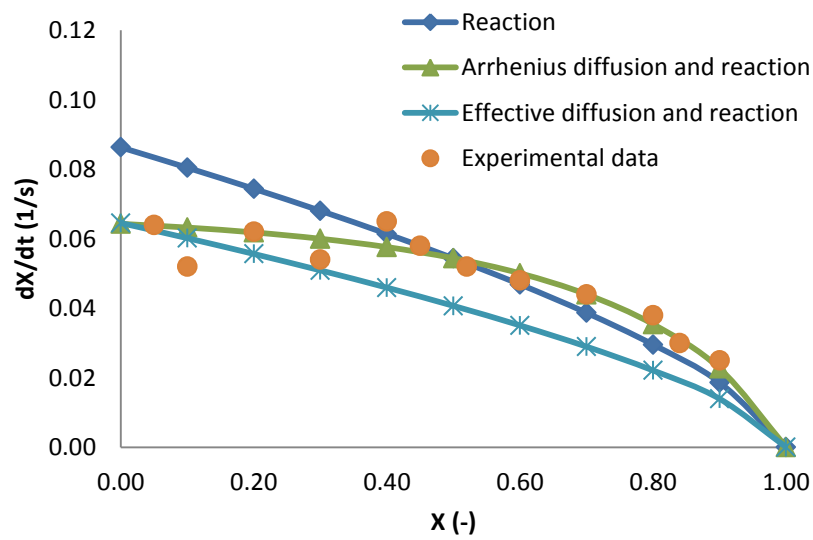
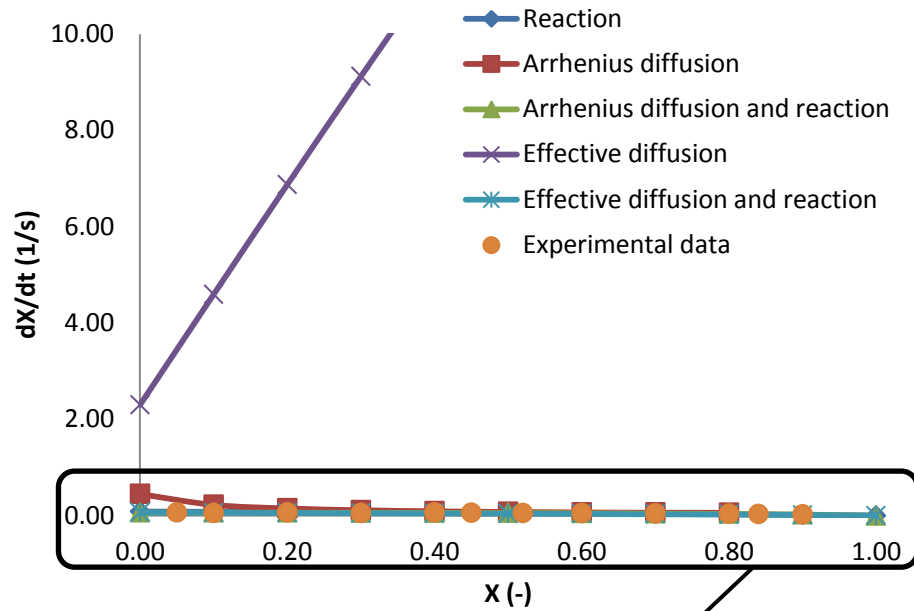
โดยตัวแปร Y_4 คือ ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน

$X_A X_C X_D$ คือ ค่าเข้ารหัสของตัวแปร A C และ D ตามลำดับ

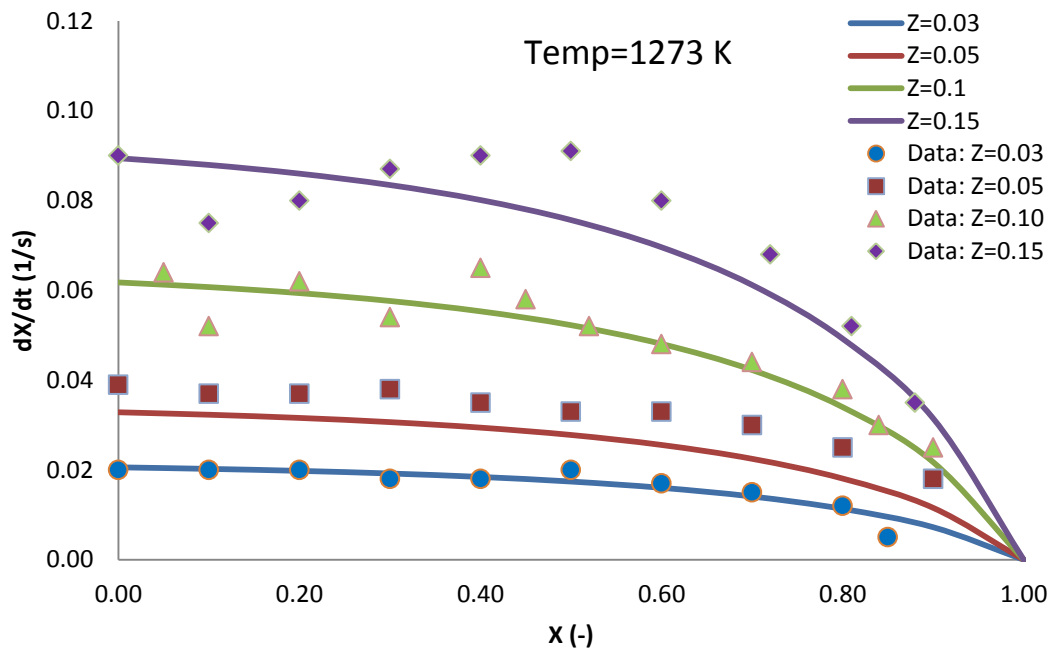
การทดสอบความถูกต้องของส่วนตกค้างจากแบบจำลองการถดถอยข้างต้นนี้แสดงในภาคผนวก จะเห็นว่ามีความถูกต้อง เพราะมีการกระจายตัวอย่างปกติและความแปรปรวนอย่างสม่ำเสมอคงที่ ทำให้สามารถนำแบบจำลองการถดถอยที่ได้มาสร้างกราฟพื้นผิวตอบสนอง

(Response surface) โดยรูปที่ 4.23 แสดงกราฟพื้นผิวตอบสนองของค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนที่ (ก) อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร และ (ข) อนุภาคของแข็งนิกเกิลที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00020 เมตร พบว่า เปรียบเทียบระหว่างอนุภาคของแข็งทั้งสองขนาด เมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้นและลดความเร็วแก๊สป้อนเข้า จะส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนมีแนวโน้มสูงขึ้นไปในทางเดียวกัน เพราะอุณหภูมิจะช่วยให้เกิดปฏิกิริยาได้ดีขึ้นและความเร็วแก๊สป้อนเข้าที่ไม่สูงเกินไป จะทำให้อนุภาคของแข็งมีเวลาในการสัมผัสและเกิดปฏิกิริยาภายในเครื่องปฏิกรณ์ได้มากขึ้น ในทางเดียวกันกับผลของตัวแปรหลักและผลของอันตรกิริยาต่อค่าตัวแปรตอบสนองในส่วนที่ผ่านมา พบว่า ที่ความเร็วแก๊สป้อนเข้าต่ำจะส่งผลให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานทั้งในแนวรัศมีและแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งมีค่าต่ำ แสดงถึงความแปรปรวนของอนุภาคของแข็งที่มีความสม่ำเสมอ ส่งผลให้เกิดการผสมกันได้ดี เมื่ออนุภาคของแข็งภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศมีความสม่ำเสมอแล้วแก๊สที่จะเข้าไปทำปฏิกิริยากับอนุภาคของแข็งจึงเกิดปฏิกิริยาเคมีกันได้อย่างยิ่งยิ่ง ส่งผลต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนสูงเป็นแนวโน้มเดียวกัน

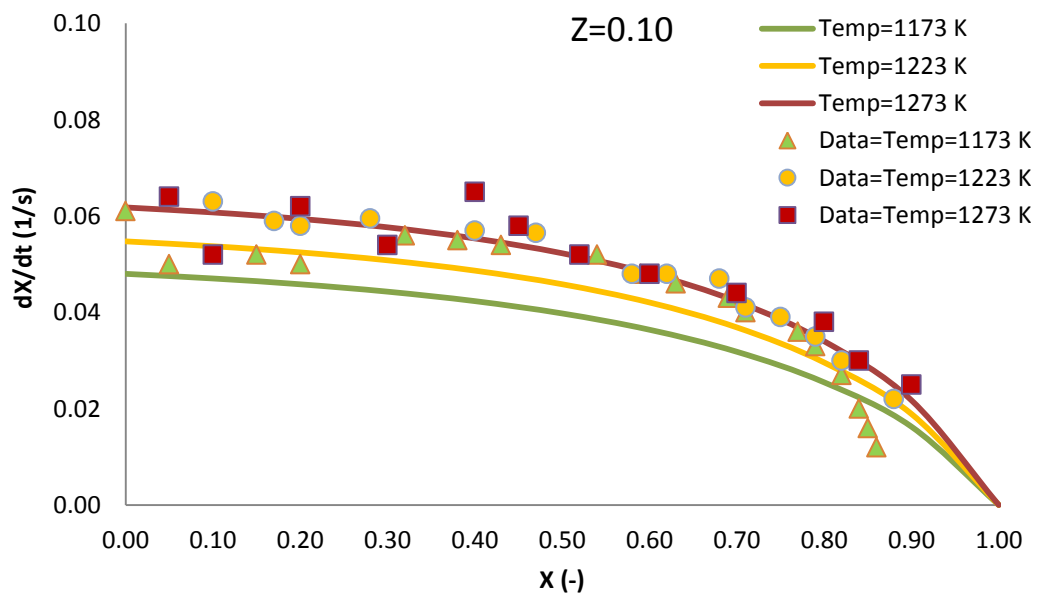
จากการจำลองอุทกพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูปิงนี้ ได้ข้อมูลเพิ่มเติมที่สามารถนำไปพัฒนาต่อในภาคอุตสาหกรรมที่ต้องการเพิ่มประสิทธิภาพในการเกิดปฏิกิริยาเคมีของการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูปิงให้สูงขึ้น โดยการออกแบบกระบวนการทางคณิตศาสตร์ของการจำลองตัวแปรดำเนินการที่ทำให้เกิดการผสมกันของอนุภาคของแข็งหรือของไหลภายในเครื่องปฏิกรณ์เกิดการผสมที่ดีขึ้น ลดปัญหาการรวมตัวกันของอนุภาคของแข็ง อีกทั้งในส่วนของการเกิดปฏิกิริยาเคมีแสดงผลร้อยละผลได้ที่มีค่าสูง ส่งผลให้การเกิดปฏิกิริยาเคมีของโลหะกับออกซิเจนในอัตราที่ดีขึ้น และยังช่วยลดค่าใช้จ่ายในการปฏิบัติงานจริง เนื่องจาก การจำลองจะสามารถหาภาวะที่เหมาะสม เลือกตัวแปรที่อาจส่งผลกระทบต่อปฏิกิริยา เช่น ชนิดของอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิ อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง ความเร็วแก๊สป้อนเข้า ทำให้สามารถลดค่าใช้จ่ายในการปรับเปลี่ยนค่าต่างๆเหล่านี้



รูปที่ 4.18 ร้อยละการเปลี่ยนแปลงของนิกเกิลกับออกซิเจนที่สมการของการเกิดปฏิกิริยาเคมีแตกต่างกัน



รูปที่ 4.19 ร้อยละการเปลี่ยนแปลงของนิกเกิดกับออกซิเจน ณ อุณหภูมิ 1273 เคลวิน ที่อัตราส่วนโดยโมลของแก๊สแตกต่างกัน



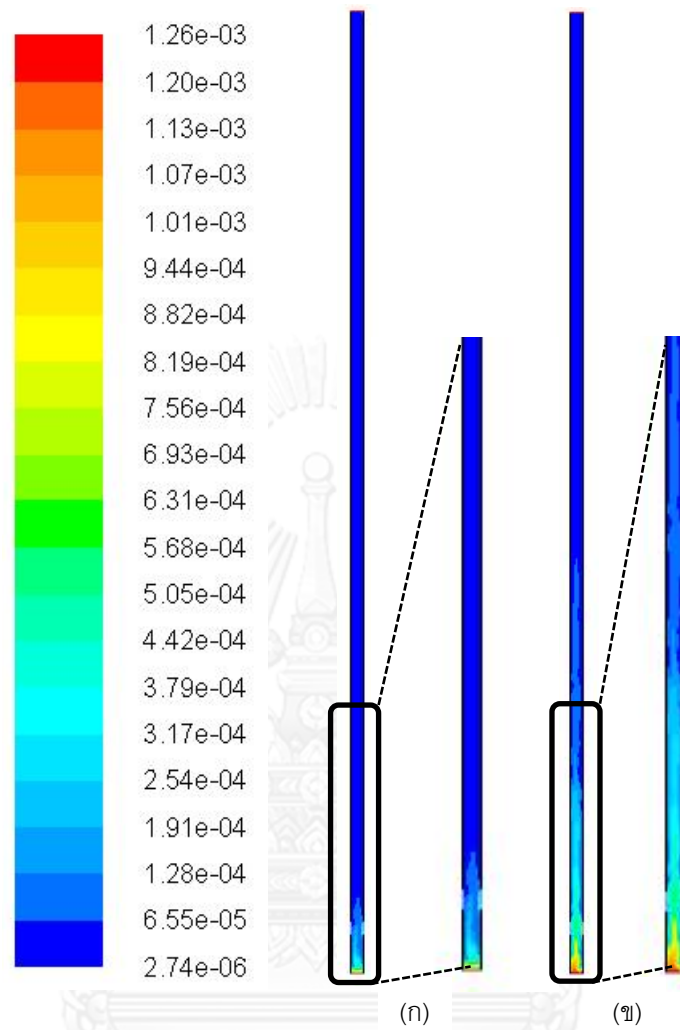
รูปที่ 4.20 ร้อยละการเปลี่ยนแปลงของนิกเกิดออกซิเจนที่อัตราส่วนโดยโมลของแก๊สเท่ากับ 0.1 ณ อุณหภูมิแตกต่างกัน

ตารางที่ 4.5 การออกแบบการทดลองแบบ 2^4 ของการศึกษาผลตัวแปรดำเนินการและค่าตัวแปรตอบสนองที่ได้จากการจำลองที่เกิดปฏิกิริยาเคมี

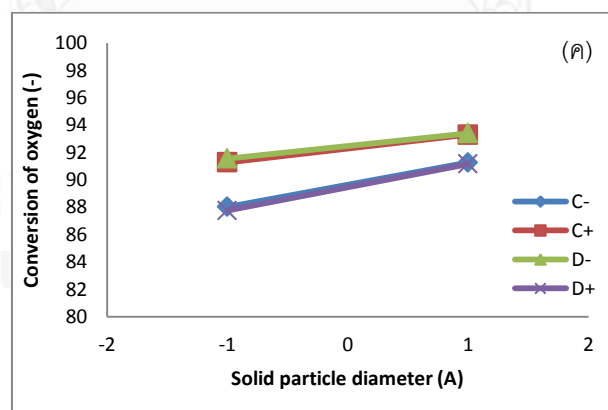
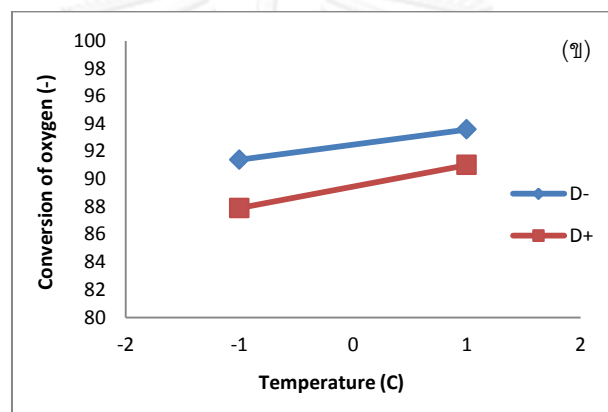
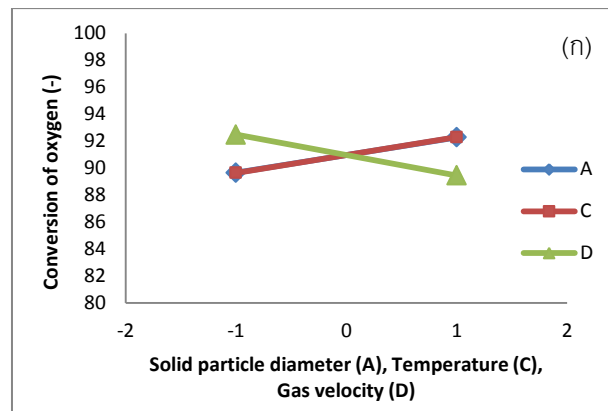
Case	Particle diameter (m) (A)	Solid circulating flux ($\text{kg/m}^2 \text{ s}$) (B)	Temperature (K) (C)	Inlet gas velocity (m/s) (D)	Conversion of oxygen (-)
1	0.00015	300	1073	1	90.3486
2	0.00020	300	1073	1	92.4758
3	0.00015	400	1073	1	90.3115
4	0.00020	400	1073	1	92.4479
5	0.00015	300	1273	1	92.8068
6	0.00020	300	1273	1	94.3773
7	0.00015	400	1273	1	92.7854
8	0.00020	400	1273	1	94.3620
9	0.00015	300	1073	3	85.7560
10	0.00020	300	1073	3	90.6140
11	0.00015	400	1073	3	85.7033
12	0.00020	400	1073	3	89.5516
13	0.00015	300	1273	3	89.8216
14	0.00020	300	1273	3	92.2450
15	0.00015	400	1273	3	89.7446
16	0.00020	400	1273	3	92.2385

ตารางที่ 4.6 การวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้ค่าตอบสนองเป็นค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน

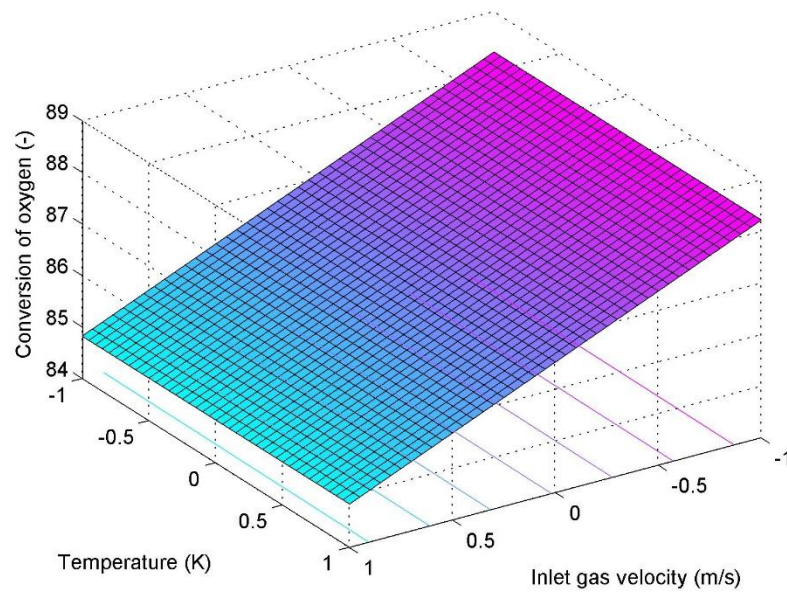
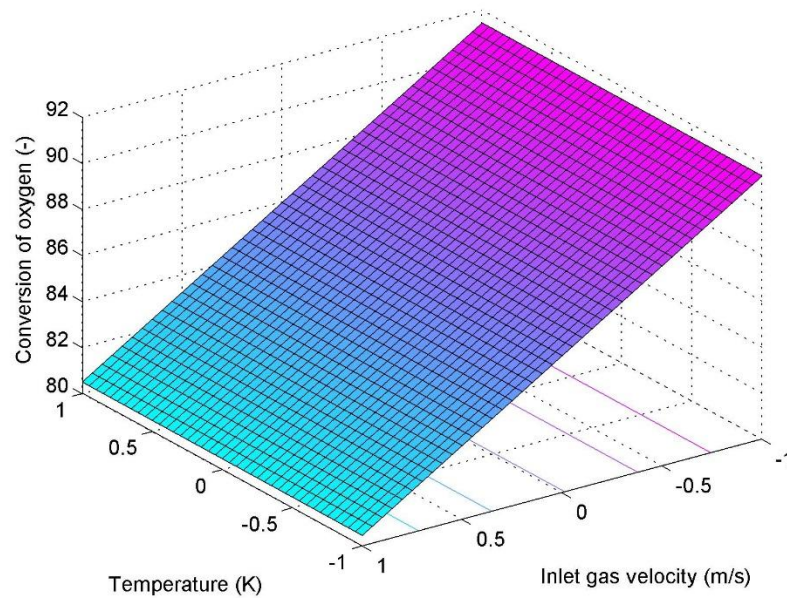
Source of variation	Sum of squares	Degree of freedom	Mean square	F Value	p-value
A	27.653	1	27.653	388.006	< 0.0001
C	28.017	1	28.017	393.110	< 0.0001
D	36.726	1	36.726	515.311	< 0.0001
AC	1.504	1	1.504	21.105	0.0018
AD	2.413	1	2.413	33.853	0.0004
CD	0.845	1	0.845	11.858	0.0088
ACD	0.446	1	0.446	6.263	0.0368
Error	0.570	8	0.071		
Total	98.174	15			



รูปที่ 4.21 คอนทัวร์ของความเข้มข้นของออกซิเจนที่วินาทีที่ 30 (ก) กรณีที่ 6 และ (ข) กรณีที่ 11



รูปที่ 4.22 (ก) ผลของตัวแปรหลัก (ข) ผลของอันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งและความเร็วแก๊สป้อนเข้า และ (ค) ผลของอันตรกิริยาร่วมระหว่างชนิดอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิ และความเร็วก๊าซป้อนเข้า ต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน



รูปที่ 4.23 พื้นผิวตอบสนองของค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน เมื่ออุณหภูมิและความเร็วแก๊สป้อนเข้าแตกต่างกัน (ก) อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร ส่วนในรูป (ข) อนุภาคของแข็งนิกเกิลที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00020 เมตร

บทที่ 5

สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการวิจัย

การสรุปผลการวิจัยแบ่งออกเป็น 4 หัวข้อคือ 1. การหาแบบจำลองการไหลที่เหมาะสมในงานวิจัย 2. การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่มีต่ออุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ 3. การหาแบบจำลองของปฏิกิริยาเคมีที่เหมาะสมในงานวิจัย 4. การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่มีต่อปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ

5.1.1 การหาแบบจำลองการไหลที่เหมาะสมในงานวิจัย

การหาแบบจำลองการไหลที่เหมาะสมในงานวิจัย จำเป็นต้องหาพื้นที่ในการคำนวณที่เหมาะสมและให้ผลการจำลองที่มีความถูกต้องแม่นยำ ซึ่งในงานวิจัยนี้ใช้พื้นที่ในการคำนวณที่มีเซลล์การคำนวณ 12500 เซลล์ เวลาที่ใช้ในการคำนวณที่เข้าสู่ภาวะเสมือนคงตัว (Quasi- Steady state) อยู่ในช่วงเวลา 20-50 วินาที และการหาแบบจำลองแรงต้านทานการเคลื่อนที่ (Drag model) จากแบบจำลองแรงต้านทานการเคลื่อนที่ที่มีการใช้งานอยู่ในปัจจุบัน พบว่า แบบจำลอง EMMS ให้ผลการจำลองใกล้เคียงกับผลจากการทดลองจริงของ Shuai และคณะ [11] และ Issangya และคณะ [12] มากที่สุด โดยมีการปรับเปลี่ยนค่าตัวแปรแบบจำลองอีก 2 ตัวแปรคือ ค่า specularity coefficient เท่ากับ 0.5 และค่า restitution coefficient เท่ากับ 0.97 ผลความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมีแสดงลักษณะการไหลแบบแกนในวงนอก (core-annulus) ที่พบอนุภาคของแข็งหนาแน่นบริเวณผนังและเบาบางบริเวณตรงกลาง ส่วนในแนวแกน พบความเข้มข้นของอนุภาคของแข็งหนาแน่นบริเวณด้านล่างของเครื่องปฏิกรณ์อากาศและลดลงตามความสูงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศ

5.1.2 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่มีต่ออุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์

อากาศ

จากผลการจำลองเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูปิง พบว่าจากกรณีศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการทั้งหมด 16 กรณี กรณีศึกษาที่ 3 อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาที ที่อุณหภูมิ 1073 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาที จะให้ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งสูงสุด ส่วนในกรณีที่ 11 อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาที ที่อุณหภูมิ 1073 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 3 เมตรต่อวินาที จะให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งในแนวรัศมีต่ำที่สุด และ

กรณีศึกษาที่ 15 อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 400 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาที ที่อุณหภูมิ 1273 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 3 เมตรต่อวินาที จะให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งในแนวแกนต่ำที่สุด ส่วนตัวแปรดำเนินการที่ส่งผลต่อค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งคือ ชนิดของอนุภาคของแข็ง อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง ความเร็วแก๊สป้อนเข้า และอันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งกับความเร็วแก๊สป้อนเข้า ตัวแปรที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวรัศมีของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งคือ ชนิดของอนุภาคของแข็ง ความเร็วแก๊สป้อนเข้า และอันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งกับความเร็วแก๊สป้อนเข้า และความเร็วแก๊สป้อนเข้าเป็นตัวแปรเดียวที่ส่งผลต่อค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานในแนวแกนของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็ง จากการวิเคราะห์ความแปรปรวนนี้ ทำให้ได้แบบจำลองการถดถอยเพื่อความสะดวกต่อการนำผลในงานวิจัยนี้ไปออกแบบการทดลองต่อไปในอนาคต และจากกราฟพื้นผิวตอบสนอง พบว่าอัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็งเท่ากับ 400 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาที และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาทีจะให้ค่าเฉลี่ยสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งสูงที่สุด และถ้าต้องการให้ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัดส่วนโดยปริมาตรของอนุภาคของแข็งทั้งในแนวรัศมีและแนวแกนมีค่าต่ำสุด จะต้องใช้อนุภาคของแข็งคอปเปอร์ที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00015 เมตร และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 3 เมตรต่อวินาที

5.1.3 การหาแบบจำลองของปฏิกิริยาเคมีที่เหมาะสมในงานวิจัย

ในงานวิจัยนี้เลือกใช้สมการแบบจำลองแกนกลางหดตัว (shrinking core model) สำหรับอธิบายปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นภายในกระบวนการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิงของเครื่องปฏิกรณ์อากาศที่เป็นปฏิกิริยาออกซิเดชัน โดยเลือกใช้สมการของความสัมพันธ์อาร์เรนีเยสระหว่างการแพร่และปฏิกิริยาเคมี (Arrhenius diffusion and reaction) ที่ให้ผลการจำลองใกล้เคียงกับผลจากการทดลองมากที่สุด ซึ่งเปรียบเทียบกับผลจากการทดลองทั้งอุณหภูมิในการเกิดปฏิกิริยาเคมีและอัตราส่วนโดยโมลของแก๊สแตกต่างกัน

5.1.4 การศึกษาผลของตัวแปรดำเนินการที่มีต่อปฏิกิริยาเคมีภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศ

จากผลการจำลองของเครื่องปฏิกรณ์อากาศในส่วนที่เกิดปฏิกิริยาเคมี พบว่า กรณีศึกษาที่ 6 อนุภาคของแข็งชนิดนิกเกิลที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.00020 เมตร อัตราการไหลเวียนของอนุภาคของแข็ง 300 กิโลกรัมต่อเมตรกำลังสองวินาที ที่อุณหภูมิ 1273 เคลวิน และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาที ส่งผลให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนสูงที่สุด และจากผลของตัวแปรดำเนินการที่มีผลต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงออกซิเจนสูงที่สุด พบว่า ชนิดของอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิ ความเร็วแก๊สป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งกับอุณหภูมิ อันตรกิริยาระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็งกับความเร็วแก๊สป้อนเข้า อันตรกิริยาระหว่างอุณหภูมิกับความเร็วแก๊สป้อนเข้า และอันตรกิริยาร่วมระหว่างชนิดของอนุภาคของแข็ง อุณหภูมิ และความเร็ว

แก๊สป้อนเข้า เป็นตัวแปรที่ส่งผลต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจน เมื่อนำแบบจำลองการถดถอยไปสร้างกราฟพื้นผิวตอบสนอง พบว่าเมื่อเพิ่มอุณหภูมิเป็น 1273 เคลวินและลดความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาที จะทำให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนเกิดได้ดีที่สุด ซึ่งจากผลในการจำลองนี้ สภาวะที่เหมาะสมต่อการนำไปทำการวิจัยต่อไปคือ ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาคของแข็งที่อยู่ในช่วงระหว่าง 0.00015 ถึง 0.00020 เมตร โดยจะทำในสภาวะอุณหภูมิสูงคือ 1273 เคลวิน อัตราการไหลเข้าของแก๊ส 300 เมตรต่อวินาทีกำลังสอง และความเร็วแก๊สป้อนเข้า 1 เมตรต่อวินาที ที่เกิดการผสมและเกิดปฏิกิริยาภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศได้สูง

5.2 ข้อเสนอแนะ

การจำลองในงานวิจัยนี้เป็นการจำลองแบบสองมิติของเครื่องปฏิกรณ์อากาศในการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิง ทั้งภาวะที่ไม่เกิดปฏิกิริยาเคมีและเกิดปฏิกิริยาเคมี โดยได้วิเคราะห์เฉพาะส่วนของตัวแปรดำเนินการที่อาจส่งผลต่ออุทกพลศาสตร์ จึงทำให้การอธิบายผลของตัวแปรกับค่าที่วิเคราะห์ยังเห็นความแตกต่างที่ไม่ชัดเจนนัก อาจจำเป็นต้องมีการวิเคราะห์ผลของตัวแปรในการออกแบบโครงสร้างภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศเพื่อให้เกิดการผสมที่ดีมากขึ้น หรืออาจต้องทำการจำลองแบบสามมิติเพื่อเปรียบเทียบความแตกต่างจากการจำลองแบบสองมิติ และแสดงให้เห็นถึงลักษณะการเปลี่ยนแปลงของอุทกพลศาสตร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์อากาศที่ชัดเจนมากยิ่งขึ้น ในส่วนการเลือกสมการอธิบายปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์อาจมีการสร้างสมการจากผลจากการจำลองนี้โดยตรงเพื่อความแม่นยำในการทำนายปฏิกิริยาในกระบวนการเคมีคอลลูบิงมากยิ่งขึ้น สุดท้ายอาจต้องมีการจำลองการเผาไหม้แบบเคมีคอลลูบิงที่ครบทั้งวงปฏิกิริยาเคมีคือมีทั้งในส่วนของเครื่องปฏิกรณ์อากาศและเครื่องปฏิกรณ์เชื้อเพลิง เพื่อให้การดำเนินการของกระบวนการหรือการเคลื่อนที่ของทั้งของไหลภายในระบบมีความสมบูรณ์และแม่นยำในการจำลองมากขึ้น

รายการอ้างอิง

1. Li, B., Y. Duan, D. Luebke, and B. Morreale, *Advances in CO₂ capture technology: A patent review*. Applied Energy, 2013. **102**: p. 1439-1447.
2. Mahalatkar, K., J. Kuhlman, E.D. Huckaby, and T. O'Brien, *CFD simulation of a chemical-looping fuel reactor utilizing solid fuel*. Chemical Engineering Science, 2011. **66**(16): p. 3617-3627.
3. Chandel, M.K., A. Hoteit, and A. Delebarre, *Experimental investigation of some metal oxides for chemical looping combustion in a fluidized bed reactor*. Fuel, 2009. **88**(5): p. 898-908.
4. 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.
5. 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.
6. Mattisson, T., E. Jerndal, C. Linderholm, and A. Lyngfelt, *Reactivity of a spray-dried NiO/NiAl₂O₄ oxygen carrier for chemical-looping combustion*. Chemical Engineering Science, 2011. **66**(20): p. 4636-4644.
7. Wang, S., et al., *Simulation of flow behavior of particles by cluster structure-dependent drag coefficient model for chemical looping combustion process: Air reactor modeling*. Fuel Processing Technology, 2012. **104**: p. 219-233.
8. Linderholm, C., A. Lyngfelt, and C. Dueso, *Chemical-looping combustion of solid fuels in a 10kW reactor system using natural minerals as oxygen carrier*. Energy Procedia, 2013. **37**: p. 598-607.
9. Adanez, J., A. Abad, F. Garcia-Labiano, P. Gayan, and L.F. de Diego, *Progress in chemical-looping combustion and reforming technologies*. Progress in Energy and Combustion Science, 2012. **38**(2): p. 215-282.
10. Johansson, M., T. Mattisson, A. Lyngfelt, and A. Abad, *Using continuous and pulse experiments to compare two promising nickel-based oxygen carriers for use in chemical-looping technologies*. Fuel, 2008. **87**(6): p. 988-1001.
11. Shuai, W., et al., *Modeling of cluster structure-dependent drag with Eulerian approach for circulating fluidized beds*. Powder Technology, 2011. **208**(1): p. 98-110.

12. Issangya, A.S., J.R. Grace, D. Bai, and J. Zhu, *Further measurements of flow dynamics in a high-density circulating fluidized bed riser*. Powder Technology, 2000. **111**(1–2): p. 104-113.
13. Epple, B., A. Lyngfelt, J. Adanez, and J. Yan, *The 2nd International Conference on Chemical Looping 2012*. Applied Energy, 2014. **113**: p. 1827-1829.
14. Fossdal, A., et al., *Study of inexpensive oxygen carriers for chemical looping combustion*. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2011. **5**(3): p. 483-488.
15. Sedor, K.E., M.M. Hossain, and H.I. de Lasa, *Reactivity and stability of Ni/Al₂O₃ oxygen carrier for chemical-looping combustion (CLC)*. Chemical Engineering Science, 2008. **63**(11): p. 2994-3007.
16. Stainton, H., A. Ginet, K. Surla, and A. Hoteit, *Experimental investigation of CLC coal combustion with nickel based particles in a fluidized bed*. Fuel, 2012. **101**: p. 205-214.
17. Pantankar, S.V., *Numerical heat transfer and fluid flow*. computational methods in mechanics and thermal sciences. 1980: Press Roman by hemisphere publishing corporation.
18. Cruz, E., F.R. Steward, and T. Pugsley, *New closure models for CFD modeling of high-density circulating fluidized beds*. Powder Technology, 2006. **169**(3): p. 115-122.
19. Mahalatkar, K., J. Kuhlman, E.D. Huckaby, and T. O'Brien, *Computational fluid dynamic simulations of chemical looping fuel reactors utilizing gaseous fuels*. Chemical Engineering Science, 2011. **66**(3): p. 469-479.
20. 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.
21. Loha, C., H. Chattopadhyay, and P.K. Chatterjee, *Effect of coefficient of restitution in Euler–Euler CFD simulation of fluidized-bed hydrodynamics*. Particuology, 2013.
22. Zhou, X., J. Gao, C. Xu, and X. Lan, *Effect of wall boundary condition on CFD simulation of CFB risers*. Particuology, 2013. **11**(5): p. 556-565.
23. Li, P., et al., *Drag models for simulating gas–solid flow in the turbulent fluidization of FCC particles*. Particuology, 2009. **7**(4): p. 269-277.
24. Yang, N., W. Wang, W. Ge, L. Wang, and J. Li, *Simulation of Heterogeneous Structure in a Circulating Fluidized-Bed Riser by Combining the Two-Fluid*

- Model with the EMMS Approach*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2004. **43**(18): p. 5548-5561.
25. Chalermsoonsuwan, B., P. Piumsomboon, and D. Gidaspow, *Kinetic theory based computation of PSRI riser: Part I—Estimate of mass transfer coefficient*. Chemical Engineering Science, 2009. **64**(6): p. 1195-1211.
 26. Chalermsoonsuwan, B., P. Piumsomboon, and D. Gidaspow, *A computational fluid dynamics design of a carbon dioxide sorption circulating fluidized bed*. AIChE Journal, 2010. **56**(11): p. 2805-2824.
 27. Kolbitsch, P., T. Pröll, and H. Hofbauer, *Modeling of a 120kW chemical looping combustion reactor system using a Ni-based oxygen carrier*. Chemical Engineering Science, 2009. **64**(1): p. 99-108.
 28. Kruggel-Emden, H., F. Stepanek, and A. Munjiza, *A comparative study of reaction models applied for chemical looping combustion*. Chemical Engineering Research and Design, 2011. **89**(12): p. 2714-2727.
 29. Almuttahir, A. and F. Taghipour, *Computational fluid dynamics of high density circulating fluidized bed riser: Study of modeling parameters*. Powder Technology, 2008. **185**(1): p. 11-23.



ภาคผนวก

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

ภาคผนวก ก

การคำนวณความเร็วน้อยสุดที่ทำให้เกิดช่วงการไหลแบบปั่นป่วน (Minimum turbulent fluidization velocity : U_c)

$$U_c = 0.463Ar^{0.145}\sqrt{gD_t} \quad (ก1)$$

$$Ar = \frac{\rho_g(\rho_s - \rho_g)gd_p^3}{\mu_g^2} \quad (ก2)$$

Ar คือ ตัวเลขไร์หน่วยอาร์คิมิดีส (-)

ρ_s คือ ความหนาแน่นของอนุภาคของแข็ง (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร)

ρ_g คือ ความหนาแน่นของแก๊ส (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร)

d_p คือ เส้นผ่านศูนย์กลางกลางของอนุภาคของแข็ง (เมตร)

g คือ ค่าแรงโน้มถ่วงของโลก (เมตรต่อวินาทีกำลังสอง)

μ_g คือ ค่าความหนืดของแก๊ส (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที)

D_t คือ เส้นผ่านศูนย์กลางกลางของเครื่องปฏิกรณ์ (เมตร)

ตัวอย่างการคำนวณหาค่า U_c

$$Ar = \frac{(0.3492)(3446 - 0.3492)(9.81)(0.2 \times 10^{-3})^3}{(4.36 \times 10^{-5})^2} = 49.68 \quad (ก3)$$

$$U_c = 0.463(49.68)^{0.145}(\sqrt{9.81 \times 0.0762}) = 0.7052 \text{ m/s} \quad (ก4)$$

การคำนวณความเร็วน้อยสุดที่ทำให้เกิดช่วงการไหลแบบฟลูอิดเซชันความเร็วสูง (Transport velocity : U_{tr})

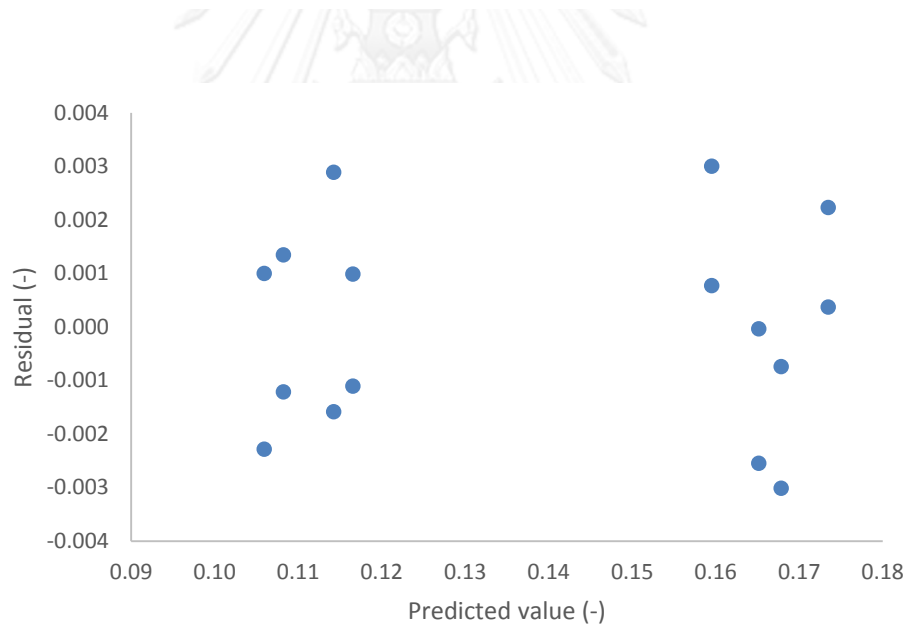
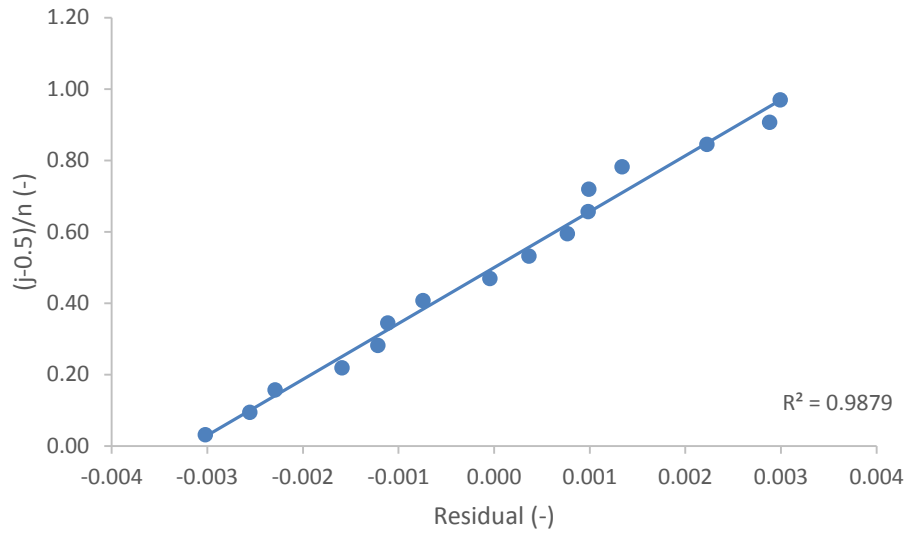
$$U_{tr} = \frac{0.169Ar^{0.545}\left(\frac{D_t}{d_p}\right)^{0.3}\mu_g}{d_p\rho_g} \quad (ก5)$$

ตัวอย่างการคำนวณหาค่า U_{tr}

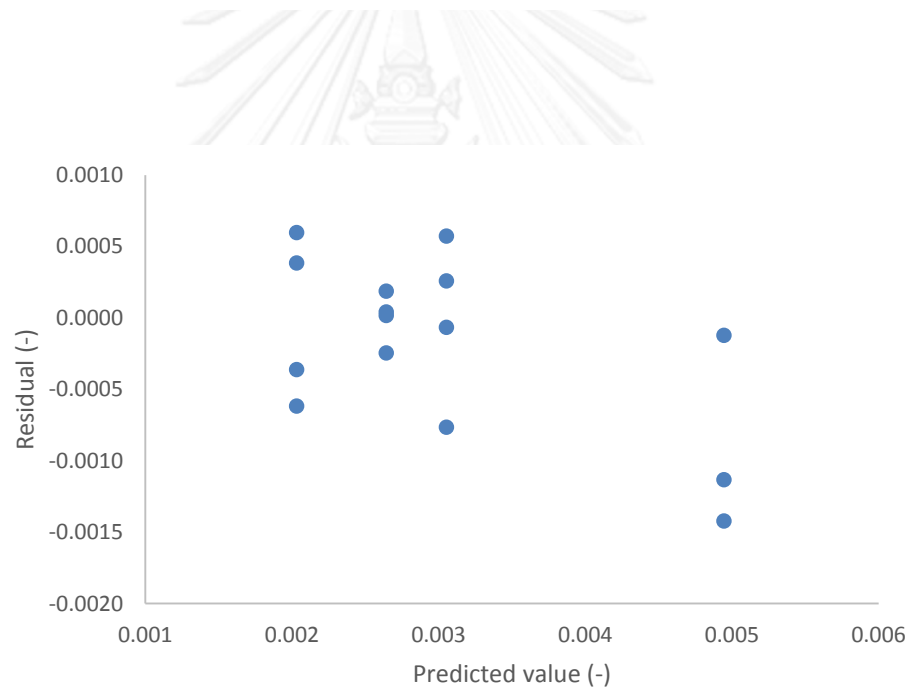
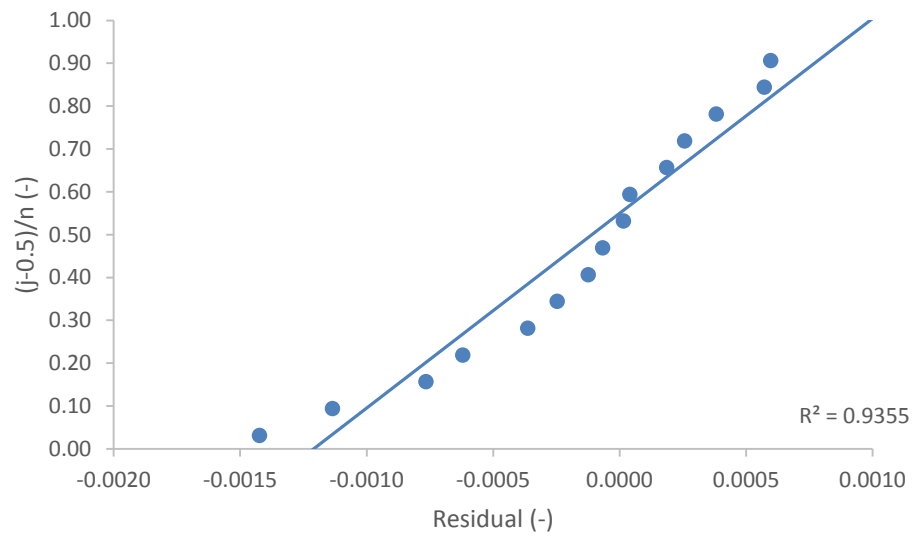
$$U_{tr} = \frac{0.169(49.68)^{0.545} \left(\frac{0.0762}{0.2 \times 10^{-3}} \right)^{0.3} (4.36 \times 10^{-5})}{(0.2 \times 10^{-3})(0.3492)} = 5.2706 \text{ m/s} \quad (\text{ก6})$$



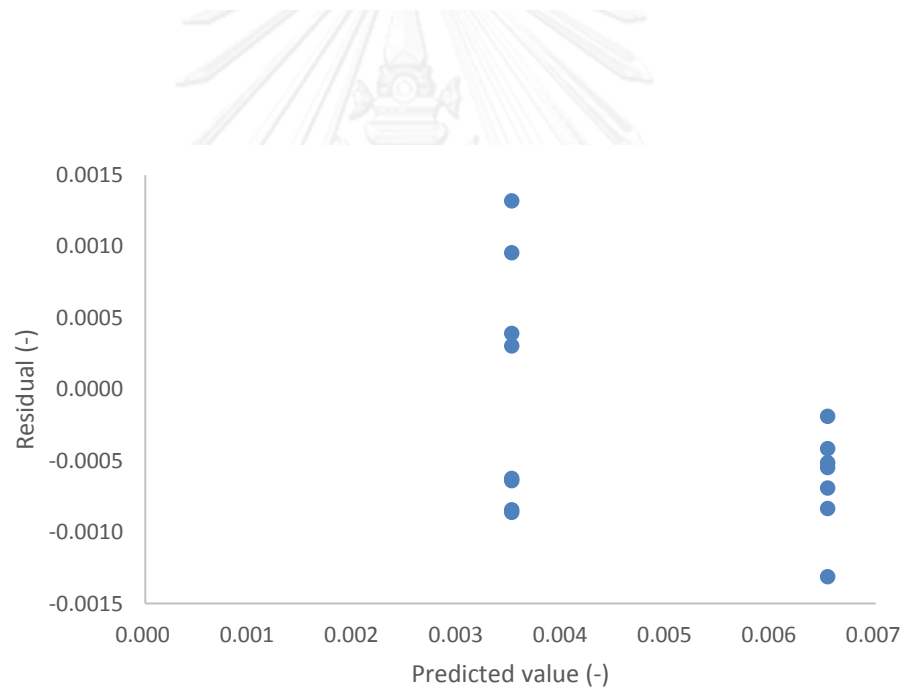
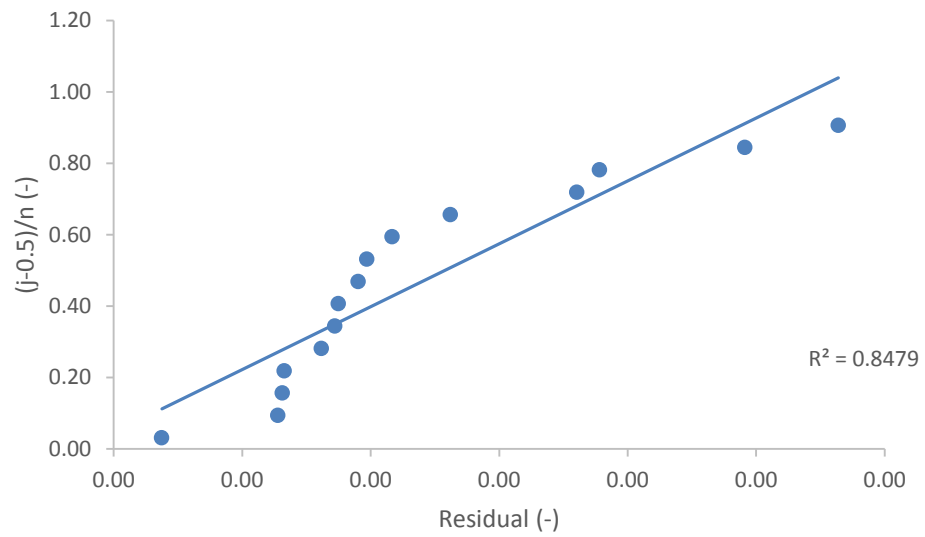
ภาคผนวก ข



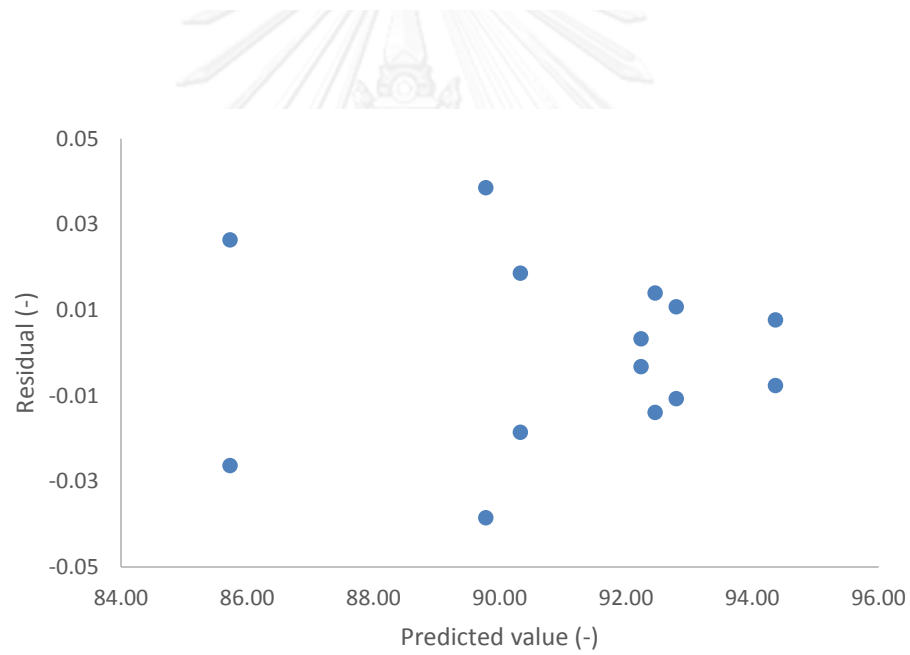
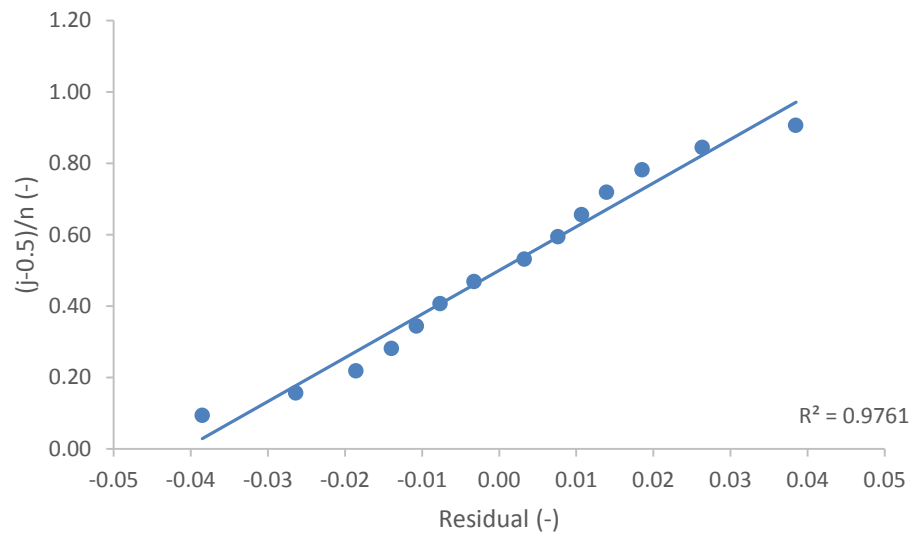
รูปที่ ข1 (ก) กราฟความน่าจะเป็นแบบปกติของส่วนตกค้าง และ (ข) กราฟความสัมพันธ์ระหว่างส่วนตกค้างกับค่าที่ทำนายได้ของสมการที่ (4.1)



รูปที่ ข2 (ก) กราฟความน่าจะเป็นแบบปกติของส่วนตกค้าง และ (ข) กราฟความสัมพันธ์ระหว่างส่วนตกค้างกับค่าที่ทำนายได้ของสมการที่ (4.2)



รูปที่ ข3 (ก) กราฟความน่าจะเป็นแบบปกติของส่วนตกค้าง และ (ข) กราฟความสัมพันธ์ระหว่างส่วนตกค้างกับค่าที่ทำนายได้ของสมการที่ (4.3)



CHULALONGKORN UNIVERSITY

รูปที่ ข4 (ก) กราฟความน่าจะเป็นแบบปกติของส่วนตกค้าง และ (ข) กราฟความสัมพันธ์ระหว่างส่วนตกค้างกับค่าที่ทำนายได้ของสมการที่ (4.4)

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นางสาวพิริยา ไหลอาภาธร เกิดเมื่อวันอังคารที่ 10 เมษายน พ.ศ. 2533 สำเร็จการศึกษาปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาเคมีอุตสาหกรรม ภาควิชาเคมีอุตสาหกรรม คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ ในปีการศึกษา 2554 และเข้าศึกษาต่อในหลักสูตรวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาเคมีเทคนิค ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เมื่อ พ.ศ. 2555 ได้ตีพิมพ์และเข้าร่วมการนำเสนอผลงานทางวิชาการ ดังนี้

1. Laiarpatorn, P., P. Piumsomboon, and B. Chalermssinsuwan, Effect of modeling parameters on system hydrodynamics of air reactor in chemical looping combustion using CFD simulation. The 3rd TIChE International Conference, Khon Kaen, Thailand (2013).

2. Laiarpatorn, P., P. Piumsomboon, and B. Chalermssinsuwan, Effect of modeling parameters on system hydrodynamics of air reactor in chemical looping combustion using CFD simulation. International Transaction of Engineering, Management, & Applied Sciences & Technologies, 2014 5(1): p. 39-55.

3. Laiarpatorn, P., P. Piumsomboon, and B. Chalermssinsuwan, Effect of operating parameters in air reactor of chemical looping combustion using CFD simulation and experimental design analysis. 9th Mathematics and Physical Sciences Graduate Congress, Kuala Lumpur, Malaysia (2014).

4. Laiarpatorn, P., S. Sunphorka, P. Piumsomboon, and B. Chalermssinsuwan, Correlation between biomass components and kinetic parameters of biomass pyrolysis based on simplex-lattice mixture design. The 5th Research Symposium on Petrochemicals and Material Technology, Bangkok, Thailand (2014).