



รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผา
ไหม้สำหรับการประยุกต์ใช้สเปรย์ในเครื่องยนต์โดยใช้
แบบจำลองสเปรย์ของโมเมนต์ของจำนวนละอองสเปรย์ขนาด
ต่างกัน

(Development of Combustion Models for Spray
Applications in Engines Based on the Drop Number Size
Moment Modelling Sprays)

โดย ดร. อิศเรศ ฐชกัลยา และคณะ

มิถุนายน 2556

สัญญาเลขที่ MRG5480198

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผา
ไหม้สำหรับการประยุกต์ใช้สเปรย์ในเครื่องยนต์โดยใช้
แบบจำลองสเปรย์ของโมเมนต์ของจำนวนละอองสเปรย์ขนาด
ต่างกัน

(Development of Combustion Models for Spray
Applications in Engines Based on the Drop Number Size
Moment Modelling Sprays)

ผู้วิจัย

สังกัด

- | | |
|------------------------------|-----------------------|
| 1. ดร. อิศเรศ ฐชกัลยา | มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ |
| 2. ศ.ดร. ผดุงศักดิ์ รัตนเดโช | มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ |

สนับสนุนโดยสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย

(ความเห็นในรายงานนี้เป็นของผู้วิจัย
สกว.ไม่จำเป็นต้องเห็นด้วยเสมอไป)

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ : MRG5480198

ชื่อโครงการ : การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้สำหรับการประยุกต์ใช้
สเปรย์ในเครื่องยนต์โดยใช้แบบจำลองสเปรย์ของโมเมนต์ของจำนวนละออง
สเปรย์ขนาดต่างกัน

ชื่อนักวิจัย และสถาบัน :

- 1) ดร. อิศเรศ รุชกัลยา ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์
มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์
- 2) ศ.ดร. ผดุงศักดิ์ รัตนเดโช ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์
มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์

อีเมล: disares@engr.tu.ac.th

ระยะเวลาโครงการ : 2 ปี

บทคัดย่อ:

งานวิจัยนี้ได้พัฒนาและประยุกต์แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ของสเปรย์
ซึ่งแบบจำลองสเปรย์อยู่บนพื้นฐานของโมเมนต์การกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาด
ต่าง ๆ ในแบบจำลองสเปรย์ การกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่าง ๆ ถูกแสดงใน
รูปของโมเมนต์ 4 แบบ ซึ่งแต่ละโมเมนต์แสดงถึงปริมาตร พื้นที่ ปริมาตร และจำนวนทั้งหมดของ
ละอองฝอยตามลำดับ สำหรับชุดสมการควบคุมของก๊าซและของเหลวนี้ ได้หาคำตอบด้วยวิธี
finite volume ในกรอบของ Eulerian โดยชุดสมการและ source term ของแบบจำลองย่อยซึ่ง
ประกอบไปด้วยการแตกตัว การชนกัน การระเหยของละอองฝอย และการปฏิสัมพันธ์ระหว่าง
ก๊าซและของเหลวได้ถูกพัฒนาบนพื้นฐานของค่าเฉลี่ยเชิงโมเมนต์ ซึ่งเป็นหลักสำคัญของ
แบบจำลองสเปรย์นี้ สำหรับการวิเคราะห์การเผาไหม้ แบบจำลอง unsteady flamelet/
reaction progress variable จะถูกใช้ในการทำนายการจุดระเบิดเองและปรากฏการณ์ลอยตัว
ของเปลวไฟของสเปรย์ดีเซล ซึ่งกลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบโครงร่างที่เลือกใช้ในการสร้าง
flamelet library นี้ มีจำนวนส่วนประกอบเคมี 43 ชนิดและสมการเคมีทั้งหมด 185 สมการ
ผลลัพธ์ของ unsteady flamelet/ reaction progress variable ร่วมกับกระบวนการ probability
density function จะถูกใช้คำนวณในระเบียบวิธี RANS เพื่อแก้ปัญหาการปฏิสัมพันธ์ระหว่าง
ความปั่นป่วนและเคมี โดยตัวแปรเคมีเชิงความร้อนดังกล่าวทั้งหมดจะแสดงอยู่ในรูปของ ค่า
สัดส่วนของผสม ความแปรปรวนของค่าสัดส่วนของผสม reaction progress variable และ

scalar dissipation rate กระจายตัวเชิง PDF ของสัดส่วนของผสมสมมุติเป็นแบบ beta และการกระจายตัวเชิง PDF แบบ delta สำหรับ reaction progress variable และ scalar dissipation rate เพื่อประเมินศักยภาพของแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นจึงได้ทำการเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [45] ปรากฏว่า สามารถทำนายการจุดระเบิดเอง การพัฒนาตัวของเปลว และระยะเปลวลอยตัวได้ค่อนข้างดี โดยการกระจายตัวของอุณหภูมิที่ทำนายได้จะใกล้เคียงกับภาพถ่ายเปลวจากการทดลอง อัตราการขยายตัวของเปลวที่ทำนายได้จะสอดคล้องกับผลการทดลอง แต่จะมีขนาดใหญ่กว่าผลการทดลองอยู่เล็กน้อย ดังนั้นแบบจำลองนี้ จึงสามารถทำนายปรากฏการณ์การจุดระเบิดเอง และการลอยตัวของเปลวสเปรย์ดีเซลในเครื่องยนต์ดีเซลได้อย่างถูกต้อง แม่นยำ และมีประสิทธิภาพ

คำหลัก: การจุดระเบิดเอง, การเผาไหม้, เฟลมเลท, แบบจำลอง, สเปรย์

Abstract

Project Code : MRG5480198

Project Title : Development of Combustion Models for Spray Applications in Engines

Based on the Drop Number Size Moment Modelling Sprays

Investigator :

- 1) Dr. Isares Dhuchakallaya, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Thammasat University
- 2) Professor Dr. Phadungsak Rattanadecho, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Thammasat University

E-mail Address : disares@engr.tu.ac.th

Project Period : 2 years

Abstract:

This research presents the development and implementation of a spray combustion model based on the spray droplet number size distribution moments approach to spray modelling. In this spray model, the droplet size distribution of spray is characterised by the first four moments related to number, radius, surface area and volume of droplets, respectively. The governing equations for both the gas and liquid phases are solved by the finite volume method based on an Eulerian framework. These constructed equations and source terms of sub-models including droplet breakup, collision, evaporation, and the interactions between the liquid phase and the gas phase are derived based on the moment-average quantities which are the key concept for this spray model. For combustion analysis, unsteady flamelet/ reaction progress variable approach is employed to implement the diesel spray flames for capturing the auto-ignition and flame lift-off phenomena. The skeleton chemical kinetic mechanisms consisting of 43 chemical components and 185 reactions are solved in order to create the Flamelet library. The flamelet-progress-variable solutions embedded in RANS with the probability density function approach signifies the turbulence-chemistry interaction. All thermochemical scalars are represented as a function of mean mixture fraction, mixture fraction variance, reaction progress variable and scalar dissipation rate. Mixture fraction is assumed to follow a beta-PDF distribution, as reaction progress variable and

scalar dissipation rate distributions are assumed to be a delta-PDF. In order to assess the capability of this developed model, the predicted results are required to compare with the experimental data [2]. The developed model gives a reasonably good overall predicting performance in terms of auto-ignition, flame development and flame lift-off length. The flame temperature distributions are comparable with the formations of luminous flames. The predicted flame growth rate is consistent with the experimental results, but there is small over-prediction. Therefore, the present approach can accurately and efficiently capture the auto-ignition and flame lift-off phenomena of diesel spray flame in diesel engines.

Keywords: Auto-ignition, Combustion, Flamelet, Modelling, Spray

บทสรุปสำหรับผู้บริหาร (Executive Summary)

1. ความสำคัญและที่มาของปัญหา

การเผาไหม้ของสเปรย์นั้นมีความสำคัญมากในอุปกรณ์ต้นกำเนิดกำลัง เช่น หม้อไอน้ำ อุตสาหกรรม ห้องเผาไหม้ของอากาศยาน และเครื่องยนต์สันดาปภายในต่าง ๆ ดังนั้นการเข้าใจรายละเอียดของกระบวนการเผาไหม้แบบสเปรย์ซึ่งประกอบด้วย การแตกตัวของสเปรย์ ลักษณะของสเปรย์ พลศาสตร์ของสเปรย์ การถ่ายเทมวลและความร้อน การจุดระเบิดเอง (autoignition) และการเคลื่อนที่ของเปลวไฟ นั้นมีจำเป็นอย่างยิ่งในการออกแบบและปรับปรุงประสิทธิภาพของอุปกรณ์ดังกล่าว เนื่องจากส่วนผสมเชื้อเพลิงที่ตำแหน่งต่าง ๆ ในห้องเผาไหม้มีความแปรปรวนค่อนข้างสูง ดังนั้นการเผาไหม้ของสเปรย์จึงมีความซับซ้อนมากกว่าการเผาไหม้แบบเนื้อเดียว (homogeneous combustion) นอกเหนือจากคุณสมบัติทางเคมีของเชื้อเพลิงที่มีผลต่อกระบวนการเผาไหม้แล้ว คุณสมบัติการกระจายตัวของสเปรย์ก็มีผลต่อการเผาไหม้ไม่น้อยเช่นกัน [1]

ในปัจจุบันนี้ เทคโนโลยีการฉีดน้ำมันโดยตรง (direct injection) ได้เข้ามามีบทบาทสำคัญทั้งในเครื่องยนต์ที่จุดระเบิดด้วยแรงอัดและประกายไฟ ซึ่งเทคโนโลยีนี้จะให้การประหยัดเชื้อเพลิงมากกว่าเมื่อเปรียบเทียบกับเครื่องยนต์แบบ Indirect injection pre- and swirl-chamber แต่อย่างไรก็ตามการสั่นสะเทือนและเสียงที่ดังก็เป็นปัญหาที่ต้องพิจารณาตามมา หลักการเบื้องต้นของการเผาไหม้แบบสเปรย์เริ่มจาก เชื้อเพลิงเหลวถูกฉีดด้วยความดันสูงเข้าสู่ห้องเผาไหม้ซึ่งมีอุณหภูมิและความดันสูง ความดันที่สูงของการฉีดจะทำให้ผิวของลำเจ็ตเกิดการแยกเป็นเส้น ๆ (ligaments) และแตกตัวเป็นละอองเล็ก ๆ ถัดมา ละอองที่แตกตัวมานั้นจะถูกทำให้ระเหยกกลายเป็นไอเชื้อเพลิงเนื่องจากการถ่ายเทความร้อนระหว่างละอองของเหลวกับอากาศร้อน ซึ่งไอเชื้อเพลิงนี้จะไปรวมตัวกับอากาศเพื่อใช้ในการเผาไหม้ต่อไป ส่วนผสมเชื้อเพลิงหนาโดยส่วนใหญ่จะปรากฏในบริเวณแกนกลางของสเปรย์และความปริมาณอากาศที่เข้ามาผสมจะมากขึ้นเมื่อห่างจากแกนมากขึ้น ที่สภาวะที่เหมาะสมสำหรับการจุดระเบิดประกอบไปด้วยอุณหภูมิที่สูงเพียงพอและความเข้มข้นของส่วนผสมเชื้อเพลิงต้องอยู่ภายใต้ขีดจำกัดการลุกไหม้ (flammability limits) ณ ส่วนผสมเชื้อเพลิงดังกล่าวจะเริ่มมีการจุดระเบิดและลุกไหม้อย่างรวดเร็ว ซึ่งนำไปสู่การเพิ่มขึ้นอย่างฉับพลันของการถ่ายเทความร้อนอันเนื่องมาจากปฏิกิริยาทางเคมี จากการสังเกตจากการทดลองจะพบว่า การจุดระเบิดจะเกิดขึ้นในบริเวณต้น ๆ ของกลุ่มไอเชื้อเพลิงที่มีการระเหย ซึ่งปรากฏการณ์นี้เป็นจุดเริ่มของการเผาไหม้

เมื่อพิจารณาเชื้อเพลิงที่ถูกฉีดเข้าไปในห้องเผาไหม้ อัตราการระเหยและผสมกับอากาศ (mixing rate) จะใกล้เคียงกับอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี (chemical reaction rate) ในการเผาไหม้ในบริเวณที่มีส่วนผสมบาง ละอองน้ำมันอาจจะถูกระเหยกกลายเป็นไอทั้งหมดในช่วงของการให้

ความร้อนส่งผลให้มีอัตรา การผสมกันที่สูง เมื่อเกิดการเผาไหม้อัตราของปฏิกิริยาเคมีจะเข้ามาควบคุมกระบวนการในบริเวณนั้น เปลวไฟในที่นี้จึงเรียกว่า เปลว premixed ในทำนองกลับกัน บริเวณที่มีส่วนผสมหนา ละอองน้ำมันโดยส่วน ใหญ่จะไม่ถูกระเหยทั้งหมดและความเข้มข้นของ ออกซิเจนค่อนข้างจะต่ำ ดังนั้นอัตราการผสมกันระหว่างไอ เชื้อเพลิงและออกซิเจนจึงค่อนข้างต่ำ ไอเชื้อเพลิงที่ผสมกับอากาศจึงถูกใช้ในการเผาไหม้อย่างรวดเร็วและละอองเชื้อเพลิงที่ยังไม่ได้ ระเหยจะถูกเผาไหม้อย่างช้า ๆ และถูกเผาไหม้เฉพาะส่วนที่มีการผสมกันอย่างเหมาะสม การเผาไหม้ในบริเวณนี้จึงถูกควบคุมด้วยอัตราการแพร่ของไอเชื้อเพลิงและออกซิเจน ดังนั้นเปลวไฟในที่นี้ จึงเรียกว่า เปลว diffusion หรือ non-premixed ซึ่งในการเผาไหม้ของสเปรย์นั้นเป็นการผสมผสาน กันระหว่างเปลวแบบ premixed และ non-premixed ดังนั้นทฤษฎีและแบบจำลองเกี่ยวกับเปลว แบบ premixed และ diffusion จึงถูกใช้ในการวิเคราะห์การเผาไหม้แบบสเปรย์ [2].

โดยปกติแล้ว แบบจำลองสำหรับการเผาไหม้ในเครื่องยนต์สันดาปภายในนั้นมีความ ซับซ้อนมากเนื่องมาจากปัจจัยหลายประการ เช่น ความดันภายในห้องเผาไหม้ที่ค่อนข้างสูงและ เปลี่ยนแปลงตามเวลาเนื่องจากการเคลื่อนที่ของลูกสูบ การปฏิสัมพันธ์ของของไหลสองสถานะซึ่ง ต้องการแบบจำลองที่มีความซับซ้อนมาใช้ในการวิเคราะห์ ความซับซ้อนของการไหลแบบปั่นป่วน ในก๊าซและความซับซ้อนของกลไกจลนศาสตร์ทางเคมี (chemical kinetic mechanisms) ของ เชื้อเพลิง และการจุดระเบิดเองซึ่งเป็นปัจจัยที่สำคัญในการเริ่มของกระบวนการเผาไหม้ ดังปัจจัยที่ ได้กล่าวมา จะเห็นได้ว่า แบบจำลองการเผาไหม้ของสเปรย์นั้นมีความยุ่งยากและซับซ้อนในการ คำนวณ จึงต้องการแหล่งทรัพยากรทางการคำนวณที่สูงเพื่อใช้ในการวิเคราะห์

ในปัจจุบันนี้ การพัฒนาและประยุกต์ใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการเผาไหม้ แบบสเปรย์ในเครื่องยนต์ได้เป็นที่ดึงดูดนักวิจัยเป็นอย่างมาก เนื่องมาจากวิธีนี้จะมีต้นทุนที่ ค่อนข้างต่ำ และให้ผลลัพธ์ที่น่าเชื่อถือถือในการอธิบายหรือทำนายปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในการเผา ไหม้ในห้องเผาไหม้แบบสเปรย์ มันสามารถทำนายผลได้ทุกตัวแปรที่สนใจและทุกตำแหน่งที่ วิเคราะห์ และทุกเวลาที่พิจารณา โดยที่การทดลองไม่สามารถให้ข้อมูลที่สมบูรณ์เหล่านี้ได้ เนื่องมาจาก ประการแรก มันยากมากและสิ้นเปลืองสูงที่จะใช้เครื่องมือและเทคนิคที่ซับซ้อนมาวัด ในเครื่องยนต์ที่มีการแกว่งกวัดค่อนข้างเร็ว โดยที่ไม่มีผลกระทบต่อสภาวะการพัฒนาตัวของสเปรย์ และเปลวไฟ ตัวอย่างเช่น ในบริเวณใกล้หัวฉีดซึ่งเป็นบริเวณที่มีความเข้มข้นของละอองเชื้อเพลิงที่ สูงเนื่องจากการแตกตัวของสเปรย์ส่วนใหญ่จะเกิดในบริเวณนี้ และบริเวณหัวของสเปรย์ซึ่งมีความ เข้มข้นของเขม่าค่อนข้างสูง นอกจากนี้ในการทดลองโดยทั่วไปจะให้ข้อมูลได้แค่ 2 มิติ และส่วน น้อยมากที่สามารถให้ข้อมูลที่เป็น 3 มิติ ข้อได้เปรียบอีกประการของแบบจำลองก็คือตัวแปรที่สร้าง ขึ้นมาเป็นพิเศษ (artificial parameters) ที่ใช้ในการวิเคราะห์อิทธิพลของตัวแปรต่าง ๆ ที่มีต่อ กระบวนการเผาไหม้ของสเปรย์ เพื่อใช้เป็นข้อมูลเชิงลึกที่ใช้วิเคราะห์ต่อการเผาไหม้ โดยที่ตัว แปรเหล่านี้ไม่สามารถวัดได้โดยตรงจากเครื่องมือวัด

ถึงแม้ว่าความละเอียดถูกต้องของแบบจำลองที่สร้างขึ้นจะเพิ่มขึ้นอย่างมาก การทดลองศึกษาที่มีความละเอียดและแม่นยำสูงก็ยังคงมีความสำคัญเช่นกัน เพื่อให้ได้ความละเอียดถูกต้องที่สูงยิ่งขึ้น ผลการทดลองที่มีคุณภาพสูงจำนวนมากก็ยังคงต้องการในการเปรียบเทียบและสอบเทียบกับแบบจำลอง จำนวนข้อมูลการทดลองยิ่งมาก ยิ่งมีประโยชน์ในการศึกษา และวิเคราะห์แบบจำลองย่อยที่มีความซับซ้อนที่เกิดขึ้นในการเผาไหม้แบบสเปรย์ของเครื่องยนต์ให้มีประสิทธิภาพในการทำนายมากยิ่งขึ้น นอกจากนี้ เทคโนโลยีทางคอมพิวเตอร์ที่พัฒนาไปมาก ก็ดูเหมือนจะเป็นไปได้ในเชิงปฏิบัติสำหรับการสร้างแบบจำลองเครื่องยนต์เหล่านี้ โดยสิ่งต่าง ๆ เหล่านี้ก็ยังมีความสำคัญมากขึ้นในอนาคต เนื่องจากแนวโน้มของการพัฒนาเครื่องยนต์สันดาปภายใน จะมุ่งเน้นการนำมาใช้ประโยชน์ของเทคโนโลยีการฉีดแบบโดยตรง ซึ่งประเทศไทยก็เป็นประเทศผู้ผลิตเครื่องยนต์รายใหญ่ของโลก ดังนั้นแบบจำลองที่พัฒนามานี้ จะเป็นประโยชน์อย่างมากในวงการผลิตรถยนต์ในบ้านเรา

2. วัตถุประสงค์ของโครงการ

ในกระบวนการเผาไหม้แบบสเปรย์ อัตราการเผาไหม้ของสเปรย์จะขึ้นอยู่กับปัจจัยหลัก ๆ คือ กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีและความปั่นป่วนที่ซับซ้อนของก๊าซเชื้อเพลิง โดยที่กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีที่มีความละเอียดแม่นยำสูงซึ่งจะใช้ปฏิกิริยาเคมีและ species ที่เกี่ยวข้องทั้งหมด นั้นค่อนข้างมีขีดจำกัดสูง สำหรับการนำมาประยุกต์ใช้กับเครื่องยนต์เชื้อเพลิงที่มีค่าไฮโดรคาร์บอนสูง อย่างเช่น ดีเซล นอกจากนี้ การปฏิสัมพันธ์ระหว่างความปั่นป่วนและเคมีของก๊าซเชื้อเพลิงนั้นยากที่จะสร้างและสามารถทำนายได้ใกล้เคียง โดยวิธีที่มีศักยภาพมากที่สุดคือการใช้แบบจำลอง probability density function (PDF) transport equation เพราะ source term ของปฏิกิริยาเคมีของแต่ละ species สามารถอนุพันธ์ได้โดยตรงจากทฤษฎีทางจลนศาสตร์ทางเคมีโดยปราศจากการจำลองใด ๆ ทั้งสิ้น และสามารถทำนาย source term ของปฏิกิริยาได้ค่อนข้างสมบูรณ์เช่นกัน แต่ในทางปฏิบัติ มันเป็นการยากมากที่จะสมมุติรูปร่างของ PDF ร่วม ซึ่งขึ้นอยู่กับตัวแปรมากกว่าสองตัวแปร และความซับซ้อนของปัญหายิ่งทวีมากขึ้นเมื่อจำนวนตัวแปรของ species ที่เกี่ยวข้องเพิ่มขึ้น ดังนั้นวิธีการนี้จึงสามารถประสบความสำเร็จได้กับเชื้อเพลิงที่มีค่าไฮโดรคาร์บอนต่ำๆ เท่านั้นโดยใช้ Monte-Carlo ในการแก้ปัญหา [3, 4] ซึ่งหลักการดังที่ได้กล่าวมานั้น ใช้เวลาในการคำนวณสิ้นเปลืองสูงมากและเป็นไปได้ยากสำหรับการนำมาประยุกต์ใช้กับการจำลองการเผาไหม้ของสเปรย์ในเครื่องยนต์สันดาปใน ในปัจจุบัน เช่น ดีเซล โดยงานวิจัยในกลุ่มนี้ จะต้องใช้ทุนวิจัยที่สูงมากและการพัฒนาจะถูกจำกัดในวงแคบ ๆ เฉพาะห้องวิจัยที่มีชื่อเสียง เช่น California Institute of Technology, Stanford University, Imperial College, Chalmers University of Technology เป็นต้น

ดังนั้นในงานวิจัยนี้ จึงมุ่งเน้นที่การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ของสเปรย์สำหรับประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์ดีเซล โดยแบบจำลองจะเริ่มพัฒนาจากแบบจำลองสเปรย์ของ Beck [5] ซึ่งสามารถทำนายการกระจายตัวของสเปรย์ได้ค่อนข้างถูกต้องแม่นยำ ดังปรากฏในงานตีพิมพ์จำนวนมาก [6-11] ส่วนแบบจำลองของการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้จะถูกพัฒนาขึ้นมา โดยแบบจำลองนี้จะต้องสามารถทำนายปรากฏการณ์การเผาไหม้ที่เกิดขึ้นในเครื่องยนต์ได้อย่างแม่นยำใกล้เคียงกับผลงานวิจัยที่เกิดขึ้นจากห้องวิจัยที่มีชื่อเสียง แต่จะต้องใช้เวลาในการคำนวณและทุนวิจัยที่น้อยกว่าอย่างชัดเจน เพื่อที่แบบจำลองนี้จะสามารถถูกใช้เป็นเครื่องมือในการออกแบบและปรับปรุงประสิทธิภาพการเผาไหม้ภายในเครื่องยนต์ดีเซลได้จริงในอุตสาหกรรมยานยนต์หรืออุปกรณ์ทางอุตสาหกรรมต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องต่อไป โดยแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นมานี้จะถูกใช้ในการทำนายหลัก ๆ ได้แก่

- 2.1 การจุดระเบิดเอง (Autoignition) ซึ่งจะคำนึงถึงระยะเวลาหน่วงการจุดระเบิด ตำแหน่งที่เกิดการจุดระเบิดเอง โดยผลการทำนายที่ได้จะถูกนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองและแบบจำลองอื่น ๆ
- 2.2 การเคลื่อนที่ของเปลว (Flame propagation) ซึ่งจะคำนึงถึงระยะเวลาที่ใช้ในการเผาไหม้ อัตราการเผาไหม้ รวมถึงลักษณะของเปลวที่เคลื่อนที่ไป โดยผลการทำนายที่ได้จะถูกนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองและแบบจำลองอื่น ๆ

3. ระเบียบวิธีวิจัย

การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์อาศัยข้อมูลจากการค้นคว้างานวิจัยที่เกี่ยวข้องและพื้นฐานทางทฤษฎี โดยใช้ระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขขั้นสูงอาศัยเทคนิค FVM (Finite Volume Method) และ FDTD (Finite Difference Time Domain) เพื่อหาคำตอบของปัญหาที่สามารถอธิบายได้จากกลุ่มของสมการอนุพันธ์ซึ่งไม่เป็นอิสระต่อกัน (Coupled) และมีความไม่เป็นเชิงเส้นสูง (Highly non-linear) อันประกอบไปด้วยสมการอนุพันธ์ย่อยมวล โมเมนตัมของอากาศ ไอเชื้อเพลิง เชื้อเพลิงเหลวและก๊าซผลิตภัณฑ์ต่าง ๆ และสมการพลังงาน จะถูกนำเสนอในรูปแบบของชุดสมการส่งถ่าย (Transport equations) โดยที่ชุดสมการส่งถ่ายสำหรับทั้งสถานะก๊าซและของเหลวที่ใช้ในการแก้ปัญหาจะอยู่ในรูปของ Eulerian และการเรียงตัวของกริดแบบเยื้อง (Staggered grid arrangement) จะถูกใช้สำหรับความเร็วของทั้งสถานะก๊าซและของเหลว โดยแบบจำลองสเปรย์จะพิจารณาบนพื้นฐานของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่างกัน [5] ซึ่งหลักการคร่าว ๆ คืออาศัยหลักการสถิติของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่าง ๆ โดยลักษณะทางกายภาพของสเปรย์จะนำเสนอในรูปแบบของโมเมนต์ 4 ตัว ซึ่งในแต่ละโมเมนต์จะแสดงถึงปริมาณทั้งหมดของของเหลว พื้นผิว รัศมีและจำนวนของละอองตามลำดับ โดยที่โมเมนต์เหล่านี้จะเป็นตัวแปรที่สำคัญในแบบจำลองย่อยซึ่ง

ประกอบไปด้วยการแตกตัวของละออง การชนกันของละออง การระเหยของละออง การปฏิสัมพันธ์ระหว่างก๊าซและของเหลว สำหรับแบบจำลองเกี่ยวกับการเผาไหม้ ในที่นี้ จะใช้กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบย่อส่วน (Reduced chemical kinetic mechanisms) ร่วมกับ Presumed probability density function ใช้ในการทำนายอัตราการเกิดปฏิกิริยาของ species ต่าง ๆ ซึ่งจะให้ผลการทำนายที่น่าเชื่อถือและเป็นที่ยอมรับทั่วไป และที่สำคัญจะใช้เวลาในการคำนวณที่สั้นด้วย

4. สรุปผลการศึกษา

จากผลการทำนายการจุดระเบิดเองของแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นมานี้ จะเกิดขึ้นที่บริเวณส่วนปลายของสเปรย์ (spray tip) ซึ่งเป็นบริเวณที่มี χ_{st} ต่ำมาก โดย ค่า χ_{st} จะมีค่าสูงมากในบริเวณใกล้หัวฉีด ซึ่งเป็นบริเวณที่ละอองฝอยเกิดการระเหยกลายเป็นไอน้ำมากที่สุด ซึ่งผลการจุดระเบิดดังกล่าว สอดคล้องกับการทำนายของ Wright และคณะ [12] ซึ่งใช้วิธี conditional moment closure นอกจากนี้ ตำแหน่งการจุดระเบิดเองเกิดขึ้นที่ค่าสัดส่วนของผสมมีค่ามากกว่า Z_{st} เช่นเดียวกับผลการทำนายของ Wright และคณะ [12] และ Mastorakos และคณะ [13] ซึ่งผลดังกล่าว น่าจะเกิดมาจาก radical ซึ่งจะเกิดการแตกตัวได้ดีในบริเวณผิวเปลือกของสเปรย์ จะมีแนวโน้มแพร่เข้าไปในบริเวณที่มีค่าสัดส่วนของผสมสูง [12] และก๊าซ CO จะโดดเด่นมากในช่วงการจุดระเบิดเอง

หลังจากเกิดประกายไฟที่บริเวณปลายของสเปรย์ เปลวไฟก็เริ่มเคลื่อนที่ลงไปตามแนวเปลือกกรอบนอกของสเปรย์ซึ่งมีส่วนผสมใกล้เคียง stoichiometric ทำให้เกิดอุณหภูมิสูงที่สุด และอุณหภูมิจะลดต่ำลงเมื่อลึกเข้าไปในแกนของสเปรย์ โดยเปลวไฟที่เคลื่อนที่ลงไปทางหัวฉีด จะหยุดการพัฒนาตัวที่ระยะเปลวลอยตัว (lift-off length) หลังจากสิ้นสุดการฉีดน้ำมันเชื้อเพลิง การเผาไหม้ที่บริเวณหางของสเปรย์ (ใกล้หัวฉีด) จะเกิดขึ้นอย่างรวดเร็ว เนื่องจากออกซิเจนสามารถแพร่เข้ามาทำปฏิกิริยาได้ง่าย ทำให้หางของสเปรย์จะค่อย ๆ สั่นลง และรูปร่างของเปลวดูคล้ายกับลูกบอลไฟในที่สุด และเมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [14] ปรากฏว่าเวลาหน่วงการจุดระเบิดเองที่ทำนายได้จากแบบจำลองจะแตกต่างค่อนข้างมากกับผลการทดลอง แต่อย่างไรก็ตาม เป็นที่น่าสังเกตว่า ภาพถ่ายที่ได้จากการทดลอง ก็ไม่ได้ยืนยันถึงประกายไฟที่เกิดจากการจุดระเบิด เพียงแต่อ้างอิงจากความดันภายในห้องเผาไหม้ที่เปลี่ยนแปลง หลังจากเกิดการจุดระเบิดเองแล้ว เปลวไฟจะพัฒนาตัวอย่างรวดเร็วจนกลายเป็นเปลวลอยตัว ซึ่งระยะเปลวลอยตัวที่ได้จากแบบจำลองจะมีค่ามากกว่าผลการทดลองอยู่เล็กน้อย และระยะดังกล่าวก็สอดคล้องกับสหสัมพันธ์ของ Siebers และคณะ [15, 16] ที่ใช้ในการทำนายระยะเปลวลอยตัว ส่วนลักษณะรูปร่างการกระจายตัวของอุณหภูมิที่ทำนายได้จะใกล้เคียงกับภาพถ่ายเปลวไฟจากการทดลอง รวมถึงพฤติกรรมการณ์ปลดปล่อยพลังงานจากการเผาไหม้และขนาดของเปลวด้วย จากผลการศึกษาวิจัยที่กล่าวมาข้างต้น จึงสามารถสรุปได้ว่า แบบจำลอง unsteady flamelet ร่วมกับ reaction

progress variable ที่ได้พัฒนาขึ้น สามารถทำนายการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้ของสเปร์ยดีเซล
ได้ค่อนข้างดี โดยสามารถอธิบายปรากฏการณ์โดยหลักของเปลวไฟที่เกิดขึ้นได้อย่างครบถ้วน

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อ	i
Abstract	iii
บทสรุปผู้บริหาร	v
สารบัญ	xi
รายการสัญลักษณ์	xiii
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ความสำคัญของปัญหาที่ทำการวิจัย	1
1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ	3
1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	4
1.4 ขอบเขตของการวิจัย	4
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	6
2.1 บทนำ	6
2.2 การแตกตัวเป็นละอองสเปรย์	6
2.2.1 โมเมนต์ของการกระจายตัวของขนาดละออง	7
2.2.2 การแตกตัวของละออง	8
2.2.3 การชนกันของละออง	13
2.2.4 การกระจายตัวของละออง	16
2.2.5 การต้านของละออง	18
2.2.6 การถ่ายเทความร้อนและมวล	19
2.3 การเผาไหม้ (Combustion)	24
2.3.1 กระบวนการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้	24
2.3.2 กลไกปฏิกิริยาเคมี	25
2.3.3 การสร้างแบบจำลองการเผาไหม้	28
2.3.4 สัดส่วนของผสม	32
2.3.5 แบบจำลอง Laminar Flamelet	33
2.3.6 การหาค่าเฉลี่ยโดยใช้ Probability Density Function	37
2.3.7 Reaction Progress Variable	40
2.3.8 ระยะเปลวลอยตัว	42

	หน้า
บทที่ 3 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์	45
3.1 บทนำ	45
3.2 สมการควบคุมสำหรับก๊าซ	45
3.3 สมการควบคุมสำหรับของเหลว	48
3.3.1 แบบจำลองการส่งถ่ายโมเมนต์ละออง	48
3.3.2 สมการส่งถ่ายสำหรับของเหลว	50
3.3.3 แบบจำลองการแตกตัวของละออง	50
3.3.4 แบบจำลองการชนกันของละออง	53
3.3.5 แบบจำลองการต้านระหว่างสถานะ	56
3.3.6 แบบจำลองอุณหภูมิของละออง	58
3.3.7 แบบจำลองการถ่ายเทความร้อนและมวล	59
3.3.8 ข้อสมมติของการกระจายตัวของขนาดละออง	62
3.4 แบบจำลองการเผาไหม้ Unsteady Laminar Flamelet/Reaction Progress Variable	66
3.5 ระเบียบวิธีเชิงตัวเลข	74
3.5.1 Discretisation และกระบวนการหาคำตอบ	74
3.5.2 เงื่อนไขขอบ	76
บทที่ 4 ผลจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์และการวิเคราะห์	78
4.1 บทนำ	78
4.2 ผลการคำนวณชุดสมการ laminar flamelet	78
4.3 การจุดระเบิดเอง	85
4.4 การเผาไหม้	89
4.5 การเปรียบเทียบผลการทำนายของแบบจำลองกับผลการทดลอง	95
บทที่ 5 สรุปและข้อเสนอแนะ	99
5.1 สรุป	99
5.2 ข้อเสนอแนะสำหรับงานวิจัยในอนาคต	101
Output ที่ได้จากโครงการ	103
เอกสารอ้างอิง	104
ภาคผนวก	116

รายการสัญลักษณ์

A	Area	m	Mass
b	Impact Parameter	M	Molecular Weight
B_M	Mass Transfer Number	N	Number of Drops
B_{Q2}	Source Term for Q_2 due to Break-up	Nu	Nusselt Number
B_T	Heat Transfer Number	N_{coll}	Number of Collisions
C	Critical Radius, Reaction Progress Variable	$n(r)$	Number Size Distribution
C_D	Drag Coefficient	Oh	Ohnesorge Number
C_{coll}	Collision Constant	P	Pressure, Probability
C_{Q2}	Source Term for Q_2 due to Collision	P_k	Production of Turbulence K.E.
C_s	Break-up Time Constant	P_n	Poisson Distribution Probability
C_μ	Turbulence Parameter	Pr	Prandtl Number
C_{ε_1}	Turbulence Parameter	Q	Heat
C_{ε_2}	Turbulence Parameter	Q_i	Droplet Moment
C_{ε_3}	Turbulence Parameter	Q_0	Total Drop Number
C_p	Specific Heat Capacity	Q_1	Sum of Drop Radii
d, D	Diameter	Q_2	Sum of Squares of Drop Radii
D_C	Molar Diffusivity	Q_3	Sum of Cubes of Drop Radii
Da	Damkohler Number	r	Radius
E	Total Energy	R	Gas Constant
E_A	Activation Energy	R_u	Universal Gas Constant
f	Fuel Vapour Mass Fraction	Ra	Rabin Number
h	Heat Transfer Coefficient	Re	Reynolds Number
h_m	Mass Transfer Coefficient	s	Stoichiometric mass ratio
h_s	Sensible of Formation	S	Source Term
k	Thermal Conductivity	S_{Q2}	Source Term due to Evaporation
k	Turbulent Kinetic Energy	Sc	Schmidt Number
k	Kinetic Rate Constant	Sh	Sherwood Number
L	Latent Heat of Vaporisation	t	Time
L_b	Break Up Length	T	Temperature
L_f	Lift-off Length	U, V	Velocity
Le	Lewis Number	V_{cell}	Cell Volume
		$v(d)$	Volume Size Distribution

We	Weber Number	b	Bag Break-up, Burned
x	Coordinate Direction	che	Chemical
Y	Species Mass Fraction	$cell$	Cell
Z	Mixture Fraction	$coal$	Coalescence
Z''^2	Mixture Fraction Variance	$coll$	Collision
อักษรกรีก		e	Evaporative
α_R	Rosin-Rammler Parameter	eff	Effective
χ	Scalar Dissipation Rate	eq	Equilibrium
δt	Time Step	f	Film
ε	Dissipation Rate	F	Fuel
γ_k	Volume Fraction of k^{th} group	g	Gas
μ	Dynamic Viscosity	i	Moment Index, Species
ν	Kinetic Viscosity	ig	Ignition
ν'	Stoichiometric Coefficients of Reactants	inj	Injection
ν''	Stoichiometric Coefficients of Products	j	Vector (Free) Index
θ	Void Fraction	k	Turbulent Kinetic Energy, Species
ρ	Density	l	Liquid
σ	Surface Tension	lam	Laminar
σ	Turbulent Prandtl/Schmidt Number	O_2	Oxygen
σ_ν	Turbulence Damping Coefficient	out	Out
τ	Breakup Time, Ignition Delay Time	p, q	Mean Diameter Parameter
$\dot{\omega}$	Reaction Rate	P	Product
Φ_i	Moment Averaged Quantity	rel	Relative
Φ	General Dependent Variable, Equivalence Ratio	R	Reactant, Rosin-Rammler
ตัวห้อย		s	Drop Surface, Stripping Break-Up
2	Based on Surface-Area-Averaged	sep	Separation
3	Based on Volume-Averaged	st	Stoichiometric Condition
32	Sauter Mean	t	Inside Radius, Turbulent
ad	Adiabatic	tot	Total
		U_{ki}	Velocity Component
ตัวยก			
		b	Backward
		f	Forward

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความสำคัญของปัญหาที่ทำการวิจัย

การเผาไหม้ในอุปกรณ์ต้นกำเนิดกำลังต่าง ๆ เช่น หม้อไอน้ำอุตสาหกรรม ห้องเผาไหม้ของอากาศยาน และเครื่องยนต์สันดาปภายในต่าง ๆ จะอาศัยการแตกตัวของเชื้อเพลิงเหลวโดยอาศัยหลักการสเปรย์ เพื่อให้อากาศและละอองเชื้อเพลิงผสมกันได้อย่างดีก่อนที่จะเกิดการลุกไหม้ ดังนั้นการเข้าใจรายละเอียดของกระบวนการเผาไหม้แบบสเปรย์ซึ่งประกอบด้วย การแตกตัวของสเปรย์ ลักษณะของสเปรย์ พลศาสตร์ของสเปรย์ การถ่ายเทมวลและความร้อน การจุดระเบิดเอง (auto-ignition) และการเคลื่อนที่ของเปลวไฟ นั้นมีจำเป็นอย่างยิ่งในการออกแบบและเพิ่มประสิทธิภาพการเผาไหม้ของอุปกรณ์ดังกล่าว เนื่องจากส่วนผสมเชื้อเพลิงที่ตำแหน่งต่าง ๆ ภายในห้องเผาไหม้นั้นมีความแปรปรวนค่อนข้างสูง ดังนั้นการเผาไหม้ของสเปรย์จึงมีความซับซ้อนมากกว่าการเผาไหม้แบบเนื้อเดียว (homogeneous combustion) นอกเหนือจากคุณสมบัติทางเคมีของเชื้อเพลิงที่มีผลต่อกระบวนการเผาไหม้แล้ว คุณลักษณะการกระจายตัวของสเปรย์ก็มีผลต่อการเผาไหม้ไม่น้อยเช่นกัน [1]

จากข้อได้เปรียบทางด้านการประหยัดน้ำมันและการเผาไหม้ที่สะอาดกว่า จึงทำให้เทคนิคการฉีดน้ำมันโดยตรงเข้ามามีบทบาทมากขึ้นในเครื่องยนต์ในปัจจุบัน ทั้งในระบบที่จุดระเบิดด้วยแรงอัดและประกายไฟ ดังนั้นจะเห็นได้ว่า มีงานวิจัยจำนวนมากพยายามพัฒนาเทคนิคทางด้านนี้ ทั้งการเพิ่มความดันให้กับหัวฉีด การเพิ่มการหมุนวนของสเปรย์เพื่อให้ผสมกับอากาศได้มากขึ้นด้วยเทคนิคต่าง ๆ ดังนั้นเพื่อตอบสนองต่อการพัฒนาเหล่านี้ งานวิจัยนี้จึงพัฒนาต่อยอด โดยสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อทำนายการเผาไหม้ของสเปรย์ที่เกิดขึ้นจากงานวิจัยข้างต้น ความสำเร็จของแบบจำลองที่พัฒนาขึ้น จะช่วยลดค่าใช้จ่ายในการทดลองลงได้มาก และช่วยในการออกแบบ และปรับปรุงประสิทธิภาพการเผาไหม้ภายในเครื่องยนต์ดีเซล หรืออุปกรณ์ทางอุตสาหกรรมต่อไป

โดยปกติแล้ว แบบจำลองสำหรับการเผาไหม้ในเครื่องยนต์สันดาปภายในนั้นมีความซับซ้อนมากเนื่องมาจากปัจจัยหลายประการ เช่น ความดันภายในห้องเผาไหม้ที่ค่อนข้างสูง และ

เปลี่ยนแปลงตามเวลาเนื่องจากการเคลื่อนที่ของลูกสูบ การปฏิสัมพันธ์ของของไหลสองสถานะซึ่งต้องการแบบจำลองที่มีความซับซ้อนมาใช้ในการวิเคราะห์ ความซับซ้อนของการไหลแบบปั่นป่วนในก๊าซ ความซับซ้อนของกลไกจลนศาสตร์ทางเคมี (Chemical kinetic mechanisms) ของเชื้อเพลิง และการจุดระเบิดเองซึ่งเป็นปัจจัยที่สำคัญในการเริ่มของกระบวนการเผาไหม้ ดังปัจจัยที่ได้กล่าวมา จะเห็นได้ว่า แบบจำลองการเผาไหม้ของสเปรย์นั้นมีความยุ่งยากและซับซ้อนในการคำนวณ จึงต้องการแหล่งทรัพยากรทางการคำนวณที่สูงเพื่อใช้ในการวิเคราะห์ปัญหา

ในปัจจุบัน การพัฒนาและประยุกต์ใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการเผาไหม้แบบสเปรย์ในเครื่องยนต์ได้เป็นที่ดึงดูดนักวิจัยจำนวนมาก เนื่องจากวิธีนี้ จะมีต้นทุนที่ค่อนข้างต่ำ และให้ผลลัพธ์ที่น่าเชื่อถือในการอธิบายหรือทำนายปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในของการเผาไหม้แบบสเปรย์ภายในห้องเผาไหม้ ซึ่งผลของแบบจำลองสามารถทำนายได้ทุกตัวแปรที่สนใจ ทุกตำแหน่งที่วิเคราะห์ และทุกเวลาที่พิจารณา โดยที่การทดลองไม่สามารถให้ข้อมูลที่สมบูรณ์เหล่านี้ได้เนื่องจาก ประการแรก มันยากมากและสิ้นเปลืองสูงที่จะใช้เครื่องมือและเทคนิคที่ซับซ้อนมาวัดในเครื่องยนต์ที่มีการแกว่งกวัดค่อนข้างเร็ว โดยปราศจากผลกระทบต่อการพัฒนาตัวของสเปรย์และเปลวไฟ ตัวอย่างเช่น ในบริเวณใกล้หัวฉีดซึ่งเป็นบริเวณที่มีความเข้มข้นของละอองเชื้อเพลิงที่สูง เนื่องมาจากการแตกตัวของสเปรย์ส่วนใหญ่จะเกิดในบริเวณนี้ และบริเวณหัวของเปลวสเปรย์ซึ่งมีความเข้มข้นของเขม่าค่อนข้างสูง นอกจากนี้ในการทดลองโดยทั่วไปจะสามารถให้ข้อมูลได้แค่ 2 มิติ และส่วนน้อยมากที่จะสามารถให้ข้อมูลที่เป็น 3 มิติ ข้อได้เปรียบที่สำคัญอีกประการของแบบจำลองก็คือ ตัวแปรที่สร้างขึ้นมาเป็นพิเศษ (Artificial parameters) ที่ใช้ในการวิเคราะห์อิทธิพลของตัวแปรต่าง ๆ ที่มีต่อกระบวนการเผาไหม้ของสเปรย์ เพื่อใช้เป็นข้อมูลเชิงลึกที่ถูกใช้วิเคราะห์ต่อการเผาไหม้ โดยที่ตัวแปรเหล่านี้ไม่สามารถวัดได้โดยตรงจากเครื่องมือวัด เช่น สัดส่วนเชิงมวลของผสม (Mixture mass fraction)

อย่างไรก็ตาม ถึงแม้ว่าความละเอียดถูกต้องของแบบจำลองที่สร้างขึ้นจะเพิ่มขึ้นอย่างมาก แต่ผลการทดลองศึกษาที่มีความละเอียด แม่นยำสูงก็ยังคงมีความสำคัญมากเช่นกัน เพื่อให้ได้ความละเอียดถูกต้องมากยิ่งขึ้น ผลการทดลองที่มีความน่าเชื่อถือสูงจำนวนมากก็ยังคงต้องการในการเปรียบเทียบและสอบเทียบกับแบบจำลอง จำนวนข้อมูลผลการทดลองยิ่งมาก ยิ่งมีประโยชน์ในการศึกษาวิเคราะห์แบบจำลองย่อยที่มีความซับซ้อนซึ่งเกิดขึ้นในการเผาไหม้แบบสเปรย์ของเครื่องยนต์ให้มีความสามารถในการทำนายมากยิ่งขึ้น นอกจากนี้ เทคโนโลยีทางคอมพิวเตอร์ที่ถูกพัฒนาไปมาก ก็ยิ่งดูเหมือนจะเป็นไปได้ในเชิงปฏิบัติสำหรับการสร้างแบบจำลองการเผาไหม้ในเครื่องยนต์เหล่านี้ โดยสิ่งต่าง ๆ เหล่านี้ก็ยังมีความสำคัญมากขึ้นในอนาคต เนื่องจากแนวโน้มของการพัฒนาเครื่องยนต์สันดาปภายใน จะมุ่งเน้นไปที่การนำเทคโนโลยีการฉีดโดยตรงมาใช้ประโยชน์ ซึ่งประเทศไทยก็เป็นประเทศผู้ผลิตรถยนต์รายใหญ่ของโลก ดังนั้นแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นมานี้ จะเป็นประโยชน์อย่างมาก ในวงการผลิตรถยนต์ในบ้านเรา

1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ

ในกระบวนการเผาไหม้แบบสเปรย์ อัตราการเผาไหม้ของสเปรย์จะขึ้นอยู่กับปัจจัยหลัก ๆ คือ กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีและความปั่นป่วนที่ซับซ้อนของก๊าซเชื้อเพลิง โดยที่กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีที่มีความละเอียดแม่นยำสูงซึ่งจะใช้ปฏิกิริยาเคมีและ species ที่เกี่ยวข้องทั้งหมดนั้นค่อนข้างมีขีดจำกัดสูง สำหรับการนำมาประยุกต์ใช้กับเชื้อเพลิงที่มีค่าไฮโดรคาร์บอนสูง ๆ อย่างเช่น ดีเซล นอกจากนี้ การปฏิสัมพันธ์ระหว่างความปั่นป่วนและปฏิกิริยาเคมีของก๊าซเชื้อเพลิงนั้นยากที่จะสร้าง และสามารถทำนายได้ใกล้เคียง โดยวิธีที่มีศักยภาพมากที่สุดคือการใช้แบบจำลอง Probability density function (PDF) transport equation เพราะ source term ของปฏิกิริยาเคมีของแต่ละ species สามารถอนุพันธ์ได้โดยตรงจากทฤษฎีทางจลนศาสตร์ทางเคมีโดยปราศจากการจำลองใด ๆ ทั้งสิ้น และสามารถทำนาย source term ของปฏิกิริยาได้ค่อนข้างสมบูรณ์เช่นกัน แต่ในทางปฏิบัตินั้น มันเป็นการยากมากที่จะสมมติรูปร่างของ PDF ที่ใช้ร่วม โดยที่ขึ้นอยู่กับตัวแปรมากกว่าสองตัวแปร และความซับซ้อนของปัญหายิ่งทวีคูณมากยิ่งขึ้น เมื่อจำนวนตัวแปรของ species ที่เกี่ยวข้องเพิ่มขึ้น ดังนั้นวิธีการนี้จึงประสบความสำเร็จได้กับเชื้อเพลิงที่มีค่าไฮโดรคาร์บอนต่ำๆ เท่านั้นโดยวิธี Monte-Carlo ในการแก้ปัญหา [3, 4] ซึ่งหลักการดังที่ได้กล่าวมานั้น ใช้เวลาในการคำนวณสิ้นเปลืองสูงมากและเป็นไปได้ยากสำหรับการนำมาประยุกต์ใช้กับการจำลองการเผาไหม้ของสเปรย์ในเครื่องยนต์สันดาปใน ในปัจจุบัน เช่น ดีเซล โดยงานวิจัยในกลุ่มนี้จะต้องใช้ทุนวิจัยที่สูงมากและการพัฒนาจะถูกจำกัดในวงแคบ ๆ เฉพาะห้องวิจัยที่มีชื่อเสียง เช่น California Institute of Technology, Stanford University, Imperial College, Chalmers University of Technology เป็นต้น

ดังนั้นในงานวิจัยนี้ จึงมุ่งเน้นที่จะศึกษาและพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ของสเปรย์สำหรับประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์ดีเซล โดยแบบจำลองจะเริ่มพัฒนาจากแบบจำลองสเปรย์ ของ Beck [5] ซึ่งสามารถทำนายการกระจายตัวของสเปรย์ได้ค่อนข้างถูกต้องแม่นยำ ดังปรากฏในงานตีพิมพ์จำนวนมาก [6-11] ส่วนแบบจำลองของการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้จะถูกพัฒนาขึ้นมา โดยแบบจำลองนี้จะต้องสามารถทำนายปรากฏการณ์การเผาไหม้ที่เกิดขึ้นในเครื่องยนต์ได้อย่างแม่นยำใกล้เคียงกับผลงานวิจัยที่เกิดขึ้นจากห้องวิจัยที่มีชื่อเสียง แต่จะต้องใช้เวลาในการคำนวณและทุนวิจัยที่น้อยกว่าอย่างชัดเจน เพื่อที่แบบจำลองนี้จะสามารถถูกใช้เป็นเครื่องมือในการออกแบบและปรับปรุงประสิทธิภาพการเผาไหม้ของสเปรย์ภายในเครื่องยนต์ดีเซลได้จริงในภาคอุตสาหกรรมยานยนต์หรืออุปกรณ์ทางอุตสาหกรรมอื่น ๆ ที่เกี่ยวข้องต่อไป โดยแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นมานี้จะถูกใช้ในการทำนายหลัก ๆ ได้แก่

1.2.1 การจุดระเบิดเอง (auto-ignition) ซึ่งจะคำนึงถึงระยะเวลาหน่วงการจุดระเบิดตำแหน่งที่เกิดการจุดระเบิดเอง โดยผลการทำนายที่ได้จะถูกนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองและแบบจำลองอื่น ๆ

1.2.2 การเคลื่อนที่ของเปลว (flame propagation) ซึ่งจะคำนึงถึงระยะเวลาที่ถูกใช้ในการเผาไหม้ อัตราการเผาไหม้ รวมถึงลักษณะของเปลวที่เคลื่อนที่ไป โดยผลการทำนายที่ได้จะถูกนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองและแบบจำลองอื่น ๆ

1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

ผลจากการศึกษาวิจัยจะก่อให้เกิดความเข้าใจยิ่งขึ้นในปรากฏการณ์การเผาไหม้ของสเปรย์ในเครื่องยนต์ดีเซลซึ่งมีความดันและอุณหภูมิที่สูง โดยที่แบบจำลองที่ถูกพัฒนาขึ้นมานั้นจะสามารถทำนายปรากฏการณ์การจุดระเบิดเอง และการเคลื่อนที่ของเปลวที่เกิดขึ้นภายในเครื่องยนต์ได้อย่างถูกต้องและใช้เวลาในการคำนวณที่สั้น เพื่อที่แบบจำลองนี้จะสามารถถูกใช้เป็นเครื่องมือในการออกแบบและปรับปรุงประสิทธิภาพการเผาไหม้ของสเปรย์ภายในเครื่องยนต์ดีเซลต่อไป หรืออุปกรณ์ทางอุตสาหกรรมต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องต่อไป โดยองค์ความรู้ที่ได้รับจากงานวิจัยชิ้นนี้จะมีประโยชน์อย่างสูงต่ออุตสาหกรรมยานยนต์ เช่น เครื่องยนต์สันดาปภายในทั้งที่จุดระเบิดด้วยประกายไฟและการอัดตัว รวมทั้งหัวเผาอุตสาหกรรมต่าง ๆ ที่ใช้หัวฉีด

นอกเหนือจากที่กล่าวมาแล้ว โครงการวิจัยนี้ยังเป็นประโยชน์ต่อการพัฒนาการเรียนการสอนทั้งในระดับปริญญาตรี โท และเอกต่อไปในอนาคต โดยแบบจำลองจะช่วยให้นักศึกษาเข้าใจได้ดียิ่งขึ้นถึงปรากฏการณ์การเผาไหม้ที่เกิดขึ้นและลักษณะการพัฒนาตัวของเปลว และยังสามารถทำการวิจัยต่อยอดสำหรับนักศึกษาระดับบัณฑิตศึกษา เพื่อขยายผลของการวิจัยในอนาคต

1.4 ขอบเขตของการวิจัย

งานวิจัยนี้จะมุ่งเน้นการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการเผาไหม้แบบสเปรย์ของเชื้อเพลิงดีเซลที่ประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์สันดาปภายในแบบฉีดโดยตรง ซึ่งมีอุณหภูมิและความดันภายในห้องเผาไหม้ที่สูง โดยใช้ระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขขั้นสูงอาศัยเทคนิค FVM (Finite Volume Method) และ FDTD (Finite Difference Time Domain) เพื่อหาคำตอบของปัญหาที่สามารถอธิบายได้จากกลุ่มของสมการอนุพันธ์ซึ่งไม่เป็นอิสระต่อกัน (coupled) และมีความไม่เป็นเชิงเส้นสูง (highly non-linear) ซึ่งประกอบไปด้วยสมการอนุพันธ์ย่อยมวลและโมเมนตัมของอากาศ เชื้อเพลิง และ species ต่าง ๆ และสมการพลังงาน โดยจะถูกนำเสนอในรูปของชุดสมการส่งถ่าย (transport equations) สำหรับชุดสมการส่งถ่ายของทั้งสถานะก๊าซและของเหลวที่ใช้ในการแก้ปัญหาจะอยู่ในรูปของ Eulerian 2 มิติ และการเรียงตัวของกริดแบบเยื้อง (staggered grid arrangement) จะถูกใช้สำหรับความเร็วของทั้งสถานะก๊าซและของเหลว โดยแบบจำลองสเปรย์จะพิจารณาบนพื้นฐานของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่างกัน [5] ซึ่งหลักการคร่าว ๆ คืออาศัยหลักการสถิติของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่าง ๆ โดยลักษณะทางกายภาพของสเปรย์จะนำเสนอในรูปของโมเมนต์ 4 ตัว ซึ่งในแต่ละโมเมนต์จะแสดงถึงปริมาตรทั้งหมดของของเหลว พื้นผิว รัศมีและจำนวนของละอองตามลำดับ โดยที่โมเมนต์เหล่านี้จะเป็นตัวแปรที่สำคัญในแบบจำลองย่อยซึ่งประกอบไปด้วยการแตกตัวของละออง การชนกันของ

ละออง การระเหยของละออง การปฏิสัมพันธ์ระหว่างก๊าซและของเหลว สำหรับแบบจำลองที่เกี่ยวข้องกับการเผาไหม้ ในที่นี้ จะใช้กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบโครงร่าง (skeleton chemical kinetic mechanisms) ในการทำนายอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของ species ต่าง ๆ ที่สภาวะใด ๆ บนสมมติฐานของแบบจำลอง Laminar Flamelet ซึ่งกลไกนี้มีความละเอียดถูกต้องมากกว่ากลไกแบบย่อส่วน (reduced mechanism) แต่น้อยกว่ากลไกแบบละเอียด (detailed mechanism) ซึ่งข้อมูลที่ได้จากการคำนวณนี้ประกอบไปด้วย อุณหภูมิเปลว อัตราส่วนเชิงมวลของ species ใด ๆ ความหนาแน่นของก๊าซผลิตภัณฑ์ และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี โดยข้อมูลต่าง ๆ เหล่านี้จะถูกนำมาเก็บไว้ในฐานข้อมูลซึ่งเรียกว่า Flamelet library แล้วข้อมูลเหล่านี้จะถูกนำมาคำนวณร่วมกับ presumed probability density function เพื่อใช้ในการคำนวณหาค่าเฉลี่ยเชิงสถิติของอุณหภูมิและก๊าซผลิตภัณฑ์จากการเผาไหม้ แต่เนื่องจากแบบจำลองการเผาไหม้ Flamelet จะสามารถใช้คำนวณได้เฉพาะสภาวะคงตัวเท่านั้น (steady state) ดังนั้นจึงต้องสร้างตัวแปรพิเศษขึ้นมาคือ Reaction Progress Variable มาใช้ร่วมในการพิจารณาเพื่อหาการจุดระเบิดและการเคลื่อนที่ของเปลวไฟด้วย โดยผลการคำนวณที่ได้จากวิธีดังกล่าวจะมีความน่าเชื่อถือและเป็นที่ยอมรับโดยทั่วไป และที่สำคัญจะใช้เวลาในการคำนวณที่สั้นด้วย

บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1 บทนำ

หลักการเบื้องต้นของการเผาไหม้แบบสเปรย์เริ่มต้นจาก เชื้อเพลิงเหลวถูกฉีดด้วยความดันสูงเข้าสู่ห้องเผาไหม้ซึ่งมีอุณหภูมิและความดันสูง ความดันที่สูงของการฉีดจะไปทำให้ผิวของลำเจ็ตเกิดการแยกเป็นเส้น ๆ (ligaments) และแตกตัวเป็นละอองเล็ก ๆ ถัดมา ละอองที่แตกตัวมานั้นจะถูกทำให้ระเหยกลายเป็นไอเชื้อเพลิงเนื่องจากการถ่ายเทความร้อนระหว่างละอองของเหลวกับอากาศร้อน ซึ่งไอเชื้อเพลิงนี้จะไปรวมตัวกับอากาศแล้วเกิดการลุกไหม้ต่อไป โดยส่วนใหญ่ ส่วนผสมเชื้อเพลิงหนาจะปรากฏในบริเวณแกนกลางของสเปรย์ และปริมาณอากาศที่แทรกเข้ามาผสมกับไอเชื้อเพลิงจะมากขึ้นเมื่อระยะห่างจากแนวแกนเพิ่มมากขึ้น ซึ่งสภาวะที่เหมาะสมสำหรับการจุดระเบิดเอง (Autoignition) จะประกอบไปด้วยอุณหภูมิที่สูงเพียงพอและความเข้มข้นของส่วนผสมเชื้อเพลิงที่อยู่ภายใต้ขีดจำกัดการลุกไหม้ (flammability limits) ณ บริเวณที่มีส่วนผสมเชื้อเพลิงดังกล่าวจะเริ่มมีการจุดระเบิดเองและลุกไหม้ขึ้นอย่างรวดเร็ว ซึ่งนำไปสู่การเพิ่มขึ้นอย่างฉับพลันของการถ่ายเทความร้อนอันเนื่องมาจากปฏิกิริยาทางเคมี จากการสังเกตจากผลการทดลองจะพบว่า การจุดระเบิดจะเกิดขึ้นในบริเวณต้น ๆ ของกลุ่มไอเชื้อเพลิงที่มีการระเหย ซึ่งปรากฏการณ์นี้เป็นจุดเริ่มของการเผาไหม้

จากกระบวนการเผาไหม้ของสเปรย์ดังที่ได้กล่าวมาข้างต้นจะเห็นได้ชัดเจนว่า ลำดับขั้นตอนที่สำคัญนั้นสามารถแบ่งหลัก ๆ ได้เป็น 2 ขั้นตอนคือ กระบวนการแตกตัวเป็นละอองของสเปรย์ และกระบวนการเผาไหม้ของส่วนผสมเชื้อเพลิง ดังนั้นทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง จึงสามารถจำแนกได้ดังนี้

2.2 การแตกตัวเป็นละอองสเปรย์ (Spray Atomisation)

เนื่องจากในงานวิจัยนี้ จะนำแบบจำลองสเปรย์ของ Beck [5] มาพัฒนา ซึ่งพิจารณาบนพื้นฐานของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่างกัน [5] ซึ่งหลักการคร่าว ๆ

คืออาศัยหลักการสถิติของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่าง ๆ โดยลักษณะทางกายภาพของสเปรย์จะนำเสนอในรูปของโมเมนต์ 4 ตัว ซึ่งจะแสดงถึงปริมาณทั้งหมดของของเหลว พื้นผิว รัศมีและจำนวนของละอองตามลำดับ โดยที่โมเมนต์เหล่านี้จะเป็นตัวแปรที่สำคัญในแบบจำลองย่อยซึ่งประกอบไปด้วยการแตกตัวของละออง การชนกันของละออง การระเหยของละออง การปฏิสัมพันธ์ระหว่างก๊าซและของเหลว

2.2.1 โมเมนต์ของการกระจายตัวของขนาดละออง (Droplet Size Distribution Moments)

การกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่าง ๆ (Droplet number size distribution, $n(r)$) สามารถหาได้จากผลคูณของการกระจายตัวของความน่าจะเป็นของจำนวนละอองที่รัศมีใด ๆ

$$n(r) = \int_{r-}^{r+} N(r) dr \quad (2.1)$$

เมื่อ $N(r)$ คือการกระจายตัวของความน่าจะเป็นของจำนวนละออง (droplet number probability distribution) ดังนั้นจำนวนละอองทั้งหมดต่อปริมาตรรวมสามารถหาได้จากการอินทิเกรตตลอดช่วงขนาดของละออง

$$Q_0 = \int_0^{\infty} n(r) dr \quad (2.2)$$

ซึ่งนี่จะเป็นโมเมนต์ตัวที่หนึ่ง ส่วนโมเมนต์ตัวที่เหลือก็สามารถหาได้ในทำนองเดียวกัน

$$Q_i = \int_0^{\infty} n(r) r^i dr \quad (2.3)$$

เพื่อให้ง่ายในการวิเคราะห์จะสมมุติว่า รูปทรงของละอองเป็นทรงกลม ดังนั้นพื้นผิวของละอองทั้งหมดต่อปริมาตรรวมมีค่าเท่ากับ $4\pi Q_2$ และปริมาตรของละอองทั้งหมดต่อปริมาตรรวมสามารถหาได้จาก

$$\frac{V_{liquid}}{V_{cell}} = \frac{4}{3} \pi Q_3 \quad (2.4)$$

นอกจากนี้ โมเมนต์ Q_3 ยังสามารถแสดงถึงมวลของละอองทั้งหมดต่อปริมาตรรวมได้ ถ้าสมมติว่า ความหนาแน่นของของเหลวมีค่าคงที่ในปริมาตรควบคุม ดังนั้นในที่นี้โมเมนต์จำนวนเพียง 4 ตัวก็เพียงพอสำหรับการแสดงพฤติกรรมของการกระจายตัวของละอองสเปรย์

เนื่องจากขนาดและจำนวนที่แตกต่างกันของละอองสเปรย์ ดังนั้นตัวแปรต่าง ๆ ที่ใช้ในการคำนวณ เช่น ความเร็ว อุณหภูมิ จึงต้องใช้เป็นค่าเฉลี่ย ซึ่ง Beck [5] ได้ให้นิยามเกี่ยวกับการหาค่าเฉลี่ยของตัวแปรถ่วงโมเมนต์ใด ๆ ไว้ดังนี้

$$\Phi_i = \frac{\int_0^{\infty} r^i n(r) \Phi dr}{Q_i} \quad (2.5)$$

เมื่อ Φ_i คือค่าเฉลี่ยถ่วงโมเมนต์ใด ๆ ของตัวแปร Φ จากหลักการนี้ จึงทำให้โมเมนต์ต่าง ๆ เคลื่อนที่ด้วยความเร็วที่แตกต่างกัน ส่งผลให้เกิดการกระจายตัวของขนาดละอองที่ตำแหน่งต่าง ๆ และความเร็วเฉลี่ยถ่วงโมเมนต์ที่เกิดขึ้น จากการกระจายตัวของขนาดละอองนี้ จึงมีค่าเปลี่ยนไปตามตำแหน่ง และเวลาที่เคลื่อนที่ผ่าน

2.2.2 การแตกตัวของละออง (Droplet Breakup)

เมื่อของเหลวถูกฉีดออกจากหัวฉีด จะทำให้ของเหลวถูกฉีกตัว แยกจากกัน และแตกตัวเป็นละอองในที่สุด ซึ่งมีขนาด ความเร็ว และความเข้มข้นที่แตกต่างกัน การแตกตัวของละอองนี้เกิดมาจากความเร็วสัมพัทธ์ที่สูงระหว่างของเหลวและอากาศแวดล้อม ซึ่งความเร็วสัมพัทธ์นี้ก่อให้เกิดการกระจายที่ไม่สม่ำเสมอของความดันและความเค้นเฉือนบนพื้นผิวของเหลว ส่งผลให้เกิดการบิดตัวและเปลี่ยนรูปของของเหลว ซึ่งนำไปสู่การแตกตัวของละอองในที่สุด [17] จากการรวบรวมผลงานวิจัยจำนวนมากเกี่ยวกับปรากฏการณ์การแตกตัวของละอองนี้พบว่า นักวิจัยต่าง ๆ พยายามจะอธิบายกลไกการแตกตัวของละอองที่ได้จากผลการทดลอง และจำแนกชนิดของการแตกตัว รวมถึงการสร้างสมการเชิงประจักษ์ (Empirical equation) เพื่อใช้ทำนายค่าวิกฤตการแตกตัว ขนาด ความเร็วการแตกตัว และ เวลาการแตกตัว ดังนี้

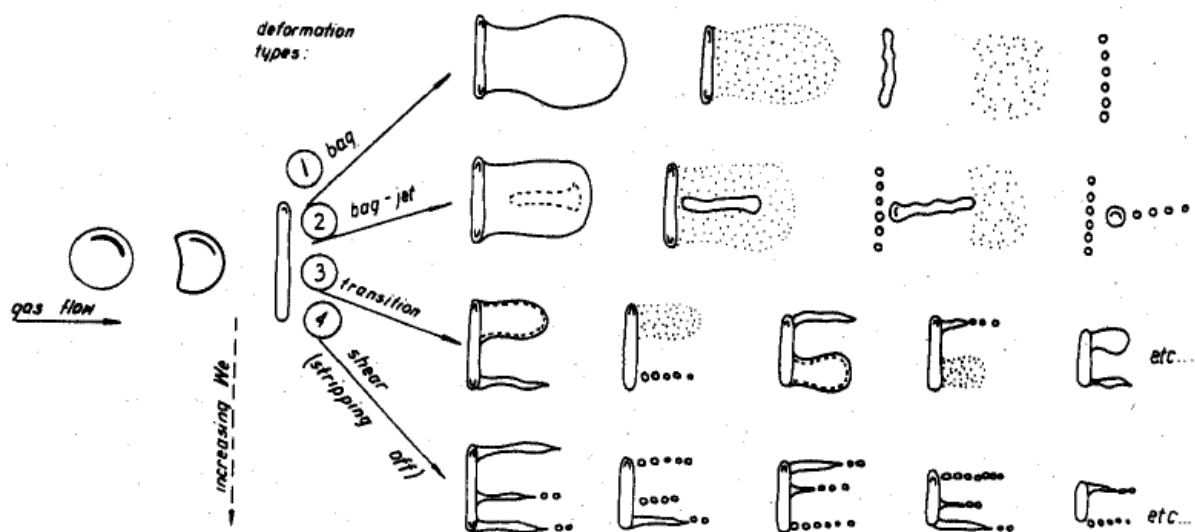
Krzczkowski [18] ได้ทำการทดลองศึกษาอิทธิพลของความหนืดที่มีต่อชนิดของการแตกตัว และเวลาการแตกตัวโดยใช้สารละลายเมทานอล น้ำ บิวทานอล น้ำ-กลีเซอริน และกลีเซอริน ซึ่งสามารถจำแนกชนิดการแตกตัวของละอองได้เป็น 4 ประเภทหลักคือ

1. *bag breakup mode* ซึ่งมีลักษณะรูปร่างคล้ายถุงผู่ลมชูชีพ
2. *bag-jet (or umbrella) breakup mode* ซึ่งมีลักษณะคล้ายแบบแรก แต่จะมีเส้นแกนของเหลวปรากฏในบริเวณแกนกลางของถุง
3. *transition breakup mode* ซึ่งจะปรากฏที่ค่า Weber number สูงขึ้น ทำให้เกิดการผสมผสานกันระหว่างเส้นแกนของเหลวและถุงฟิล์มของเหลว โดยที่เส้นแกนของเหลวจะปรากฏใน

บริเวณอีกด้านหนึ่งของถุงฟิล์มของเหลว และกระบวนการนี้จะเกิดขึ้นสลับกันไปมา จนกว่าหยดของเหลวจะแตกตัวหมด

4. *shear (or stripping) breakup mode* เมื่อค่า Weber number เพิ่มขึ้น ลักษณะคล้ายถุงฟิล์มของเหลวจะเปลี่ยนรูปร่างคล้ายริ้วของเหลว ดังนั้นการแตกตัวชนิดนี้จึงมีรูปร่างเป็นแถบของเหลวจำนวนมาก ก่อนที่จะเกิดแตกตัวเป็นละอองเล็ก ๆ ในเวลาต่อมา

เพื่อให้เข้าใจง่ายขึ้น รูป 2.1 จะแสดงถึงกลไกการแตกตัวดังกล่าว และรูปที่ 2.2 แสดงถึงเวลาการแตกตัวที่สอดคล้อง ส่วนรูปที่ 2.3 แสดงถึงความสัมพันธ์ระหว่างสภาวะการไหลและชนิดของการแตกตัว



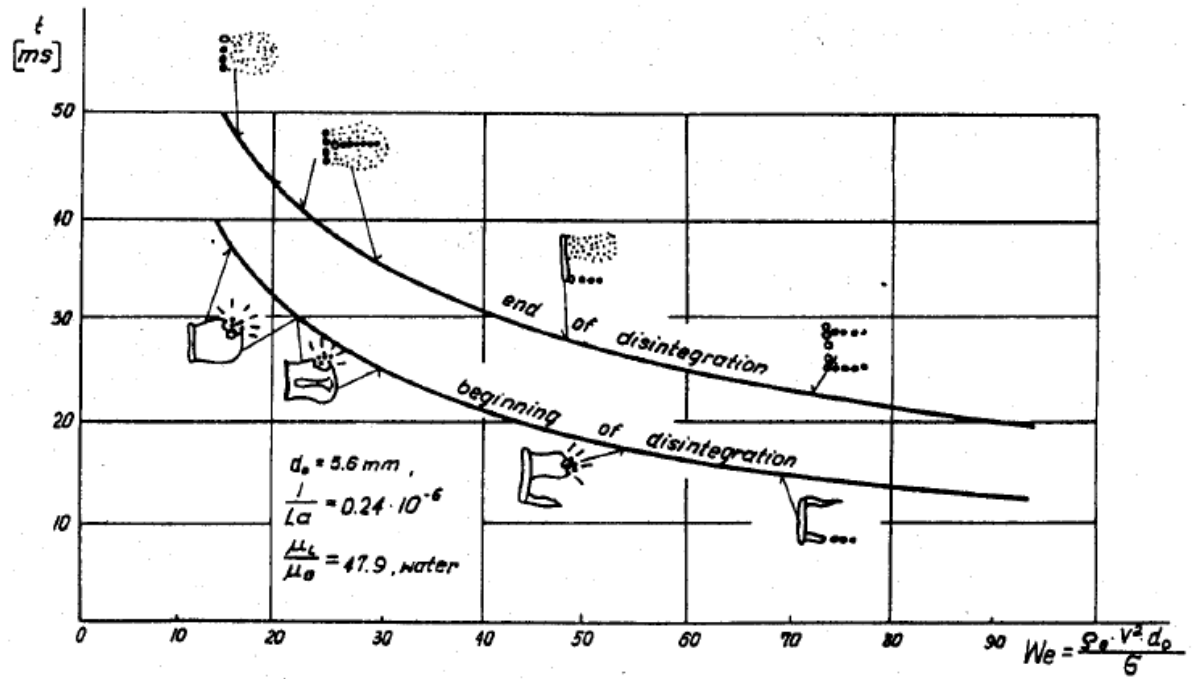
รูปที่ 2.1 ภาพร่างของการแตกตัวของละออง (จาก Krzeczowski [18])

Borisov และคณะ [19] ได้ทำการศึกษาการแตกตัวของหยดของเหลวภายใน shock tubes และสามารถจำแนกชนิดการแตกตัวออกเป็น 3 ช่วงหลัก ๆ ดังนี้

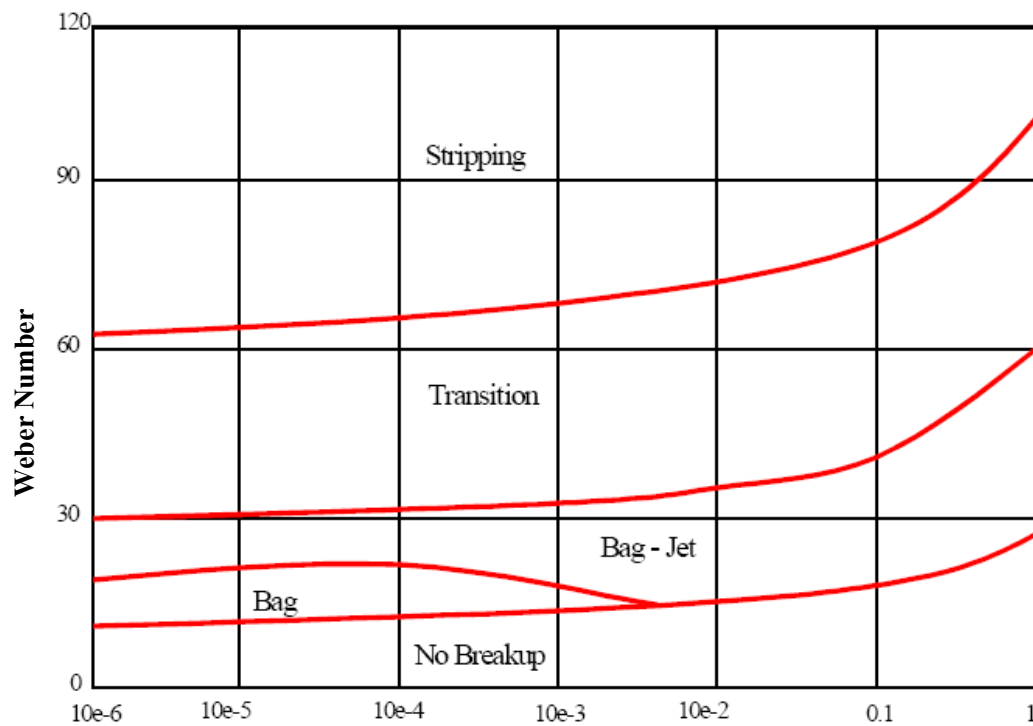
1. *bag-type breakup*, ($8 \leq We \leq 40$; $0.2 \leq Ra \leq 1.6$) ซึ่งหยดของเหลวจะแตกตัวย่อยออกเป็น 2 ละอองหรือมากกว่านั้น และขนาดของละอองที่แตกตัวนั้นจะมีขนาดใกล้เคียงกับหยดของเหลวเริ่มต้น

2. *shear-type breakup*, ($20 \leq We \leq 2 \times 10^4$; $1.0 \leq Ra \leq 20$) หยดของเหลวจะเซ็งแถบของเหลวจะแตกตัวย่อยออกเป็นละอองเล็ก ๆ จำนวนมาก และมีขนาดที่เล็กกว่าอย่างชัดเจน

3. *explosive-type breakup*, ($2 \times 10^3 \leq We \leq 2 \times 10^5$; $20 \leq Ra \leq 2 \times 10^2$) ซึ่งขนาดของละอองที่แตกตัวจะมีขนาดที่เล็กมาก



รูปที่ 2.2 เวลาการแตกตัวของละออง (จาก Krzeczkowski [18])



รูปที่ 2.3 แผนภาพกลไกการแตกตัวของละออง (จาก Krzeczkowski [18])

เมื่อ $We = \frac{\rho_g U_{rel}^2 d}{\sigma_l}$, $Ra = We / \sqrt{Re}$, $Re = \frac{\rho_l U_{rel} d}{\mu_l}$, และ d คือค่า Weber number,

Rabin number, Reynolds number, และขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของหัวฉีดตามลำดับ

สำหรับ shear breakup regime เวลาที่ใช้ในการแตกตัวสามารถประมาณได้จาก

$$\tau \approx \frac{d}{U_{rel}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.6)$$

เมื่อ d คือเส้นผ่านศูนย์กลางของละอองและ U_{rel} คือความเร็วสัมพัทธ์ระหว่างลำเจ็ตและก๊าซแวดล้อม

Pilch และ Erdman [20] ได้ทำการรวบรวมข้อมูลการทดลองต่าง ๆ และทำการวิเคราะห์ให้ข้อสรุปว่าการแตกตัวของหยดของเหลวสามารถแบ่งออกได้เป็น 5 ช่วงดังนี้

1. vibrational breakup ($We \leq 12$)
2. bag breakup ($12 < We \leq 50$)
3. bag and stamen breakup ($50 < We \leq 100$)
4. sheet stripping ($100 < We \leq 350$)
5. catastrophic breakup ($We > 350$)

และเวลาการแตกตัวที่สอดคล้องสามารถประมาณได้จาก

$$\tau = T \left[\frac{d}{U_{rel}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \right] \quad (2.7)$$

เมื่อ	$T = 6.0 \times (We - 12)^{-0.25}$	$(12 \leq We \leq 18)$
	$T = 2.45 \times (We - 12)^{0.25}$	$(18 \leq We \leq 45)$
	$T = 14.1 \times (We - 12)^{-0.25}$	$(45 \leq We \leq 351)$
	$T = 0.766 \times (We - 12)^{0.25}$	$(351 \leq We \leq 2670)$
	$T = 5.5$	$(We > 2670)$

Hsiang และ Faeth [21, 22] ได้ทำการศึกษาการเปลี่ยนแปลงรูปร่างและการแตกตัวภายใน shock wave และให้ข้อสรุปว่า ค่าวิกฤตการแตกตัวสำหรับ bag, multimode และ shear breakup มีค่าเท่ากับ $We = 13, 35$ และ 80 ตามลำดับ และเวลาการแตกตัวมีค่าเป็น

$$\tau = \frac{5d}{\left[1 - \frac{Oh}{7}\right] U_{rel}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.8)$$

ต่อมา Liu และ Reitz [23] ได้ทำการทดลองศึกษาการแตกตัวโดยใช้เครื่องมือที่ทันสมัยมากยิ่งขึ้นคือ Laser Diffraction Particle Analysis (LDPA) และ Phase Doppler Particle Analysis (PDPA) และให้ผลการทำนายที่คล้ายคลึงกันคือ

1. bag breakup ($12 < We < 80$)
2. stripping (shear) breakup ($80 < We < 350$)
3. catastrophic (surface wave) breakup ($We > 350$)

Dai และ Faeth [24] ทำการทดลองภายใน shock-wave เช่นกัน และผลที่ได้คือ

1. bag breakup ($We < 18$)
2. multimode breakup ($18 < We < 80$)
3. shear breakup ($80 < We < 800$)
4. catastrophic breakup ($We > 800$)

สำหรับ bag breakup จะเริ่มการแตกตัวเมื่อ $\tau/\tau^* = 4.0$ และสิ้นสุดเมื่อ $\tau/\tau^* = 5.0$ ซึ่ง ณ เวลานี้ จะเป็นจุดเริ่มต้นของ shear breakup และกระบวนการ shear breakup จะสิ้นสุดที่ $\tau/\tau^* = 7.5$ โดยที่

$$\tau^* = \frac{d}{U_{rel}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.9)$$

Reitz และ Diwaker [25] ได้ระบุไว้ว่าละอองสามารถแตกตัวได้ทั้งแบบ bag หรือ shear (stripping) ขึ้นอยู่กับค่า Weber number ถ้า $We \geq 12$ จะเกิดการแตกตัวแบบ bag และสำหรับแบบ shear จะเกิดขึ้นเมื่อ $Ra \geq 0.5$ โดยเวลาการแตกตัวสำหรับแบบ bag สามารถหาได้จาก

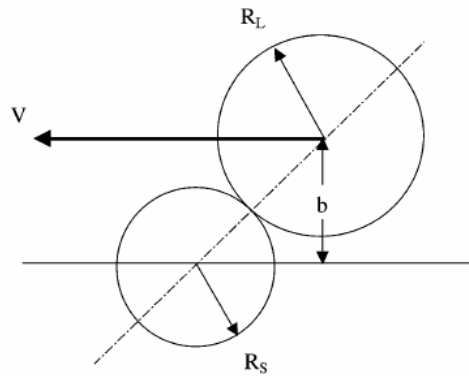
$$\tau_b = \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{\rho_l d^3}{\sigma}} \quad (2.10)$$

ขณะที่สำหรับแบบ shear คำนวณได้จาก

$$\tau_s = \frac{10d}{U_{rel}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.11)$$

2.2.3 การชนกันของละออง (Droplet Collision)

การชนกันระหว่างละอองเป็นกระบวนการที่ซับซ้อน ซึ่งขึ้นอยู่กับลักษณะทางกายภาพของละออง ได้แก่ ความเร็ว ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง ตัวแปรไร้มิติการชน (non-dimensional impact parameter) ความตึงผิวของเหลว ความหนาแน่นและความหนืดของทั้งของเหลวและก๊าซแวดล้อม นอกจากนี้ ความดัน น้ำหนักโมเลกุล และโครงสร้างโมเลกุล ก็มีอิทธิพลต่อการชนด้วย ตัวแปรไร้มิติการชน (B) ซึ่งนิยามจากระยะห่างระหว่างเส้นศูนย์กลางของละอองหนึ่ง ไปยังเส้นขนานกับทิศทางของเวกเตอร์ความเร็วสัมพัทธ์ซึ่งวางตัวบนเส้นศูนย์กลางของละอองอีกก้อนหนึ่ง ดังแสดงในรูปที่ 2.4



รูปที่ 2.4 แผนร่างแสดงการนิยามตัวแปรไร้มิติการชน ($B = \frac{b}{R_S + R_L}$)

O'Rourke และ Bracco [26] เป็นกลุ่มนักวิจัยแรกที่เสนอแบบจำลองการชนกันของละออง ซึ่งประกอบไปด้วย การถ่ายเทมวล โมเมนตัม และพลังงาน รวมถึงการรวมตัวกันของละออง (coalescence) หลังจากการชน ซึ่งมักปรากฏในบริเวณกลุ่มละอองดีเซลที่มีความหนาแน่นสูงของสเปรย์ หลังจากนั้นกลุ่มนักวิจัย Kuo และ Bracco [27] Bracco [28] และ Reitz [29] ได้นำแบบจำลองนี้ไปทดสอบความแม่นยำ สำหรับการคำนวณการชนกัน ละอองที่อยู่ภายในเซลล์ที่คำนวณ จะถูกสมมุติให้มีการกระจายตัวที่สม่ำเสมอ ดังนั้นความน่าจะเป็น P_n สำหรับการชน n ครั้งระหว่างละอองภายในเซลล์ที่คำนวณในหนึ่งขั้นเวลาคำนวณ สามารถประมาณได้จากทฤษฎีการกระจายของ Poisson ซึ่งแสดงได้ดังนี้

$$P_n = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!} \quad (2.12)$$

เมื่อ $\bar{n}$ คือค่าเฉลี่ยการชนกันของละออง ซึ่งสามารถหาได้จาก

$$\bar{n} = \frac{c\pi}{V_{cell}} (r_S + r_L)^2 U_{rel} \Delta t \quad (2.13)$$

เมื่อ r_s , r_L , และ Δt คือค่ารัศมีเฉลี่ยของกลุ่มละอองขนาดเล็กกว่า ค่ารัศมีเฉลี่ยของกลุ่มละอองขนาดใหญ่กว่า และชั้นเวลาคำนวณ ตามลำดับ จำนวนละอองของกลุ่มละอองที่มีรัศมีเล็กกว่าให้มีค่าเท่ากับ c หลังจากนั้นตัวแปรสุ่มซึ่งมีค่าอยู่ระหว่าง 0 ถึง 1 ถูกนำมาใช้เพื่อพิจารณาว่า การชนจะเกิดขึ้นหรือไม่ จากข้อมูลเชิงสถิติ จะถูกนำไปใช้ในการคำนวณหาค่าตัวแปรการชน ถ้าตัวแปรการชนมีค่าน้อยกว่าค่าตัวแปรการชนวิกฤต การชนที่เกิดขึ้นจะเป็นแบบชนแล้วรวมกัน (coalescence) ในทำนองตรงกันข้าม การชนจะเป็นแบบเฉียด (grazing collision) โดยที่ค่าตัวแปรการชนวิกฤตนี้จะขึ้นอยู่กับรัศมีเฉลี่ยของกลุ่มละออง ความเร็วสัมพัทธ์ระหว่างกลุ่มละออง และสัมประสิทธิ์ความตึงผิวของเหลว

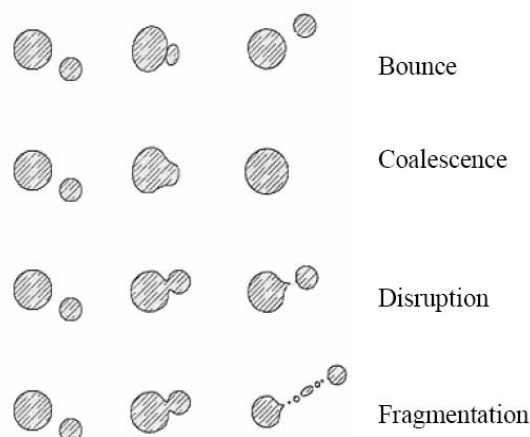
จากปรากฏการณ์การชนของละออง Orme [30] สามารถจำแนกลักษณะการชนออกได้เป็น 4 ประเภทหลัก ๆ ดังแสดงในรูปที่ 2.5 คือ

-*Bounce*: เมื่อพลังงานของการชนไม่สูงพอที่จะชนะชั้นฟิล์มของก๊าซ จึงทำให้ละอองทั้งสองผลัดออกจากกัน โดยที่ขนาดของละอองไม่เปลี่ยนแปลง แต่ความเร็วจะเปลี่ยนแปลง

-*Coalescence*: เมื่อพลังงานของการชนสูงพอที่จะชนะชั้นฟิล์มของก๊าซ แต่ไม่สูงพอที่จะชนะแรงตึงผิวของละอองเพื่อสร้างชั้นผิวใหม่ จึงทำให้เกิดการรวมตัวของละอองที่ชนกัน และมีขนาดใหญ่ขึ้น โดยที่โมเมนตัมและมวลของละอองคงที่

-*Disruption*: เมื่อพลังงานของการชนนั้นสูงมากพอที่จะชนะทั้งชั้นฟิล์มของก๊าซและแรงตึงผิวของละอองเพื่อสร้างชั้นผิวใหม่ ทำให้เกิดละอองใหม่ขึ้น โดยที่ขนาดและจำนวนของละอองยังเท่าเดิม แต่โมเมนตัมบางส่วนสูญเสียไปในระหว่างการชน

-*Fragmentation*: เมื่อพลังงานของการชนนั้นอยู่ในระดับที่สูงมาก ทำให้ภายหลังการชนเกิดละอองขนาดเล็กจำนวนมาก

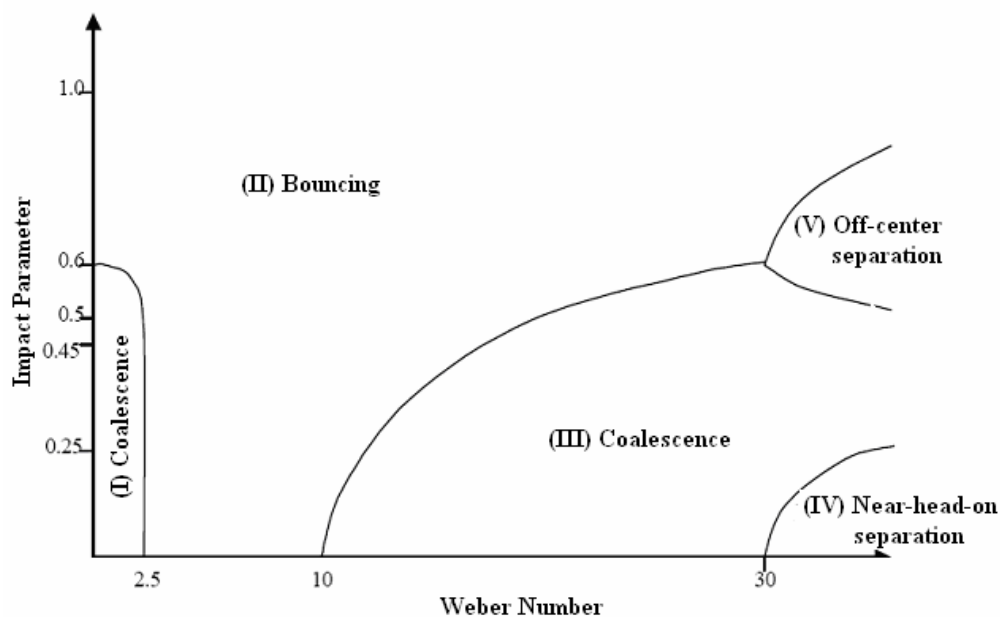


รูปที่ 2.5 ผลการชนของละอองที่เป็นไปได้ (จาก Orme [30])

แผนผังซึ่งแสดงถึงความเป็นไปได้ของผลที่เกิดจากการชนของละออง ได้ถูกนำเสนอโดยนักวิจัยจำนวนมาก [31-33] แต่ที่เป็นที่นิยมใช้ก็คือแผนผังของ Qian และ Law [34] ที่ได้นำผลการ

ทดลองของ Jiang และคณะ [35] มาทำการศึกษาเพิ่ม เพื่อขยายผลการศึกษาพฤติกรรมการณ์ให้กว้างยิ่งขึ้นของทั้งน้ำและเชื้อเพลิงไฮโดรเจนหลายชนิด และได้นำผลการศึกษามาแสดงในรูปของแผนผังของชนิดการณ์ โดยขึ้นอยู่กับตัวแปรไร้มิติคือ Weber number และตัวแปรการณ์ ดังแสดงในรูปที่ 2.6

ในบริเวณ I ความเร็วสัมผัสของละอองนั้นค่อนข้างต่ำจึงทำให้มีเวลาเพียงพอสำหรับการรวมตัวของละออง ในบริเวณ II ความเร็วสัมผัสของละอองนั้นสูงขึ้น เพียงพอที่จะชนะชั้นฟิล์มของก๊าซ ประกอบกับเวลาปฏิสัมพันธ์ที่สั้นสำหรับการรวมตัว ดังนั้นการผลัดออกจากรวมตัวกันจึงเกิดขึ้นในบริเวณนี้ สำหรับในบริเวณ III จะเกี่ยวข้องกับการรวมตัวกันของละอองภายหลังการชน ซึ่งจะตรงกันข้ามกับในบริเวณ I กล่าวคือ การรวมตัวกันเกิดขึ้นเนื่องจากความเร็วสัมผัสที่สูงพอ ถ้าพลังงานจลน์ของการชนสูงมากกว่าขีดจำกัดของการรวมตัวกัน จะส่งผลให้เกิดการแยกจากกัน ก่อให้เกิดการแตกตัวเป็นละออง 2 ละอองหรือมากกว่านั้น โดยที่การแยกจากกัน (separation) สามารถแยกย่อยออกเป็นสองบริเวณคือ การแยกแบบ near head-on (บริเวณ IV) ซึ่งละอองพุ่งเข้าชนกันเกือบจะอยู่ในแนวศูนย์กลางเดียวกัน (ตัวแปรการณ์มีค่าน้อยมาก) และแบบ off-center (บริเวณ V) ซึ่งละอองเกิดการชนกันแบบเฉียง โดยหลังจากการชน ละอองจะยุบตัวเล็กน้อย ก่อนที่จะขยายตัวใหญ่ขึ้น และแยกจากกัน สำหรับการชนแบบ near head-on ส่วนการชนแบบ off-center ละอองจะบิดเบี้ยวแล้วแยกออกจากกัน ซึ่งผลจากการชนแบบแยกจากกันนี้ (บริเวณ IV และ V) อาจจะก่อให้เกิดละอองใหม่ 2 ละอองหรือมากกว่านั้นก็ได้



รูปที่ 2.6 แผนภาพขอบเขตการณ์ของ Qian และ Law [34]

2.2.4 การกระจายตัวของละออง (Droplet Distribution)

โดยทั่วไปแล้ว การกระจายตัวของขนาดละอองจะนำเสนอในรูปของเปอร์เซ็นต์สะสมของจำนวนละออง (n), พื้นที่ผิว (A), หรือปริมาตร (V) เป็นฟังก์ชันกับขนาดของละออง (D) แต่อย่างไรก็ตาม สำหรับในงานออกแบบทางวิศวกรรม ค่าเฉลี่ยของขนาดละอองสเปรย์นั้นมีความสำคัญมากกว่า การทราบรูปร่างการกระจายตัวของละออง ซึ่งจะเป็นตัวแทนที่ใช้ในการคำนวณต่าง ๆ ดังนั้นเส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยของละออง D_{pq} สามารถนิยามได้จาก

$$(D_{pq})^{p-q} = \frac{\int_{D_0}^{D_c} D^p n(D) dD}{\int_{D_0}^{D_c} D^q n(D) dD} \quad (2.14)$$

เมื่อ

$$n(D) = \frac{dn}{dD} \quad (2.15)$$

คือการกระจายตัวของจำนวนละออง, dn คือจำนวนละอองที่มีขนาดระหว่าง D ถึง $D+\Delta D$, และ n คือจำนวนละอองทั้งหมด

โดยทั่วไปแล้ว เส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยที่ใช้ในการสเปรย์เชื้อเพลิงสำหรับเผาไหม้นั้น จะนิยมใช้ Sauter Mean Diameter (SMD หรือ D_{32}) เป็นตัวแทน ซึ่งเป็นอัตราส่วนระหว่างปริมาตรของละอองสเปรย์ต่อพื้นที่ผิวของละอองสเปรย์

$$SMD = \frac{\int_{D_0}^{D_c} D^3 n(D) dD}{\int_{D_0}^{D_c} D^2 n(D) dD} \quad (2.16)$$

ในบางงานวิจัย เช่น Yule และคณะ [36] จะใช้เส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยเชิงปริมาตร, $D_{V,0.5}$, ซึ่งนิยามจาก

$$\int_{D_0}^{D_{V,0.5}} V(D) dD = 0.5 \quad (2.17)$$

ในความเป็นจริงแล้ว สเปรย์จะประกอบไปด้วยละอองจำนวนมากที่มีขนาดที่แตกต่างกัน (polydisperse spray) ซึ่งการกระจายตัวของขนาดละอองสเปรย์จะแปรเปลี่ยนไปตามหัวฉีด

ของเหลว และสภาวะการทำงาน มีความพยายามอย่างมากที่จะสร้างสมการเชิงประจักษ์เพื่อใช้ในการทำนายการกระจายตัวของละอองสเปรย์นี้ อย่างไรก็ตาม ไม่มีสมการใดที่สามารถทำนายได้ทั่วกันในทุกด้าน สมการเชิงประจักษ์ที่เป็นที่นิยมใช้กันในการทำนายการกระจายตัวของละอองสเปรย์ ได้แก่ Nukiyama-Tanasawa distribution, the Rosin-Rammler distribution, the Modified Rosin-Rammler distribution และ Gamma distribution [37].

สมการเชิงประจักษ์ที่นิยมมากที่สุด ในการทำนายการกระจายตัวของละอองสเปรย์คือ การกระจายตัวสะสมเชิงปริมาตรซึ่งถูกนำเสนอโดย Rosin และ Rammler [38] ซึ่งสมการ Rosin-Rammler volume distribution แสดงไว้ดังนี้

$$V(r) = \left(\frac{\alpha_R}{r_R^{\alpha_R}} \right) r^{\alpha_R - 1} \exp \left(- \left(\frac{r}{r_R} \right)^{\alpha_R} \right) \quad (2.18)$$

โดยลักษณะการกระจายตัวของสมการ Rosin-Rammler distribution จะขึ้นอยู่กับสองตัวแปร คือ ค่าการกระจาย (dispersion parameter, α_R) ซึ่งสัมพันธ์กับความกว้างของการกระจายตัว ถ้าค่าการกระจายยิ่งน้อย ค่าความกว้างของการกระจายตัวยิ่งมากขึ้น การกระจายของสเปรย์โดยส่วนใหญ่จะมีค่าการกระจายอยู่ระหว่าง 2 ถึง 4 ส่วนอีกตัวแปรหนึ่งคือตัวแปรขนาด (size parameter, r_R) ซึ่งมีค่าเท่ากับ $r_{V, 0.632}$, กล่าวคือรัศมีที่มีปริมาตรของละออง 63.2% ของปริมาตรของเหลวทั้งหมด

สมการการกระจายตัว Nukiyama-Tanasawa [39] ได้ถูกสร้างขึ้นมาเพื่อใช้ทำนายการกระจายตัวของเครื่องทำละอองนิวแมติก ซึ่งแสดงได้ดังนี้

$$\frac{dn}{dD} = aD^p \exp \left(-(bD)^q \right) \quad (2.19)$$

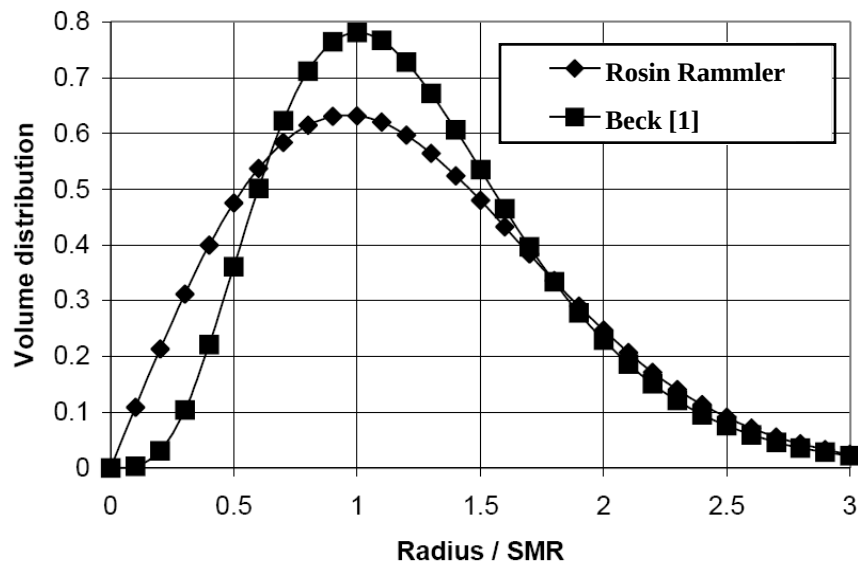
เมื่อ a , b , p และ q คือค่าตัวแปรคงที่ เนื่องจากจำนวนตัวแปรที่เพิ่มขึ้นในสมการเชิงประจักษ์ ดังนั้นความถูกต้องในการทำนายการกระจายตัวก็ย่อมสูงขึ้นตาม แต่อย่างไรก็ตาม การหาค่าของตัวแปรที่เหมาะสมก็มีความยากลำบากและซับซ้อนมาก

Boulderston และคณะ [40]; และ Chin และ Lefebvre [41] ได้แนะนำว่า สมการเชิงประจักษ์ Rosin-Rammler จะทำนายการกระจายตัวเชิงปริมาตรได้ดี แต่ทำนายการกระจายตัวของจำนวนละอองได้ไม่แม่นยำ ส่วนสมการเชิงประจักษ์ Nakiyama-Tanasawa จะให้ผลการทำนายการกระจายตัวของจำนวนละอองได้ดี แต่ทำนายได้ไม่แม่นยำสำหรับการกระจายตัวเชิงปริมาตร ขณะที่การกระจายตัวเชิงปริมาตรนั้นเทียบเท่ากับการกระจายตัวเชิงมวล (ถ้าพิจารณาว่า ละอองของสเปรย์มีลักษณะเป็นทรงกลม) ดังนั้นสมการที่สามารถทำนายการกระจายตัวเชิงปริมาตรได้แม่นยำจะมีประโยชน์ในทางปฏิบัติมากกว่า

สมการการกระจายตัว Gamma ซึ่งถูกนำมาใช้โดย Beck [5] มีลักษณะการกระจายตัวจะใกล้เคียงกับสมการ Rosin-Rammler ที่มีค่าการกระจายตัวเท่ากับ 2 ซึ่งเป็นค่าที่นิยมใช้กันอย่างแพร่หลาย [42] โดยที่สมการ Gamma ที่ใช้แสดงการกระจายตัวของจำนวนละอองมีรูปแบบดังนี้

$$n(r) = \frac{16r}{r_{32}^2} \exp\left(-\frac{4r}{r_{32}}\right) \quad (2.20)$$

เมื่อ r_{32} คือ Sauter mean radius เมื่อนำสมการการกระจายตัวเชิงปริมาตร Rosin-Rammler มาเปรียบเทียบกับสมการ Gamma ซึ่งนำเสนอโดย Beck [5] จะได้ผลดังแสดงในรูปที่ 2.7 จะเห็นว่า สมการ Gamma จะทำนายได้ดีกว่าสมการ Rosin-Rammler ในช่วงละอองขนาดเล็ก และทำนายได้สูงกว่าในช่วงละอองมีขนาดกลาง และใกล้เคียงกันมากสำหรับละอองขนาดใหญ่



รูปที่ 2.7 การเปรียบเทียบการกระจายตัวของสมการ Rosin-Rammler ที่มีค่าการกระจายตัวเท่ากับ 2 กับสมการของ Beck [5]

2.2.5 การต้านของละออง (Droplet Drag)

แรงต้านเกิดขึ้นเนื่องจากการเคลื่อนที่ของอนุภาคผ่านก๊าซแวดล้อม ซึ่งแรงต้านดังกล่าวนี้จะมีผลต่อความ เร่งของละออง ดังนั้นความเร็วของละอองที่ตำแหน่งใด ๆ ซึ่งเป็นฟังก์ชันกับเวลาดังนี้

$$\frac{dU_l}{dt} = \frac{3}{8} C_D \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{U_{rel} |U_{rel}|}{r} \quad (2.21)$$

เมื่อ C_D คือสัมประสิทธิ์แรงต้าน ซึ่งโดยปกติแล้วจะเป็นฟังก์ชันกับ Reynolds number ของละออง สำหรับการไหลที่ $Re \leq 10^3$ ค่าสัมประสิทธิ์แรงต้านของ Stokes สำหรับทรงกลมสามารถหาได้จาก

$$C_D = \frac{24}{Re} \quad (2.22)$$

โดยกฎของ Stokes จะเหมาะสมกับการไหลที่มีค่า Reynolds number ต่ำ ๆ ซึ่งแรงหนืดจะมีอิทธิพลมาก สำหรับการไหลที่ Reynolds number สูงขึ้น ซึ่งแรงเฉื่อยจะเข้ามามีบทบาทแทน จึงทำให้สัมประสิทธิ์แรงต้านของ Stokes ทำนายได้ไม่แม่นยำ ดังนั้นนักวิจัยจำนวนมากจึงพยายามนำเสนอสมการเชิงประจักษ์ที่เหมาะสม Putnam [43] ได้เสนอสมการเชิงประจักษ์ที่ง่ายต่อการอินทิเกรตและยังคงทำนายได้แม่นยำ ซึ่งสมการนี้ได้ถูกนำไปใช้อย่างแพร่หลาย [25, 44, 45].

$$C_D = \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{1}{6} Re^{2/3}\right) \quad (2.23)$$

Clift และคณะ [46] ก็ได้นำเสนอสมการเชิงประจักษ์ที่มีลักษณะใกล้เคียงกันดังนี้

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) \quad (2.24)$$

ซึ่งได้ถูกนำไปใช้โดย Khaleghi [47] และ Park [48] นอกเหนือจากนั้น Yuen และ Chen [49] ก็ได้พัฒนาสมการเช่นกัน โดยมีค่าคงที่ที่แตกต่างกันเล็กน้อย

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.667}) \quad (2.25)$$

สำหรับการไหลที่มี $Re > 10^3$ ค่าสัมประสิทธิ์แรงต้านจะลู่เข้าค่าคงที่ ซึ่งมีค่าเท่ากับ 0.424

2.2.6 การถ่ายเทความร้อนและมวล (Heat and Mass Transfer)

การระเหยของละอองเกิดขึ้นเนื่องจาก การถ่ายเทความร้อนและมวลระหว่างละอองของเหลวกับก๊าซแวดล้อม พลังงานที่ละอองได้รับจากก๊าซแวดล้อมจะทำให้ ละอองมีอุณหภูมิที่สูงขึ้นควบคู่ไปกับการระเหยของมวลละอองเหลว การเปลี่ยนแปลงสถานะจากของเหลวเป็นก๊าซจะเกิดขึ้นที่ผิวของละอองและสามารถอธิบายปรากฏการณ์ดังกล่าวได้ ด้วยการใส่สมการสมดุลความร้อนและมวล ของทั้งก๊าซและของเหลวในบริเวณผิวสัมผัสทั้งสอง โดยทั่วไปแล้ว ในการวิเคราะห์จะสมมุติว่า กระบวนการที่เกิดขึ้นในบริเวณผิวสัมผัสมีสภาวะกึ่งคงตัว (quasi-steady) และอิทธิพลจากการระเหย

ของละอองข้างเคียงมีผลน้อยมาก สำหรับแบบจำลองการระเหยอย่างง่าย จะสมมุติให้ค่าการนำความร้อนของละอองมีค่าสูงมาก ซึ่งส่งผลให้อุณหภูมิภายในละอองทุกตำแหน่งมีค่าคงที่ ซึ่งจะมี ความคลาดเคลื่อนสูงขึ้น เมื่อขนาดของละอองใหญ่ขึ้น แต่อย่างไรก็ตาม เนื่องจากความง่ายของ แบบจำลอง isothermal นี้ จึงได้ถูกนำไปประยุกต์อย่างแพร่หลาย [50, 51] แต่อย่างไรก็ตาม เพื่อให้ สามารถทำนายได้แม่นยำมากยิ่งขึ้นและใกล้เคียงกับความเป็นจริงมากขึ้น การคำนึงถึงการกระจาย ตัวของอุณหภูมิภายในละอองก็ได้ถูกนำมาพิจารณาในแบบจำลองซึ่งซับซ้อนมากยิ่งขึ้น โดยทั่วไป แล้ว จะสมมุติรูปร่างการกระจายตัวของอุณหภูมิภายในละอองเป็นพาราโบลา [52, 53] เนื่องจากตัว แปรที่ใช้ในการวิเคราะห์เพิ่มมากขึ้น ความถูกต้องแม่นยำก็ย่อมสูงขึ้น แต่ก็ส่งผลต่อเวลาที่ใช้ในการ คำนวณที่ยาวนานขึ้น นอกจากนี้ในบางแบบจำลองได้นำผลของการแผ่รังสีความร้อนเข้ามารวม พิจารณาด้วย

พิจารณาการระเหยของละอองเดี่ยว อัตราการเปลี่ยนแปลงของละอองเดี่ยวในสภาวะก๊าซ แวดล้อมหนึ่งสามารถคำนวณได้จาก

$$\frac{dY_F}{dr} = -\frac{RT}{D_C P} m_F (1 - Y_F) \quad (2.26)$$

เมื่อ m_F , Y_F , และ D_C คืออัตราการแพร่เชิงมวลต่อหน่วยพื้นที่ (mass rate of diffusion per unit area) สัดส่วนเชิงมวลของไอเชื้อเพลิง และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ ตามลำดับ ทำการสมมูลมวล ของไอเชื้อเพลิงที่ระยะรัศมีใด ๆ จะได้

$$\frac{dY_F}{dr} = -\frac{RT}{D_C P} m_{F_s} \left(\frac{r_s}{r} \right)^2 (1 - Y_F) \quad (2.27)$$

หลังจากนั้น ทำการอินทิเกรตสมการข้างต้น โดยที่เงื่อนไขขอบเขตเป็นดังนี้

$$\begin{aligned} r = r_s & \quad T = T_s & \quad Y_F = Y_{F_s} \\ r = r_\infty & \quad T = T_\infty & \quad Y_F = 0 \end{aligned}$$

จะได้

$$-\ln(1 - Y_{F_s}) = \frac{RT}{D_C P} m_{F_s} r_s \quad (2.28)$$

จากงานวิจัยของ Spalding [54] ค่าตัวเลขการถ่ายเทมวล (mass transfer number, B_M) ได้ ให้นิยามไว้ดังนี้

$$B_M = \frac{Y_{F_s} - Y_{F_\infty}}{1 - Y_{F_s}} \quad (2.29)$$

ดังนั้น อัตราการการถ่ายเทมวลจึงมีค่าเท่ากับ

$$\dot{m}_F = 4\pi r_s^2 m_{F_s} = 4\pi r_s D_C \rho_g \ln(1 + B_M) \quad (2.30)$$

ในทำนองคล้าย ๆ กัน สมการพลังงานสำหรับละอองเดี่ยวสามารถคำนวณได้จาก

$$r_s^2 m_{F_s} C_{p_g} \frac{dT}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 k_g \frac{dT}{dr} \right) \quad (2.31)$$

ทำการอินทิเกรตสมการข้างต้นเทียบกับ r โดยมีเงื่อนไขขอบเขตเพิ่มเติมคือ $k_g \left(\frac{dT}{dr} \right)_s = m_{F_s} L$ ซึ่งได้ผลลัพธ์ดังนี้

$$r_s^2 m_{F_s} C_{p_g} (T - T_s + \frac{L}{C_{p_g}}) = r^2 k_g \frac{dT}{dr} \quad (2.32)$$

ทำการจัดเรียงสมการข้างต้นใหม่ แล้วทำการอินทิเกรตอีกครั้ง ซึ่งจะได้ผลดังนี้

$$\frac{r_s m_{F_s} C_{p_g}}{k_g} = \ln \left(\frac{C_{p_g} (T_\infty - T_s)}{L} + 1 \right) \quad (2.33)$$

จากงานวิจัยของ Spalding [54] ค่าตัวเลขการถ่ายเทความร้อน (heat transfer number, B_T) นิยามได้จากอัตราส่วนเอนทัลปีที่มีในก๊าซแวดล้อมต่อความร้อนที่ต้องการในการระเหยเชื้อเพลิงเหลว,

$$B_T = \frac{C_{p_g} (T_\infty - T_s)}{L} \quad (2.34)$$

ดังนั้น อัตราการระเหยที่ได้จากสมการพลังงานสามารถแสดงได้ดังนี้

$$\dot{m}_F = 4\pi r_s \left(\frac{k}{C_p} \right)_g \ln(1 + B_T) \quad (2.35)$$

ในสภาวะก๊าซแวดล้อมมีการเคลื่อนไหว สมการแสดงอัตราการถ่ายเทความร้อนและมวล จำเป็นจะต้องถูกดัดแปลง โดยการคูณด้วยค่าแก้ไขเนื่องจากการพา ซึ่งอิทธิพลการพาจะช่วยให้ อัตราการถ่ายเทมีค่าที่เพิ่มขึ้น ค่าแก้ไขดังกล่าวได้ถูกเสนอโดย Faeth [55] ดังนั้นอัตราการระเหย สำหรับกรณีที่มีการพาเข้ามาเกี่ยวข้องจะมีรูปแบบดังนี้

$$\dot{m}_F = 2\pi r_s D_C \rho_g Sh \ln(1 + B_M) \quad (2.36)$$

และ

$$\dot{m}_F = 2\pi r_s \left(\frac{k}{Cp} \right)_g Nu \ln(1 + B_T) \quad (2.37)$$

จากความสัมพันธ์ของอัตราการระเหยของไอเชื้อเพลิง (สมการที่ 2.36 และ 2.37) ตัวเลขการถ่ายเทความร้อนสามารถแสดงในรูปของตัวเลขการถ่ายเทมวลได้ดังนี้

$$B_T = (1 + B_M)^{1/Le} - 1 \quad (2.38)$$

เมื่อ ค่า Nusselt number ($Nu = hd/k_g$) และ Sherwood number ($Sh = h_m d/D_C$) สามารถหาได้จากสมการเชิงประจักษ์สำหรับการถ่ายเทความร้อนและมวลรอบวัตถุทรงกลม โดยที่ค่าทั้งสองนี้ จะมีเท่ากับค่าคงที่ 2 ในกรณีที่ไม่มีพาเข้ามาเกี่ยวข้อง จากงานวิจัยของ Ranz และ Marshall [56, 57] ได้ให้ความสัมพันธ์สำหรับกรณีการพาผ่านวัตถุทรงกลมไว้ดังนี้

$$Nu = 2 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (2.39)$$

$$Sh = 2 + 0.6 Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (2.40)$$

เมื่อ Pr คือ Prandtl number ($Pr = Cp_g \mu_g / k_g$) และ Sc คือ Schmidt number ($Sc = \nu / D_C$) นอกจากนี้ Abramzon และ Sirignano [58] ได้นำเสนอสหสัมพันธ์ขึ้น โดยคำนึงถึงอิทธิพลของฟิล์ม ซึ่งจะต้านทานการถ่ายเทความร้อนและมวลระหว่างละอองและก๊าซแวดล้อม ดังนั้นค่า Nusselt และ Sherwood numbers จึงถูกดัดแปลงเป็น

$$Nu = 2 + \frac{Nu_0 - 2}{(1 + B_T)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T}} \quad (2.41)$$

$$Sh = 2 + \frac{Sh_0 - 2}{(1 + B_M)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M}} \quad (2.42)$$

โดยปกติแล้ว Sh_0 และ Nu_0 จะคำนวณจากสหสัมพันธ์ของ Ranz-Marshall จากการศึกษาโดย Abramzon และ Sirignano [58] ได้ให้ความเห็นว่า สหสัมพันธ์ของ Ranz-Marshall จะทำนายค่าอัตราการถ่ายเทได้สูงเกินในช่วง Reynolds number ต่ำ ๆ ($Re < 10$)

ในช่วงแรกของการระเหยของละอองซึ่งเป็นช่วงของการให้ความร้อน (heating-up period) โดยที่ความร้อนส่วนใหญ่ที่ได้จากกระบวนการนี้ เกือบทั้งหมดจะใช้ในการเพิ่มอุณหภูมิให้กับละออง ซึ่งส่งผลให้เกิดการถ่ายเทมวลที่น้อยมาก จนกระทั่งอุณหภูมิผิวของละอองเข้าใกล้อุณหภูมิกระเปาะเปือกและอุณหภูมิภายในละอองเริ่มเข้าสู่สภาวะสมดุล ซึ่งความดันไอเชื้อเพลิงจะมีค่าเท่ากับความดันรวมของก๊าซ แวลลุ่ม และการกระจายตัวของอุณหภูมิภายในละอองจะสม่ำเสมอ เมื่อสิ้นสุดกระบวนการให้ความร้อน อัตราการถ่ายเทมวลจะเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว โดยในกระบวนการให้ความร้อน ความร้อนที่ถ่ายเทจากก๊าซแวลลุ่มให้กับละอองสามารถคำนวณได้จาก

$$Q_{in} = \pi d^2 h (T_\infty - T_s) \quad (2.43)$$

จากงานวิจัยของ Faeth [55] ค่า Nusselt number ได้ถูกดัดแปลงเป็น

$$Nu = \frac{hd}{k_g} = Nu_0 \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (2.44)$$

ดังนั้นความร้อนที่ถ่ายเทเนื่องจากการพาสำหรับละอองเดี่ยวสามารถแสดงได้เป็น

$$Q_{in} = 2\pi r_s k_g (T_\infty - T_s) Nu_0 \frac{\ln(1 + B_M)^{1/Le}}{(1 + B_M)^{1/Le} - 1} \quad (2.45)$$

และความร้อนที่ใช้สำหรับการระเหยละอองเชื้อเพลิงสามารถหาได้จาก

$$Q_{evap} = \dot{m}_F L = 2\pi r_s D_C \rho_g Sh \ln(1 + B_M) L \quad (2.46)$$

ดังนั้น ความร้อนที่ใช้ในกระบวนการให้ความร้อนจึงหาได้จาก

$$Q_{heat} = Q_{in} - Q_{evap} \quad (2.47)$$

สำหรับคุณสมบัติต่าง ๆ ทางกายภาพที่ใช้ในการคำนวณ เช่น ค่าการนำความร้อน ค่าความจุความร้อน นั้นจะขึ้นอยู่กับอุณหภูมิของชั้นฟิล์มไอเชื้อเพลิงซึ่งปกคลุมรอบละออง ซึ่งโดยทั่วไปแล้วอุณหภูมิของชั้นฟิล์มนี้จะสามารถประมาณได้จากกฎหนึ่งส่วนสาม (one-third rule) ของ Sparrow และ Gregg [59] ซึ่งนิยามไว้ดังนี้

$$T_f = T_s + \frac{T_\infty - T_s}{3} \quad (2.48)$$

นอกจากนี้ ยังมีนักวิจัยบางท่านพยายามนำเสนออุณหภูมิของชั้นฟิล์มในรูปแบบอื่น [47] แต่อย่างไรก็ตามกฎหนึ่งส่วนสามก็เป็นที่ยอมรับกันอย่างแพร่หลายในการประมาณค่าอุณหภูมิของชั้นฟิล์ม

2.3 การเผาไหม้ (Combustion)

2.3.1 กระบวนการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้ (Auto-ignition and Combustion Processes)

กลไกการเผาไหม้ของสเปรย์นั้นมีความสลับซับซ้อน โดยกระบวนการเริ่มต้นจากเชื้อเพลิงเหลวถูกฉีดเข้าไปในห้องเผาไหม้ที่มีอุณหภูมิและความดันที่สูง ทำให้เชื้อเพลิงเหลวเกิดการแตกตัวเป็นละอองเชื้อเพลิง ในสภาวะแวดล้อมที่มีอุณหภูมิสูงจะทำให้ละอองเชื้อเพลิงเกิดการระเหยกลายเป็นไอและจะผสมกับอากาศร้อน เมื่อมีการผสมกันของเชื้อเพลิงและอากาศ ปฏิกริยาเคมีก็ค่อย ๆ เริ่มเกิดขึ้น แต่เนื่องจากในช่วงแรก อัตราการใช้ไอเชื้อเพลิงในการเกิดปฏิกริยาเคมีค่อนข้างช้า จึงทำให้อุณหภูมิค่อนข้างคงที่ โดยปฏิกริยาเคมีส่วนใหญ่ในช่วงแรก จะเป็นการสลายพันธะโมเลกุลขนาดใหญ่ให้มีขนาดที่เล็กลง เมื่อโมเลกุลขนาดเล็กมีจำนวนมากพอ ปฏิกริยาเคมีที่เกิดก็จะมีควมรุนแรงมากขึ้น ส่งผลให้อุณหภูมิมีค่าสูงขึ้น และอุณหภูมิที่สูงจะเป็นปัจจัยสำคัญที่เร่งอัตราการเกิดปฏิกริยาเคมีให้สูงขึ้น จนกระทั่งเกิดการจุดระเบิดเอง (auto-ignition หรือ self-ignition)

จากการรวบรวมงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการจุดระเบิดเองในเครื่องยนต์ดีเซลพบว่า มีการให้นิยามเกี่ยวกับการจุดระเบิดเองที่หลากหลายแตกต่างกันขึ้นอยู่กับเกณฑ์ที่ใช้พิจารณา เช่น ความดันที่เปลี่ยนแปลงภายในห้องเผาไหม้ ประกายแสงที่เปล่งออกมา อุณหภูมิที่เพิ่มสูงขึ้น ปริมาณเชื้อเพลิงที่ลดลงภายในห้องเผาไหม้ และอัตราการเปลี่ยนแปลงความชันของความร้อนที่ปลดปล่อยออกมา เป็นต้น [1, 60-62] แต่ในปัจจุบันนี้ จะนิยมใช้เพียงความดันที่เพิ่มขึ้นเนื่องจากการเผาไหม้ [14, 63] และแสงที่เปล่งออกมา [14, 63-67] เป็นตัวระบุการจุดระเบิดเอง จากการรายงานของ Crua [63] ความดันที่เพิ่มขึ้นเนื่องจากการเผาไหม้นั้น ตรวจพบก่อนที่จะเกิดประกายเปลวไฟ ซึ่งผลที่ได้ไม่สอดคล้องกับรายงานของ Heywood [1] และ Akiyama และคณะ [14] แต่อย่างไรก็ตาม ผลที่ได้จากทั้งสองวิธีนี้ก็ให้ความแตกต่างกันที่ไม่มาก และดูเหมือนว่า เทคนิคการตรวจวัดด้วยแสงที่เปล่ง

ออกมาจะมีความน่าเชื่อถือมากขึ้นทุกวัน เนื่องจากความก้าวหน้าทางเทคโนโลยีด้านนี้ และประกอบกับ เทคนิคนี้สามารถระบุตำแหน่งของการจุดระเบิดเอง และการพัฒนาตัวของเปลวไฟได้อีกด้วย

เนื่องจากเกณฑ์ที่แท้จริงของการระบุเวลาจุดระเบิดเองในการทดลอง ยังไม่สามารถกำหนดชัดเจนได้ ดังที่ได้กล่าวมาแล้ว เช่นกัน ในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ก็ไม่มีเกณฑ์ใดเกณฑ์หนึ่งที่จะระบุถึงเวลาการจุดระเบิดที่ชัดเจน ซึ่งเวลาการจุดระเบิดก็จะแตกต่างกันเล็กน้อยไปตามหลักเกณฑ์ของนักวิจัยแต่ละท่านที่กำหนด ถึงแม้ว่าจะศึกษาโดยใช้เชื้อเพลิงและลักษณะทางกายภาพที่เหมือนกัน [68] ตัวอย่างเช่น Kang และคณะ [69] เลือกใช้ช่วงเวลาที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาและอุณหภูมิ เริ่มเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็วมาเป็นเกณฑ์ในการกำหนดการจุดระเบิดเอง ในขณะที่ Lutz และคณะ [70] ระบุว่าถ้าอุณหภูมิสูงเกินกว่าอุณหภูมิเริ่มต้น 200 K จะเกิดการจุดระเบิดเอง นอกจากนี้ Rente และคณะ [71] ให้ความเห็นว่า ควรเลือกใช้อุณหภูมิเฉลี่ยภายในห้องเผาไหม้จะเหมาะสมกว่า โดยถ้าอุณหภูมิเฉลี่ยสูงเกินกว่า 1% จากค่าเริ่มต้น จะเป็นจุดเริ่มต้นของการจุดระเบิดเอง ดังนั้นนี้อาจจะเป็นอีกสาเหตุหนึ่ง ที่ทำให้เกิดความผิดพลาดได้จากการทำนาย

ในการเผาไหม้ ปัจจัยสำคัญที่มีผลต่ออัตราการเผาไหม้ของเชื้อเพลิงได้แก่ อัตราการผสมกันของอากาศและเชื้อเพลิง (mixing rate) และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี (chemical reaction rate) โดยเริ่มต้น ละอองเชื้อเพลิงจะระเหยกกลายเป็นไอและผสมรวมตัวกับอากาศแวดล้อม ในบริเวณที่มีละอองเชื้อเพลิงน้อย (ส่วนผสมบาง) ละอองอาจจะถูกระเหยกกลายเป็นไอทั้งหมดในช่วงของการให้ความร้อน ส่งผลให้มีอัตรา การผสมกันที่สูง เมื่อเกิดการเผาไหม้ อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีซึ่งช้ากว่า จะเข้ามาควบคุมกระบวนการในบริเวณนั้น เปลวไฟในที่นี้จึงเรียกว่า เปลว premixed ดังนั้นในช่วงแรกของการลุกไหม้ (รวมถึงการจุดระเบิดเองด้วย) จึงเป็นช่วงที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีเป็นตัวควบคุมปฏิกิริยารวม ในทำนองกลับกัน ในบริเวณที่มีส่วนผสมหนา ละอองเชื้อเพลิงโดยส่วนใหญ่จะไม่ถูกระเหยกทั้งหมด และความเข้มข้นของออกซิเจนค่อนข้างจะต่ำ ดังนั้นอัตราการผสมกันระหว่างไอเชื้อเพลิงและออกซิเจนจึงค่อนข้างต่ำ ไอเชื้อเพลิงที่ได้ผสมกับอากาศแล้ว จึงถูกใช้ในการเผาไหม้อย่างรวดเร็ว ส่วนละอองเชื้อเพลิงที่ยังไม่ได้ระเหยกจะถูกเผาไหม้อย่างช้า ๆ และจะถูกเผาไหม้เฉพาะส่วนที่มีการผสมกันอย่างเหมาะสม การเผาไหม้ในบริเวณนี้ จึงถูกควบคุมด้วยอัตราการแพร่ของไอเชื้อเพลิงและออกซิเจน ดังนั้นเปลวไฟในที่นี้จึงเรียกว่า เปลว diffusion หรือ non-premixed ดังนั้นในการเผาไหม้ของสเปรย์นั้น จะเป็นการผสมผสานกันระหว่างเปลวแบบ premixed และ non-premixed ซึ่งทฤษฎีและแบบจำลองเกี่ยวกับเปลวแบบ premixed และ diffusion จึงถูกใช้ในการวิเคราะห์การเผาไหม้แบบสเปรย์ [2].

2.3.2 กลไกปฏิกิริยาเคมี (Chemical Reaction Mechanism)

จากหัวข้อที่แล้ว จะเห็นได้ว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีนั้นมีความสำคัญมาก ต่อการทำนายการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้ในช่วงแรก ดังนั้นการสร้างแบบจำลองปฏิกิริยาเคมีที่เหมาะสม กล่าวคือมีความแม่นยำสูงและใช้เวลาในการคำนวณไม่นานเกินไป ก็จะช่วยทำให้แบบจำลองการเผาไหม้สเปรย์สามารถนำไปใช้งานได้จริง โดยกลไกของปฏิกิริยาเคมีสามารถแบ่งหลัก ๆ ออกได้เป็น 4

กลุ่มใหญ่ดังนี้ กลไกแบบละเอียด (detailed mechanism) กลไกแบบโครงร่าง (skeletal mechanism) กลไกแบบย่อส่วน (reduced mechanism) และกลไกรวม (global mechanism) โดยในแบบจำลองแบบละเอียดจะใช้ปฏิกิริยาเคมีและ species ที่เกี่ยวข้องทั้งหมด อย่างไรก็ตาม การนำแบบจำลองนี้มาประยุกต์ใช้กับการเผาไหม้ในเครื่องยนต์นั้นค่อนข้างจะมีข้อจำกัดมาก เนื่องจากขาดกลไกจลนศาสตร์ทางเคมี (chemical kinetic mechanism) สำหรับเชื้อเพลิงที่มีค่าไฮโดรคาร์บอนสูง และใช้เวลาในการคำนวณนานมาก จากการรายงานของ Gas Research Institute (GRI) กลไกแบบละเอียดที่ถูกพัฒนาขึ้นมาในปัจจุบันนี้ มีเพียงเชื้อเพลิงไฮโดรเจน มีเทน เมทานอล และอีเทน เท่านั้น ซึ่งล้วนแต่เป็นเชื้อเพลิงที่มีค่าไฮโดรคาร์บอนต่ำ เพื่อเป็นการลดความยุ่งยากในการคำนวณและขีดจำกัดดังกล่าว แนวการวิจัยจึงมุ่งเน้นไปที่แบบจำลองของกลไกแบบโครงร่างแทน

แบบจำลองกลไกแบบโครงร่างนั้นจะเลือกพิจารณาเฉพาะปฏิกิริยาเคมีที่สำคัญเท่านั้นจากกลไกแบบละเอียด วิธีการที่ง่ายที่สุดคือ การกำจัดปฏิกิริยาเคมีที่เร็วออก และลดจำนวน species ที่วิเคราะห์ ถึงแม้ว่าจำนวนปฏิกิริยาเคมีและ species จะลดลงแล้ว แต่ก็ยังยากลำบากที่จะนำมาใช้กับเชื้อเพลิงดีเซล แต่อย่างไรก็ตาม ก็ได้มีการนำแบบจำลองไปประยุกต์ใช้กับเชื้อเพลิงที่มีค่าออกเทนใกล้เคียงกับน้ำมันดีเซล เช่น n-dodecane, n-heptane เป็นต้น ในเครื่องยนต์มาแล้ว [72-74]

ถัดมา แบบจำลองกลไกแบบย่อส่วนซึ่งมีความซับซ้อนน้อยกว่ากลไกแบบละเอียดและแบบโครงร่าง เนื่องจากแบบจำลองนี้จะเลือกเฉพาะปฏิกิริยาเคมีที่สำคัญมากจากกลไกแบบละเอียดหรือแบบโครงร่าง โดยวิธี sensitivity analysis และ steady-state analysis ด้วยการเพิ่ม generic species หรือปฏิกิริยาเคมีรวมแทน โดยที่ปฏิกิริยาเคมีที่มีส่วนร่วมน้อยจะถูกกำจัดทิ้ง แบบจำลองชนิดนี้ที่มีชื่อเสียงได้แก่ แบบจำลอง Shell [75] ซึ่งถูกพัฒนามาเพื่อใช้ในการทำนายการเกิด knock ของเครื่องยนต์แบบจุดระเบิดด้วยประกายไฟ แบบจำลองนี้ประกอบไปด้วยปฏิกิริยาเคมีลูกโซ่จำนวน 8 สมการ และจำนวน species 6 ชนิด ซึ่งนี่เป็นกลไกแบบย่อส่วนแรกๆ ที่ประสบความสำเร็จในการประยุกต์ใช้กับการทำนายการจุดระเบิดเองของเครื่องยนต์ลูกสูบ

เพื่อเป็นการพัฒนาให้แบบจำลอง Shell มีความแม่นยำมากขึ้น และสามารถประยุกต์ใช้งานได้กว้างมากขึ้น จากการสำรวจงานวิจัยที่ผ่านมาพบว่า แนวทางการปรับปรุงแบ่งหลัก ๆ ได้เป็น 2 กลุ่ม กลุ่มแรกจะเป็นการปรับปรุงแบบจำลองการถ่ายเทความร้อน การสมดุลพลังงานและมวลของ species ในก๊าซผลิตภัณฑ์ และการแก้ไขค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาซึ่งได้ข้อมูลมาจากการทดลอง โดยที่ไม่มีการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างโดยรวมของสมการเคมี [76-79] อีกกลุ่มหนึ่งจะเน้นไปที่การเปลี่ยนโครงสร้างโดยรวมทางเคมี เพื่อให้สอดคล้องกับหลักทางเคมี ดังนั้นสมการทางเคมีและ species จึงถูกสร้างเพิ่มขึ้นเพื่อให้สามารถอธิบายทางเคมีได้ในช่วงสภาวะการทำงานที่กว้างขึ้น [80, 81] ซึ่งแบบจำลองนี้ได้ถูกใช้งานอย่างกว้างขวางในการทำนายการจุดระเบิดเองของเครื่องยนต์ดีเซล [82-85] โดยเลือก n-heptane เป็นตัวแทนสำหรับเชื้อเพลิงดีเซล เนื่องจากค่าออกเทนที่ใกล้เคียงกัน นอกจากนี้ ก็ยังมีกลไกแบบย่อส่วนอื่น ๆ ที่ประสบความสำเร็จเช่นกัน [86-88] อย่างไรก็ตามกลไกแบบย่อส่วนจากที่ได้อธิบายไปแล้วว่ามีขีดจำกัดในการทำนายกระบวนการจุดระเบิดสำหรับเชื้อเพลิง

ที่มีไฮโดรคาร์บอนสูง เช่น ดีเซล เนื่องจากความซับซ้อนของกลไกทางเคมีและความสับสนเปลี่ยนทางการคำนวณดังกล่าว

แบบจำลองสุดท้ายซึ่งเป็นแบบจำลองที่ง่ายที่สุดคือ แบบจำลองกลไกรวม ซึ่งเป็นการลดกลไกแบบละเอียดให้เหลือเฉพาะสารตั้งต้นและผลิตภัณฑ์หลักในสมการทางเคมีรวมเพียงหนึ่งสมการหรือมากกว่านั้น โดยอ้างอิงข้อมูลการทดลองเป็นหลัก หลักการของแบบจำลองนี้ จะเป็นการลดจำนวนตัวแปรที่เกี่ยวข้องให้น้อยที่สุด ซึ่งเป็นที่ดึงดูดอย่างมากสำหรับการคำนวณทาง CFD ในทางปฏิบัติแบบจำลองรวมจะใช้สมการเชิงประจักษ์ของความสัมพันธ์ระหว่างเชื้อเพลิงและลักษณะทางกายภาพของสภาวะแวดล้อมที่ได้จากการข้อมูลการทดลองหรือผลของการวิเคราะห์เชิงตัวเลขของกลไกแบบละเอียดเพื่อสร้างสมการเคมีแบบขั้นเดียว โดยส่วนใหญ่จะแสดงในรูปของ Arrhenius

$$\frac{d[Fuel]}{dt} = AT^n[Fuel]^a[Oxidizer]^b \exp(-E_A / R_u T) \quad (2.49)$$

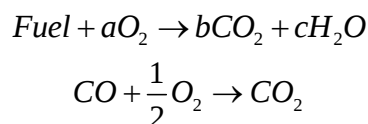
เมื่อ $[Fuel]$ และ $[Oxidizer]$ แสดงถึงสัดส่วนเชิงมวลของไอเชื้อเพลิงและออกซิเจน E_A คือพลังงานก่อกัมมันต์ A , n , a และ b คือค่าคงที่ ซึ่งได้จากการทดลองหรือกลไกแบบละเอียดเนื่องจากใช้เวลาในการคำนวณที่ไม่สิ้นเปลือง และง่ายต่อการทำแบบจำลอง วิธีนี้จึงได้รับความสนใจเป็นอย่างมากดังที่ปรากฏในงานวิจัยเหล่านี้ [69, 89-91] และความสนใจจะเพิ่มมากขึ้น เมื่อเชื้อเพลิงที่ใช้มีค่าไฮโดรคาร์บอนที่มากขึ้น เนื่องมาจาก ขาดกลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบละเอียดหรือแบบย่อส่วนที่เหมาะสม สำหรับเชื้อเพลิงดังกล่าว Westbrook and Dryer [92] ได้ทำการทดลองหาค่าคงที่ต่าง ๆ สำหรับแบบจำลองกลไกรวมของเชื้อเพลิงไฮโดรคาร์บอนชนิดต่าง ๆ ดังแสดงในตาราง 2.1 เนื่องจากแบบจำลองนี้ ใช้เพียงสมการเดียว ดังนั้นจึงไม่มีข้อมูลของ intermediate species ซึ่งเป็นสารตั้งต้นสำหรับก๊าซมลพิษ

ตาราง 2.1 ค่าคงที่ต่าง ๆ สำหรับแบบจำลองแบบกลไกรวมตามสมการที่ (2.49) [92]

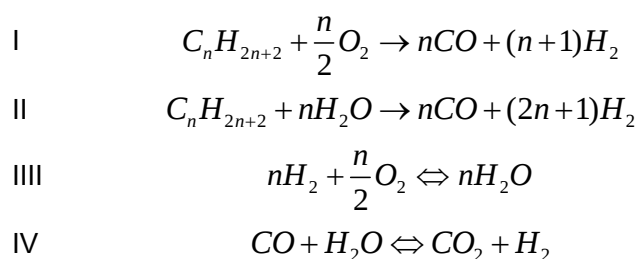
Fuel	A	E_A	a	b
C_2H_6	1.1×10^{11}	30000	0.10	1.65
C_3H_8	8.6×10^{11}	30000	0.10	1.60
C_4H_{10}	7.4×10^{11}	30000	0.25	1.50
C_5H_{12}	6.4×10^{11}	30000	0.25	1.50
C_6H_{14}	5.7×10^{11}	30000	0.25	1.50
C_7H_{16}	5.1×10^{11}	30000	0.25	1.50
C_8H_{18}	4.6×10^{11}	30000	0.25	1.50
C_9H_{20}	4.2×10^{11}	30000	0.25	1.50
$C_{10}H_{22}$	3.8×10^{11}	30000	0.25	1.50

หน่วย: cm, g, mol, s, cal และ K

นอกจากนี้ โดยส่วนใหญ่แล้ว แบบจำลองกลไกรวมจะทำนายอัตราการปล่อยความร้อนได้สูงเกินไป ส่งผลให้เปลวไฟมีอุณหภูมิที่สูงกว่าการทดลอง เพื่อเป็นการปรับปรุงข้อด้อยเหล่านี้ จำนวนสมการเคมีและ species จึงถูกเพิ่มเข้าไปในการคำนวณ ตัวอย่างเช่น แบบจำลองกลไกรวมสองชั้น



Jones และ Lindsted [93] เสนอแบบจำลองกลไกรวมสี่ชั้นสำหรับการเผาไหม้แบบ premixed และ non-premixed ดังนี้

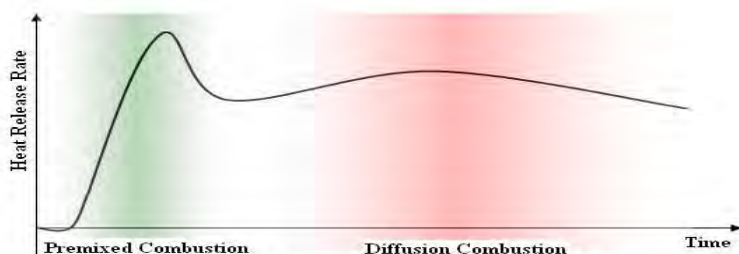


ขณะที่จำนวนขั้นของปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น ข้อมูลของก๊าซผลิตภัณฑ์ก็จะเพิ่มมากขึ้นด้วยและการคำนวณก็จะซับซ้อนมากยิ่งขึ้น ซึ่งแบบจำลองกลไกรวมหลายชั้นอาจจะจัดให้อยู่ในกลุ่มเดียวกับแบบจำลองกลไกย่อยส่วนได้

2.3.3 การสร้างแบบจำลองการเผาไหม้ (Combustion Modelling)

จากที่ได้กล่าวมา การเผาไหม้ของสเปรย์นั้นจะเป็นการผสมผสานกันระหว่างเปลวแบบ premixed และ non-premixed โดยในช่วงแรกของการเผาไหม้จะเป็นแบบ premixed และหลังจากนั้นการเผาไหม้แบบ non-premixed จะเข้ามาแทนที่และมีครอบคลุมช่วงเวลาที่ยาวนานกว่าดังแสดงในรูปที่ 2.8 ซึ่งแสดงถึงอัตราการปล่อยความร้อน ดังนั้นจึงอาจพิจารณาได้ว่า การเผาไหม้ของสเปรย์เป็นแบบ non-premixed ซึ่งข้อแตกต่างหลักระหว่างการเผาไหม้แบบ premixed กับ non-premixed คือ สัดส่วนของผสมซึ่งชัดเจนในเปลว premixed แต่ในเปลว non-premixed สัดส่วนการผสมจะแปรเปลี่ยนไปตามตำแหน่ง โดยที่เปลวแบบ non-premixed ก็จะไม่สามารถเคลื่อนที่ไปยังบริเวณที่มีส่วนผสมหนาเกินไปหรือบางเกินไปได้ เนื่องจากขาดไอเชื้อเพลิงหรือออกซิเจนเป็นส่วนร่วมในการเผาไหม้ ดังนั้นความปั่นป่วนจะมีผลเป็นอย่างมากต่อการเผาไหม้แบบ non-premixed นอกจากนี้ อุณหภูมิการเผาไหม้จะขึ้นอยู่กับความเข้มข้นของส่วนผสม และอุณหภูมิสูงสุดจะเกิดที่สภาวะ stoichiometric และอุณหภูมิที่สูงยังมีผลต่อการเกิด NO_x ด้วย ดังนั้นเพื่อควบคุมอุณหภูมิ

การเผาไหม้ไม่ให้อุณหภูมิสูงเกินไป สามารถทำได้โดยการควบคุมสัดส่วนการผสมกันของไอเชื้อเพลิงและอากาศให้เหมาะสม ซึ่งยากในทางปฏิบัติ

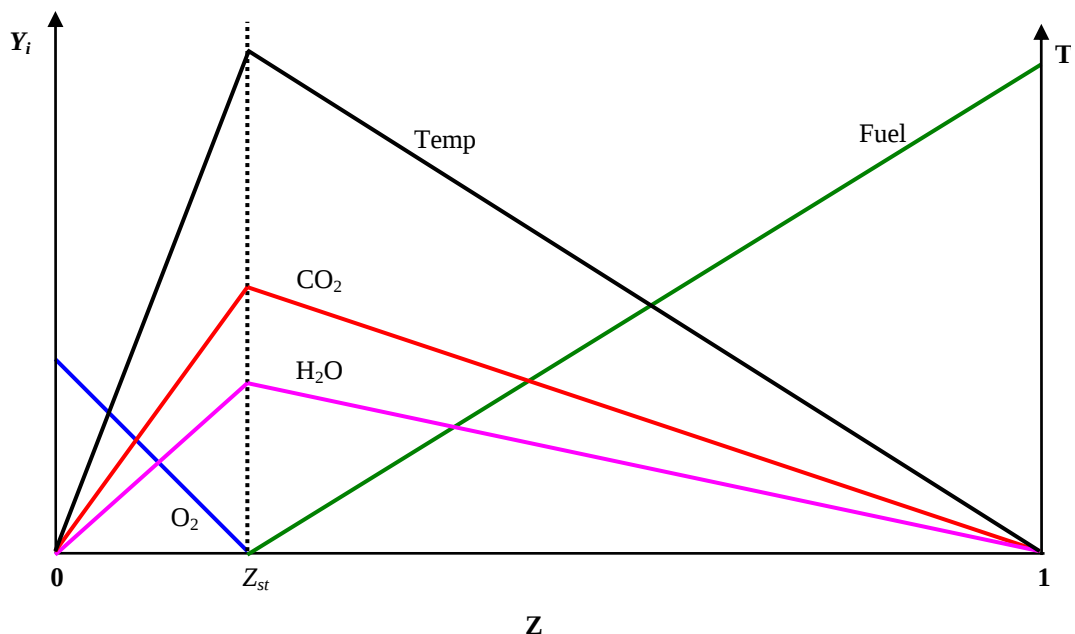


รูปที่ 2.8 แผนภาพเค้าร่างของอัตราการปล่อยความร้อนของเครื่องยนต์ดีเซล

แบบจำลองที่ง่ายที่สุดสำหรับการวิเคราะห์การเผาไหม้แบบ non-premixed คือแบบจำลองผสมแล้วลุกไหม้ (mixed-is-burned) ของ Burke และ Schumann [94] ดังแสดงในรูป 2.9 โดยมีสมมุติฐานว่า อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีสูงมากและย้อนกลับไม่ได้ ดังนั้นเชื้อเพลิงและออกซิเจนจะไม่มีโอกาสอยู่ร่วมกันเลย และถูกแบ่งแยกโดยชั้นปฏิกิริยาบางซึ่งอยู่ในตำแหน่งสภาวะ stoichiometric และที่ตำแหน่งนี้จะให้อุณหภูมิเปลวสูงสุด นอกจากนี้ ปฏิกิริยาเคมีจะเป็นการเผาไหม้แบบสมบูรณ์ โดยไม่ต้องคำนึงถึงอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีหรือสภาวะสมดุลทางเคมี ดังนั้นตัวแปรอุณหพลศาสตร์เคมีต่าง ๆ (thermo-chemical variables) จะเป็นฟังก์ชันเชิงเส้นกับค่าสัดส่วนของผสม ถึงแม้ว่าแบบจำลองนี้จะมีขีดจำกัดมากเนื่องจากสมมุติฐานที่ใช้ข้างอิง แต่ก็มีนักวิจัยจำนวนมากนำแบบจำลองนี้ไปใช้ทำนายการเผาไหม้ในเครื่องยนต์ดีเซล [13, 95] เนื่องจากความง่ายและให้ผลการทำนายที่สมเหตุสมผลเมื่อเทียบกับผลการทดลอง

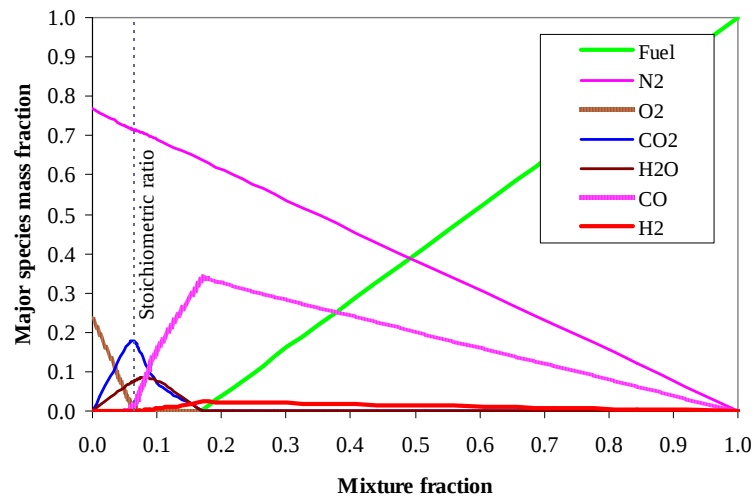
เนื่องจากแบบจำลองของ Burke และ Schumann จะพิจารณาปฏิกิริยาเคมีเป็นการเผาไหม้แบบสมบูรณ์ ดังนั้นก๊าซหลักที่เกี่ยวข้องในการคำนวณจะมีเพียง CO_2 , H_2O , O_2 และ N_2 แต่ในความเป็นจริงแล้ว ก๊าซหลักเหล่านี้จะมีการแตกตัว (dissociation) เป็น species ย่อยในการเผาไหม้ที่อุณหภูมิสูง เช่น H_2 , OH , CO , H , O , N , NO เป็นต้น ดังนั้นจะมีความแม่นยำมากขึ้น ถ้าพิจารณาการเผาไหม้เป็นแบบสมดุลเคมี (chemical equilibrium) ซึ่งอัตราการเกิดปฏิกิริยาเร็วเพียงพอที่ทำให้ระบบอยู่ในสภาวะสมดุลตลอดเวลา โดยที่อัตราส่วนเชิงมวลของแต่ละ species และอุณหภูมิที่สภาวะสมดุลจะสัมพันธ์กับค่าสัดส่วนของผสมดังแสดงในรูปที่ 2.10-2.12 โดยทั่วไปสมดุลทางเคมีสามารถคำนวณหาได้จากวิธี minimization of Gibbs free energy หรือ equilibrium constants ซึ่งรายละเอียดเพิ่มเติมสามารถหาอ่านได้จาก [85] ดังนั้นแบบจำลองนี้จึงสามารถทำนายค่า intermediate species ได้ โดยไม่ต้องการข้อมูลใด ๆ จากกลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบละเอียด

แบบจำลองนี้จึงได้ถูกประยุกต์ใช้ในการเผาไหม้สเปรย์ [95-97] เนื่องจากต้องการทรัพยากรทางการคำนวณไม่สูงและสามารถทำนายสารตั้งต้นที่ก่อมลพิษได้

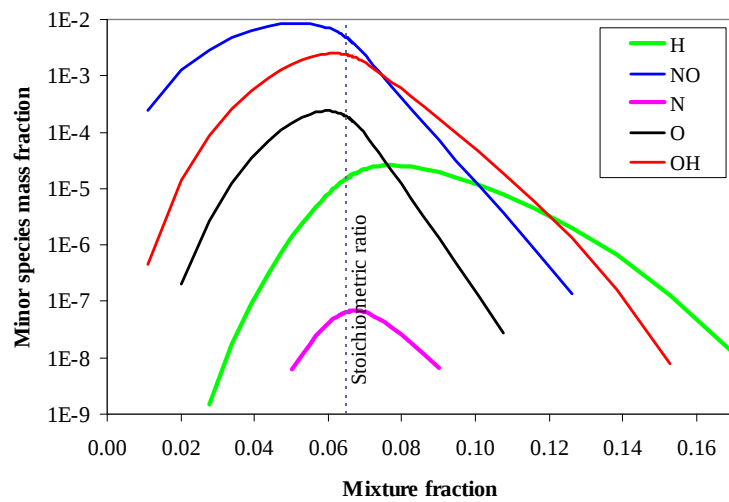


รูปที่ 2.9 แบบจำลองการเผาไหม้ของ Burke และ Schumann

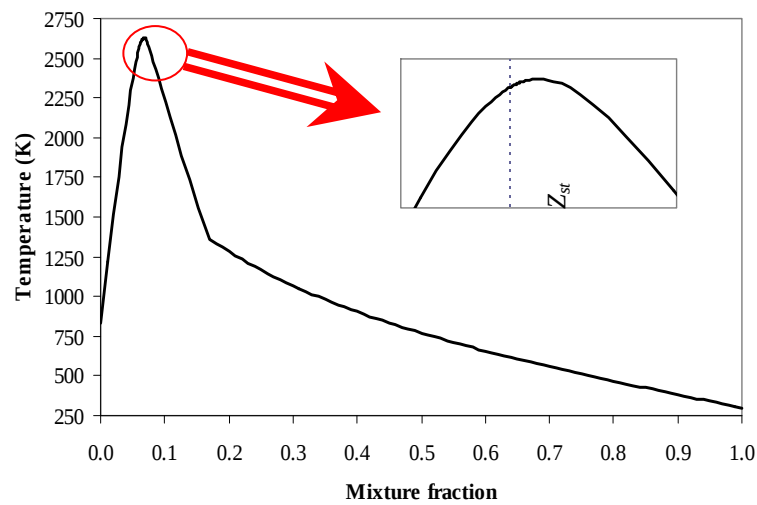
แต่ในความเป็นจริงแล้ว อัตราการเกิดปฏิกิริยาไม่เพียงพอที่จะทำให้ระบบอยู่ในสภาวะสมดุลตลอดเวลา ดังนั้นแบบจำลองใกล้เคียงสมดุลทางเคมี (near chemical equilibrium) หรือ Laminar Flamelet จึงมีความเหมาะสมมากกว่า โดยในแบบจำลอง Laminar Flamelet จะสมมุติว่า ชั้นการแพร่ซึ่งยึดอยู่ในบริเวณการไหลแบบปั่นป่วนที่ไม่เกิดปฏิกิริยานั้นจะบางมาก ดังนั้นปฏิกิริยาเคมีและการแพร่ของโมเลกุลทั้งหมด จะสามารถประมาณได้ว่าเป็นโครงสร้างแบบลามินาร์ จึงทำให้ง่ายขึ้นในการหา flame surface density ด้วยข้อมูลของ detailed chemistry ซึ่งได้มาจากฐานข้อมูลของ Flamelet ดังนั้นค่าเฉลี่ยของตัวแปรเคมีเชิงความร้อนจึงสามารถหาได้จากค่าสัดส่วนของผสมและ scalar dissipation ซึ่งอิทธิพลของจลนศาสตร์ทางเคมีจึงถูกนำเข้ามาพิจารณาพร้อมกับแปลวที่มีความปั่นป่วนได้อย่างเหมาะสมทางเชิงการคำนวณ โดยหลักการนี้ เป็นที่นิยมอย่างมากสำหรับการประยุกต์ใช้กับเครื่องยนต์ดีเซล ดังแสดงในงานวิจัย [95, 98, 99]



รูปที่ 2.10 แบบจำลองการเผาไหม้แบบสมมูลทางเคมี [100]



รูปที่ 2.11 การกระจายตัวของก๊าซผลิตภัณฑ์ย่อยของแบบจำลองสมมูลเคมี [100]



รูปที่ 2.12 การกระจายตัวของอุณหภูมิก๊าซผลิตภัณฑ์ของแบบจำลองสมมูลเคมี [100]

2.3.4 สัดส่วนของผสม (Mixture Fraction)

ตัวแปรที่สำคัญที่ใช้ในการอธิบายการเผาไหม้แบบ non-premixed คือ สัดส่วนของผสม ซึ่งมีคุณสมบัติเป็น conserved scalar กล่าวคือ ไม่สามารถผลิตหรือทำลายได้ โดยค่าสัดส่วนของผสมจะเป็นตัวแปรที่บ่งบอกถึงระดับการผสมกันระหว่างไอเชื้อเพลิงและออกซิเจน (ทั้งก๊าซที่ถูกเผาไหม้แล้ว และยังไม่ถูกเผาไหม้) ค่าสัดส่วนของผสมจะมีค่าเป็นศูนย์ในสายการไหลของออกซิเจน และมีค่าเป็นหนึ่งในสายการไหลของไอเชื้อเพลิง ซึ่งค่าสัดส่วนของผสมนี้จะเปลี่ยนแปลงได้ด้วยการพาและการแพร่เท่านั้น ส่วนปฏิกิริยาไม่สามารถเปลี่ยนแปลงค่านี้ได้ โดยนิยามของค่าสัดส่วนของผสมกำหนดไว้ดังนี้

$$Z \equiv \frac{\text{mass of material having its origin in the fuel stream}}{\text{mass of mixture}}$$

จากนิยามดังกล่าวสำหรับการไหลของไอเชื้อเพลิงและออกซิเจนเข้ามาผสมกัน Peters [101] ได้แสดงความสัมพันธ์ของค่าสัดส่วนของผสมกับสัดส่วนเชิงมวลของไอเชื้อเพลิงและออกซิเจนไว้ดังนี้

$$Z = \frac{sY_F - Y_{O_2} + Y_{O_2,2}}{sY_{F,1} + Y_{O_2,2}} \quad (2.50)$$

เมื่อ $Y_{F,1}$ คือสัดส่วนเชิงมวลของเชื้อเพลิงในเชื้อเพลิง ดังนั้น $Y_{F,1} = 1$ และ $Y_{O_2,2}$ คือสัดส่วนเชิงมวลของออกซิเจนในอากาศ ซึ่ง $Y_{O_2,1} = 0.233$ และ s คือค่าอัตราส่วนเชิงมวล stoichiometric ดังนั้นในการไหลที่ไม่มีปฏิกิริยา สัดส่วนของผสมจะมีค่าเท่ากับสัดส่วนเชิงมวลของไอเชื้อเพลิง

ต่อมา Bilger และคณะ [102] ได้ทำการพัฒนาสมการสำหรับคำนวณหาสัดส่วนของผสมและใช้กันอย่างแพร่หลาย ดังนี้

$$Z = \frac{\frac{Y_C - Y_{C,2}}{M_C} + \frac{1}{2} \frac{Y_H - Y_{H,2}}{M_H} - \frac{Y_O - Y_{O,2}}{M_O}}{\frac{Y_{C,1} - Y_{C,2}}{M_C} + \frac{1}{2} \frac{Y_{H,1} - Y_{H,2}}{M_H} - \frac{Y_{O,1} - Y_{O,2}}{M_O}} \quad (2.51)$$

เมื่อ M คือมวลโมเลกุล และตัวห้อย C , H และ O จะหมายถึงส่วนประกอบคาร์บอน ไฮโดรเจน และออกซิเจน ตามลำดับ ส่วนตัวห้อย 1 และ 2 จะอ้างถึงค่าคงที่ในสภาวะเริ่มต้นของสายการไหลเชื้อเพลิงและออกซิเจน ตามลำดับ

ในการเผาไหม้แบบ non-premixed สภาวะการผสมกันที่ตำแหน่งและเวลาต่าง ๆ สามารถระบุได้ด้วยค่าเฉลี่ยของสัดส่วนของผสมและค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสม ภายใต้สมมุติฐานที่ว่า species ทุกชนิดมีค่าการแพร่เชิงโมเลกุล (molecular diffusivity) เท่ากันทุกชนิด

สมการส่งถ่ายสำหรับการคำนวณหาการกระจายตัวของค่าเฉลี่ยของสัดส่วนของผสมโดยไม่ต้องพิจารณา source term สามารถแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{Z}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\bar{\rho} D_z + \frac{\mu_t}{Sc_z} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right\} \quad (2.52)$$

เมื่อ D_z คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ ในการไหลแบบปั่นป่วน ความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมจะมีผลอย่างมากต่อการเกิดปฏิกิริยา ดังนั้นค่าความแปรปรวนจึงต้องถูกนำมาพิจารณา โดยนำ probability density function มาใช้ร่วมในการพิจารณา ซึ่งสมการส่งถ่ายของค่าเฉลี่ยถ่วงน้ำหนักสำหรับค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมสามารถแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{Z}''^2}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\bar{\rho} D_{\tilde{Z}''^2} + \frac{\mu_t}{Sc_{\tilde{Z}''^2}} \right) \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_i} \right\} + \underbrace{2 \frac{\mu_t}{Sc_{\tilde{Z}''^2}} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2}_{production} - \underbrace{\bar{\rho} C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Z}''^2}_{dissipation} \quad (2.53)$$

เมื่อสองเทอมท้ายสุด จะแสดงถึงการผลิตและการสูญเสียของค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมตามลำดับ โดยที่ค่า Schmidt number, Sc สำหรับค่าเฉลี่ยและค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมโดยทั่วไปแล้ว จะมีค่าทั้งคู่เท่ากับ 0.9 และ C_χ เท่ากับ 2.0 [103] นอกจากนี้เทอมการสูญเสียของ $\tilde{Z}''^2$ สามารถนำเสนอในรูปของ scalar dissipation rate $\tilde{\chi}$ ได้ดังนี้

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Z}''^2 \quad (2.54)$$

ซึ่งตัวแปร $\tilde{\chi}$ นั้นมีความสำคัญมากในการวิเคราะห์การเผาไหม้แบบปั่นป่วน non-premixed เนื่องจากตัวแปรนี้จะใช้ประเมินผลของความปั่นป่วนที่มีต่อการเบี่ยงเบนไปจากสภาพสมดุลของปฏิกิริยา

2.3.5 แบบจำลอง Laminar Flamelet

เทอม flamelet จะสื่อถึงชั้นบางหนึ่งมิติ ซึ่งชั้นบางการแพร่นี้จะยึดอยู่ในบริเวณการไหลแบบปั่นป่วนทั้งที่เกิดปฏิกิริยาและไม่เกิดปฏิกิริยา เมื่อความหนาของชั้นเปลวมีขนาดบาง ซึ่งเล็กกว่าขนาดของ eddies ผิวหน้าของเปลวจะถูกทำให้ยึดและยับย่นเนื่องจากการกระทำของ eddies ที่ปั่นป่วน ดังนั้นพฤติกรรมนี้ จึงสามารถประมาณเฉพาะส่วนได้ว่าเป็นโครงสร้างแบบลามินาร์ ในสมการ flamelet สัดส่วนเชิงมวลของ species ต่าง ๆ และอุณหภูมิจะเป็นฟังก์ชันกับสามตัวแปรหลัก

ได้แก่ สัดส่วนของผสม Z , scalar dissipation χ และเวลา t เพื่อต้องการคำนวณหาตำแหน่งของ flamelet ดังนั้นระบบพิกัดแกนใหม่จึงถูกนำมาประยุกต์ใช้ โดยเริ่มต้นจากกฎลูกโซ่

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial x_j} = \frac{\partial Z}{\partial x_j} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \quad (2.56)$$

และสมการอนุพันธ์รวม

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z} \quad (2.57)$$

แทนค่าสมการข้างต้นลงในสมการส่งถ่าย species จะได้

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} + Y_i \left[\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \frac{\partial \rho U_j}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \left[\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial Z}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \right] \\ = \rho D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_i \end{aligned} \quad (2.58)$$

โดยในเทอมที่สองและสามทางด้านซ้ายมือจะหักล้างกันไป เนื่องจากสมการความต่อเนื่อง และสมการส่งถ่ายสัดส่วนของผสม ดังนั้นจึงสามารถจัดรูปใหม่ได้เป็น

$$\frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = \frac{\chi}{2} \frac{1}{Le_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} \quad (2.59)$$

เมื่อ scalar dissipation ให้นิยามเป็น $\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)^2$ ซึ่งตัวแปรนี้จะเป็นตัวบ่งบอกถึง

สภาพการผสมกันในการไหลปั่นป่วนที่มีผลต่อโครงสร้างของ flamelet และ Le_i คือ Lewis number ของ species ชนิดที่ i^{th} ในทำนองคล้าย ๆ กัน สมการพลังงานก็สามารถพิสูจน์ได้เป็น

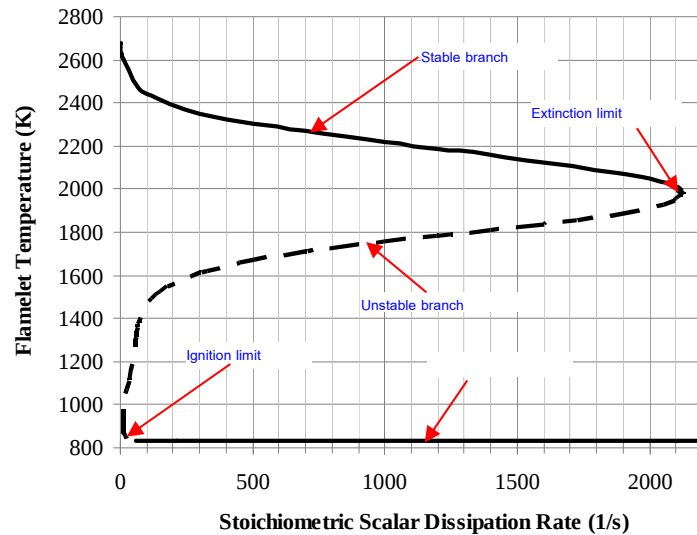
$$c_p \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\chi}{2} \frac{1}{Le_i} \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \sum_{k=1}^N h_i \left\{ \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} \right\} \quad (2.60)$$

ในการประยุกต์ใช้แบบจำลอง laminar flamelet นั้น จะแยกการคำนวณสมการ flamelet และสมการเคมี ออกจากการคำนวณทางพลศาสตร์ของไหล (CFD) แล้วนำข้อมูลการคำนวณข้างต้นมา

เก็บเป็นฐานข้อมูลซึ่งเรียกว่า flamelet library ดังนั้นแบบจำลองนี้จึงเป็นการผสมผสานกันระหว่างความง่ายในการใช้งานและความต้องการนำกลไกทางเคมีอย่างละเอียดมาใช้ร่วมกัน ข้อมูลจากการคำนวณซึ่งเก็บไว้ใน flamelet library ได้แก่ อุณหภูมิ ความหนาแน่น สัดส่วนเชิงมวลของ species ต่าง ๆ ซึ่งเป็นฟังก์ชันกับค่าสัดส่วนของผสมและ scalar dissipation ดังนั้นในแบบจำลองจึงต้องการเพียงสมการส่งถ่ายสัดส่วนของผสม มาคำนวณร่วมกับสมการส่งถ่ายโมเมนตัมและความต่อเนื่อง ขณะที่ค่า scalar dissipation rate สามารถคำนวณได้โดยตรงจากค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสม จากวิธีการดังกล่าว จะทำให้จำนวนสมการที่ใช้ในการคำนวณลดลงอย่างมาก

โดยรูปแบบของแบบจำลอง laminar flamelet ที่นิยมใช้ในการทำนายการเผาไหม้จะอยู่ในรูปของ steady flamelet model (SFM) และ unsteady flamelet model (UFM) สำหรับแบบจำลอง SFM โครงสร้างของเปลวจะสามารถอธิบายได้จากค่า mixture fraction และ scalar dissipation rate ซึ่งแบบจำลองนี้ ได้รับความนิยมในการทำนายการเผาไหม้แบบปั่นป่วน [104-110] เนื่องจากความซับซ้อนที่น้อย และใช้เวลาในการคำนวณไม่มาก แต่แบบจำลองนี้ ก็ไม่สามารถรองรับการเปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็วของ scalar dissipation rate ได้ [110-113] ดังนั้นแบบจำลอง SFM จึงไม่สามารถทำนายการจุดระเบิดหรือการดับลงของเปลวได้ ซึ่งจะส่งผลโดยตรงต่อการทำนายระยะเปลวลอยตัว (lift-off) ที่คลาดเคลื่อน เพื่อให้แบบจำลอง SFM สามารถทำนายการจุดระเบิดหรือการดับลงของเปลวได้ ตัวแปรพิเศษคือ reaction progress variable จึงถูกนำมาใช้ร่วมในการคำนวณ โดย Pierce และ Moin [114] ได้นำ reaction progress variable มาใช้แทนค่า scalar dissipation rate ในการสร้าง flamelet library เพื่อทำนายการจุดระเบิดหรือการดับลงของเปลวปั่นป่วนแบบ non-premixed ซึ่งวิธีดังกล่าว ได้ถูกปรับปรุงต่อโดย Ihme และคณะ [115-117]

จากข้อด้อยของแบบจำลอง SFM ที่ไม่สามารถอธิบายการจุดระเบิดหรือการดับลงของเปลวได้ เนื่องจากฐานข้อมูลของ flamelet ที่มีขีดจำกัด โดยทั่วไปแล้ว สภาวะของการจุดระเบิดหรือการดับลงของเปลวจะอยู่บริเวณตำแหน่งเลี้ยวกลับของส่วนโค้งตัว S ดังแสดงในรูปที่ 2.13 โดยเส้นโค้งบนจะแสดงถึงคำตอบของเปลวในสภาวะคงตัว ส่วนโค้งด้านล่างจะแสดงถึงผลจากการผสมกันของสารตั้งต้น และเส้นโค้งที่เชื่อมระหว่างเส้นโค้งทั้งสองจะเป็นคำตอบของเปลวที่ไม่เสถียร โดยแบบจำลอง SFM จะพิจารณาเฉพาะเพียงเส้นโค้งส่วนบนและส่วนล่างเท่านั้น ดังนั้นผลลัพธ์ของเปลวจึงมีลักษณะไม่ต่อเนื่องที่บริเวณขีดจำกัดการดับลงของเปลว ส่งผลให้การคำนวณไม่มีเสถียรภาพเพื่อกำจัดจุดด้อยนี้ แบบจำลอง UFM ซึ่งตัวแปรของเวลาถูกพิจารณาเพิ่มเข้าไป จึงถูกนำมาใช้แทนแบบจำลอง SFM ส่งผลให้จำนวน flamelet ที่ต้องพิจารณามีจำนวนเพิ่มมากขึ้น โดยแบบจำลองนี้ได้ถูกนักวิจัยหลายท่านนำมาใช้ในการคำนวณการเผาไหม้ [118, 119] เพื่ออธิบายการจุดระเบิดหรือการดับลงของเปลวแบบแพร่ (diffusion flame) นอกจากนี้ การประยุกต์แบบจำลองนี้เข้ากับระบบคำนวณ LES ก็ถูกศึกษาโดย Pitsch และ Steiner [120] ซึ่งให้ผลการคำนวณที่สอดคล้องกับผลการทดลองเป็นอย่างดี



รูปที่ 2.13 อุณหภูมิเปลวสูงสุดจากการเผาไหม้ n-heptane กับอากาศ

เนื่องจากความหนาของเปลวในแบบจำลอง flamelet นั้น มีขนาดเล็กมากเมื่อเทียบกับความกว้างของกริด ดังนั้นการกระจายตัวทางสถิติของ Z และ χ จึงมีความสำคัญที่จะต้องนำมาพิจารณา ร่วม เพื่อใช้ในการคำนวณค่าเฉลี่ยของปริมาณต่าง ๆ ในปฏิกิริยา กระบวนการทางสถิติที่เกี่ยวข้องนี้คือ Probability Density Function (PDF) ซึ่งในกระบวนการหาค่าเฉลี่ยนี้ ตัวแปรที่ต้องใช้ในการวิเคราะห์ได้แก่ ค่าเฉลี่ยสัดส่วนของผสม $\tilde{Z}$ ค่าความแปรปรวน $\tilde{Z}''^2$ และค่าเฉลี่ย scalar dissipation rate $\tilde{\chi}$ นอกจากนี้ลักษณะการกระจายตัวของตัวแปรเหล่านี้ก็จำเป็นต้องทราบก่อนการวิเคราะห์เช่นกัน ทั้งนี้ที่ทราบข้อมูลเหล่านี้ ข้อมูลจาก flamelet library จะถูกนำมาอินทิเกรตเพื่อหาค่าเฉลี่ยเพื่อนำไปใช้งานต่อไป โดยสมการหาค่าเฉลี่ยสามารถแสดงได้ดังนี้

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \int_0^{+\infty} \phi(Z, \chi) \tilde{P}(Z, \chi) d\chi dZ \quad (2.61)$$

จะเห็นว่าแบบจำลองนี้ จะช่วยลดจุดด้อยของสมมุติฐานที่ว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเร็วมาก โดยการเพิ่มตัวแปร scalar dissipation rate ลงในแบบจำลอง เมื่อระดับค่า χ เพิ่มขึ้น จะส่งผลให้พฤติกรรมของการเกิดปฏิกิริยาลดลง โดยรวมแล้ว แบบจำลอง Laminar Flamelet นี้มีข้อเด่นหลักคือการนำกลไกทางเคมีอย่างละเอียดมาใช้ในการคำนวณการเผาไหม้ โดยใช้เวลาในการคำนวณที่ไม่สิ้นเปลือง เนื่องจากข้อมูลที่ได้จากกลไกทางเคมีอย่างละเอียด ได้แก่ อุณหภูมิ ความหนาแน่น สัดส่วนเชิงมวลของ species ต่าง ๆ ได้ถูกคำนวณไว้ล่วงหน้าแล้ว และถูกเก็บไว้ในฐานข้อมูล เพื่อเรียกใช้ต่อไป

2.3.6 การหาค่าเฉลี่ยโดยใช้ Probability Density Function (PDF Averaging)

จากที่ได้กล่าวมาแล้ว การเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นในการไหลแบบปั่นป่วนนั้น ไม่สามารถทำนายได้อย่างเที่ยงตรง ดังนั้นค่าที่ได้จากการไหลแบบปั่นป่วน จึงนิยมนำเสนอในรูปของค่าเฉลี่ย ซึ่งค่าเฉลี่ยทางสถิติที่ใช้กันคือ Probability Density Function (PDF) ซึ่งเป็นฟังก์ชันที่ต่อเนื่องของตัวแปรสุ่มใด ๆ (Φ) โดยมีนิยามเป็นดังนี้

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(\Phi) d\Phi = 1 \quad (2.62)$$

โดยที่ค่าเฉลี่ย $\overline{\Phi}$ และค่าความแปรปรวน $\overline{\Phi'^2}$ ของตัวแปรสุ่ม สามารถคำนวณได้จาก probability density function $P(\Phi)$ ดังนี้

$$\overline{\Phi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi P(\Phi) d\Phi \quad (2.63)$$

$$\overline{\Phi'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\Phi - \overline{\Phi})^2 P(\Phi) d\Phi \quad (2.64)$$

ดังนั้นในทำนองเดียวกัน ค่าเฉลี่ยของสเกลาร์ใด ๆ θ (เช่น อัตราการเกิดปฏิกิริยา สัดส่วนเชิงมวลของ species อุณหภูมิ) ในสายการไหลแบบปั่นป่วน ซึ่งเป็นฟังก์ชันกับสัดส่วนของผสมอย่างเดี่ยว สามารถคำนวณหาได้จาก

$$\overline{\theta} = \int_0^1 \theta(Z) P(Z) dZ \quad (2.65)$$

แต่ในความเป็นจริงแล้ว ค่าเฉลี่ยต่าง ๆ นั้นจะเป็นฟังก์ชันกับหลายตัวแปร ตัวอย่างเช่น เป็นฟังก์ชันกับทั้ง f และ r เพื่อให้แบบจำลองง่ายขึ้น จะสมมุติว่า การเปลี่ยนแปลงของ f และ r เป็นอิสระต่อกัน ($\overline{fr'} = 0$) ดังนั้น ค่าเฉลี่ย $\theta(f, r)$ ที่ตำแหน่งใด ๆ จึงหาได้จาก

$$\overline{\theta} = \int_0^1 \int_0^1 \theta(f, r) P(f) P(r) df dr \quad (2.66)$$

ในแบบจำลองการเผาไหม้ จะนิยมใช้ค่าเฉลี่ยถ่วงน้ำหนัก PDF (density-weighted probability density function, $\tilde{P}(Z)$) เนื่องจากมีความแตกต่างของอุณหภูมิที่สูง ส่งผลให้เกิดความ

แตกต่างของความหนาแน่นหรือน้ำหนักมาก โดยที่ค่าเฉลี่ยถ่วงน้ำหนัก $\tilde{P}(Z)$ จะมีความสัมพันธ์กับค่าเฉลี่ยไม่ถ่วงน้ำหนัก $P(Z)$ ดังนี้

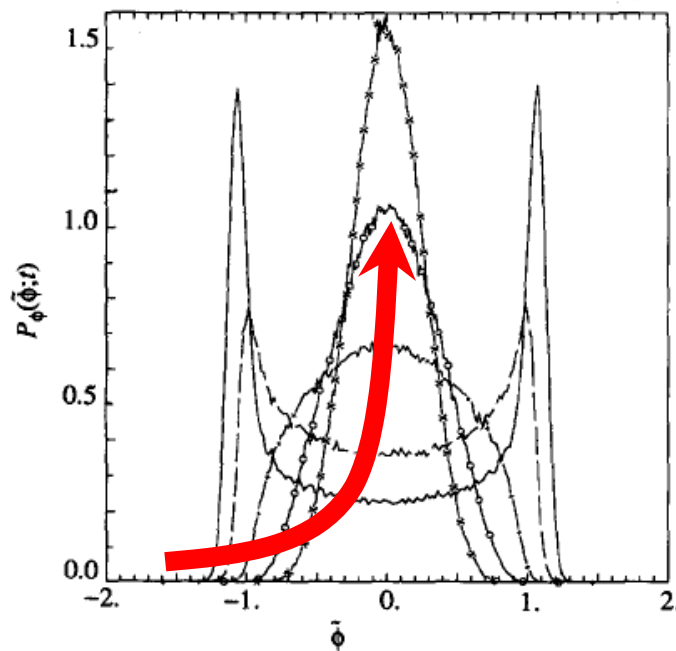
$$\tilde{P}(Z) = \frac{\rho}{\bar{\rho}} P(Z) \quad (2.67)$$

ดังนั้น ค่าเฉลี่ยถ่วงน้ำหนักของสเกลาร์ใด ๆ สามารถหาได้ในทำนองเดียวกัน ดังนี้

$$\tilde{\theta} = \int_0^1 \theta(Z) \tilde{P}(Z) dZ \quad (2.68)$$

ตัวอย่างเช่น ค่าเฉลี่ยถ่วงน้ำหนักของสัดส่วนเชิงมวลของ species i คำนวณได้จาก

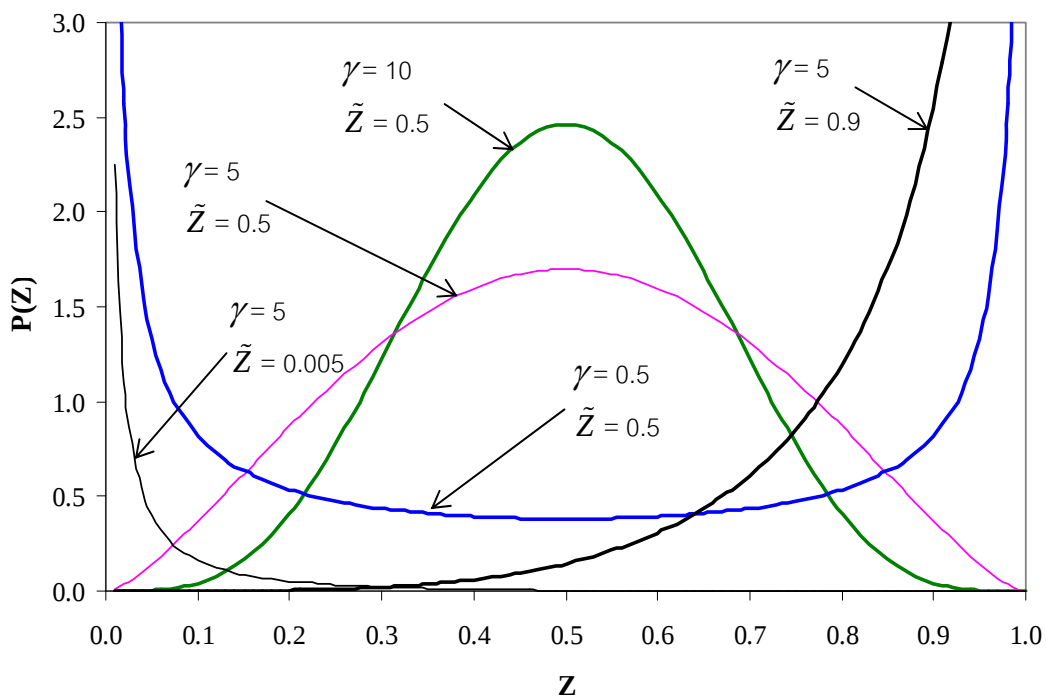
$$\tilde{Y}_i(Z) = \int_0^1 Y_i(Z) \tilde{P}(Z) dZ \quad (2.69)$$



รูปที่ 2.14 การพัฒนาตัวของรูปร่าง PDF เนื่องจากการผสมกันจากข้อมูล DNS (จาก Eswaran และ Pope [121]) ลูกศรแสดงทิศทางของการพัฒนาตัว

ในการหาค่าเฉลี่ยถ่วงน้ำหนักดังกล่าว นอกเหนือจากค่าเฉลี่ยและค่าความแปรปรวนของของผสมที่ต้องทราบแล้ว ยังต้องทราบรูปร่างการกระจายตัวของ PDF ด้วย รูปร่างที่เหมาะสมจะสามารถอธิบายการกระจายตัวได้ดีในช่วงการทำงานที่กว้าง และให้ผลการทำนายที่แม่นยำ ฟังก์ชันแสดง

ลักษณะการกระจายตัวที่นิยมใช้โดยทั่วไป ได้แก่ ฟังก์ชัน Gaussian function (หรือการกระจายปกติ) ฟังก์ชัน Beta และฟังก์ชัน Dirac-delta จากข้อมูลของแบบจำลอง DNS [121] แสดงการพัฒนาตัวของรูปร่าง PDF สำหรับสองสายการไหลสเกลาร์ที่กำลังผสมกันดังแสดงในรูปที่ 2.14 โดยในช่วงแรกของการกระบวนการผสมกัน รูปร่าง PDF จะมีลักษณะคล้ายกับฟังก์ชัน double Dirac-delta นั้นหมายความว่า สเกลาร์ทั้งสองเกือบจะไม่ได้ผสมกันเลย ถัดมารูปร่าง PDF จะค่อยเปลี่ยนแปลงตามทิศทางของลูกศรจนกระทั่งกลายเป็นการผสมเนื้อเดียว (homogeneous mixing) ซึ่งในช่วงสุดท้ายของการผสมกันนี้ รูปร่างจะใกล้เคียงกับฟังก์ชัน Gaussian หรือการกระจายปกติ



รูปที่ 2.15 รูปร่างของ Beta PDF

ฟังก์ชัน Beta ก็เป็นอีกทางเลือกหนึ่งที่น่าสนใจ เนื่องจากต้องการเพียงแค่สองตัวแปรคือ ค่าเฉลี่ยและค่าความแปรปรวนของของผสม ในการสร้างรูปร่าง PDF และที่สำคัญ ฟังก์ชัน Beta สามารถสร้างรูปร่าง PDF ได้หลากหลายขึ้นอยู่กับระดับค่าของความแปรปรวนดังแสดงในรูปที่ 2.15 เมื่อความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมมีค่าเพิ่มขึ้น (γ มีค่าน้อย) โดยที่ $\tilde{Z} = 0.5$ รูปร่างการกระจายตัวจะค่อย ๆ เปลี่ยนจากของผสมเนื้อเดียว (รูปประฆังคว่ำแคบรอบ ซึ่งคล้ายกับการกระจายตัวแบบ Gaussian) กลายเป็นการกระจายตัวแบบไม่ผสมกัน (รูป U ฐานกว้าง ซึ่งคล้ายกับการกระจายตัวแบบ Dirac-delta) ส่วนลักษณะการกระจายตัวรูป L จะเกิดขึ้นเมื่อ $\tilde{Z}$ มีค่าน้อย ซึ่งจะแสดงถึงพฤติกรรมของออกซิเจนเนื้อเดียว ในทำนองกลับกัน รูปร่าง J ซึ่งแสดงถึงพฤติกรรมของเชื้อเพลิงเนื้อเดียว จะเกิดขึ้นเมื่อ $\tilde{Z}$ มีค่ามาก นอกจากนี้ ข้อมูลของ DNS ยังแสดงให้เห็นว่า ฟังก์ชัน

Beta มีความเหมาะสมที่สุดสำหรับการจำลองรูปร่าง PDF ของสายการไหลสองชนิดที่กำลังผสมกัน [122] โดยทั่วไปแล้ว Beta PDF สามารถคำนวณได้ดังนี้ โดย $0 \leq Z \leq 1$

$$\tilde{P}(Z) = GZ^{\alpha-1}(1-Z)^{\beta-1} \quad (2.70)$$

และ

$$G = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \quad (2.71)$$

เมื่อ Γ คือฟังก์ชันแกมมา ส่วนตัวแปร α , β และ γ สามารถหาได้จาก

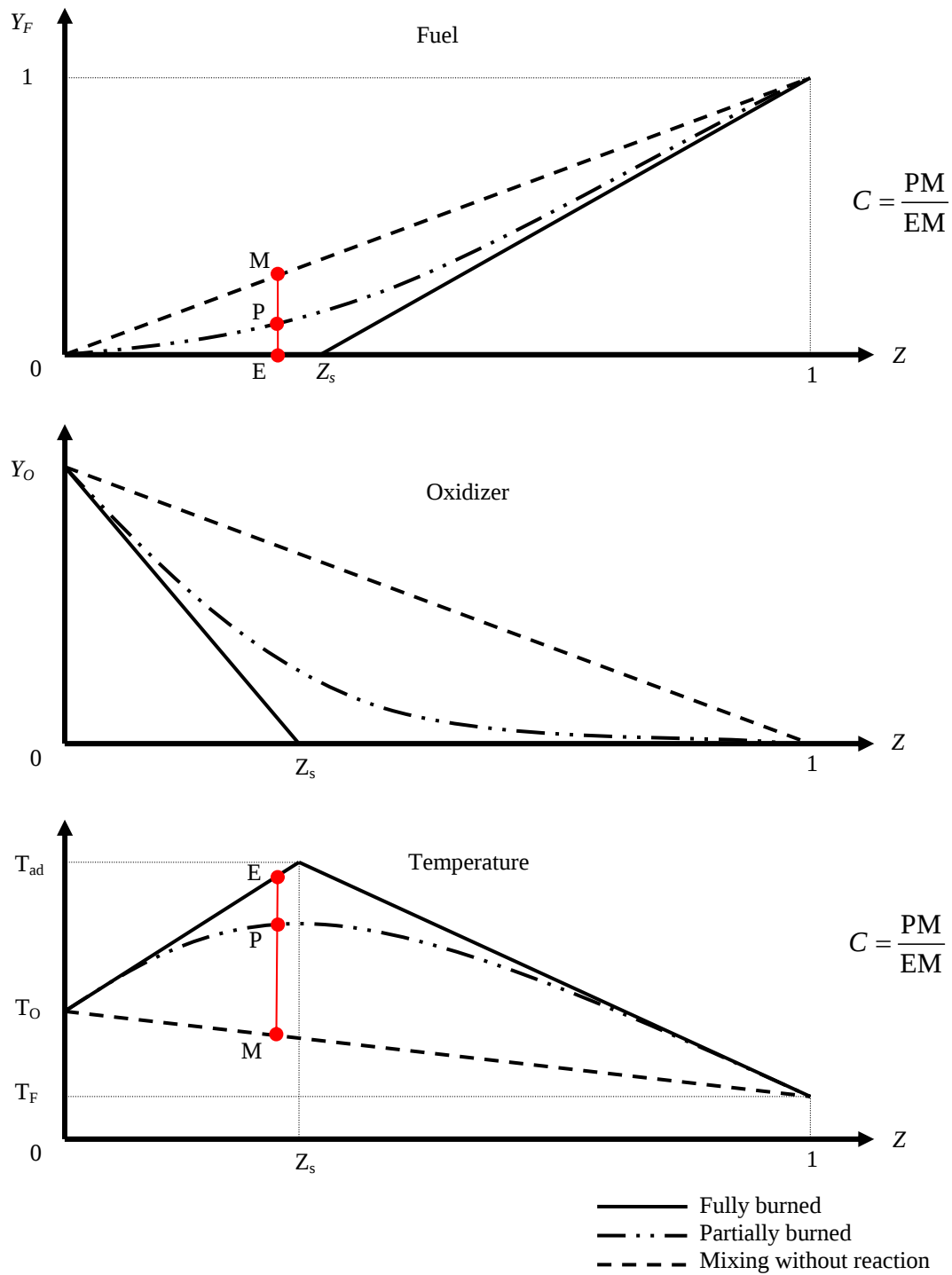
$$\alpha = \tilde{Z}\gamma \quad \beta = (1-\tilde{Z})\gamma \quad \gamma = \frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - 1 \quad (2.72)$$

2.3.7 Reaction Progress Variable

การเผาไหม้ของสเปรย์ภายในเครื่องยนต์จะเป็นการเผาไหม้ที่ผสมผสานกันระหว่างแบบ premixed และ non-premixed เนื่องจากบางส่วนของไอเชื้อเพลิงและอากาศ มีการผสมกันก่อนจะเกิดการลุกไหม้ (บริเวณรอบนอกของสเปรย์) ในขณะที่ในบริเวณแกนกลางของสเปรย์ซึ่งเต็มไปด้วยเชื้อเพลิงจะลุกไหม้ได้ยากและช้าเนื่องจากขาดออกซิเจน ดังนั้นจึงอาจพิจารณาได้ว่าการเผาไหม้สเปรย์เป็นแบบ partially premixed จากรูปที่ 2.16 จะแสดงถึงเส้นการเผาไหม้แบบ partially premixed ซึ่งวางตัวอยู่ระหว่างเส้นการผสมกัน (mixing line) และเส้นการเผาไหม้ทั้งหมด (fully burned line) ซึ่งให้หมายความว่า ส่วนผสมเชื้อเพลิงส่วนหนึ่งถูกเผาไหม้กลายเป็นก๊าซผลิตภัณฑ์แล้ว ในขณะที่ยังเหลือส่วนผสมบางส่วนที่ยังไม่ถูกเผาไหม้ ดังนั้น reaction progress variable จึงได้ถูกนิยามขึ้น เพื่อใช้เป็นเกณฑ์ในการพิจารณาถึงปริมาณเชื้อเพลิงที่ถูกเผาไหม้ ซึ่งตัวแปรนี้มีค่าอยู่ระหว่างศูนย์ (ที่สภาวะผสมกันโดยไม่เกิดปฏิกิริยา) ถึงหนึ่ง (ที่สภาวะเผาไหม้ทั้งหมด) นิยามที่เป็นที่นิยมของ reaction progress variable มีดังนี้

$$C \equiv \frac{Y_{F,mix}(Z) - Y_F(Z)}{Y_{F,mix}(Z) - Y_{F,dif}(Z)} \quad (2.73)$$

เมื่อ $Y_{F,dif}$ แสดงถึงสัดส่วนเชิงมวลของไอเชื้อเพลิงที่สภาวะเผาไหม้ทั้งหมด เมื่อพิจารณาจากรูปที่ 2.15 จะเห็นว่า reaction progress variable นั้นเป็นสัดส่วนของระยะห่างระหว่างเส้นผสมกันโดยไม่เกิดปฏิกิริยากับเส้นการเผาไหม้แบบ diffusion



รูปที่ 2.16 การกระจายตัวของไอเชื้อเพลิง ออกซิเจน และอุณหภูมิตามแกนสัดส่วนของผสม

ถ้าสมมุติว่า $Le = 1$ และค่าความจุความร้อนและน้ำหนักโมเลกุลคงที่ นิยาม reaction progress variable ข้างต้น จะสามารถเปลี่ยนรูปได้เป็น

$$C = \frac{T(Z) - T_{mix}(Z)}{T_{dif}(Z) - T_{mix}(Z)} \quad (2.74)$$

เมื่อ T_{diff} คืออุณหภูมิเปลว diffusion จากการเปรียบเทียบนิยามทั้งสองในการเผาไหม้แบบลามินาร์โดย Cant และคณะ [123] ซึ่งของไหลมีเทนวิ่งสวนทางกับอากาศร้อน พบว่า นิยาม reaction progress variable ที่อ้างอิงสัดส่วนเชิงมวลของไอเชื้อเพลิงจะทำนายได้แม่นยำกว่าแบบอ้างอิงอุณหภูมิ แต่อย่างไรก็ตาม ความแตกต่างนี้จะค่อย ๆ ลดลง เมื่อ strain rate ของเปลวเพิ่มขึ้น

นอกจากนี้ การนิยาม reaction progress variable อยู่ในรูปของผลรวมของสัดส่วนเชิงมวลของก๊าซผลิตภัณฑ์ก็เป็นที่ยอมรับ ซึ่งชนิดของก๊าซที่เลือกใช้จะแตกต่างกันไปบ้าง [117, 124-126] ตัวอย่างเช่น Ihme และ Pitsch [117] ให้นิยามไว้ว่า

$$C = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O} + Y_{H_2} \quad (2.75)$$

สำหรับสมการส่งถ่ายของค่าเฉลี่ยถ่วงน้ำหนักของ reaction progress variable, $\bar{C}$, สามารถคำนวณได้จาก

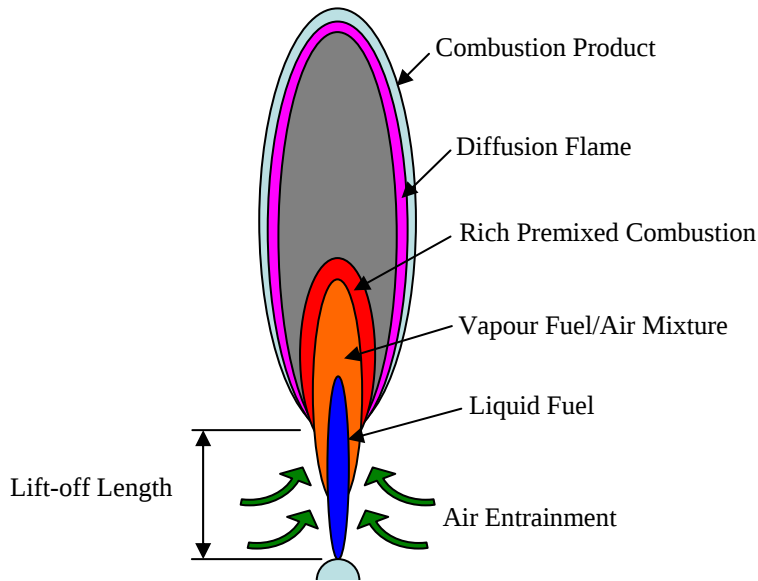
$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i \bar{C}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\bar{\rho} D_c + \frac{\mu_t}{Sc_c} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \right\} + \bar{\dot{\omega}} \quad (2.76)$$

โดยที่ $\bar{\dot{\omega}}$ คือค่าเฉลี่ยอัตราการเกิดปฏิกิริยา

2.3.8 ระยะเปลวลอยตัว (Lift-off Length)

หลังจากเกิดการลุกไหม้ของสเปรย์ดีเซล เปลวจะเคลื่อนที่อย่างรวดเร็วขยายไปจนคลุมบริเวณที่มีไอเชื้อเพลิง ยกเว้นบริเวณใกล้ลำหัวฉีด ซึ่งเปลวลักษณะนี้จะเรียกว่า เปลวลอยตัว (lifted flame) และระยะห่างจากหัวฉีดไปยังขอบของเปลวจะเรียกว่า ระยะเปลวลอยตัว (lift-off length) ซึ่งเป็นระยะที่ไอเชื้อเพลิงและอากาศเข้ามาผสมกันก่อนที่จะเกิดการเผาไหม้ขึ้น ดังแสดงแผนภาพในรูปที่ 2.17 ซึ่งนำเสนอโดย Dec [127] ต่อมา Siebers และคณะ [16] ได้ขยายผลการศึกษาและให้ความเห็นว่า ระยะเปลวลอยตัวจะเป็นตัวแปรที่สำคัญต่อการเกิดเขม่า จากการศึกษาโดยใช้ภาพถ่ายของ Dec [127] และแบบจำลองของ Chomiak และ Karlsson [128] ซึ่งแสดงให้เห็นว่า ไอเชื้อเพลิงและอากาศที่ผสมกันแล้วจะเกิดปฏิกิริยาอย่างรุนแรงในบริเวณส่วนผสมหนา (บริเวณสีแดง) ซึ่งอยู่ถัดจากระยะเปลวลอยตัวเล็กน้อย โดยปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นในบริเวณนี้ จะก่อให้เกิดการปล่อยความร้อนจำนวนมาก ส่งผลให้มีอุณหภูมิก๊าซที่สูง ก๊าซผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการเผาไหม้ในบริเวณส่วนผสมหนานี้จะปนไปด้วยเชื้อเพลิงที่ยังไม่เผาไหม้และเขม่า ซึ่งก๊าซเหล่านี้จะถูกพัดให้เคลื่อนที่ต่อไปยังปลายทาง โดยที่กระบวนการเผาไหม้ยังคงดำเนินต่อไป โดยทางทฤษฎีแล้วในเปลว diffusion การลุกไหม้แบบ stoichiometric จะเกิดขึ้นบริเวณรอบนอกของสเปรย์ [127, 129] และเขม่าที่เกิดขึ้นจะถูกเผาไหม้หมดในบริเวณนี้ แต่ในความเป็นจริง เขม่าบางส่วนได้เล็ดลอดออกไป เนื่องจากการดับลงของเปลวในบริเวณชอกแคบ ๆ หรือเวลาที่สั้นเกินไปในการเผาไหม้

เขม่าจะถูกพัดและสะสมมากขึ้นในบริเวณปลายทางของสเปรย์ [127, 130] ปริมาณของเขม่าจะลดลงเมื่อปริมาณอากาศที่มากขึ้นถูกดึงเข้ามาทำปฏิกิริยาในช่วงของระยะเปลวลอยตัว และจะไม่เกิดเขม่าเลย ถ้าปริมาณอากาศนี้มีมากเพียงพอในบริเวณการเผาไหม้ของส่วนผสมหนา [131] นอกจากนี้อากาศที่อยู่บริเวณด้านหน้าของปลายสเปรย์จะถูกดึงเข้ามาผสมและเผาไหม้ จึงทำให้มีอุณหภูมิสูงที่ปลายของสเปรย์ดังปรากฏในภาพถ่าย Schlieren และการลุกไหม้จะเกิดขึ้นต่อภายในหัวของสเปรย์ขณะที่ปลายของสเปรย์เคลื่อนที่ไปข้างหน้า



รูปที่ 2.17 แผนภาพของการเผาไหม้สเปรย์

เนื่องจากระยะเปลวลอยตัวมีผลต่อการออกแบบห้องเผาไหม้และปริมาณเขม่าที่เกิดขึ้น ดังนั้นจึงมีนักวิจัยจำนวนมาก ทำการศึกษาอิทธิพลของอุณหภูมิ ความหนาแน่นภายในห้องเผาไหม้ ความดัน ขนาดรูของหัวฉีด ที่มีผลต่อระยะเปลวลอยตัวในเครื่องยนต์ดีเซล DI [15, 16, 131-133] พบว่า ระยะเปลวลอยตัวจะลดลง เมื่ออุณหภูมิหรือความหนาแน่นภายในห้องเผาไหม้เพิ่มขึ้น และระยะเปลวลอยตัวจะเพิ่มขึ้น เมื่อความดันหรือขนาดรูของหัวฉีดเพิ่มขึ้น ซึ่งผลการศึกษาดังกล่าวสามารถนำมาสร้างความสัมพันธ์โดยใช้ power-law scaling ซึ่งเสนอโดย Siebers และ Higgins [15] และ Siebers และคณะ [16] ดังนี้

$$L_{f, measured} \propto (\Delta P_{inj})^{0.5} (T)^{-3.74} (\rho)^{-0.85} (Y_{O_2})^{-1.0} \quad (2.77)$$

โดย Siebers [15, 16] ให้ความเห็นว่า ระยะเปลวลอยตัวนั้นจะมีความสัมพันธ์กับขนาดรูของหัวฉีดน้อยมาก ซึ่งความเห็นดังกล่าว สอดคล้องกับผลการวิจัยของ Venugopal และ Abraham [134] ซึ่งเสนอความสัมพันธ์ไว้ดังนี้

$$L_{f,computed} \propto (\Delta P_{inj})^{0.36} (T)^{-2.78} (\rho)^{-0.76} (Y_{O_2})^{-0.82} \quad (2.78)$$

ต่อมา Frijters และคณะ [67] ทำการศึกษาถึงอิทธิพลของสภาวะการทำงานที่มีต่อระยะเปลวลอยตัว โดยทำการทดลองที่ความดันและขนาดของหัวฉีดคงที่ที่ 103 MPa และ 177 μm ตามลำดับ ซึ่งได้ความสัมพันธ์ดังนี้

$$L_{f,measured} \propto (\rho)^{-0.16} (T)^{-3.46} \quad (2.79)$$

นอกจากนี้ ผลการทดลองของ Pickett และคณะ [135] แสดงให้เห็นว่า เชื้อเพลิงที่มีเวลาหน่วงจุดระเบิดต่ำ จะส่งผลให้มีระยะเปลวลอยตัวต่ำด้วยเช่นกัน

ระยะเปลวลอยตัวจะนิยามว่า ระยะห่างสุดจากหัวฉีดไปยังตำแหน่งอุณหภูมิสูง ซึ่งโดยทั่วไปจะอ้างถึง ชีตเริ่มเปลี่ยน (threshold) ของก๊าซ OH หรือชีตเริ่มเปลี่ยนของอุณหภูมิ ซึ่งชีตเริ่มเปลี่ยนเหล่านี้จะแตกต่างกันไปตามนักวิจัย โดยในการทดลองจะนิยมใช้การเปล่งแสงของก๊าซ OH เป็นตัวระบุระยะเปลวลอยตัว ซึ่งระดับความเข้มของแสงที่เปล่งออกมาโดยก๊าซ OH จะสัมพันธ์กับอุณหภูมิ แต่จากการรวบรวมงานวิจัย ก็ยังไม่มีการระบุแน่ชัดว่า ค่าชีตเริ่มเปลี่ยนที่เหมาะสมควรเป็นเท่าไร เช่น อุณหภูมิที่ 2200 K เป็นค่าชีตเริ่มเปลี่ยนที่ใช้ในงานวิจัย [136, 137] แต่ที่อุณหภูมิต่ำกว่าคือ 1600 K ถูกเลือกใช้เป็นตัวกำหนดระยะเปลวลอยตัวโดย Lehtiniemi และคณะ [99]

บทที่ 3

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์

3.1 บทนำ

ในบทนี้จะกล่าวถึงชุดสมการควบคุม (governing equations) ทั้งหมดที่ใช้ในการอธิบายการเผาไหม้ของสเปรย์ โดยในส่วนแรกจะอธิบายถึงการสร้างแบบจำลองของสเปรย์ ซึ่งในที่นี้ สเปรย์จะถูกอธิบายได้จากโมเมนต์การกระจายตัวของขนาดละออง (Q_3 , Q_2 , Q_1 และ Q_0) ดังที่ได้กล่าวถึงในหัวข้อ 2.2.1 โดยโมเมนต์ดังกล่าวจะแสดงถึงปริมาตร พื้นที่ผิว รัศมี และจำนวนของละอองทั้งหมดตามลำดับ ซึ่งเพียงพอสำหรับการแสดงพฤติกรรมของการกระจายตัวของละอองสเปรย์ สำหรับชุดสมการควบคุมของก๊าซและละอองเหล่านี้ ได้ถูกสร้างบนพื้นฐานของค่าเฉลี่ยเชิงโมเมนต์ (moment-average quantity) ตามแนวคิดของ Beck [5] ซึ่งโมเมนต์เหล่านี้จะใช้ในการสร้างแบบจำลองย่อยของสเปรย์ซึ่งประกอบไปด้วยกระบวนการแตกตัว การชนกัน การระเหยของละออง และการปฏิสัมพันธ์ระหว่างก๊าซและของเหลว ในส่วนที่เหลือของบทนี้ จะกล่าวถึงการสร้างแบบจำลองการเผาไหม้ ซึ่งเป็นส่วนหลักของงานวิจัยนี้ ในงานวิจัยนี้ จะใช้แบบจำลองการเผาไหม้แบบ Steady Laminar Flamelet ซึ่งเป็นที่นิยมในปัจจุบันนี้ เนื่องจากความละเอียดถูกต้องที่สูงและใช้เวลาในการคำนวณไม่มาก ดังที่ได้กล่าวมาแล้วในหัวข้อ 2.3.3 แต่เนื่องจากขีดจำกัดหลักของแบบจำลองนี้คือ สามารถทำนายได้เฉพาะสถานะคงตัว ดังนั้นจึงไม่สามารถทำนายการจุดระเบิดเอง (ignition) และการดับลง (extinguishing) ของเปลวไฟได้ รวมถึงการทำนายเปลวลอยตัว (lifted flame) ได้ ดังนั้นจึงต้องมีการสร้างตัวแปรพิเศษเพิ่มขึ้นมาคือ reaction progress variable มาใช้ร่วมในการพิจารณา ซึ่งรายละเอียดของการสร้างแบบจำลองต่าง ๆ นี้จะถูกกล่าวต่อไป

3.2 สมการควบคุมสำหรับก๊าซ (Gas Phase Governing Equations)

ในการวิเคราะห์ปัญหาเกี่ยวกับของไหลสองสถานะ การปฏิสัมพันธ์ระหว่างก๊าซและของเหลวจะนำเสนอในรูปของ สัดส่วนช่องว่าง (void fraction, θ) ซึ่งนิยามไว้ดังนี้

$$\theta = 1 - \frac{V_{liquid}}{V_{cell}} \quad (3.1)$$

เมื่อ V_{cell} คือปริมาตรของเซลล์ซึ่งประกอบไปด้วยก๊าซและของเหลว โดยที่สัดส่วนช่องว่างสามารถคำนวณได้โดยตรงจากการกระจายของโมเมนต์ Q_3 ดังนั้นสมการอนุรักษ์มวลของก๊าซจึงสามารถแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta \bar{\rho}_g) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\theta \bar{\rho}_g \bar{U}_{gj}) = S_m \quad (3.2)$$

เมื่อ S_m คือ Source term ของการระเหยของละอองฝอยภายในปริมาตรควบคุม

ในการวิเคราะห์ปัญหาของสเปรย์ซึ่งมีความเร็วค่อนข้างสูง ดังนั้นจึงไม่คำนึงถึงอิทธิพลของแรงโน้มถ่วง ดังนั้นสมการอนุรักษ์โมเมนต์ที่รวมผลของความปั่นป่วนจึงสามารถแสดงได้ดังนี้

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\theta \bar{\rho}_g \bar{U}_{gi}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\theta \bar{\rho}_g \bar{U}_{gj} \bar{U}_{gi}) - \bar{U}_{gi} \left(\frac{\partial}{\partial t}(\theta \bar{\rho}_g) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\theta \bar{\rho}_g \bar{U}_{gj}) \right) = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \theta \left(\frac{\partial \bar{U}_{gi}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_{gj}}{\partial x_i} \right) \right) - \theta \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \theta \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}_g \tilde{k} \delta_{ij} + \mu_{eff} \frac{\partial \bar{U}_{gk}}{\partial x_k} \right) + S_m (\bar{U}_{l3i} - \bar{U}_{gi}) + S_{U_i} \end{aligned} \quad (3.3)$$

เมื่อ δ_{ij} คือ Kronecker delta และ S_{U_i} คือ source term ของโมเมนต์ที่ถ่ายเทระหว่างของเหลวและก๊าซ ในของไหลสถานะเดียว เทอมที่สามของสมการทางด้านซ้ายมือมีค่าเท่ากับศูนย์เนื่องจากเป็นผลคูณของสมการอนุรักษ์มวล [138] ในกรณีของไหลสองสถานะ เทอมดังกล่าวจะมีค่าไม่เท่ากับศูนย์ สำหรับเทอมรองสุดท้ายซึ่งเป็นเทอมแสดงถึงการเปลี่ยนแปลงของโมเมนต์จากความเร็วของเหลวกลายเป็นความเร็วก๊าซ เนื่องจากการเปลี่ยนสถานะ [139]

ค่า effective turbulent viscosity, μ_{eff} , สามารถหาได้จาก

$$\mu_{eff} = \mu_{lam} + \bar{\rho}_g C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (3.4)$$

เมื่อ C_μ มีค่าเท่ากับ 0.09 และเทอม μ_{lam} คือค่า molecular viscosity ซึ่งสามารถประมาณได้จากสูตรของ Sutherland ดังนี้

$$\mu_{lam} = \frac{A_1 \tilde{T}^{1.5}}{\tilde{T} + A_2} \quad (3.5)$$

เมื่อ A_1 และ A_2 คือค่าคงที่ ซึ่งในงานนี้กำหนดให้มีค่าเท่ากับ 1.458×10^{-6} และ 110.4 ตามลำดับ

ถึงแม้ว่าสมการอนุรักษ์โมเมนตัมจะไม่ปรากฏเทอมของการเผาไหม้ แต่ปฏิกิริยาเคมีจะมีผลอย่างมากต่อพฤติกรรมกรไหล เนื่องจากพลังงานความร้อนที่ส่งผ่านผิวหน้าของเปลว จะทำให้ความหนืด ความหนาแน่น และความเร็วของก๊าซเปลี่ยนแปลงไปอย่างมากเมื่อเทียบกับการไหลที่ปราศจากปฏิกิริยาเคมี

ในทำนองเดียวกัน สมการส่งถ่ายพลังงานสำหรับก๊าซ จะเพิ่มเทอมการถ่ายเทความร้อน เนื่องจากการระเหยและปฏิกิริยาเคมี เข้าไปในการวิเคราะห์ ซึ่งสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}_g \tilde{h}_g) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}_g \bar{U}_{gj} \tilde{h}_g) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_t} \theta \left(\frac{\partial \tilde{h}_g}{\partial x_j} \right) \right) - \theta \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{PU_{gj}}) + S_E + \bar{\omega}_F Q_F \quad (3.6)$$

เมื่อ S_E คือ source term ของการถ่ายเทความร้อนเนื่องจากการระเหย ส่วน Q_F คือความร้อนที่ปลดปล่อยเนื่องจากการเผาไหม้ และ $\bar{\omega}_F$ คืออัตราการเกิดปฏิกิริยาของเชื้อเพลิง

เมื่อละอองของเชื้อเพลิงเกิดการระเหย จะทำให้มวลของไอเชื้อเพลิงเพิ่มมากขึ้น และปะปนกับก๊าซอื่น ๆ ซึ่งเคลื่อนที่ด้วยความเร็วของก๊าซ จนในที่สุดเกิดการลุกไหม้ส่งผลให้อุณหภูมิสูงขึ้น และเกิดก๊าซผลิตภัณฑ์ตามมา ดังนั้นจึงสามารถแสดงสมการส่งถ่ายของสัดส่วนของผสมได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}_g \bar{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}_g \bar{U}_{gj} \bar{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \theta \left(\frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_j} \right) \right) + S_m \quad (3.7)$$

โดย source term ที่เพิ่มเข้าไปในสมการนี้ เนื่องจากเกิดจากการระเหยของละอองเชื้อเพลิง ซึ่งไม่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาเคมีใด ๆ ส่วนสมการส่งถ่ายสำหรับค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมสามารถแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}_g \bar{Z}''^2) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}_g \bar{U}_{gj} \bar{Z}''^2) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_{Z''^2}} \theta \left(\frac{\partial \bar{Z}''^2}{\partial x_j} \right) \right) + 2 \frac{\mu_t}{Sc_{Z''^2}} \left(\frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - \bar{\rho} C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\bar{k}} \bar{Z}''^2 \quad (3.8)$$

โดยที่ค่า Sc มีค่าเท่ากับ 0.9 และ C_χ เท่ากับ 2.0 [103]

แบบจำลองความปั่นป่วน $k-\varepsilon$ ของ Launder และ Spalding [140] ถูกเลือกใช้ในงานวิจัยนี้ ซึ่งประกอบไปด้วยสมการส่งถ่าย turbulent kinetic energy

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta \bar{\rho}_g \tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\theta \bar{\rho}_g \bar{U}_{gj} \tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \theta \left(\frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right) \right) + \theta P_k - \bar{\rho}_g \tilde{\varepsilon} \theta \quad (3.9)$$

และสมการส่งถ่าย dissipation rate

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\theta \bar{\rho}_g \tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\theta \bar{\rho}_g \bar{U}_{gj} \tilde{\varepsilon}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \theta \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) \right) \\ &+ \theta C_{\varepsilon 1} P_k \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} - \theta C_{\varepsilon 2} \frac{\bar{\rho}_g \tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} + \theta C_{\varepsilon 3} \bar{\rho}_g \tilde{\varepsilon} \frac{\partial \bar{U}_{gj}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (3.10)$$

โดยที่ turbulence kinetic energy production rate หาได้จาก

$$P_k = \bar{\rho}_g C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \left(\frac{\partial \bar{U}_{gi}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_{gj}}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_{gj}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\bar{\rho}_g \tilde{k} + \bar{\rho}_g C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \frac{\partial \bar{U}_{gk}}{\partial x_k} \right) \frac{\partial \bar{U}_{gj}}{\partial x_i} \quad (3.11)$$

ค่าคงที่ที่เลือกใช้ในงานนี้มีค่าดังนี้ $C_{\varepsilon 1} = 1.44$, $C_{\varepsilon 2} = 1.92$, $C_{\varepsilon 3} = -0.373$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$

3.3 สมการควบคุมสำหรับของเหลว (Liquid Phase Governing Equations)

ในหัวข้อนี้ จะอธิบายถึงสมการส่งถ่ายสำหรับโมเมนต์และความเร็วเฉลี่ยเชิงโมเมนต์ ของ ละอองสเปรย์ที่เปลี่ยนแปลง เนื่องจากการแตกตัว การชนกัน และการระเหยของละอองสเปรย์

3.3.1 แบบจำลองการส่งถ่ายโมเมนต์ละออง (Droplet Moment Transport Models)

จากที่ได้อธิบายไปแล้วว่า โมเมนต์ละออง Q_3 จะแสดงถึงมวลของละอองเหลวต่อหน่วย ปริมาตร ดังนั้นสมการส่งถ่ายสำหรับโมเมนต์ละอองจึงสามารถพิสูจน์ได้จากสมการอนุรักษ์มวล โดย เริ่มต้นจากการแบ่งกลุ่มละอองออกเป็นกลุ่มย่อย ๆ ดังนั้นสมการอนุรักษ์มวลของกลุ่มละอองขนาด k ซึ่งครอบคลุมปริมาตรเป็นสัดส่วน γ_k สามารถแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_l \gamma_k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_l \gamma_k U_{lkj}) = -S_{mk} \quad (3.12)$$

เมื่อ S_{mk} คือ source term ของการถ่ายเทมวลเนื่องจากการระเหยจากกลุ่มละออง k โดย สมการนี้สามารถเขียนในรูปของจำนวนและขนาดของละอองในกลุ่มนี้ได้ดังนี้

$$\frac{4\pi}{3} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_l n_k r_k^3) + \frac{4\pi}{3} \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_l n_k r_k^3 U_{lkj}) = -S_{mk} \quad (3.13)$$

โดยสมมุติว่า จำนวนของละอองในแต่ละกลุ่มรัศมีมีจำนวนน้อย ดังนั้นสมการซึ่งแสดงถึงผลรวมของละอองทุกขนาด สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$\frac{4\pi}{3} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^\infty \rho_l n(r) r^3 dr \right) + \frac{4\pi}{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\int_0^\infty \rho_l n(r) r^3 U_{lj} dr \right) = -S_m \quad (3.14)$$

จากนิยามของโมเมนต์สเปร์ย์และค่าเฉลี่ยเชิงโมเมนต์ สามารถแสดงได้เป็น

$$\frac{4\pi}{3} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_l Q_3) + \frac{4\pi}{3} \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_l Q_3 U_{l3j}) = -S_m \quad (3.15)$$

จากความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนช่องว่างและโมเมนต์ Q_3 สามารถเขียนสมการของต้นใหม่ได้เป็น

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_l (1-\theta)) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_l (1-\theta) U_{l3j}) = -S_m \quad (3.16)$$

ซึ่งสมการนี้จะแสดงถึงสมการความต่อเนื่องของของเหลว และความเร็วที่ปรากฏในสมการจะเป็นความเร็วเฉลี่ยของโมเมนต์นั้น ๆ

นอกจากนั้น สมการส่งถ่ายสำหรับโมเมนต์ที่เหลือก็มีรูปแบบคล้ายกัน แตกต่างกันที่ source term เท่านั้น สำหรับสมการส่งถ่ายโมเมนต์ Q_2 ของสเปร์ย์สามารถแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial t} (Q_2) + \frac{\partial}{\partial x_j} (Q_2 U_{l2j}) = B_{Q2} + C_{Q2} - S_{Q2} \quad (3.17)$$

เมื่อ B_{Q2} , C_{Q2} และ S_{Q2} เป็น source term เนื่องจากการแตกตัว การชนกัน และการระเหยของละอองตามลำดับ สำหรับแบบจำลองสเปร์ย์นี้ ต้องการเพียงแค่สมการส่งถ่ายโมเมนต์ Q_2 และ Q_3 เท่านั้น ส่วนโมเมนต์ที่เหลือ Q_1 และ Q_0 สามารถหาได้จากการกระจายตัวของละออง

3.3.2 สมการส่งถ่ายสำหรับของเหลว (Liquid Phase Transport Equations)

สมการจะถูกเริ่มพิสูจน์มาจากสมการในรูปของ Lagrangian สำหรับกลุ่มละอองขนาดต่าง ๆ ดังที่ได้กล่าวมาแล้วในสมการส่งถ่ายโมเมนต์ละออง และรายละเอียดที่มาของชุดสมการสามารถอ่านเพิ่มเติมได้จาก Beck [5] ดังนั้นสมการโมเมนต์สำหรับของเหลวสามารถแสดงได้เป็น

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_l(1-\theta)U_{l3i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_l(1-\theta)U_{l3i}U_{l3j}) + U_{l3i}S_m = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho_l(1-\theta)\sigma_v\nu_l\frac{\partial U_{l3i}}{\partial x_j}\right) - S_{U_{3i}} \quad (3.18)$$

เมื่อ σ_v คือค่าสัมประสิทธิ์ของ Melville และ Bray [141], ν_l คือ turbulent equivalent viscosity, S_m และ $S_{U_{3i}}$ เป็น source term ของการถ่ายเทมวลและโมเมนต์ ตามลำดับ

ส่วนสมการที่เหลือสำหรับความเร็วเฉลี่ยเชิงโมเมนต์ สามารถพิสูจน์ในทำนองเดียวกัน ดังอธิบายรายละเอียดใน Beck [5] ดังนั้น

$$\frac{\partial}{\partial t}(Q_2U_{l2i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(Q_2U_{l2i}U_{l2j}) + (U_{l3i} - U_{l2i})B_{Q2} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(Q_2\sigma_v\nu_l\frac{\partial U_{l2i}}{\partial x_j}\right) - S_{U_{2i}} - U_{l2i}S_{Q2} \quad (3.19)$$

เมื่อ $S_{U_{2i}}$ และ B_{Q2} คือ source term สำหรับโมเมนต์และการแตกตัว

สมการพลังงานของเหลวสามารถพิสูจน์ได้ในทำนองเดียวกัน เพื่อให้ง่ายต่อการวิเคราะห์ จึงสมมุติว่า อุณหภูมิภายในละอองคงที่ ไม่ขึ้นอยู่รัศมี ดังนั้นสมการพลังงานสามารถแสดงได้เป็น

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_l(1-\theta)h_l) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_l(1-\theta)U_{l3j}h_l) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho_l(1-\theta)\sigma_v\nu_l\frac{\partial h_l}{\partial x_j}\right) - S_E \quad (3.20)$$

เมื่อ S_E คือ source term การถ่ายเทความร้อนเนื่องจากการระเหย

3.3.3 แบบจำลองการแตกตัวของละออง (Droplet Breakup Models)

โดยทั่วไปแล้ว การแตกตัวของละอองเกิดขึ้นในสองลักษณะคือ bag และ stripping breakup จากสหสัมพันธ์ของ Reitz และ Diwakar [25] การแตกตัวของละอองแบบ bag จะเกิดขึ้นได้ต่อเมื่อ

$$We = \frac{\rho_g U_{rel}^2 d}{\sigma_l} > 12.0 \quad (3.21)$$

และค่ารัศมีวิกฤตที่สอดคล้องมีค่าเป็น

$$r_b = \frac{6\sigma_l}{\rho_g U_{rel}^2} \quad (3.22)$$

ในขณะที่การแตกตัวแบบ stripping จะเกิดขึ้นเมื่อ

$$\frac{We}{\sqrt{Re}} > 0.5 \quad (3.23)$$

และค่ารัศมีวิกฤตที่สอดคล้องสามารถคำนวณได้จาก

$$r_s = \frac{\sigma_l^2}{2\rho_g U_{rel}^3 \mu_g} \quad (3.24)$$

นอกเหนือจากขนาดรัศมีวิกฤตที่ทำให้เกิดการแตกตัวของละอองแล้ว ช่วงเวลาวิกฤตก็มีผลต่อการแตกตัวด้วย จากงานวิจัยของ Reitz และ Diwakar [25] ช่วงเวลาวิกฤตสำหรับการแตกตัวแบบ bag ประมาณได้จาก

$$\tau_b = \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{\rho_l d^3}{\sigma}} \quad (3.25)$$

และสำหรับการแตกตัวแบบ stripping หาได้จาก

$$\tau_s = \frac{C_s d}{2U_{rel}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (3.26)$$

Nicholls [142] ได้เสนอค่าคงที่ C_s มีค่าเป็นหนึ่งในสี่ แต่ Reitz และ Diwakar [25] แย้งว่า ควรมีค่าเป็น 20 จากผลการทดลอง แต่ในงานวิจัยนี้เลือกใช้ค่าเท่ากับหนึ่ง เพราะทำให้ผลการทำนายที่ดีเมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลอง [5]

จำนวนละอองที่จะแตกตัวเกิดขึ้นก็ต่อเมื่อมีรัศมีมากกว่ารัศมีวิกฤต และจะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับช่วงเวลาวิกฤตดังแสดงในสมการ

$$\frac{\delta t}{\tau} \quad (3.27)$$

เมื่อ δt คือ time step และ τ คือช่วงเวลาวิกฤตของละอองที่ไม่เสถียรพร้อมที่จะแตกตัว ดังที่แสดงในสมการข้างต้น

จากข้อสมมุติฐานของ Faeth และคณะ [143] ว่า ขนาดของละอองที่แตกตัวแล้วจะมีขนาดเท่ากับ Sauter Mean Diameter ซึ่งสมมุติฐานนี้ จะให้ผลการทำนายที่ค่อนข้างดี [6] ดังนั้น สหสัมพันธ์สำหรับการแตกตัวแบบ stripping จึงแสดงได้ดังนี้

$$r_{32,out} = 6.2 \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0.25} \left(\frac{\mu_l}{2\rho_l U_{rel}} \right)^{0.5} r_{in}^{0.5} \quad (3.28)$$

สมมุติว่า ในการแตกตัว ปริมาตรของละอองจะไม่มีการเปลี่ยนแปลง ดังนั้นการเปลี่ยนแปลงของโมเมนต์ Q_2 เนื่องจากการแตกตัวของละอองเดี่ยวสามารถหาได้จาก

$$Q_{2,out} - Q_{2,in} = \frac{r_{in}^3}{6.2 \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0.25} \left(\frac{\mu_l}{2\rho_l U_{rel}} \right)^{0.5} r_{in}^{0.5}} - \frac{r_{in}^3}{r_{in}} \quad (3.29)$$

source term ของโมเมนต์ Q_2 เนื่องจากการแตกตัว จึงสามารถหาได้จากนำสมการข้างต้นมาหารด้วยช่วงเวลาวิกฤต แล้วอินทิเกรตตลอดขนาดของละอองจะได้

$$B_{Q_{2,s}} = \frac{(Q_{1,s} Q_{2,s})^{0.5}}{6.2 \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0.25} \left(\frac{\mu_l}{2\rho_l U_{rel}} \right)^{0.5} \frac{C_s}{U_{rel}} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0.5}} - \frac{Q_{1,s}}{\frac{C_s}{U_{rel}} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0.5}} \quad (3.30)$$

เมื่อ $Q_{1,s}$ และ $Q_{2,s}$ เป็นผลรวมของรัศมีและรัศมียกกำลังสองของละอองที่แตกตัว ในการวิเคราะห์ โมเมนต์ที่ไม่เป็นจำนวนเต็ม $Q_{1.5,s}$ สามารถประมาณได้จาก $(Q_{1,s} Q_{2,s})^{0.5}$

ในกรณีการแตกตัวแบบ bag ซึ่งยังไม่มีสหสัมพันธ์ที่เหมาะสมในปัจจุบัน ดังนั้นจึงสมมุติว่า พื้นที่ผิวของละอองจะเพิ่มขึ้นเป็นสองเท่าภายหลังการแตกตัว ซึ่งจะเทียบเท่ากับละอองย่อย 8 ละออง เกิดขึ้นภายหลังการแตกตัว ดังนั้น

$$\frac{\delta Q_2}{\delta t} = \frac{r_{in}^{0.5}}{\pi \left(\frac{\rho_l}{2\sigma} \right)^{0.5}} \quad (3.31)$$

source term ซึ่งเป็นผลรวมของละอองที่เกิดการแตกตัวแบบ bag สามารถประมาณได้จาก

$$B_{Q2,b} = \frac{(Q_{0,b} Q_{1,b})^{0.5}}{\pi \left(\frac{\rho_l}{2\sigma} \right)^{0.5}} \quad (3.32)$$

เมื่อ $Q_{1,b}$ และ $Q_{0,b}$ แสดงถึงผลรวมของรัศมีและจำนวนของละอองทั้งหมดที่เกิดการแตกตัว

3.3.4 แบบจำลองการชนกันของละออง (Droplet Collision Models)

ในการคำนวณของแบบจำลองการชนกันของละออง ในงานวิจัยนี้ จะอ้างอิงแบบจำลองกึ่งเชิงประจักษ์ (semi-empirical model) ซึ่งจะประกอบไปด้วย 3 ขั้นตอนหลัก เริ่มต้นจาก การคำนวณจำนวนครั้งของการชนกันระหว่างละออง โดยใช้ความถี่ของการชนตามหลักการของ O'Rourke และ Bracco [26] ความน่าจะเป็น P_n สำหรับการชน n ครั้งระหว่างละอองภายในเซลล์ที่คำนวณในหนึ่งช่วงเวลาคำนวณ สามารถประมาณได้จากทฤษฎีการกระจายของ Poisson ซึ่งแสดงได้ดังนี้

$$P_n = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!} \quad (3.33)$$

เมื่อ $\bar{n}$ คือค่าเฉลี่ยการชนกันของละออง ซึ่งสามารถหาได้จาก

$$\bar{n} = \frac{c\pi}{V_{cell}} (r_1 + r_2)^2 U_{rel} \delta t \quad (3.34)$$

เมื่อ จำนวนละอองของกลุ่มละอองที่มีรัศมีเล็กกว่าให้มีค่าเท่ากับ c หลังจากนั้นตัวแปรสุ่มซึ่งมีค่าอยู่ระหว่าง 0 ถึง 1 ถูกนำมาใช้เพื่อพิจารณาว่า การชนจะเกิดขึ้นหรือไม่ ความน่าจะเป็นของการชนระหว่างสองละอองต่อหน่วยปริมาตรต่อหน่วยเวลาในปริมาตรควบคุมสามารถหาได้จาก

$$P_{coll} = \frac{\pi}{V_{cell}^2} (r_i + r_j)^2 U_{rel} \quad (3.35)$$

เนื่องจากต้องการเทอมที่เกี่ยวข้องกับโมเมนต์การกระจายตัวของจำนวนละอองปรากฏในสมการ ดังนั้นจึงต้องคูณเทอมกระจายตัวของจำนวนละอองที่เหมาะสมเข้าไปในสมการ แล้วจึงอินทิเกรตสมการตลอดขนาดของละออง ความน่าจะเป็นของแต่ละการชนจะพิจารณาเป็นสองเท่า ดังนั้นจำนวนการชนทั้งหมดต่อหน่วยปริมาตรต่อหน่วยเวลาหาได้จาก

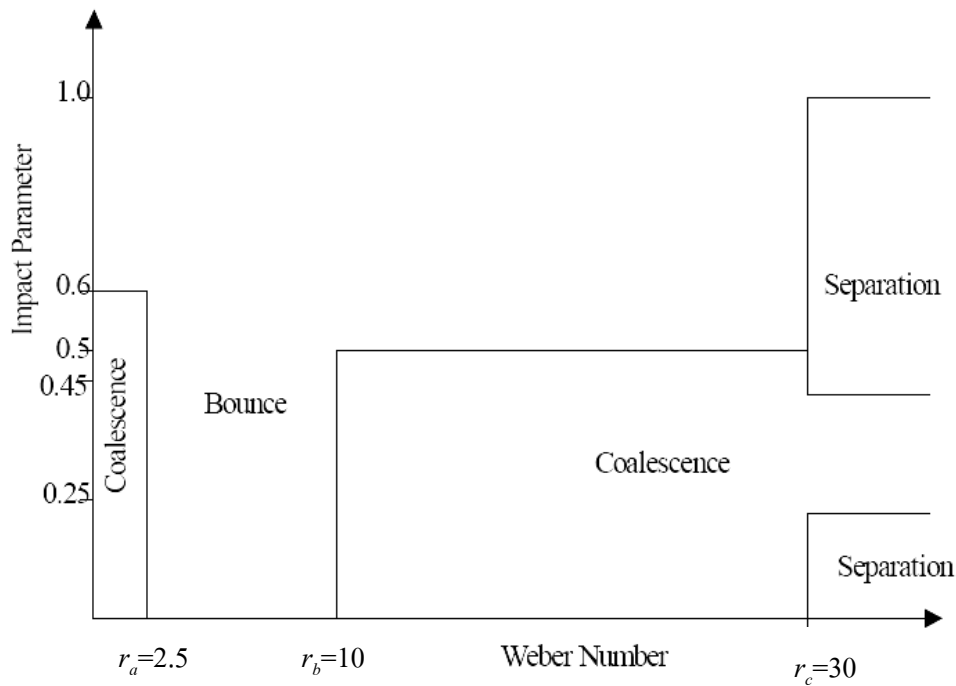
$$N_{coll} = \frac{1}{2} \frac{\pi}{V_{cell}^2} \iint (r_i + r_j)^2 U_{rel} n(r_i) n(r_j) dr_i dr_j \quad (3.36)$$

ซึ่ง U_{rel} จะเป็นฟังก์ชันของ r_i และ r_j แต่ความสัมพันธ์ที่แท้จริงยังคงคลุมเครือ นอกเหนือจากขึ้นอยู่กับขนาดของละอองแล้ว ยังขึ้นอยู่กับทิศทางการเคลื่อนที่ของละอองด้วย ดังนั้นในแบบจำลองนี้ จึงสมมุติค่าดังกล่าวประมาณเท่ากับความเร็วสัมพัทธ์เฉลี่ยระหว่างละอองที่ชนกันทั้งหมด จะได้

$$N_{coll} = C_{coll} \pi \bar{U}_{rel} (Q_0 Q_2 + Q_1^2) \quad (3.37)$$

เมื่อ C_{coll} คือค่าคงที่ โดยทั่วไปจะมีค่าเท่ากับ 0.15 ความเร็วสัมพัทธ์ระหว่างละอองสามารถประมาณได้โดย สมมุติให้ละอองขนาดใหญ่เคลื่อนที่ด้วยความเร็วเฉลี่ยเชิงมวล และละอองขนาดเล็กเคลื่อนที่เท่ากับความเร็วของก๊าซ นั่นหมายความว่า ความเร็วสัมพัทธ์ของละอองจะเท่ากับผลต่างของความเร็วเฉลี่ยเชิงมวลของของเหลวและความเร็วเฉลี่ยของก๊าซ

ในขั้นตอนถัดไป จะคำนวณถึงจำนวนผลลัพธ์ที่เกิดจากการชนกันที่เกิดในช่วง coalescence, bounce และ separation สองตัวแปรที่สำคัญที่ใช้ในการคำนวณหาสัดส่วนดังกล่าวคือ Weber number และ impact parameter, b Qian และ Law [34] ได้เสนอแผนผังการชนของละอองไฮโดรคาร์บอนในเทอมของ Weber number และ impact parameter ดังแสดงในรูปที่ 2.6 เพื่อให้ง่ายต่อการประยุกต์ Beck [5] ได้ปรับปรุงแผนผังดังกล่าวดังแสดงในรูป 3.1



รูปที่ 3.1 แผนผังการชนที่ปรับปรุงโดย Beck [5]

รัศมีวิกฤตที่คำนวณได้จากค่า Weber number วิกฤตดังกล่าวแสดงตัวเลขบนแผนผัง จากงานวิจัยของ Orme [30] ผลลัพธ์ที่เกิดจากการชนกันจะขึ้นอยู่กับค่า Weber number ของละออง

ขนาดเล็กกว่าและค่า impact parameter ความน่าจะเป็นเนื่องจากการชนของละอองขนาดเล็กกว่าจะตกในช่วงระหว่างรัศมีวิกฤตใด ๆ หาได้จาก

$$\begin{aligned} P(r_{\text{smaller}} < r_a) &= P(r < r_a)(2 - P(r < r_a)) \\ P(r_b < r_{\text{smaller}} < r_c) &= P(r_b < r < r_c)(P(r_b < r < r_c) + 2P(r > r_c)) \\ P(r_{\text{smaller}} > r_c) &= P(r > r_c)P(r > r_c) \end{aligned} \quad (3.38)$$

โดยพิจารณาขนาดของละอองทั้งสองเป็นเหตุการณ์อิสระต่อกัน ค่าดังกล่าวข้างต้นเป็นผลรวมของความน่าจะเป็นที่ละอองแรกจะตกอยู่ในช่วงรัศมีที่ต้องการและละอองที่สองตกในช่วงรัศมีที่เล็กกว่า และความน่าจะเป็นที่ละอองที่สองตกในช่วงที่ต้องการโดยละอองแรกตกในช่วงที่มีรัศมีมากกว่า ความน่าจะเป็นของละอองขนาดเล็กกว่าจะตกอยู่ในช่วงระหว่าง r_a และ r_b นั้นเป็นกรณีที่ไม่น่าสนใจเนื่องจากอยู่ในช่วง bounce ซึ่งในการชนแบบนี้ จะไม่มีการเปลี่ยนแปลงทั้งมวล พื้นที่ผิวและโมเมนตัมของละออง ดังนั้นจึงไม่พิจารณาการชนในช่วงนี้ในแบบจำลอง

จากแผนผังในรูปที่ 3.1 แสดงให้เห็นว่า ละอองขนาดเล็กกว่าซึ่งมีรัศมีน้อยกว่า r_a จะมีความน่าจะเป็นที่ผลจากการชนเป็นแบบ coalescence มีค่า 0.6 และความน่าจะเป็นที่ผลของการชนเป็นแบบ bounce จะมีค่า 0.4 ส่วนความน่าจะเป็นของการชนแบบ coalescence และ separation ของละอองขนาดเล็กกว่าที่รัศมีใด ๆ สามารถประมาณได้ในทำนองเดียวกัน โดยค่าความน่าจะเป็นที่เกิดขึ้นในแต่ละกรณี ได้สรุปไว้ในตาราง 3.1

ตารางที่ 3.1 ความน่าจะเป็นของผลลัพธ์ที่เกิดจากการชน [5]

	P_{coal}	P_{sep}
$r_{\text{smaller}} < r_a$	0.6	0
$r_b < r_{\text{smaller}} < r_c$	0.5	0
$r_{\text{smaller}} > r_c$	0.2	0.8

ดังนั้นความน่าจะเป็นที่จะเกิดการชนแบบ coalescence ทั้งหมด สำหรับละอองสามารถประมาณได้จาก

$$P_{\text{coal}} = P_{\text{coal},a} + P_{\text{coal},b} + P_{\text{coal},c} \quad (3.39)$$

โดย

$$\begin{aligned} P_{\text{coal},a} &= 0.6P(r < r_a)(2 - P(r < r_a)) \\ P_{\text{coal},b} &= 0.5P(r_b < r < r_c)(P(r_b < r < r_c) + 2P(r > r_c)) \\ P_{\text{coal},c} &= 0.2P(r > r_c)P(r > r_c) \end{aligned} \quad (3.40)$$

เป็นความน่าจะเป็นของการชนที่ละอองขนาดเล็กกว่าอยู่ในแต่ละช่วงของรัศมีวิกฤต ส่วนความน่าจะเป็นของการชนแบบ separation นั้น สามารถประมาณได้โดยตรงจาก

$$P_{sep} = 0.8P(r > r_c) P(r > r_c) \quad (3.41)$$

ในขั้นตอนสุดท้าย เป็นการพิจารณาถึงผลจากการชน ที่มีต่อการเปลี่ยนแปลงของพื้นที่ผิวของละอองภายหลังการชน โดยมวลของละอองยังคงไม่เปลี่ยนแปลง การเปลี่ยนแปลงดังกล่าวอยู่บนสมมติฐานว่า การชนของสองละอองที่มีรัศมีเท่ากัน จะทำให้เกิดการรวมตัวเป็นละอองเดียว (coalescence) หรือแตกตัวเป็นละอองย่อยเป็น 5 ละออง (separation) ที่มีรัศมีเท่ากัน ดังนั้น ปริมาตรของละอองรวมจะไม่มีการเปลี่ยนแปลง รัศมีของละอองก่อนเกิดการชน r_{in} จะขึ้นอยู่กับค่า Weber number และแสดงค่าในตาราง 3.2 สำหรับในแต่ละกรณี นอกจากนี้ ยังแสดงถึงค่าการเปลี่ยนแปลงของรัศมียกกำลังสอง δQ_2 ที่เกิดขึ้นภายหลังการชน

ตารางที่ 3.2 ผลการเปลี่ยนแปลงของพื้นที่ผิวของละอองภายหลังการชน [5]

	Initial Droplet Size, r_{in}	Change in Square of Radius
$r_{smaller} < r_a$	r_a	$\delta Q_{2,a} = (2^{2/3} - 2)r_{in}^2 = -0.41 r_{in}^2$
$r_b < r_{smaller} < r_c$	$0.5 (r_b + r_c)$	$\delta Q_{2,b} = (2^{2/3} - 2)r_{in}^2 = -0.41 r_{in}^2$
$r_{smaller} > r_c$ (coalescence)	r_c	$\delta Q_{2,c} = (2^{2/3} - 2)r_{in}^2 = -0.41 r_{in}^2$
$r_{smaller} > r_c$ (separation)	r_c	$\delta Q_{2,sep} = (5 \times 0.4^{2/3} - 2)r_{in}^2 = 0.71 r_{in}^2$

ดังนั้น source term สำหรับโมเมนต์ Q_2 เนื่องจากการชนสามารถสรุปได้ดังนี้

$$C_{Q_2} = N_{coll} (P_{coal,a} \delta Q_{2,a} + P_{coal,b} \delta Q_{2,b} + P_{coal,c} \delta Q_{2,c} + P_{sep} \delta Q_{2,sep}) \quad (3.42)$$

3.3.5 แบบจำลองการต้านระหว่างสถานะ (Inter-phase Drag Models)

แรงต้านจะมีผลต่อความเร่งของละออง ซึ่งส่งผลโดยตรงกับโมเมนตัมของละอองเหลว โดย source term ของโมเมนตัมเนื่องจากแรงต้าน สำหรับกลุ่มละอองขนาด k สามารถเขียนเป็นสมการได้ดังนี้

$$S_{U_{3j}} = \rho_l \gamma_k \frac{DU_{kj}}{Dt} \quad (3.43)$$

ทำการอินทิเกรตตลอดช่วงขนาดของละออง จะได้การเปลี่ยนแปลงโมเมนตัมรวมดังนี้

$$S_{U_{3j}} = \int_0^\infty \frac{4\pi}{3} \rho_l n(r) r^3 \frac{DU_j}{Dt} dr \quad (3.44)$$

โดยที่ Lagrangian derivative ซึ่งขึ้นอยู่กับรัศมีของละอองหาได้จาก

$$\frac{DU_j}{Dt} = \frac{3}{8} \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{|U_{rel}|}{r} C_D U_{rel,j} \quad (3.45)$$

เมื่อ ค่าสัมประสิทธิ์แรงต้าน, C_D , สามารถหาได้จากสหสัมพันธ์ของ Wallis [144] สำหรับวัตถุทรงกลม

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) \quad Re < 1000 \quad (3.46)$$

และ

$$C_D = 0.424 \quad Re \geq 1000 \quad (3.47)$$

สมมุติว่า ความเร็วสัมพัทธ์ระหว่างของเหลวและก๊าซไม่ขึ้นอยู่กับขนาดของละออง สำหรับละอองที่มีค่า Reynolds number ต่ำกว่า 1000 ค่า source term ซึ่งได้จากการพิสูจน์สมการข้างต้นได้ผลลัพธ์ดังนี้

$$S_{U_{3j}} = 6\pi\mu_g U_{rel,j} Q_1 + 1.8\pi(\rho_g |U_{rel}| Q_2)^{0.687} \left(\frac{\mu_g Q_1}{2} \right)^{0.313} U_{rel,j} \quad (3.48)$$

ค่า source term สำหรับโมเมนตัมของความเร็วเฉลี่ยเชิงพื้นที่ผิวสามารถพิสูจน์ได้ในทำนองเดียวกัน โดยเริ่มต้นจาก

$$S_{U_{2j}} = \int_0^\infty n(r) r^2 \frac{DU_j}{Dt} dr \quad (3.49)$$

ซึ่งความเร็วที่ใช้ในการพิสูจน์นี้ จะใช้ความเร็วเฉลี่ยเชิงพื้นที่ผิว ผลลัพธ์สุดท้ายที่ได้เป็นดังนี้

$$S_{U_{2j}} = \frac{9}{2} \frac{Q_0}{\rho_l} U_{rel,j} \mu_g + \frac{1.35}{\rho_l} (\rho_g |U_{rel}| Q_1)^{0.687} \left(\frac{\mu_g Q_0}{2} \right)^{0.313} U_{rel,j} \quad (3.50)$$

3.3.6 แบบจำลองอุณหภูมิของละออง (Liquid Phase Temperature Models)

เนื่องจากสมการส่งถ่ายโมเมนต์ของละอองที่ใช้ในงานวิจัยนี้อ้างอิง Q_3 และ Q_2 ดังนั้นอุณหภูมิที่ใช้ในแบบจำลองจึงมีอุณหภูมิเฉลี่ยเชิงปริมาตรและอุณหภูมิเฉลี่ยเชิงพื้นที่ผิว ซึ่งแบบจำลองนี้ได้ถูกพัฒนาโดย Watkins [11] โดยสมมติว่า การกระจายตัวของอุณหภูมิภายในละอองทรงกลมเป็นพาราโบลา ซึ่งมีเงื่อนไขขอบเขตคือ $T=T_s$ ที่ $r=r_s$ และ $\frac{dT}{dr}=0$ ที่ $r=0$ เมื่อตัวห้อย s แสดงถึงพื้นที่ผิวของละออง ดังนั้นฟังก์ชันของอุณหภูมิภายในละอองแสดงได้ดังนี้

$$T(r) = T_s - \frac{5}{2}(T_s - \bar{T}_d) \left[1 - \left(\frac{r}{r_s} \right)^2 \right] \quad (3.51)$$

เมื่อ $\bar{T}_d$ คืออุณหภูมิเฉลี่ยเชิงปริมาตร ซึ่งนิยามมาจาก

$$\bar{T}_d \int_0^{r_s} r^2 dr = \int_0^{r_s} T r^2 dr \quad (3.52)$$

การถ่ายเทความร้อนด้วยการนำความร้อนผ่านผิวละอองสามารถคำนวณได้ดังนี้

$$\dot{Q}_{in,d} = k_l A_s \left. \frac{dT}{dr} \right|_{r=r_s} = 20\pi k_l r_s (T_s - \bar{T}_d) \quad (3.53)$$

เมื่อ k_l คือค่าการนำความร้อนของละอองเหลว

ปริมาณความร้อนที่ถ่ายเททั้งหมด สามารถหาได้ โดยอินทิเกรตตลอดช่วงขนาดของละอองตามหลักการกระจายตัวของขนาดละออง ซึ่งจะได้

$$\dot{Q}_{in} = \int_0^{\infty} \dot{Q}_{in,d} n(r_s) dr_s = 20\pi k_l (T_{l2} - T_{l3}) Q_1 \quad (3.54)$$

เมื่อ อุณหภูมิเฉลี่ยเชิงพื้นที่ผิว T_{l2} และอุณหภูมิเฉลี่ยเชิงปริมาตร T_{l3} ของละออง นิยามมาจาก

$$T_{l2} Q_1 = \int_0^{\infty} T r_s n(r_s) dr_s \quad (3.55)$$

$$T_{l3}Q_1 = \int_0^{\infty} \bar{T}_d r_s n(r_s) dr_s \quad (3.56)$$

ดังนั้น อุณหภูมิเฉลี่ยเชิงพื้นที่ผิวและปริมาตร จะมีความสัมพันธ์กันดังนี้

$$T_{l2} = T_{l3} + \frac{\dot{Q}_{in}}{20\pi k_l Q_1} \quad (3.57)$$

จากสมการจะเห็นได้ว่า อุณหภูมิเฉลี่ยเชิงพื้นที่ผิวจะมีค่ามากกว่าอุณหภูมิเฉลี่ยเชิงปริมาตรเสมอ และเมื่อ T_{l3} และ Q_1 ซึ่งคำนวณได้จากสมการส่งถ่าย และ $\dot{Q}_{in}$ หาได้จากแบบจำลองการถ่ายเทความร้อน นำค่าดังกล่าวแทนลงในสมการจะสามารถหาค่า T_{l2} ได้

3.3.7 แบบจำลองการถ่ายเทความร้อนและมวล (Droplet Heat and Mass Transfer Models)

การระเหยของละอองเกิดจากการถ่ายเทมวลและความร้อนระหว่างละอองและอากาศแวดล้อม เริ่มต้นจาก มวลที่สูญเสียของละอองเดี่ยวเนื่องจากการแพร่ สามารถพิสูจน์ได้จาก

$$\dot{m}_F = 2\pi r_s \rho_g D_g Sh_d \ln(1 + B_M) \quad (3.58)$$

เมื่อ Sh_d คือ Sherwood number และ D_g คือค่าการแพร่เชิงมวล จากความสัมพันธ์ของ Sherwood number ที่เสนอโดย Ranz และ Marshall [56] มีดังนี้

$$Sh_d = 2 + 0.6 Re_d^{0.5} Sc^{0.333} \quad (3.59)$$

โดย Re_d คือ Reynolds number ซึ่งนิยามไว้ดังนี้ $Re_d = \frac{2\rho_g(U_d - U_g)r_s}{\mu_g}$ และ Sc คือ Schmidt number ซึ่งเป็นอิสระจากขนาดของละออง อินทิเกรตสมการข้างต้นจะได้ source term ของการถ่ายเทมวล ดังนี้

$$S_m = 2\pi\rho_g D_g \ln(1 + B_M) \left[2Q_1 + 0.6 \left(\frac{2\rho_g(U_{l2} - U_g)}{\mu_g} \right)^{0.5} Sc^{0.333} (Q_2 Q_1)^{0.5} \right] \quad (3.60)$$

ซึ่งความเร็วเฉลี่ยเชิงพื้นที่ผิว U_2 จะมีความเหมาะสมกว่าในการคำนวณค่า Reynolds number ส่วนโมเมนต์ที่ไม่ใช่จำนวนเต็มสามารถประมาณได้จากการเฉลี่ยตัวเลขยกกำลังของโมเมนต์ใกล้เคียง

ดังนั้น Sherwood และ Reynolds number จะถูกนิยามขึ้นมาใหม่เป็นดังนี้ [11]

$$Sh_Q = 2 + 0.6 Re_Q^{0.5} Sc^{0.333} \quad (3.61)$$

และ

$$Re_Q = \frac{2\rho_g(U_{l2} - U_g)}{\mu_g} \left(\frac{Q_2}{Q_1} \right) \quad (3.62)$$

ดังนั้น source term สำหรับการถ่ายเทมวลสามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$S_m = 2\pi\rho_g D_g \ln(1 + B_M) Q_1 Sh_Q \quad (3.63)$$

source term สำหรับพื้นที่ผิวสามารถพิสูจน์ได้ในทำนองคล้าย ๆ กัน โดยกำหนดให้การสูญเสียมวลเป็นฟังก์ชันการรัศมีของละอองดังนี้

$$\delta m = \rho_l 4\pi r^2 \delta r \quad (3.64)$$

ดังนั้น การเปลี่ยนแปลงของรัศมียกกำลังสองต่อหน่วยมวลที่สูญเสียจึงมีค่าเป็น

$$\frac{\delta(r^2)}{\delta m} = \frac{1}{2\pi\rho_l r} \quad (3.65)$$

แทนค่าการสูญเสียมวล สมการ (3.57) ลงในสมการข้างต้น จะได้อัตราการเปลี่ยนแปลงรัศมียกกำลังสองเป็นดังนี้

$$\frac{\delta(r^2)}{\delta t} = \frac{\rho_g D_g Sh_d \ln(1 + B_M)}{\rho_l} \quad (3.66)$$

อินทิเกรตตลอดช่วงขนาดของละออง จะได้ source term สำหรับ Q_2 เนื่องจากการระเหยเป็นดังนี้

$$S_{Q_2} = \frac{\rho_g D_g}{\rho_l} \ln(1 + B_M) Sh_{Q_0} Q_0 \quad (3.67)$$

โดยที่

$$Sh_{Q_0} = 2 + 0.6 Re_{Q_0}^{0.5} Sc^{0.333} \quad (3.68)$$

$$Re_{Q_0} = \frac{2\rho_g(U_{l2} - U_g)}{\mu_g} \left(\frac{Q_1}{Q_0} \right) \quad (3.69)$$

จากงานวิจัยของ Faeth [145] การถ่ายเทความร้อนเนื่องจากการพา สำหรับละอองเดี่ยวสามารถแสดงได้ดังนี้

$$\dot{Q}_{c,d} = 2\pi r_s k_g (T_g - T_s) Nu_d \frac{\ln(1 + B_M)^{1/Le}}{(1 + B_M)^{1/Le} - 1} \quad (3.70)$$

เมื่อ Nu_d คือ Nusselt number และ Le คือ Lewis number ($Le = Sc/Pr$) โดยแท้จริงแล้ว Sc และ Pr ต่างก็เป็นอิสระจากขนาดของละออง

จากงานวิจัยของ Spalding [54] ได้ให้นิยามของตัวเลขการถ่ายเทมวล B_M ในรูปของสัดส่วนเชิงมวลของไอเชื้อเพลิง Y_F ไว้ดังนี้

$$B_M = \frac{Y_{F,s} - Y_F}{1 - Y_{F,s}} = \frac{P_{v,s} M_v}{P_{a,s} M_a} (1 - Y_F) - Y_F \quad (3.71)$$

เมื่อ M_a และ M_v คือมวลโมเลกุลของอากาศและไอเชื้อเพลิง โดย s จะหมายถึงที่ตำแหน่งผิวของละออง

จากสหสัมพันธ์ของ Nusselt number ที่เสนอโดย Ranz และ Marshall ไว้ดังนี้

$$Nu_d = 2 + 0.6 Re_d^{0.5} Pr^{0.333} \quad (3.72)$$

อินทิเกรตสมการ (3.69) ตลอดช่วงขนาดของละอองตามหลักการกระจายตัวของจำนวนขนาดของละออง ซึ่งจะได้ผลดังนี้

$$\dot{Q}_{in,c} = 2\pi k_g (T_g - T_{l2}) \frac{\ln(1 + B_M)^{1/Le}}{(1 + B_M)^{1/Le} - 1} \left[2Q_1 + 0.6 \left(\frac{2\rho_g(U_{l2} - U_g)}{\mu_g} \right)^{0.5} Pr^{0.333} (Q_2 Q_1)^{0.5} \right] \quad (3.73)$$

เช่นเคย Nu_Q ได้ถูกนิยามขึ้นมาใหม่เป็น [11]

$$Nu_Q = 2 + 0.6 Re_Q^{0.5} Pr^{0.333} \quad (3.74)$$

ดังนั้น อัตราการถ่ายเทความร้อนรวมเนื่องจากการพาสามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\dot{Q}_{in,c} = 2\pi k_g (T_g - T_{l2}) \frac{\ln(1 + B_M)^{1/Le}}{(1 + B_M)^{1/Le} - 1} Q_1 Nu_Q \quad (3.75)$$

ความร้อนสำหรับเพิ่มอุณหภูมิให้ละออง เมื่อละอองเหลวมีอุณหภูมิต่ำกว่าอุณหภูมิอิ่มตัว สามารถคำนวณได้จาก

$$\dot{Q}_{in} = \dot{Q}_{in,c} - \dot{Q}_{evap} = 2\pi k_g (T_g - T_{l2}) \frac{\ln(1 + B_M)^{1/Le}}{(1 + B_M)^{1/Le} - 1} Q_1 Nu_Q - S_m L \quad (3.76)$$

โดย L คือค่าความร้อนแฝงของการระเหย ดังนั้น source term สำหรับสมการส่งถ่ายพลังงานของของเหลว คำนวณได้จาก

$$S_E = -2\pi Q_1 \left[k_g (T_g - T_{l2}) \frac{\ln(1 + B_M)^{1/Le}}{(1 + B_M)^{1/Le} - 1} Nu_Q - \rho_g D_g \ln(1 + B_M) Sh_Q L \right] \quad (3.77)$$

โดยเครื่องหมายของ source term เป็นตัวบ่งบอกว่า พลังงานเกิดการสูญเสียทางด้านก๊าซ และได้รับทางด้านของเหลว

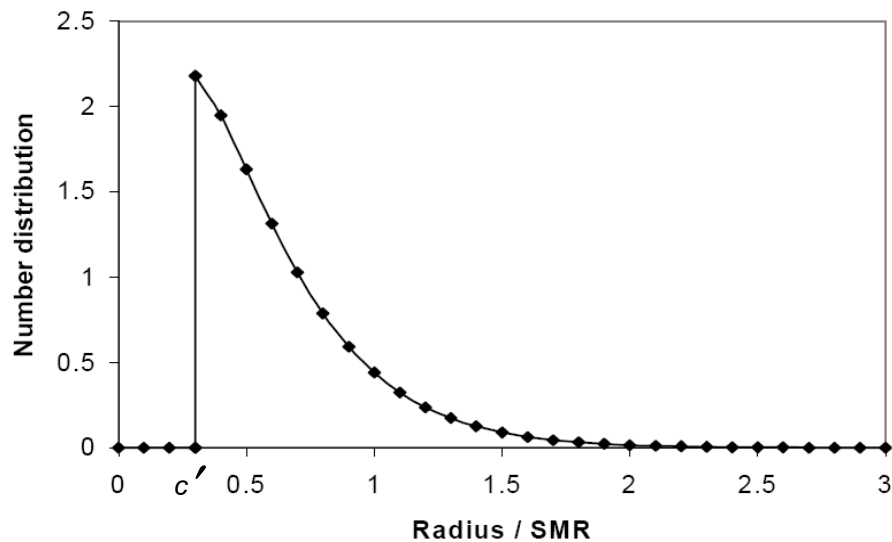
3.3.8 ข้อสมมุติของการกระจายตัวของขนาดละออง (Droplet Size Distribution Assumptions)

รูปร่างของสเปรย์เกิดขึ้นเนื่องจากการกระจายตัวของขนาดของละอองที่ไม่สม่ำเสมอ ในแบบจำลองนี้ การกระจายตัวจะอยู่บนพื้นฐานของโมเมนต์ของจำนวนละอองซึ่งได้เสนอโดย Beck [5] โดยสมมุติการกระจายตัวของจำนวนขนาดละอองเป็นแบบแกมมาที่มีตัวแปรรูปร่างเท่ากับ 2 ใช้ในแบบจำลอง ซึ่งมีลักษณะดังนี้

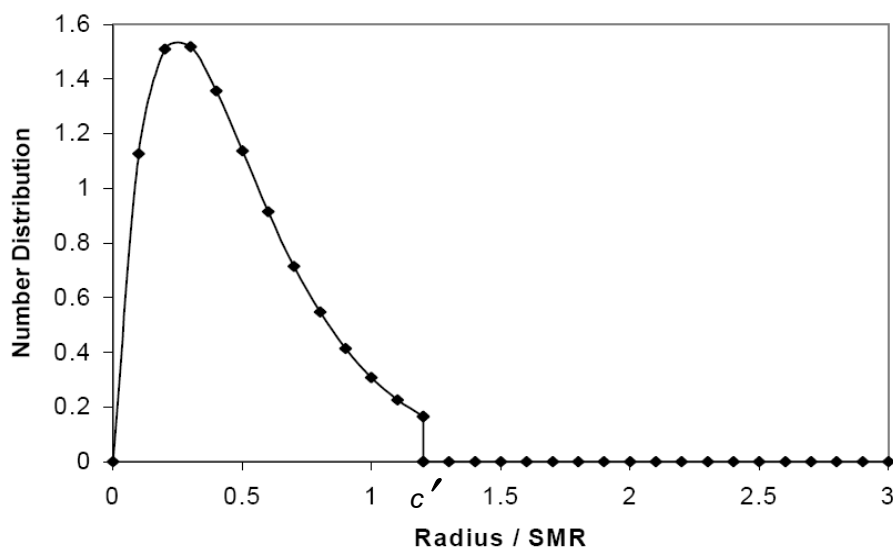
$$n(r) = \frac{16r}{\bar{r}_{32,ref}^2} \exp\left(-\frac{4r}{\bar{r}_{32,ref}}\right) \quad (3.78)$$

เมื่อ $\bar{r}_{32,ref}$ คือ SMR อ้างอิง และ r คือ SMR ที่ตำแหน่งใด ๆ วิธีการนี้จะพิจารณาการกระจายตัวเริ่มต้นเป็นการกระจายตัวอ้างอิงบนพื้นฐานของ SMR อ้างอิง ซึ่งจะคงที่ไม่เปลี่ยนแปลง

ส่วนการเปลี่ยนแปลงของ SMR ที่ตำแหน่งใด ๆ หาได้จากการตัดทอนการกระจายตัวให้สอดคล้องกับ SMR ที่คำนวณได้จากสมการส่งถ่ายสำหรับ Q_3 และ Q_2 ถ้า SMR มีค่ามากกว่าค่าอ้างอิง สามารถประมาณได้จากการตัดส่วนละอองขนาดเล็กของการกระจายตัวออกดังแสดงในรูปที่ 3.2 ในทางตรงกันข้าม ถ้าขนาดของ SMR เล็กกว่าค่าอ้างอิง สามารถประมาณได้จากการนำละอองขนาดใหญ่ออกจากการกระจายตัว ดังแสดงในรูปที่ 3.3



รูปที่ 3.2 การตัดทอนการกระจายตัวของละอองขนาดเล็กออก เมื่อขนาด SMR ที่คำนวณได้มีขนาดใหญ่มากกว่า SMR อ้างอิง [5]



รูปที่ 3.3 การตัดทอนการกระจายตัวของละอองขนาดใหญ่ออก เมื่อขนาด SMR ที่คำนวณได้มีขนาดเล็กกว่า SMR อ้างอิง [5]

พิจารณากรณีแรก เมื่อ SMR ที่ตำแหน่งใด ๆ มีค่ามากกว่าค่า SMR อ้างอิง การกระจายตัวจะถูกตัดส่วนที่มีละอองขนาดเล็กออกที่ตำแหน่ง c ดังแสดงในรูปที่ 3.2 ดังนั้นการอินทิเกรตการกระจายตัวที่ตัดทอนตลอดช่วงรัศมีจะให้ซึ่งน้อยกว่าหนึ่ง

$$\int_c^{\infty} n(r)dr = \int_c^{\infty} \frac{16r}{\bar{r}_{32,ref}^2} \exp\left(-\frac{4r}{\bar{r}_{32,ref}}\right) dr < 1 \quad (3.79)$$

เปลี่ยนตัวแปรเป็น r' ซึ่งเป็นอัตราส่วนของรัศมีต่อ SMR อ้างอิง

$$\int_{c'}^{\infty} 16r' \exp(-4r') dr' = (4c' + 1) \exp(-4c') \quad (3.80)$$

โดยนิยาม $c' = c / \bar{r}_{32,ref}$ ซึ่งผลรวมของจำนวนละออง แท้จริงแล้วมีค่าเท่ากับ Q_0 ดังนั้นสมการข้างต้นสามารถแสดงความสัมพันธ์กับ Q_1 ได้ดังนี้

$$Q_1 = \frac{Q_0}{(4c' + 1) \exp(-4c')} \int_{c'}^{\infty} r' n(r') dr' = Q_0 \bar{r}_{32,ref} \frac{\frac{1}{2} (8c'^2 + 4c' + 1) \exp(-4c')}{(4c' + 1) \exp(-4c')} \quad (3.81)$$

ในทำนองคล้าย ๆ กัน Q_2 และ Q_3 สามารถแสดงความสัมพันธ์กับ Q_0 ได้ดังนี้

$$Q_2 = \frac{Q_0}{(4c' + 1) \exp(-4c')} \int_{c'}^{\infty} r'^2 n(r') dr' = Q_0 \bar{r}_{32,ref}^2 \frac{\frac{1}{8} (32c'^3 + 24c'^2 + 12c' + 3) \exp(-4c')}{(4c' + 1) \exp(-4c')} \quad (3.82)$$

$$Q_3 = Q_0 \bar{r}_{32,ref}^3 \frac{\frac{1}{8} (32c'^4 + 32c'^3 + 24c'^2 + 12c' + 3) \exp(-4c')}{(4c' + 1) \exp(-4c')} \quad (3.83)$$

ตัวแปรที่ใช้เชื่อมโยงในการตัดทอนการกระจายตัว ซึ่งนิยามไว้ดังนี้

$$X = \frac{Q_3}{\bar{r}_{32,ref} Q_2} - 1 \quad (3.84)$$

แทนค่าสมการที่ (3.82) และ (3.83) ลงในสมการที่ (3.84) ซึ่งจะได้ฟังก์ชัน X เป็นดังนี้

$$X = \frac{32c'^4 + 32c'^3 + 24c'^2 + 12c' + 3}{32c'^3 + 24c'^2 + 12c' + 3} - 1 \quad (3.85)$$

แต่ในแบบจำลองต้องการค่า c' ใช้ในกระบวนการตัดทอนการกระจายตัว โดยที่ X สามารถหาได้จากสมการส่งถ่ายสำหรับ Q_3 และ Q_2 ดังนั้นความสัมพันธ์ของ c' กับ X สามารถประมาณได้จาก curve fitting ซึ่งได้ผลดังนี้

$$c' = (0.192X + 3.71X^2 + 0.796X^3 + 2.10X^4)^{0.25} \quad (3.86)$$

เมื่อทราบ Q_3 และ Q_2 จากสมการส่งถ่าย ส่วนโมเมนต์กระจายตัวที่เหลือได้แก่ Q_1 และ Q_0 สามารถหาได้จากสมการที่ (3.81) และ (3.82) ซึ่งเป็นฟังก์ชันกับ c'

ในกรณีหลัง หลักการพิสูจน์ก็คล้าย ๆ กัน แต่ตัวแปรที่ใช้เชื่อมในการตัดทอนการกระจายตัวจะนิยามจาก

$$X = \frac{\frac{Q_3}{Q_2}}{\bar{r}_{32,ref}} \quad (3.87)$$

ทำการอินทิเกรตสมการกระจายตัวตลอดช่วงรัศมีจะได้

$$Q_1 = \frac{Q_0}{1 - (4c' + 1)\exp(-4c')} \int_0^{c'} r'n(r')dr' = Q_0 \bar{r}_{32,ref} \frac{\frac{1}{2}[1 - (8c'^2 + 4c' + 1)\exp(-4c')]}{1 - (4c' + 1)\exp(-4c')} \quad (3.88)$$

$$Q_2 = Q_0 \bar{r}_{32,ref}^2 \frac{\frac{1}{8}[3 - (32c'^3 + 24c'^2 + 12c' + 3)\exp(-4c')]}{1 - (4c' + 1)\exp(-4c')} \quad (3.89)$$

$$Q_3 = Q_0 \bar{r}_{32,ref}^3 \frac{\frac{1}{8}[3 - (32c'^4 + 32c'^3 + 24c'^2 + 12c' + 3)\exp(-4c')]}{1 - (4c' + 1)\exp(-4c')} \quad (3.90)$$

โดยที่ X ซึ่งนิยามในสมการที่ (3.87) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$X = \frac{3 - (32c'^4 + 32c'^3 + 24c'^2 + 12c' + 3)\exp(-4c')}{3 - (32c'^3 + 24c'^2 + 12c' + 3)\exp(-4c')} \quad (3.91)$$

นอกจากนี้ ข้อมูลอื่นที่จำเป็น สำหรับแบบจำลองการแตกตัวและการชนกันของละออง ได้แก่ โมเมนต์ของละออง เช่น จำนวน รัศมี และพื้นผิวของละออง ภายในช่วงรัศมี $a \leq r \leq b$ สามารถหาได้จากการอินทิเกรตการกระจายตัวของจำนวนละอองตลอดช่วงที่พิจารณา เมื่อค่า SMR ที่ตำแหน่งใด ๆ มีค่ามากกว่าค่า SMR อ้างอิง ค่าโมเมนต์ใด ๆ สามารถหาได้จากความสัมพันธ์

$$Q_i \Big|_{a \leq r \leq b} = Q_i \frac{\int_a^b r^i n(r) dr}{\int_c^\infty r^i n(r) dr} \quad (3.92)$$

และสมการนี้

$$Q_i \Big|_{a \leq r \leq b} = Q_i \frac{\int_a^b r^i n(r) dr}{\int_0^c r^i n(r) dr} \quad (3.93)$$

จะใช้สำหรับกรณีค่า SMR ที่ตำแหน่งใด ๆ มีค่าน้อยกว่า SMR อ้างอิง

3.4 แบบจำลองการเผาไหม้ *Unsteady Laminar Flamelet/* *Reaction Progress Variable*

ในงานวิจัยนี้ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่เลือกใช้ในการทำนายการเผาไหม้ของสเปรย์คือ unsteady flamelet model เนื่องจากให้ผลการทำนายที่แม่นยำกว่า steady flamelet model และไม่สิ้นเปลืองทรัพยากรการคำนวณมาก เนื่องจากข้อมูลของค่าเฉลี่ยของตัวแปรเคมีเชิงความร้อนจะถูกเก็บไว้ใน flamelet library และเพื่อให้แบบจำลอง unsteady flamelet model มีความแม่นยำมากยิ่งขึ้นในการทำนายการจุดระเบิดและการเผาไหม้ของสเปรย์ดีเซล ตัวแปร reaction progress variable จึงถูกนำมาคำนวณร่วม ซึ่งรายละเอียดการคำนวณจะอธิบายต่อไป

ดังที่ได้กล่าวมาแล้วว่า แบบจำลองนี้อยู่บนสมมุติฐาน chemical time scale นั้นสั้นเพียงพอที่จะทำให้ปฏิกิริยาเกิดขึ้นเพียงภายในชั้นบาง ๆ บริเวณส่วนผสม stoichiometric จึงทำให้โครงสร้างของปฏิกิริยายังคงเป็นลามินาร์ และการแพร่จะเกิดขึ้นในทิศทางตั้งฉากกับชั้นผิวของส่วนผสม stoichiometric ซึ่งสมการ flamelet จะแสดงสัดส่วนเชิงมวลของ species ต่าง ๆ และอุณหภูมิเป็นฟังก์ชันกับสัดส่วนของผสม Z , scalar dissipation χ และเวลา τ ดังนี้

$$\frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = \frac{\chi}{2} \frac{1}{Le_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} \quad (3.94)$$

และ

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} - \rho \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \right) = - \frac{1}{c_p} \sum_{i=1}^N h_i \dot{\omega}_i \quad (3.95)$$

เมื่อ τ , c_p , Y_i , h_i และ $\dot{\omega}_i$ คือ เวลา, ความจุความร้อนจำเพาะที่ความดันคงที่, สัดส่วนเชิงมวล, เอนทัลปี และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของ species i ตามลำดับ

ซึ่งผลลัพธ์ของ flamelet จึงเป็นฟังก์ชันของ χ และ Z เท่านั้น สำหรับรูปแบบสมการของ scalar dissipation rate โดยทั่วไปแล้วจะถูกสมมติขึ้น ซึ่งรูปแบบที่เป็นที่นิยมคือ inverse error function เสนอโดย Peters [101] ส่วนรูปแบบอื่นดังแสดงใน [146, 147] ก็ยังคงมีใช้ทั่วไป สำหรับลักษณะการไหลสวนทางกัน สมการแสดงการกระจายตัวของ scalar dissipation rate ในพิกัด Z เป็นดังนี้

$$\chi(Z) = \frac{a_s}{\pi} \exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2 \right\} \quad (3.96)$$

เมื่อ a_s คือ strain rate ซึ่งแสดงถึงเกรเดียนความเร็วสูงสุด และ erfc^{-1} คือ inverse error function เพื่อกำจัดตัวแปร a_s ออก โดยทำเป็นสัดส่วนที่สภาวะ stoichiometric จะได้

$$\chi(Z) = \chi_{st} \frac{\exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2 \right\}}{\exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z_{st}) \right]^2 \right\}} \quad (3.97)$$

สำหรับค่าสัดส่วนของผสมนั้น ในที่นี้จะเลือกใช้สหสัมพันธ์ของ Bilger [102] ซึ่งได้นิยามให้เป็นฟังก์ชันกับ reactive species ไว้ดังนี้

$$Z = \frac{2 \frac{Y_C - Y_{C,2}}{M_C} + \frac{1}{2} \frac{Y_H - Y_{H,2}}{M_H} - \frac{Y_O - Y_{O,2}}{M_O}}{2 \frac{Y_{C,1} - Y_{C,2}}{M_C} + \frac{1}{2} \frac{Y_{H,1} - Y_{H,2}}{M_H} - \frac{Y_{O,1} - Y_{O,2}}{M_O}} \quad (3.98)$$

เมื่อ M คือมวลโมเลกุล และตัวย่อ C , H และ O จะหมายถึงส่วนประกอบคาร์บอน ไฮโดรเจน และออกซิเจน ตามลำดับ ส่วนตัวย่อ 1 และ 2 จะอ้างถึงค่าคงที่ในสภาวะเริ่มต้นของสายการไหลเชื้อเพลิงและออกซิเจน ตามลำดับ

ดังนั้นผลลัพธ์ของสมการ flamelet ที่คำนวณได้จึงแสดงในรูป $\phi(Z, \chi_{st})$ เมื่อ ϕ จะหมายถึง สัดส่วนเชิงมวลของ species, อุณหภูมิ หรืออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี แต่เมื่อพิจารณาสมการของ unsteady flamelet model จะเห็นว่า ที่ค่า χ_{st} ใด ๆ จะให้ผลลัพธ์ของ flamelet มากกว่าหนึ่งค่า เนื่องจากเทอมของเวลา ดังนั้นจึงต้องใช้ตัวแปร reaction progress variable, C มาช่วยระบุตำแหน่ง ของผลลัพธ์ของ flamelet ให้ชัดเจนมากยิ่งขึ้น ซึ่งจะทำให้สามารถทำนายการจุดระเบิดเอง (autoignition) การพัฒนาตัวของเปลว และการดับลงของเปลวไฟ (extinction) ได้แม่นยำมากยิ่งขึ้น โดยที่ตัวแปรนี้จะป็นอิสระจากค่าสัดส่วนของผสมและค่า χ_{st} ซึ่งในที่นี้ reaction progress variable จะเลือกนิยามเฉพาะก๊าซผลิตภัณฑ์หลักตามงานวิจัยของ Ihme และ Pitsch [117] คือ

$$C = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O} + Y_{H_2} \quad (3.99)$$

ดังนั้นผลลัพธ์ของสมการ flamelet ที่คำนวณได้จึงอยู่ในรูป $\phi(Z, C, \chi_{st})$ โดยในการสร้าง flamelet library นั้น ค่า C และ χ_{st} จะถูกสมมุติว่า เป็นตัวแปรอิสระกับ Z ซึ่งผลลัพธ์ที่จะเก็บไว้ใน flamelet library จะเป็นค่าเฉลี่ยเชิงสถิติ ที่เรียกว่า Probability Density Function averaging ดังนี้

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \int_0^1 \phi(Z, C, \chi_{st}) \bar{P}(Z, C, \chi_{st}) dZ dC d\chi_{st} \quad (3.100)$$

จากสมมุติฐานที่ว่า ค่า C และ χ_{st} เป็นอิสระกับค่า Z ดังนั้นการกระจายตัวเชิง PDF ของตัวแปรเหล่านี้ จึงเป็นอิสระต่อกันด้วย สามารถแสดงได้ดังนี้

$$\bar{P}(Z, C, \chi_{st}) = \bar{P}(Z) \bar{P}(C) \bar{P}(\chi_{st}) \quad (3.101)$$

ในที่นี้ การกระจายตัวของสัดส่วนของผสม สมมุติว่าเป็นแบบ beta และการกระจายตัวแบบ Dirac-delta สำหรับ reaction progress variable ส่วน scalar dissipation rate มีการกระจายตัวแบบ Dirac-delta ดังนั้นจากสมการข้างต้น จึงเขียนใหม่ได้เป็น

$$\bar{P}(Z, C, \chi_{st}) = \beta(Z; \bar{Z}, \bar{Z}''^2) \delta(C; \bar{C}) \delta(\chi_{st}; \bar{\chi}_{st}) \quad (3.102)$$

ดังนั้นค่าเฉลี่ยสเกลาร์ $\tilde{\phi}$ ซึ่งหาได้จากผลลัพธ์ชั่วขณะของ flamelet เฉลี่ยถ่วงน้ำหนักกับการกระจาย PDF สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$\tilde{\phi} = \int_0^{\chi_q} \int_0^{C_{\max}} \int_0^1 \phi(Z, C, \chi_{st}) \bar{P}(Z; \bar{Z}, \bar{Z}''^2) \bar{P}(C; \bar{C}) \bar{P}(\chi_{st}; \bar{\chi}_{st}) dZ dC d\chi_{st} \quad (3.103)$$

เมื่อ χ_q คือ quenching strain rate จากสมการข้างต้นนี้ ค่าเฉลี่ยสเกลาร์ $\tilde{\phi}$ ต่าง ๆ จึงสามารถคำนวณไว้ล่วงหน้า และเก็บไว้ใน flamelet library โดยเป็นฟังก์ชันกับค่า $\bar{Z}$, $\bar{Z}''^2$, $\bar{C}$ และ $\bar{\chi}_{st}$ ดังนั้นข้อมูลของค่าเฉลี่ยของตัวแปรเคมีเชิงความร้อนที่เก็บไว้ใน library จะถูกเรียกใช้ได้ทันทีเมื่อทราบค่า $\bar{Z}$, $\bar{Z}''^2$, $\bar{C}$ และ $\bar{\chi}_{st}$ ทำให้เวลาที่ใช้ในการคำนวณลดลงเป็นอย่างมาก เมื่อเปรียบเทียบกับวิธีการสร้างสมการส่งถ่ายสำหรับ species ต่าง ๆ แล้วคำนวณโดยตรง โดยค่า $\bar{Z}$, $\bar{Z}''^2$ และ $\bar{C}$ เหล่านี้ สามารถคำนวณได้จากสมการส่งถ่ายดังต่อไปนี้

สมการส่งถ่ายสำหรับค่าเฉลี่ยของสัดส่วนของผสมนั้น ตามนิยามจะไม่มี source term แต่ในงานวิจัยนี้ สเปรย์มีการระเหยของละอองฝอย จึงทำให้สมการส่งถ่ายเดิมไม่เหมาะสม ดังนั้นจึงได้ปรับปรุงโดยการเพิ่ม source term สำหรับการระเหยของละอองฝอยเข้าไปในสมการส่งถ่ายสถานะก๊าซ ดังนี้

$$\frac{\partial \theta \bar{\rho}_g \bar{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \theta \bar{\rho}_g \tilde{U}_{gj} \bar{Z}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left(\bar{\rho}_g D_Z + \frac{\mu_t}{Sc_Z} \right) \theta \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_j} \right\} + \dot{m}_F \quad (3.104)$$

เมื่อ D คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ และ $\dot{m}_F$ คืออัตราการระเหยของละอองฝอย ส่วนสมการส่งถ่ายของค่าเฉลี่ยถ่วงน้ำหนักสำหรับค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมสามารถแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial \theta \bar{\rho}_g \bar{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \theta \bar{\rho}_g \tilde{U}_{gj} \bar{Z}''^2}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left(\bar{\rho}_g D_{Z''^2} + \frac{\mu_t}{Sc_{Z''^2}} \right) \theta \frac{\partial \bar{Z}''^2}{\partial x_j} \right\} + 2 \frac{\theta \mu_t}{Sc_{Z''^2}} \left(\frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - \theta \bar{\rho} C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\bar{k}} \bar{Z}''^2 \quad (3.105)$$

โดยค่า Schmidt number, Sc ของค่าเฉลี่ยและค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมจะมีค่าเท่ากับ 0.9 และ C_χ เท่ากับ 2.0 [103] และค่า scalar dissipation rate $\tilde{\chi}$ มีความสัมพันธ์กับค่า $\bar{Z}''^2$ ดังนี้

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\bar{k}} \bar{Z}''^2 \quad (3.106)$$

และสำหรับสมการส่งถ่ายสำหรับ reaction progress variable ภายใต้สมมุติฐาน การแพร่เชิงโมเลกุลเท่ากันทุกชนิด species มีรูปแบบดังนี้

$$\frac{\partial \theta \bar{p}_g \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial \theta \bar{p}_g \bar{C}_{gj}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left(\bar{p}_g D_c + \frac{\mu_t}{Sc_c} \right) \theta \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \right\} + \bar{\omega}_c \quad (3.107)$$

เมื่อ $\bar{\omega}_c$ คืออัตราการเกิดปฏิกิริยาของ $\bar{C}$ ซึ่งเป็นผลรวมของอัตราการเกิดก๊าซผลิตภัณฑ์หลักดังนี้

$$\bar{\omega}_c = \bar{\omega}_{CO_2} + \bar{\omega}_{CO} + \bar{\omega}_{H_2O} + \bar{\omega}_{H_2} \quad (3.108)$$

สำหรับในงานวิจัยนี้ การสร้าง flamelet library เพื่อใช้ทำนายการเผาไหม้ของสเปรย์ในเครื่องยนต์ดีเซลนั้น จะเลือกใช้กลไกปฏิกิริยาเคมีแบบโครงร่าง (skeletal mechanism) ของ Liu และคณะ [88] ซึ่งใช้เชื้อเพลิง *n*-heptane แทนดีเซล เนื่องจากมีค่าออกเทนใกล้เคียงกัน โดยกลไกนี้มีส่วนประกอบเคมีจำนวน 43 ชนิดและสมการเคมีทั้งปฏิกิริยาไปข้างหน้าและย้อนกลับรวมจำนวน 185 สมการ มีดังนี้

ตารางที่ 3.3 กลไกปฏิกิริยาเคมีแบบโครงร่างสำหรับ *n*-heptane [88]

Number	Reaction		A	n	E
1f	$O_2 + H \rightarrow OH + O$		2.000E+14	0.00	70.3
2f	$H_2 + O \rightarrow OH + H$		5.060E+04	2.67	26.3
3f	$H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$		1.000E+08	1.60	13.8
4f	$2OH \rightarrow H_2O + O$		1.500E+09	1.14	0.42
5f	$2H + M' \rightarrow H_2 + M'$		1.800E+18	-1.00	0
6f	$2O + M' \rightarrow O_2 + M'$		2.900E+17	-1.00	0
7f	$H + OH + M' \rightarrow H_2O + M'$		2.200E+22	-2.00	0
8f	$H + O_2 + M' \rightarrow HO_2 + M'$		2.300E+18	-0.80	0
9f	$HO_2 + H \rightarrow 2OH$		1.500E+14	0.00	4.2
10f	$HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$		2.500E+13	0.00	2.9
11f	$HO_2 + H \rightarrow H_2O + O$		3.000E+13	0.00	7.2
12f	$HO_2 + O \rightarrow OH + O_2$		1.800E+13	0.00	-1.7
13f	$HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$		6.000E+13	0.00	0
14f	$2HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$		2.500E+11	0.00	-5.2
15f	$2OH + M' \rightarrow H_2O_2 + M'$		3.250E+22	-2.00	0
16f	$H_2O_2 + OH \rightarrow H_2O + HO_2$		5.400E+12	0.00	4.2
17f	$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$		6.000E+06	1.50	-3.1
18f	$CO + HO_2 \rightarrow CO_2 + OH$		1.500E+14	0.00	98.7
19f	$CO + O + M' \rightarrow CO_2 + M'$		7.100E+13	0.00	-19

Number	Reaction		A	n	E
20	$\text{CH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{O}$		6.000E+13	0.00	0
21	$\text{CH} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{CO}$		3.400E+12	0.00	2.9
22f	$\text{CH} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH}$		5.700E+12	0.00	-3.2
23f	$\text{HCO} + \text{M}' \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}'$		1.566E+14	0.00	65.9
24f	$\text{HCO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{HO}_2$		3.000E+12	0.00	0
25f	$3\text{-CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$		6.000E+12	0.00	-7.5
26f	$2\ 3\text{-CH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$		1.200E+13	0.00	3.4
27f	$3\text{-CH}_2 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$		4.200E+13	0.00	0
28f	$3\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$		1.300E+13	0.00	6.2
29f	$3\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$		1.200E+13	0.00	6.2
30f	$1\text{-CH}_2 + \text{M}' \rightarrow 3$		1.200E+13	0.00	0
31f	$1\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$		3.100E+13	0.00	0
32f	$1\text{-CH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$		7.200E+13	0.00	0
33f	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{HCO} + \text{H} + \text{M}'$		5.000E+16	0.00	320
34f	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$		2.300E+10	1.05	13.7
35f	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{HCO} + \text{OH}$		4.150E+11	0.57	11.6
36f	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$		3.400E+09	1.20	-1.9
37f	$\text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}_2$		3.000E+12	0.00	54.7
38f	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$		8.430E+13	0.00	0
39f	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_4$	k_0	6.257E+23	-1.80	0
		k_{∞}	2.108E+14	0.00	0
40	$\text{CH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{H}$		2.260E+14	0.00	64.8
41	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$		3.300E+11	0.00	37.4
42f	$\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$		1.800E+13	0.00	0
43f	$\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{O}_2$		3.600E+12	0.00	0
44	$2\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$		1.000E+16	0.00	134
45f	$2\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	k_0	1.272E+41	-7.00	11.6
		k_{∞}	1.813E+13	0.00	0
46f	$\text{CH}_3\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}'$		5.000E+13	0.00	105
47f	$\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$		1.800E+13	0.00	0
48f	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$		4.000E+10	0.00	8.9
49f	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}'$		5.000E+13	0.00	105
50f	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$		3.000E+13	0.00	0

Number	Reaction		A	n	E
51f	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$		1.000E+13	0.00	30
52f	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3$		1.300E+04	3.00	33.6
53f	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_3$		1.600E+07	1.83	11.6
54f	$\text{HCCO} + \text{H} \rightarrow 3\text{-CH}_2 + \text{CO}$		1.500E+14	0.00	0
55	$\text{HCCO} + \text{O} \rightarrow 2\text{CO} + \text{H}$		9.600E+13	0.00	0
56f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCCO} + \text{OH}$		2.000E+08	1.50	126
57f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow 3\text{-CH}_2 + \text{CO}$		1.720E+04	2.80	2.1
58f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{HCCO} + \text{H}$		1.720E+04	2.80	2.1
59f	$\text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}$	k_0	1.187E+42	-7.50	190
		k_∞	2.000E+14	0.00	166
60	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HCO}$		5.420E+12	0.00	0
61f	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{M}' \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{M}'$		2.500E+17	0.00	320
62f	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$		1.700E+15	0.00	62.9
63f	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$		6.500E+13	0.00	24.9
64f	$\text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$	k_0	1.000E+16	0.00	126
		k_∞	1.300E+13	0.00	167
65f	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow 2\text{CH}_3$		3.000E+13	0.00	0
66f	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{HO}_2$		1.100E+10	0.00	-6.3
67	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$		1.400E+09	1.50	31.1
68	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$		7.200E+06	2.00	3.6
69	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_4$		1.500E-07	6.00	25.4
70	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}_3$		1.000E+12	0.00	0
71	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{HCO} + \text{C}_2\text{H}_4$		1.000E+12	0.00	0
72f	$\text{C}_3\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}$		3.980E+13	0.00	293
73f	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}_2$		5.000E+12	0.00	0
74f	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{HO}_2$		6.000E+11	0.00	41.9
75f	$\text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_3$		3.150E+15	0.00	359
76f	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2$		5.000E+12	0.00	6.3
77f	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_2\text{O}$		7.900E+12	0.00	0
78f	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$		4.000E+12	0.00	0
79	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_4$		8.960E+12	0.00	35.6
80f	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4$		9.600E+13	0.00	130
81f	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{H} + \text{C}_3\text{H}_6$		1.250E+14	0.00	155

Number	Reaction		A	n	E
82f	$\text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{HO}_2$		1.000E+12	0.00	20.9
83f	$1\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_3$		8.000E+16	0.00	307
84f	$1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{OH} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{CH}_2\text{O}$		6.500E+12	0.00	0
85	$\text{P-C}_4\text{H}_9 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_4$		2.500E+13	0.00	121
86	$1\text{-C}_5\text{H}_{11} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{N-C}_3\text{H}_7$		3.200E+13	0.00	119
87	$\text{C}_6\text{H}_{11} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_3\text{H}_6$		2.500E+13	0.00	126
88	$1\text{-C}_6\text{H}_{12} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{C}_3\text{H}_5$		2.500E+16	0.00	298
89	$1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{H} \rightarrow \text{C}_6\text{H}_{11} + \text{H}_2$		5.000E+12	0.00	0
90	$1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{OH} \rightarrow \text{C}_6\text{H}_{11} + \text{H}_2\text{O}$		5.000E+12	0.00	0
91	$1\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow 1\text{-C}_5\text{H}_{11} + \text{C}_2\text{H}_4$		2.500E+13	0.00	121
92	$2\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow \text{P-C}_4\text{H}_9 + \text{C}_3\text{H}_6$		1.600E+13	0.00	118
93	$2\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow 1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{CH}_3$		4.000E+13	0.00	138
94	$1\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow 2\text{-C}_7\text{H}_{15}$		2.000E+11	0.00	75.8
95	$2\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow 1\text{-C}_7\text{H}_{15}$		3.000E+11	0.00	88.4
96	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} \rightarrow \text{P-C}_4\text{H}_9 + \text{N-C}_3\text{H}_7$		3.160E+16	0.00	339
97	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{H} \rightarrow 1\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{H}_2$		7.300E+07	2.00	32.2
98	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{H} \rightarrow 2\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{H}_2$		3.500E+07	2.00	20.9
99	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{OH} \rightarrow 1\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{H}_2\text{O}$		1.056E+10	1.10	7.6
100	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{OH} \rightarrow 2\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{H}_2\text{O}$		5.200E+09	1.30	2.9
101	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{HO}_2 \rightarrow 1\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{H}_2\text{O}_2$		1.790E+13	0.00	81.2
102	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{HO}_2 \rightarrow 2\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{H}_2\text{O}_2$		1.340E+13	0.00	71.2
103	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{O}_2 \rightarrow 1\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{HO}_2$		5.500E+13	0.00	205
104	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{HO}_2$		8.000E+13	0.00	199
105f	$1\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2 \rightarrow \text{RO}_2$		2.000E+12	0.00	0
105b	$\text{RO}_2 \rightarrow 1\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2$		1.750E+15	0.00	117
106f	$2\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2 \rightarrow \text{RO}_2$		2.000E+12	0.00	0
106b	$\text{RO}_2 \rightarrow 2\text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2$		1.750E+15	0.00	117
107	$\text{RO}_2 \rightarrow \text{R}'\text{O}_2\text{H}$		6.000E+11	0.00	85.6
108	$\text{R}'\text{O}_2\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}_2\text{R}'\text{O}_2\text{H}$		5.000E+11	0.00	0
109	$\text{O}_2\text{R}'\text{O}_2\text{H} \rightarrow \text{HO}_2\text{R}''\text{O}_2\text{H}$		2.000E+11	0.00	71.2
110	$\text{HO}_2\text{R}''\text{O}_2\text{H} \rightarrow \text{OR}''\text{O}_2\text{H} + \text{OH}$		1.000E+09	0.00	31.4

Number	Reaction		A	n	E
111	$\text{OR}''\text{O}_2\text{H} \rightarrow \text{OR}''\text{O} + \text{OH}$		8.400E+14	0.00	180
112	$\text{OR}''\text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + 1\text{-C}_5\text{H}_{11} + \text{CO}$		2.000E+13	0.00	62.8

หน่วย: mole, cubic centimeter, second, kilojoule, Kelvin.

ประสิทธิภาพการชนกันของ Third body คือ $[M'] = 3.0[n\text{-C}_7\text{H}_{16}] + 1.0[\text{H}_2] + 0.75[\text{CO}] + 0.40[\text{N}_2] + 6.5[\text{H}_2\text{O}] + 0.4[\text{O}_2]$.

สำหรับค่าคงที่อัตรา k , ซึ่งขึ้นอยู่กับความดัน โดย k_0 และ k_∞ ให้ค่าไว้ในตาราง และ $k = Fk_0[M]/(k_\infty + k_0[M])$,

เมื่อ $\log_{10} F = \log_{10} F_c / (1 + (\log_{10}(k_0[M]/k_\infty)/\hat{N})^2)$ and $\hat{N} = 0.75 - 1.27 \log_{10} F_c$.

โดยที่ Broadening function มีค่าดังนี้ $F_{c39} = 0.577 \exp(-T/2370 \text{ K})$, $F_{c45} = 0.38 \exp(-T/73 \text{ K}) + 0.62 \exp(-T/1180 \text{ K})$,

$F_{c59} = 0.35$, and $F_{c64} = 0.411 \exp(-73.4 \text{ K}/T) + \exp(-T/422.8 \text{ K})$.

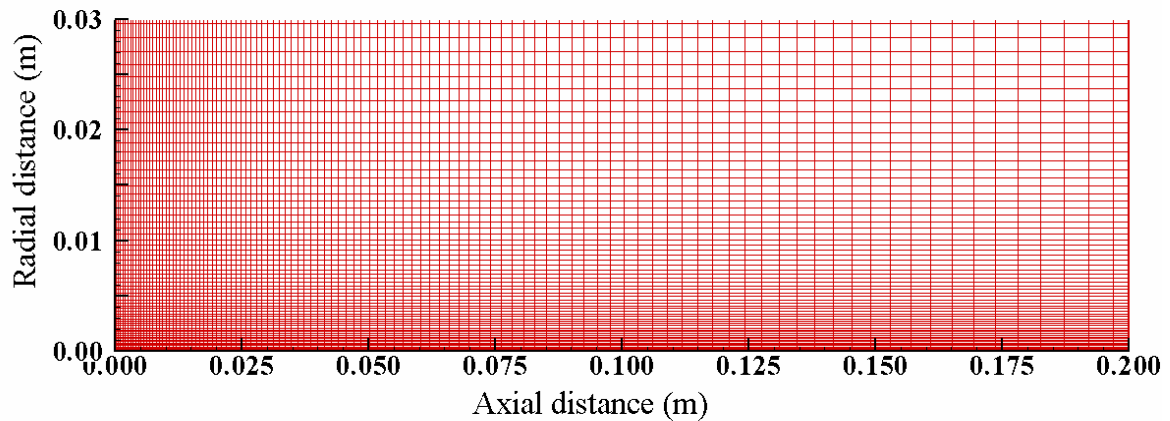
3.5 ระเบียบวิธีเชิงตัวเลข

3.5.1 Discretisation และกระบวนการหาคำตอบ

ในงานวิจัยนี้ จะเน้นศึกษาถึงพฤติกรรมของการเผาไหม้ของสเปรย์เพื่อประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์ดีเซล ดังนั้นในเบื้องต้น ลักษณะทางกายภาพของห้องเผาไหม้จะถูกสมมติว่าเป็นทรงกระบอกสมมาตรตั้งแสดงพื้นที่หน้าตัดในรูป 3.8 ซึ่งเป็นพิกัดจากสมมาตร (z , r) โดยชุดสมการส่งถ่าย Favre-averaged Navier-Stokes จะถูกหาผลเฉลยด้วยวิธี Finite volume ในโครงร่างของ Eulerian ทั้งของเหลวและก๊าซ การเรียงตัวของกริดแบบเยื้อง (staggered grid arrangement) จะถูกเลือกใช้ในการคำนวณความเร็วทั้งของเหลวและก๊าซ วิธี Euler implicit temporal differencing และ hybrid upwind/central spatial differencing จะถูกใช้ในการหาคำตอบชุดสมการส่งถ่ายให้อยู่ในรูปของ Finite volume ซึ่งมีรูปแบบทั่วไปเป็นดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial t}(X\rho\Phi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(X\rho\Phi U_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(X\Gamma_\phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}\right) + S_\phi \quad (3.109)$$

โดยตัวแปร X , ρ , U_j , Γ_ϕ และ source term S_ϕ สำหรับแต่ละสมการได้อธิบายแล้วในหัวข้อ 3.3 และ 3.4 . การหาผลเฉลยของสมการข้างต้น โดยการอินทิเกรตตลอดปริมาตรควบคุมในช่วงเวลา δt ซึ่งรายละเอียดของกระบวนการนี้ สามารถหาเพิ่มเติมได้จาก Versteeg และ Malalasekera [138] จึงขอไม่กล่าวถึงในที่นี้ แบบจำลองความปั่นป่วนเลือกใช้ standard k - ϵ เนื่องจากต้องการเวลาการคำนวณน้อย ประกอบกับการเผาไหม้ของสเปรย์มีค่า Reynolds number ค่อนข้างสูง



รูปที่ 3.4 ลักษณะของกริดที่ใช้ในปริมาตรควบคุม (มีความยาว 0.20 เมตร รัศมี 0.03 เมตร จำนวน 109x73 เซลล์)

สำหรับกระบวนการหาคำตอบจะอ้างอิงกระบวนการ PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators) ของ Issa [148] โดยมีการเพิ่มสมการของเหลวเข้าไป กระบวนการ PISO นั้น เป็นการหาคำตอบแบบ non-iterative ที่มีประสิทธิภาพ โดยจะปรับค่าความดันและความเร็วให้สอดคล้องกัน โดยอาศัยเทคนิค operator splitting แล้วหาคำตอบของสมการโมเมนตัมตามแนวทาง predictor-corrector สำหรับในแบบจำลองสเปรย์นี้ สมการโมเมนตัมของเหลวจะถูกคำนวณเพียงครั้งเดียว ตอนเริ่มต้น time step นั้นๆ ซึ่งการใช้วิธี non-iterative นั้นจะส่งผลให้เกิดการล่าช้าบางอย่างในการคำนวณ แล้วจะถูกส่งต่อการคำนวณใน time step ถัดไป ซึ่งในแบบจำลองนี้ แบบจำลองย่อยการแตกตัวและการชนกันของละอองจะถูกคำนวณท้ายสุดของ time step แล้วนำ source terms สำหรับสมการส่งถ่ายมวลและโมเมนตัม Q_2 ที่คำนวณได้ มาใช้ใน time step ถัดไป โดยรายละเอียดย่อยสามารถหาเพิ่มเติมได้จาก Beck และ Watkins [6] ซึ่งในที่นี้ จะขอกล่าวเพียงกระบวนการคร่าว ๆ เท่านั้น มีดังนี้

- ขั้นที่ 1 แก๊สมการส่งถ่ายสำหรับโมเมนต์ Q_2 และ Q_3 ของการกระจายตัวของขนาดละออง สัดส่วนช่องว่าง (void fraction) จะถูกปรับแก้จากค่า Q_3 ใหม่ ส่วนโมเมนต์ที่เหลือ Q_0 และ Q_1 จะสามารถประมาณค่าได้จากการกระจายตัวของขนาดละอองที่สมมุติไว้ ดังอธิบายในหัวข้อ 3.3.8
- ขั้นที่ 2 แก๊สมการส่งถ่ายพลังงานของเหลว อุณหภูมิและความหนาแน่นของเหลวจะถูกปรับแก้
- ขั้นที่ 3 แก๊สมการหา source terms ของการต้านระหว่างสถานะสำหรับโมเมนต์ต่าง ๆ
- ขั้นที่ 4 แก๊สมการส่งถ่ายโมเมนตัมสำหรับหาความเร็วเฉลี่ยเชิงโมเมนต์ U_{12} และ U_{13}
- ขั้นที่ 5 แก๊สมการส่งถ่ายโมเมนตัมสำหรับก๊าซจะได้ความเร็วของก๊าซ
- ขั้นที่ 6 แก๊สมการปรับค่าความดันครั้งที่หนึ่ง (ดังรายละเอียดใน Issa [148]) ความดัน ความหนาแน่น และความเร็วของก๊าซจะถูกปรับแก้

- ขั้นที่ 7** หา source terms สำหรับสมการส่งถ่ายสัดส่วนของผสมและ reaction progress variable จาก Flamelet library อุณหภูมิ ความหนาแน่น และสัดส่วนเชิงมวลของ species ต่าง ๆ ถูกปรับแก้
- ขั้นที่ 8** แก้มการส่งถ่ายค่าสัดส่วนของผสม Z และค่าความแปรปรวน Z'^2
- ขั้นที่ 9** แก้มการส่งถ่ายค่า reaction progress variable C
- ขั้นที่ 10** แก้มการส่งถ่ายพลังงานของก๊าซ เพื่อปรับแก้เอนทาลปีของก๊าซทั้งในโซนการเผาไหม้ และนอกโซนการเผาไหม้ อุณหภูมิและความหนาแน่นของก๊าซถูกปรับแก้
- ขั้นที่ 11** แก้มการปรับค่าความดันครั้งที่สอง ความดัน ความหนาแน่น และความเร็วของก๊าซจะถูกปรับแก้
- ขั้นที่ 12** แก้มการส่งถ่าย turbulence kinetic energy, k และ dissipation rate, ε รวมถึงการแก้สมการ wall function
- ขั้นที่ 13** หา source terms การแตกตัวของละอองที่ไม่เสถียรและการชนกันของละออง สำหรับคำนวณในสมการส่งถ่ายมวลและโมเมนตัมของ Q_2

แบบจำลองนี้ได้รับการทดสอบหลายครั้งและหลายเงื่อนไขเพื่อพิสูจน์ stability และ robustness ของแบบจำลอง นอกจากนี้ ความถูกต้องแม่นยำก็ยังได้พิสูจน์ดังปรากฏในงานวิจัยหลายชิ้น [6-10, 95] ทั้งในสเปรย์ที่เกิดการเผาไหม้และไม่เกิดการเผาไหม้ สำหรับ grid และ time-step dependence ได้ดำเนินการทดสอบแล้วในงานวิจัยข้างต้น จึงไม่ขอแสดงในรายงานนี้

3.5.2 เงื่อนไขขอบ (Boundary Conditions)

ขอบของสเปรย์จะต้องถูกกำหนดเงื่อนไขขอบว่า จะต้องไม่มีฟลักซ์หรือพลังงานของเหลวปรากฏในบริเวณที่ไม่มีของเหลว โดยกำหนดค่าสัมประสิทธิ์ที่เหมาะสมให้เป็นศูนย์ในสมการ Finite volume ซึ่งมีความจำเป็น เนื่องจากใช้กริดแบบเยื้อง

ส่วนเงื่อนไขขอบอื่นได้แก่ ที่เส้นผ่านศูนย์กลางและที่ทางออก โดยเงื่อนไขขอบที่เส้นผ่านศูนย์กลางคือ ความสมมาตรทั้งในสถานะก๊าซและของเหลว โดยค่าคุณสมบัติต่าง ๆ ของของไหลจะมีค่าเท่ากันทางรัศมีเท่ากับศูนย์รอบเส้นผ่านศูนย์กลาง ดังนั้นจึงไม่มีการไหลข้ามผ่านแกนสมมาตร ซึ่งเงื่อนไขขอบนี้ สามารถดำเนินการได้ โดยกำหนดค่าความเร็วในทิศตั้งฉากกับขอบให้มีค่าเท่ากับศูนย์ทั้งในสถานะก๊าซและของเหลว ส่วนเงื่อนไขขอบที่ทางออกก็ดำเนินการในลักษณะคล้าย ๆ กันคือ ค่าคุณสมบัติต่าง ๆ ของของไหลมีค่าเท่ากันในทิศตั้งฉากกับทางออกมีค่าเท่ากับศูนย์

เงื่อนไขขอบที่ผนัง โดยกำหนดให้ความเร็วทั้งของเหลวและก๊าซที่มีทิศตั้งฉากกับผนังมีค่าเท่ากับศูนย์ที่ผนัง ซึ่งหมายถึงสภาวะ no-slip โดยกำหนดค่าสัมประสิทธิ์ที่เหมาะสมในสมการโมเมนตัมให้เท่ากับศูนย์ เพื่อให้แน่ใจว่า ไม่มีมวลไหลผ่านผนัง นอกจากนี้การไหลแบบปั่นป่วนใน

บริเวณใกล้ผนังก็ส่งผลต่อความถูกต้องของแบบจำลองความปั่นป่วน ซึ่งในที่นี้จะได้นำแบบจำลอง wall function ของ Launder และ Spalding [140] มาใช้แก้ปัญหาดังกล่าว โดยในแบบจำลองนี้ได้ สมมุติการไหลเป็นแบบ Couette หนึ่งมิติ ในสภาวะ quasi-steady โดยผลของการไหลใกล้ผนังได้ ถูกพิจารณาไว้ในสมการส่งถ่าย turbulent kinetic energy ด้วย

บทที่ 4

ผลจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ และการวิเคราะห์

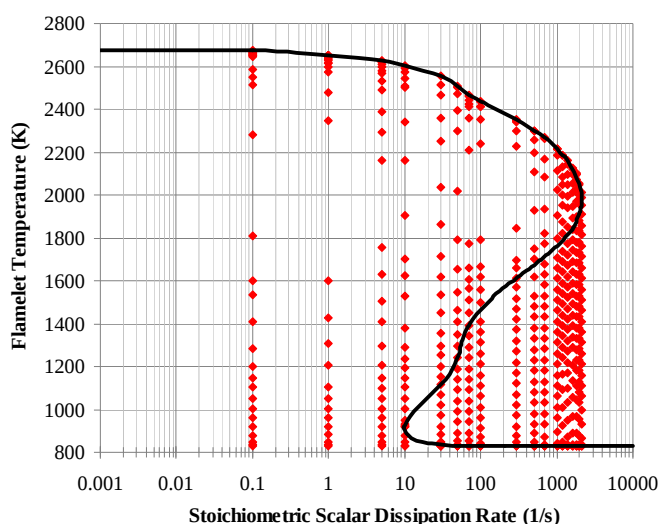
4.1 บทนำ

ในงานวิจัยนี้ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์การเผาไหม้ unsteady laminar flamelet ร่วมกับ reaction progress variable ดังได้อธิบายไว้ในบทที่แล้ว ได้ถูกใช้เพื่อทำนายการเผาไหม้ของสเปรย์ดีเซลในเครื่องยนต์ ซึ่งผลการทำนายการเผาไหม้ของแบบจำลองดังกล่าว จะถูกวิเคราะห์ในบทนี้ เพื่อประเมินศักยภาพ และความแม่นยำของแบบจำลอง โดยการวิเคราะห์จะแบ่งออกเป็นสองส่วน คือ การจุดระเบิดเอง และการเผาไหม้ ซึ่งการจุดระเบิดเองนั้น เป็นจุดเริ่มต้นของการเกิดประกายไฟที่ลูกไหม้ และส่วนของการเผาไหม้นั้น จะเป็นปรากฏการณ์ที่ต่อเนื่องจากการจุดระเบิดเอง นอกจากนี้ ระยะของเปลวลอยตัวที่เกิดขึ้นในสเปรย์ดีเซลก็เป็นอีกส่วนหนึ่งที่ถูกระบุวิเคราะห์ ซึ่งการทำนายที่ได้จากแบบจำลองดังกล่าว จะถูกนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลอง เพื่อเป็นการยืนยันความถูกต้องของแบบจำลอง โดยผลการทดลองที่นำมาเปรียบเทียบ ในที่นี้ จะเลือกผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [14] โดยผลการคำนวณที่ได้จากแบบจำลอง unsteady flamelet/ reaction progress variable จะแสดงในหัวข้อต่อไปนี้

4.2 ผลการคำนวณชุดสมการ laminar flamelet

เพื่อให้เวลาที่ใช้ในการคำนวณของแบบจำลองนี้ลดลง ค่าเฉลี่ยของตัวแปรเคมีเชิงความร้อนต่าง ๆ ได้แก่ อุณหภูมิ ความหนาแน่น อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี และสัดส่วนเชิงมวลของ species

ต่าง ๆ จึงต้องถูกคำนวณไว้ล่วงหน้า และเก็บไว้ใน flamelet library โดยจะเป็นฟังก์ชันกับค่า Z , Z''^2 , C และ χ_{st} ดังนั้นในการสร้าง flamelet library จึงต้องหาผลลัพธ์ของชุดสมการ Flamelet ดังอธิบายไว้ในหัวข้อ 3.4 จากการเผาไหม้เชื้อเพลิง *n*-heptane กับอากาศ ที่สภาวะความดัน 27 bar อุณหภูมิอากาศ 830 K และอุณหภูมิเชื้อเพลิง 298 K โดยในที่นี้จะใช้ FlameMaster code [149] ช่วยในการคำนวณ โดยใช้กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบโครงร่างของ Liu และคณะ [88] ซึ่งมีจำนวนส่วนประกอบเคมี 43 ชนิดและสมการเคมีที่เกี่ยวข้องทั้งสิ้น 185 สมการ ในการคำนวณ ค่าของ mixture fraction และความแปรปรวนนั้นจะถูกแบ่งออกเป็น 141 และ 21 จุด ตามลำดับ จำนวน flamelet 18 ชุด จะถูกสร้างขึ้นภายในช่วง stoichiometric dissipation rate ระหว่าง 0.1 ถึง 2,125.13 และขอบเขตการดับลงของเปลว $\chi_{st, q}$ จากการคำนวณมีค่าประมาณ 2,125.13 s^{-1} นอกจากนี้ในแต่ละค่าของ dissipation rate จะแบ่งค่า reaction progress variable ย่อยลงไปอีก 29 ชุด ดังนั้นจำนวน flamelet รวมทั้งสิ้น 522 ชุด ถูกใช้เพื่อบรรจุข้อมูล 1,545,642 ตำแหน่ง ในช่วงพิสัยของ Z , Z''^2 , C และ χ_{st} ดังนั้นจึงมั่นใจได้ว่า ข้อมูลของตัวแปรอุณหภูมิเชิงเคมีต่าง ๆ ที่ถูกเรียกใช้งานนั้น จะครอบคลุมตลอดทุกมิติของการจุดระเบิด การเผาไหม้ และการดับลงของเปลว

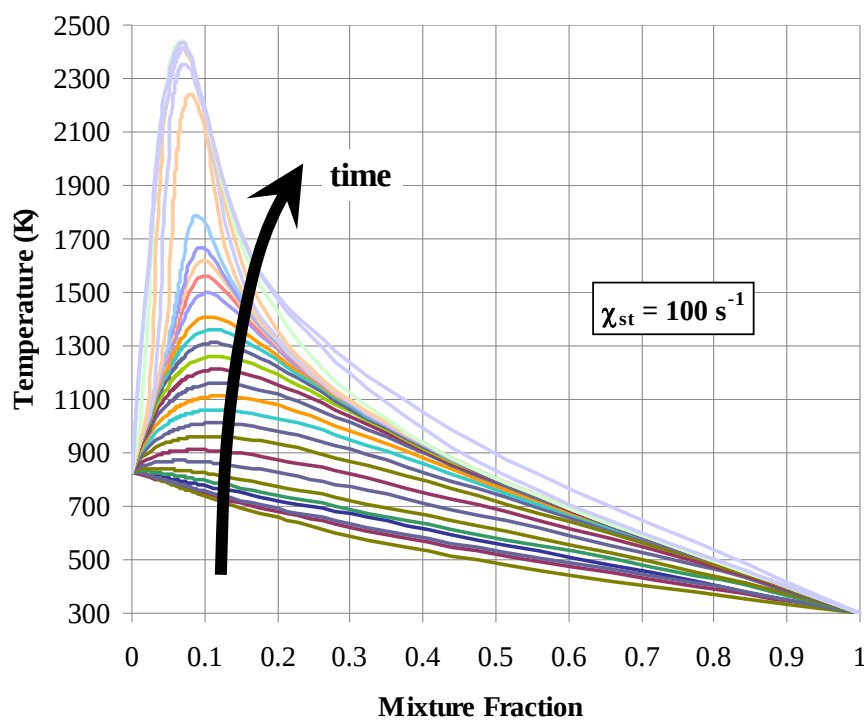


รูปที่ 4.1 ผลลัพธ์ของแบบจำลอง unsteady flamelet จากการเผาไหม้ *n*-heptane และอากาศ ($T_f=298$ K, $T_a=830$ K, 27 bar)

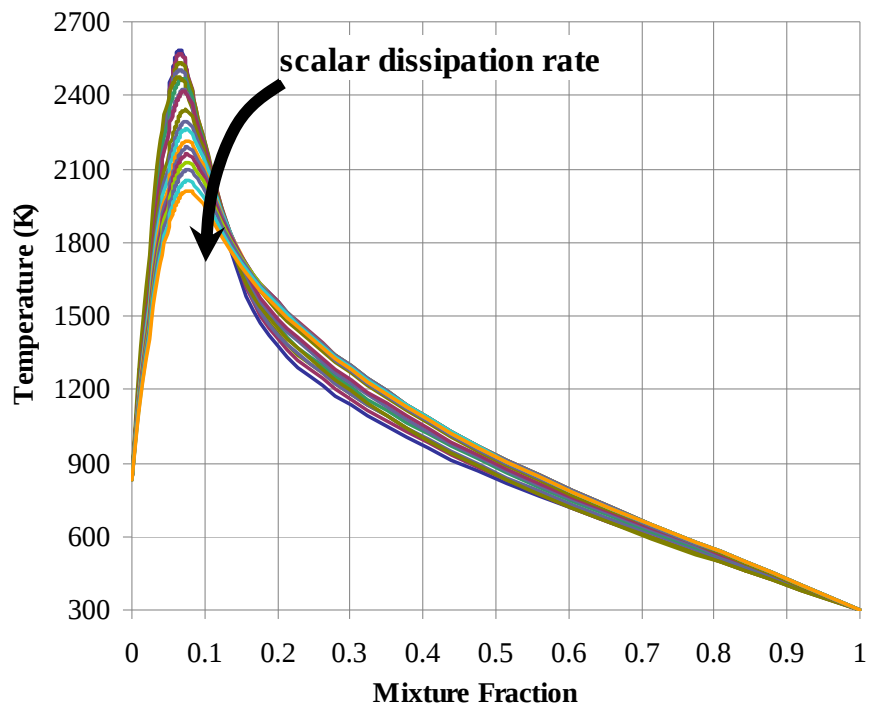
จากรูปที่ 4.1 ซึ่งแสดงอุณหภูมิการเผาไหม้สูงสุดที่ได้จากการคำนวณการเผาไหม้ของ *n*-heptane กับอากาศ เทียบกับค่า stoichiometric scalar dissipation rate ซึ่งมีลักษณะคล้ายรูปโค้งตัว S โดยกระบวนการเผาไหม้เริ่มต้นจาก เส้นโค้งการผสมกันของสารตั้งต้นด้านล่าง ขณะที่การเกิดปฏิกิริยาเพิ่มมากขึ้น อุณหภูมิจะค่อย ๆ สูงขึ้น จนกระทั่งเกิดการจุดระเบิดที่ค่า mixture fraction ค่าหนึ่ง ซึ่งค่านี้จะน้อยกว่าที่สภาวะ stoichiometric และการพัฒนาตัวของเปลวจะสิ้นสุดที่เส้นโค้งเปลวสภาวะคงตัว โดยอุณหภูมิเปลวสูงสุดจะพบที่ χ_{st} ต่ำ ๆ มีค่าประมาณ 2,650 K และเมื่อค่า dissipation rate เพิ่มขึ้น จะทำให้ความเป็นเนื้อเดียวกันของของผสมลดลง ส่งผลให้อุณหภูมิเปลวลด

ต่ำลง และมีค่าน้อยกว่า 2,000 K ที่ χ_{st} ประมาณ 2,100 s⁻¹ จนกระทั่งเปลวไฟเกิดการดับลง เพราะปฏิกิริยาเคมีไม่สามารถดำเนินต่อไปได้เนื่องจากอิทธิพลของ Arrhenius kinetic โดยจุดสีแดงที่ปรากฏในรูป จะแสดงถึงผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณชุดสมการ unsteady flamelet ซึ่งจะเห็นว่า ที่ค่า χ_{st} ใด ๆ จะมีผลลัพธ์ของ flamelet (จุดสีแดง) มากกว่าหนึ่งค่า ซึ่งนำไปสู่การเลือกใช้ reaction progress variable เพื่อใช้บ่งบอกถึงระดับปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นในแบบจำลอง

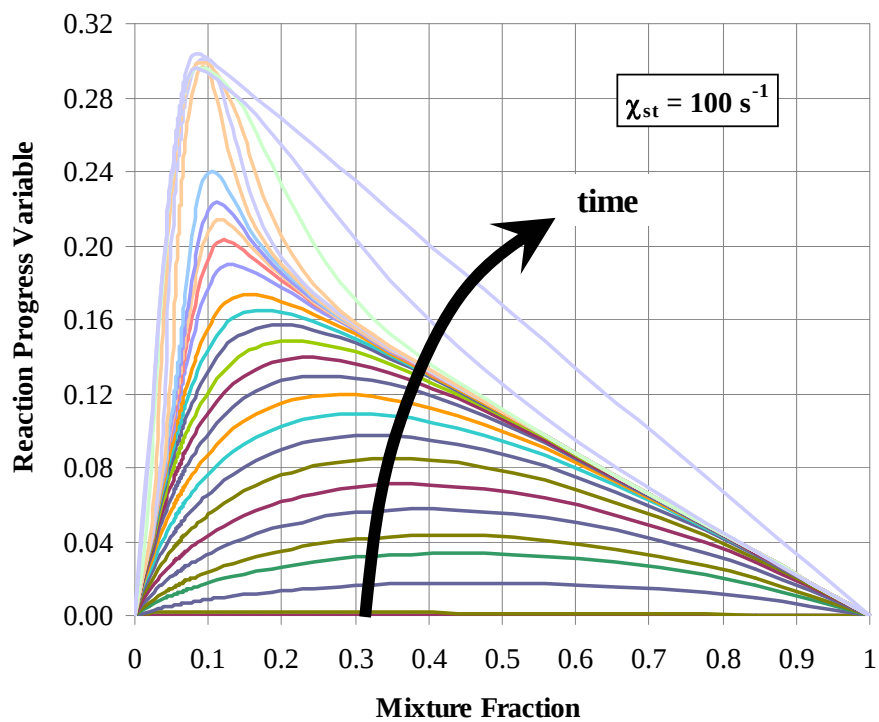
เมื่อพิจารณารูปที่ 4.2 สารตั้งต้นจะเริ่มทำปฏิกิริยาเคมีกัน ส่งผลให้อุณหภูมิค่อย ๆ เพิ่มขึ้น และทันทีที่เกิดการจุดระเบิด อุณหภูมิจะสูงเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว โดยจุดสูงสุดของอุณหภูมิเปลวแต่ละ flamelet จะค่อย ๆ เลื่อนเข้าหาค่าสัดส่วนของผสมที่สภาวะ stoichiometric เมื่อเวลาเพิ่มขึ้น (สำหรับ *n*-heptane; $Z_{st}=0.062$) นอกจากนี้ อุณหภูมิเปลวสูงสุดที่สภาวะคงตัวจะเกิดขึ้นที่ χ_{st} ต่ำๆ ดังแสดงในรูปที่ 4.3 เนื่องจากสารตั้งต้นจะได้รับการผสมกันอย่างดี โดยที่สภาวะ $\chi_{st} \rightarrow 0$ ลักษณะทางกายภาพของสารตั้งต้นจะมีผลน้อยมากต่อการเผาไหม้ เนื่องจากเชื้อเพลิงและออกซิเจนได้รับการผสมกันอย่างดี (well-mixed reactant) และเมื่อ χ_{st} มีค่าเพิ่มสูงขึ้น นั้นหมายความว่า การกระจายตัวของค่า Z จะไม่สม่ำเสมอมากยิ่งขึ้น ส่งผลให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีลดลง ทำให้อุณหภูมิสูงสุดมีค่าลดต่ำลง จนกระทั่งเปลวเกิดการดับลงของเปลวในที่สุด



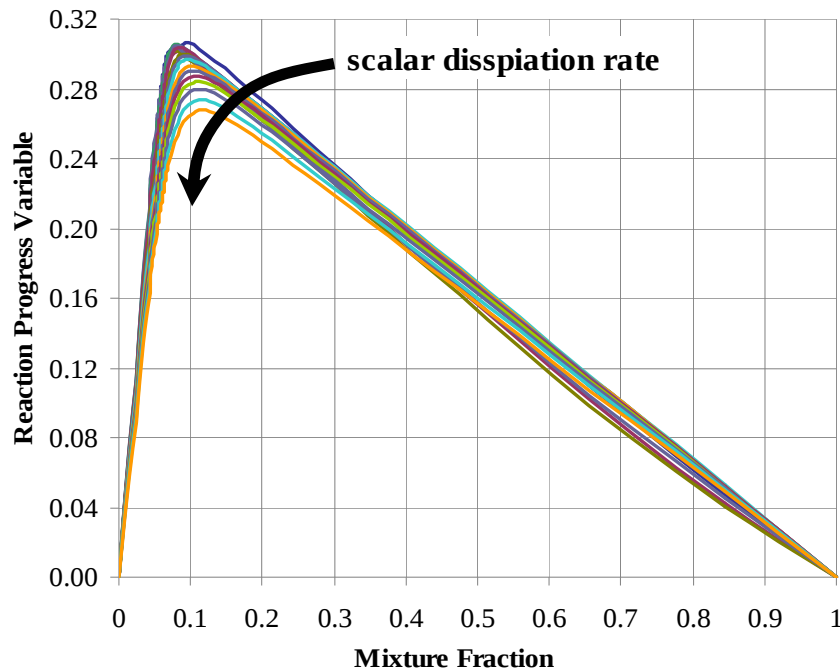
รูปที่ 4.2 การพัฒนาตัวตามเวลาของการกระจายตัวของอุณหภูมิเปลวที่ $\chi_{st} = 100 \text{ s}^{-1}$



รูปที่ 4.3 ผลของการเปลี่ยนแปลงของ χ_{st} ที่มีต่อการกระจายตัวของอุณหภูมิเปลว

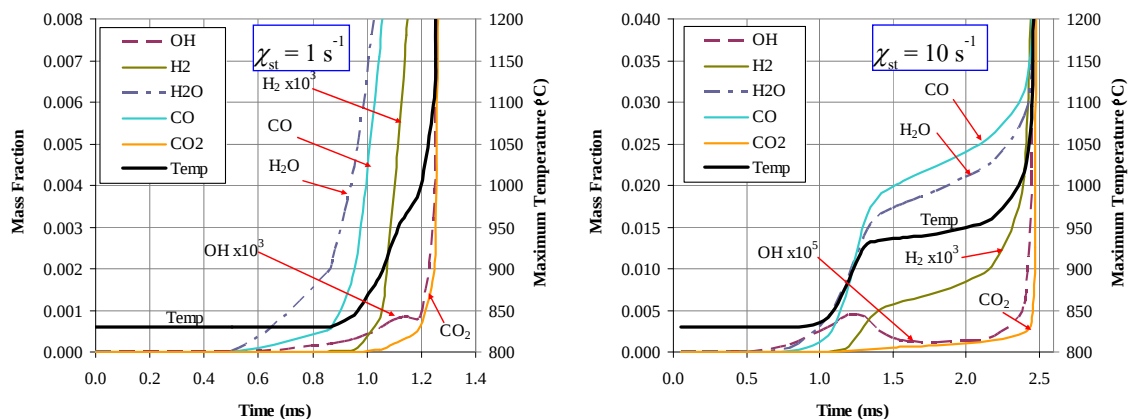


รูปที่ 4.4 การพัฒนาตัวตามเวลาของการกระจายตัวของ reaction progress variable ที่ $\chi_{st} = 100 \text{ s}^{-1}$



รูปที่ 4.5 ผลของการเปลี่ยนแปลงของ χ_{st} ที่มีต่อการกระจายตัวของ reaction progress variable ที่สภาวะคงตัว

นอกจากนี้ การพัฒนาตัวของ reaction progress variable ดังแสดงในรูปที่ 4.4 เช่นเคย จุดสูงสุดของ reaction progress variable ในแต่ละ flamelet จะค่อย ๆ เคลื่อนเข้าหาตำแหน่ง Z_{st} เมื่อเวลานานมากขึ้น โดยการเปลี่ยนแปลงจะเห็นเด่นชัด เมื่อเกิดการจุดระเบิดแล้ว และเมื่อความดันป้อนรุนแรงมากยิ่งขึ้น (χ_{st} เพิ่มสูงขึ้น) รูปร่างการกระจายตัวของ reaction progress variable จะมีขนาดที่เล็กลงดังแสดงในรูปที่ 4.5 นั้นหมายความว่า อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะลดลง จากที่แสดงมาในรูปที่ 4.2 ถึงรูปที่ 4.5 จะเห็นได้ว่า พิกัดของตัวแปร ξ , Z และ χ_{st} ใด ๆ จะสามารถระบุข้อมูลของตัวแปรอุณหภูมิความดันเคมีต่าง ๆ เพียงแค่ชุดเดียวในแบบจำลอง unsteady flamelet/ reaction progress variable

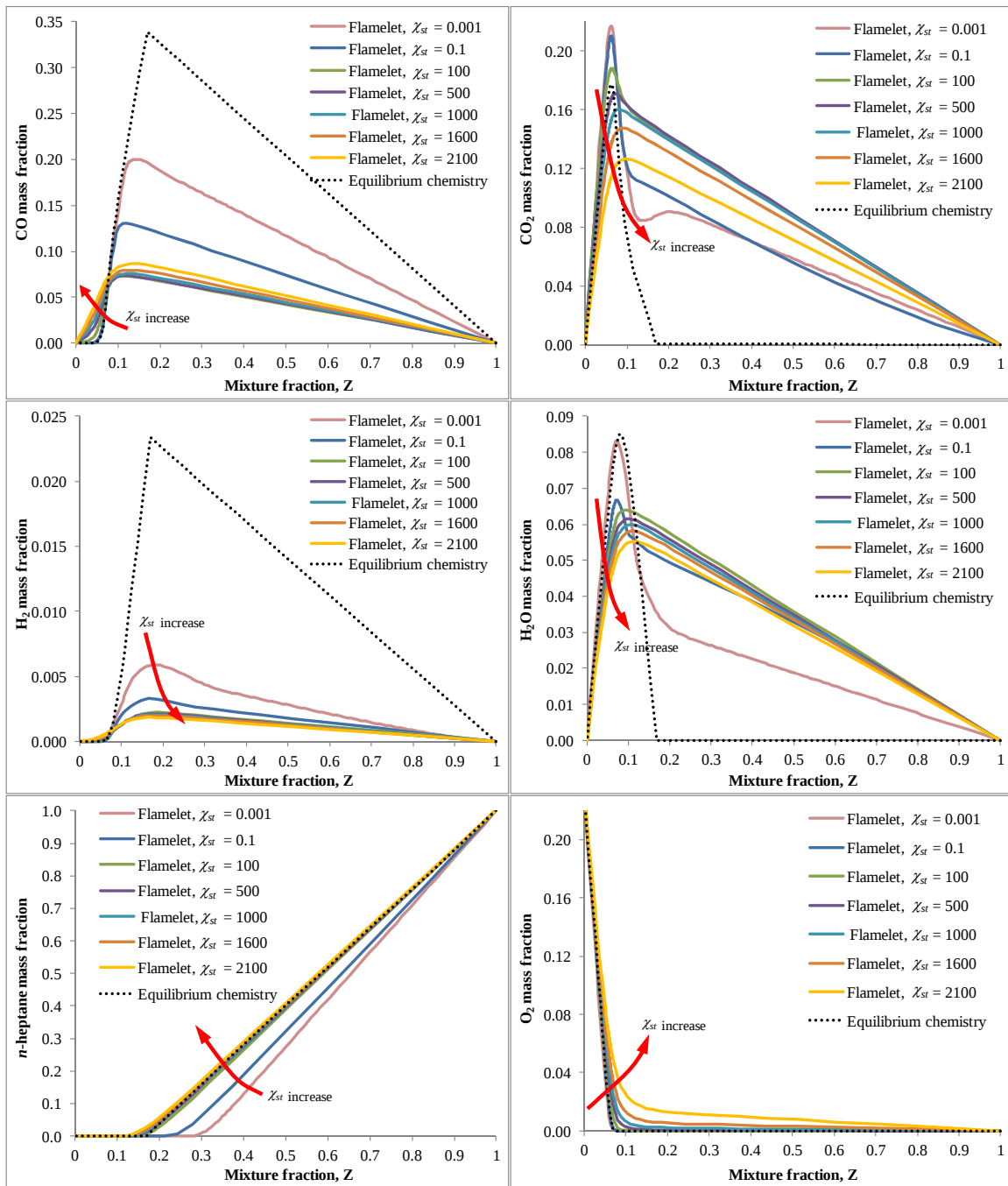


รูปที่ 4.6 การพัฒนาตัวของอุณหภูมิและก๊าซผลิตภัณฑ์ในขณะเกิดการจุดระเบิดเองที่

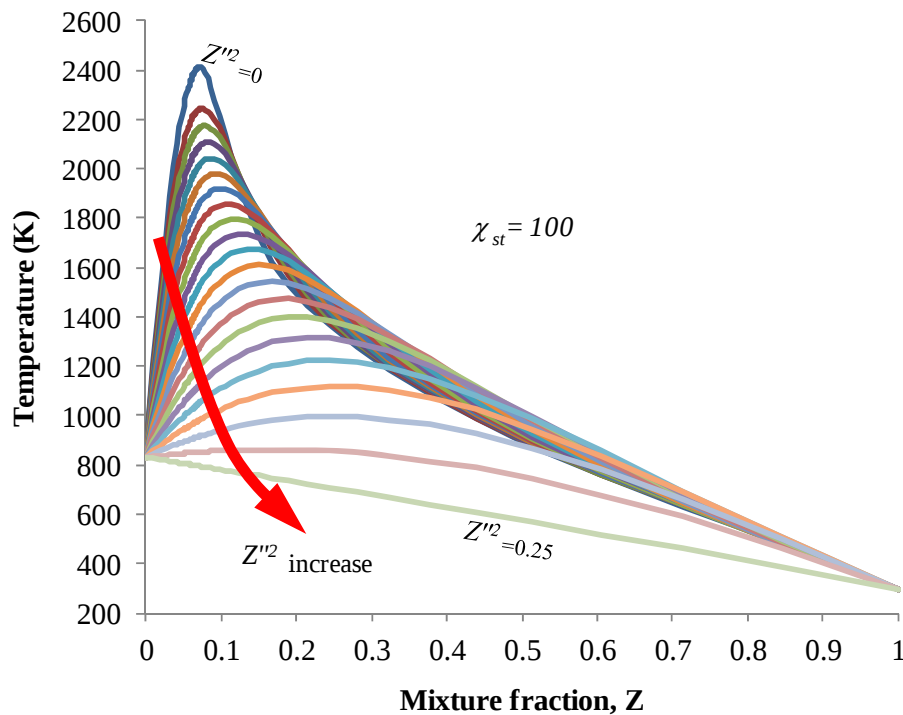
เมื่อพิจารณาการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิและก๊าซผลิตภัณฑ์ ในขณะที่เกิดการจุดระเบิดเอง ดังแสดงในรูปที่ 4.6 พบว่า ที่ χ_{st} ต่ำ ๆ (รูปด้านซ้ายมือ) เวลาหน่วงของการจุดระเบิดเองจะสั้นกว่า กรณีที่ χ_{st} สูง (รูปด้านขวามือ) เนื่องมาจากอิทธิพลของการผสมกันของสารตั้งต้น แต่ที่น่าสังเกตคือ ในช่วงก่อนการจุดระเบิด ก๊าซ CO จะถูกแตกตัวออกมาเป็นจำนวนมาก ส่วนก๊าซ CO₂ จะเข้ามาแทนที่เมื่อเกิดการลุกไหม้แล้ว เนื่องจากการออกซิไดซ์ก๊าซ CO นอกจากนี้ปรากฏการณ์ของเปลวเย็น (cool flame) จะเห็นเด่นชัดเมื่อ χ_{st} สูงขึ้น โดยปรากฏการณ์นี้ พ้นระยะย่อยที่ได้จากการสลายโมเลกุลใหญ่จะรวมตัวเข้าด้วยกันเอง จึงทำให้อุณหภูมิเพิ่มขึ้นเล็กน้อย [88] และเมื่ออุณหภูมิเพิ่มสูงขึ้นจนเพียงพอ การเกิดปฏิกิริยาก็จะรุนแรงมากขึ้นจนเกิดการลุกไหม้ต่อไป โดยก๊าซผลิตภัณฑ์ส่วนใหญ่ที่เกิดขึ้นได้แก่ CO₂, H₂O, CO และ H₂ ตามลำดับ ดังนั้นแบบจำลอง unsteady flamelet จึงสามารถแสดงพฤติกรรมของการเกิดเปลวเย็น ซึ่งเกิดก่อนที่จะปรากฏการเผาไหม้หลัก ได้อย่างไม่มีข้อสงสัย

ก๊าซผลิตภัณฑ์หลักที่เกิดจากการเผาไหม้ที่สภาวะคงตัว ก็มีลักษณะการกระจายตัวคล้าย ๆ กับอุณหภูมิ กล่าวคือ เมื่อค่า χ_{st} เพิ่มขึ้น จะส่งผลให้อัตราการเผาไหม้ลดลง อุณหภูมิและปริมาณก๊าซผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้นก็ลดลงด้วยเช่นกัน ดังแสดงในรูปที่ 4.7 โดยที่ค่า χ_{st} ต่ำมาก ๆ ($\chi_{st} \rightarrow 0$) ลักษณะการกระจายของสัดส่วนเชิงมวลของ species ต่าง ๆ จะใกล้เคียงกับแบบจำลองสมดุลเคมี [95] และเมื่อค่า χ_{st} เพิ่มขึ้นเป็น 0.1 ค่าที่ทำนายได้จากแบบจำลอง flamelet จะมีการเปลี่ยนแปลงมาก เมื่อเทียบกับแบบจำลองสมดุลเคมีจะมีความแตกต่างมากโดยเฉพาะในบริเวณส่วนผสมหนา (rich mixture) แต่ในช่วงส่วนผสมบาง (lean mixture) จะมีความแตกต่างเล็กน้อย ซึ่งความแตกต่างนี้เกิดขึ้นมาจากข้อสมมุติฐานของแบบจำลองสมดุลเคมีที่ว่า ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นนั้นเร็วเพียงพอที่จะทำให้ระบบอยู่ในสภาวะสมดุลตลอดเวลา แต่ในสภาวะจริง strain rate ที่เกิดขึ้นเนื่องจากความปั่นป่วน จะไปกีดขวางและลดอัตราการเกิดปฏิกิริยาลง ทำให้แบบจำลองสมดุลเคมีทำนายได้คลาดเคลื่อนไป ส่วนค่าสูงสุดที่แตกต่างอย่างเด่นชัดของก๊าซ CO และ H₂ ที่ทำนายได้จากแบบจำลอง flamelet และแบบจำลองสมดุลเคมีนั้น เกิดขึ้นเนื่องมาจากจำนวน species ที่ใช้ในการคำนวณของแบบจำลองสมดุลเคมีมีเพียง 12 ชนิด (C₁₂H₂₆, CO₂, CO, H₂O, H₂, H, OH, O₂, O, NO, N, และ N₂) แต่ในขณะที่แบบจำลอง flamelet มีมากถึง 43 ชนิด ดังนั้นอะตอมของคาร์บอนและไฮโดรเจนบางส่วนจึงปรากฏอยู่ใน species อื่น เช่น CH₄, C₂H₄, C₂H₆ เป็นต้น

ค่าสูงสุดของอุณหภูมิเปลวจะค่อย ๆ ลดลง เมื่อค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสม Z''^2 เพิ่มขึ้น จนในที่สุดเกิดการดับลงของเปลวไฟ ที่ $Z''^2 = 0.25$ ดังแสดงในรูปที่ 4.8 ซึ่งค่าความแปรปรวนจะเป็นตัวแปรที่กำหนดรูปร่างการกระจายตัวของ PDF ถ้าค่าความแปรปรวนต่ำ ($Z''^2 \rightarrow 0$) นั้นหมายความว่า ความน่าจะเป็นที่สัดส่วนของผสม $P(Z)$ จะมีลักษณะการกระจายตัวแบบสม่ำเสมอสูง (well mixed) ซึ่งจะมีอัตราการผสมกันต่ำ ดังนั้น $P(Z)$ จึงมีผลน้อยมากต่อการเกิดปฏิกิริยา ในทำนองตรงกันข้าม ถ้าค่าความแปรปรวนสูง ($Z''^2 \rightarrow 0.25$) นั้นหมายความว่า มีความเป็นไปได้สูงที่ เชื้อเพลิงและอากาศไม่ได้ผสมกันเลย จึงทำให้ไม่เกิดการเผาไหม้ ดังนั้นถ้าสารตั้งต้นมีความแปรปรวนที่สูง อุณหภูมิสูงสุดที่เกิดจากการเผาไหม้ก็จะลดลง



รูปที่ 4.7 การกระจายตัวของสารต้นต้นและก๊าซผลิตภัณฑ์จากการคำนวณการเผาไหม้ของ *n*-heptane ที่สภาวะคงตัว



รูปที่ 4.8 การกระจายตัวของอุณหภูมิเปลวเฉื่อยเชิง PDF ที่ค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมต่างๆ

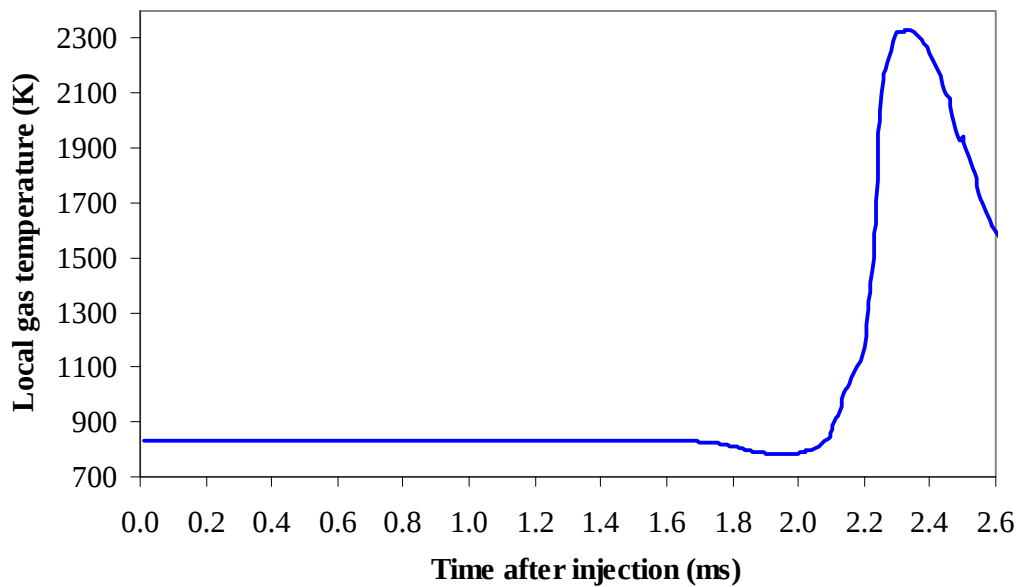
4.3 การจุดระเบิดเอง (Auto-ignition)

การจุดระเบิดเองเป็นการเริ่มต้นของการเผาไหม้ โดยตำแหน่งของการจุดระเบิดเองจะมีผลต่อรูปร่างของเปลวที่เกิดขึ้น เนื่องจากปฏิกิริยาการเผาไหม้จะแปรผันตามอุณหภูมิที่เพิ่มสูงขึ้น ส่งผลให้เปลวไฟขยายตัวออกไปอย่างรวดเร็ว ในงานวิจัยนี้ จะเลือกใช้นิยามการจุดระเบิดเองของ Kang และคณะ [69] ที่ว่า เวลาหน่วงการจุดระเบิด คือช่วงเวลาที่อุณหภูมิของก๊าซเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว โดยทั่วไปแล้ว กระบวนการการเผาไหม้จะดำเนินการได้เอง ก็ต่อเมื่อสารตั้งต้นมีอุณหภูมิที่สูงพอที่จะเร่งปฏิกิริยาให้สูงขึ้น ซึ่งในที่นี้ จะใช้อุณหภูมิที่ 1000 K เป็นอุณหภูมิการจุดระเบิดเอง โดยในการคำนวณนี้จะใช้ข้อมูลตามตารางที่ 4.1 และกริดที่ใช้ในปริมาตรควบคุมดังแสดงในรูปที่ 3.4 ซึ่งผลที่ได้จากการคำนวณมีดังนี้

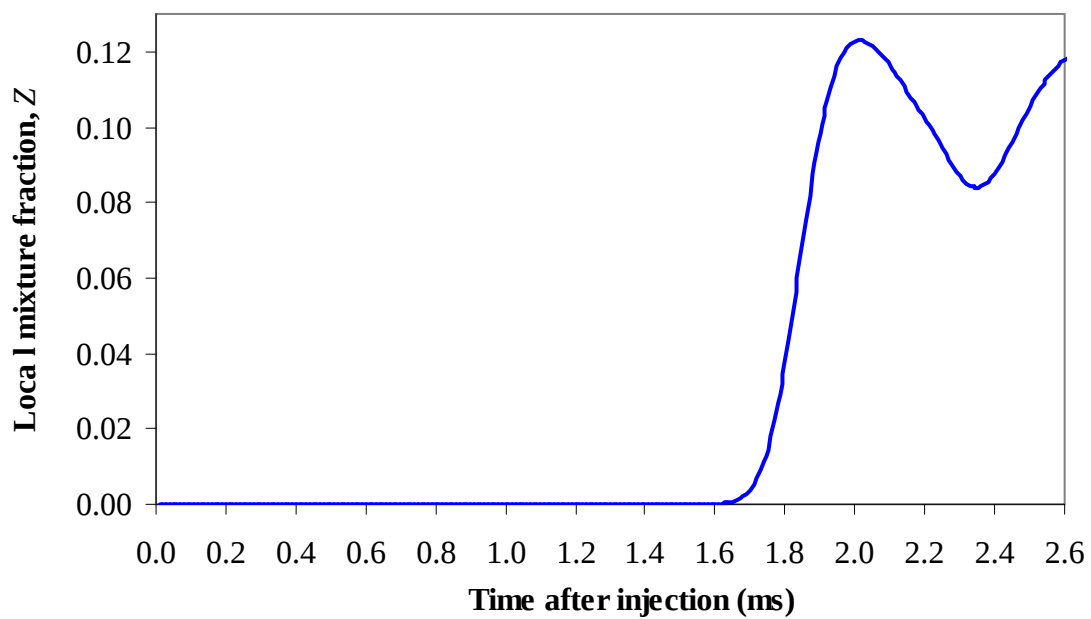
ตารางที่ 4.1 ข้อมูลที่ใช้ในการคำนวณแบบจำลองการเผาไหม้สเปรย์

Time step (μs)	0.5
Inlet SMR (μm)	10
The smallest grid width (mm)	0.5
Cell grid ($z \times r$ cells)	109x73
Trap pressure (MPa)	2.7

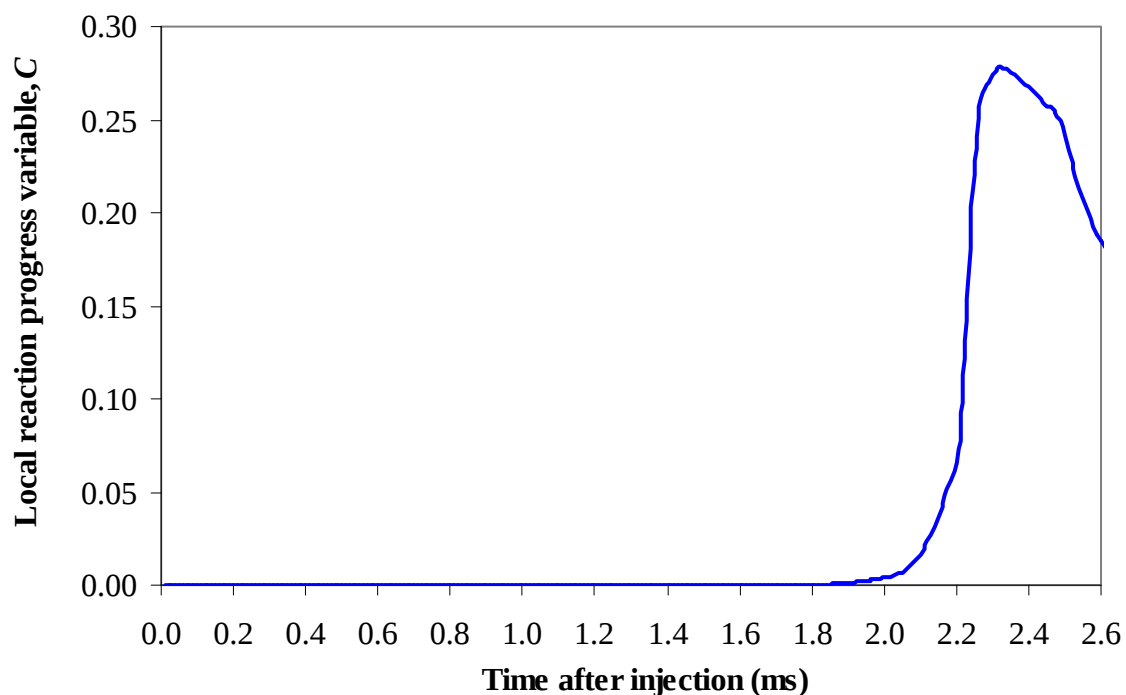
Injection pressure (MPa)	80.0
Trap temperature (K)	830
Liquid temperature (K)	298
Injector radius (mm)	0.09
Injection duration (ms)	3.8



รูปที่ 4.9 การเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิที่ทำนายได้ ณ ตำแหน่งจุดระเบิด



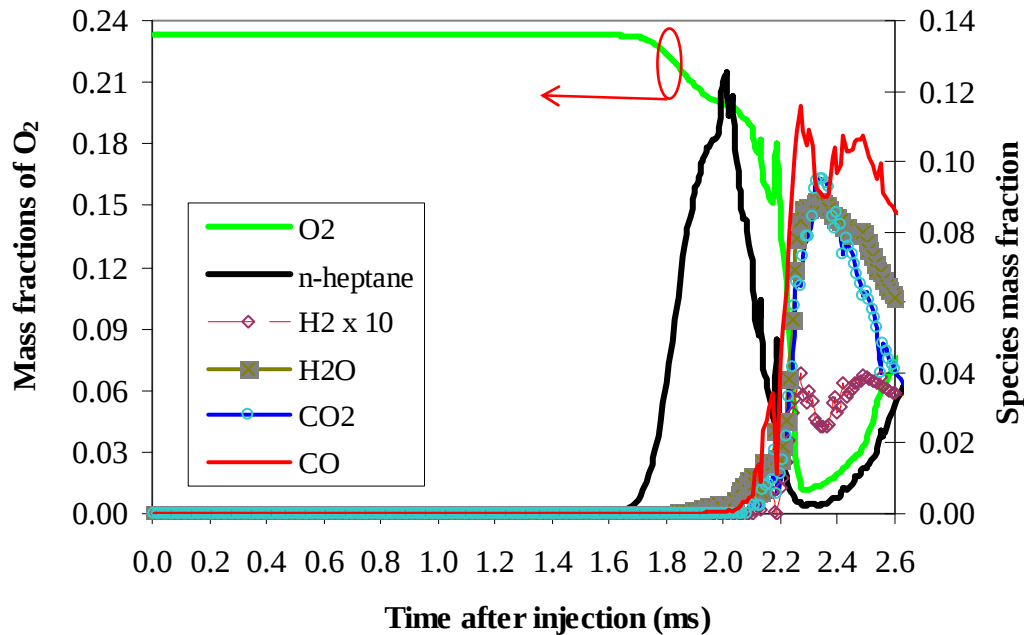
รูปที่ 4.10 การเปลี่ยนแปลงของสัดส่วนของผสม ณ ตำแหน่งจุดระเบิด



รูปที่ 4.11 การเปลี่ยนแปลงของค่า reaction progress variable ณ ตำแหน่งจุดระเบิด

จากแบบจำลอง unsteady flamelet/ reaction progress variable ทำนายการจุดระเบิดเอง จะเกิดขึ้นที่บริเวณส่วนปลายของสเปรย์ (spray tip) ซึ่งห่างจากหัวฉีดเป็นระยะ 92.5 mm และอยู่เหนือจากเส้นศูนย์กลางเป็นระยะ 5.2 mm ผลจากแบบจำลองนี้ สอดคล้องกับผลของแบบจำลองของ Wright และคณะ [12] ซึ่งใช้วิธี conditional moment closure โดยในตอนเริ่มต้น อุณหภูมิของก๊าซ ณ ตำแหน่งที่เกิดการจุดระเบิดเองจะมีค่าลดลงต่ำกว่าอุณหภูมิภายในห้องเผาไหม้ในช่วงเวลา ประมาณ 1.7-2.1 ms ดังแสดงในรูปที่ 4.9 เนื่องจากการปรากฏของละอองฝอยของน้ำมันเชื้อเพลิงที่ ตำแหน่งนี้ ซึ่งจะเห็นได้ในรูปที่ 4.10 ว่า ค่าสัดส่วนของผสมเริ่มมีค่าสูงขึ้นที่เวลาประมาณ 1.7 ms แต่เป็นที่น่าสังเกตว่า ค่า reaction progress variable (RPV) จะเริ่มเกิดขึ้นที่เวลาล่าช้ากว่าคือ ประมาณ 1.9 ms ดังแสดงในรูปที่ 4.11 เพราะต้องการเวลาในการทำปฏิกิริยา หลังจากนั้นที่เวลา 2.0 ms พลังงานที่ได้จากปฏิกิริยาเคมีจะเริ่มมีค่ามากกว่าพลังงานที่ใช้ในการระเหยของละอองฝอย จึงทำให้อุณหภูมิและค่า RPV ค่อย ๆ เพิ่มขึ้น โดยค่าสัดส่วนของผสมจะลดลงอย่างเห็นได้ชัด นั้นหมายความว่า อัตราการระเหยจะต่ำกว่าอัตราการเผาไหม้ของละอองฝอย ต่อมาปฏิกิริยาการเผาไหม้ก็ค่อย ๆ เพิ่มขึ้นตามอุณหภูมิ จนกระทั่งเกิดการจุดระเบิดเอง ทำให้อุณหภูมิและค่า RPV เพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว แต่ปริมาณสัดส่วนของผสมจะลดลง และเป็นที่น่าสังเกตว่า สัดส่วนของผสม ณ ตำแหน่งที่เกิดการจุดระเบิดเองนั้นมีค่ามากกว่า Z_{st} ซึ่งผลดังกล่าวสอดคล้องกับงานวิจัยของ Wright และคณะ [12] และ Mastorakos และคณะ [13] โดย radical จะเกิดการแตกตัวมากในบริเวณผิว เปลือกของสเปรย์ จะมีแนวโน้มแพร่เข้าไปในบริเวณที่มีค่าสัดส่วนของผสมสูง ดังนั้นจึงเป็นสาเหตุที่

การจุดระเบิดเกิดขึ้นในบริเวณดังกล่าว]12[โดยอุณหภูมิและค่า RPV จะมีค่าสูงสุดที่เวลาประมาณ 2.3 ms แต่จะเป็นตำแหน่งต่ำสุดของค่าสัดส่วนของผสม หลังจากนั้นอุณหภูมิและค่า RPV จะมีค่าลดลง แต่ค่าสัดส่วนของผสมจะมีค่าเพิ่มขึ้น ซึ่งเป็นช่วงของการเปลี่ยนพฤติกรรมจากการเผาไหม้แบบ premixed ไปเป็นแบบ diffusion ซึ่งขึ้นอยู่กับอัตราการผสมกันของอากาศและไอเชื้อเพลิงเป็นหลัก ดังนั้นจากที่อธิบายไว้ข้างต้นจะเห็นได้ว่า ในช่วงแรกของการเผาไหม้สเปรย์จะมีพฤติกรรมของเปลวแบบ premixed เป็นหลัก หลังจากนั้น อิทธิพลของเปลว diffusion จะเข้ามามีบทบาทแทนที่

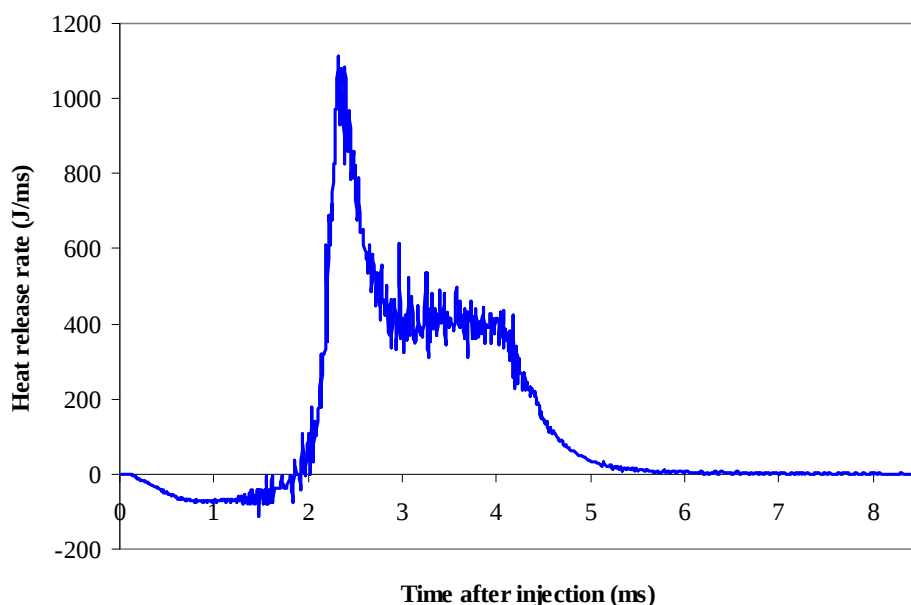


รูปที่ 4.12 ปริมาณก๊าซผลิตภัณฑ์ที่เกิดจากการเผาไหม้ที่ทำนายได้ ณ ตำแหน่งจุดระเบิด

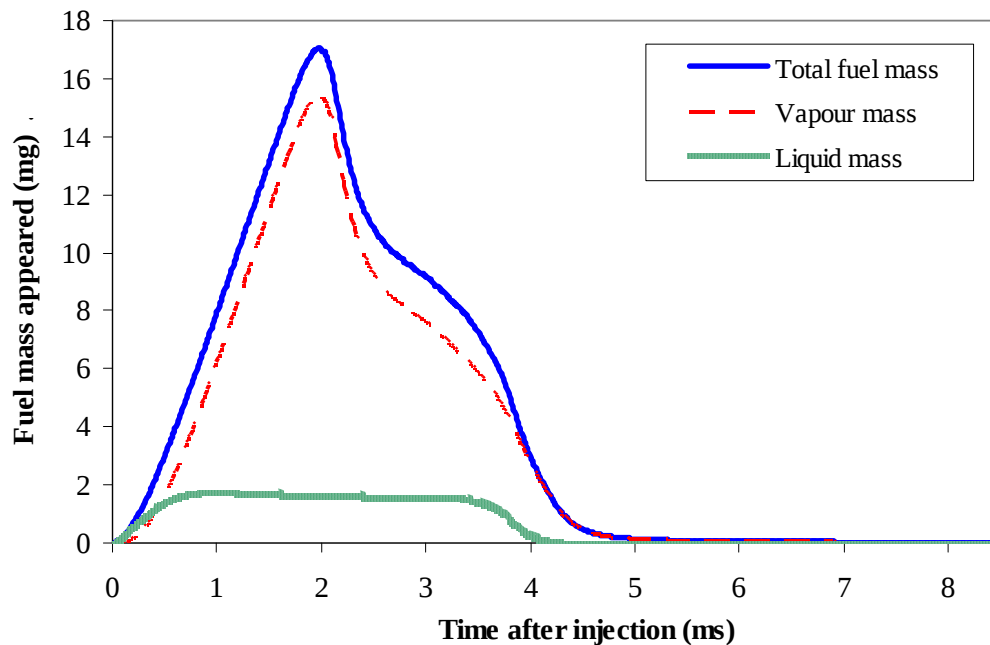
ส่วนก๊าซผลิตภัณฑ์ที่เกิดจากปฏิกิริยาการเผาไหม้แสดงในรูปที่ 4.12 โดยก๊าซ *n*-heptane และ O₂ จะเริ่มเปลี่ยนแปลงที่เวลาประมาณ 1.7 ms เนื่องจากละอองฝอยของเชื้อเพลิงได้เข้ามาที่บริเวณตำแหน่งที่เกิดการจุดระเบิด ที่เวลา 2.0 ms สัดส่วนเชิงมวลของ *n*-heptane จะเริ่มลดลงอย่างรวดเร็ว เนื่องจากปฏิกิริยาเคมี ส่งผลให้ปริมาณก๊าซผลิตภัณฑ์จะเพิ่มขึ้น และก๊าซออกซิเจนจะลดลงอย่างมาก จนกระทั่งปริมาณก๊าซ *n*-heptane ถูกใช้จนเกือบหมด รูปแบบการการเผาไหม้จึงเปลี่ยนไปเป็นแบบ diffusion ซึ่งมีอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ต่ำกว่าการเผาไหม้แบบ premixed ดังนั้นปฏิกิริยาการเผาไหม้จึงขึ้นอยู่กับอัตราการแพร่ของสารตั้งต้นเข้ามาผสมกันในบริเวณการเผาไหม้ ส่งผลให้ สัดส่วนเชิงมวลของ *n*-heptane เริ่มเพิ่มขึ้นที่เวลา 2.3 ms โดยก๊าซผลิตภัณฑ์ส่วนใหญ่ที่เกิดขึ้นได้แก่ CO, CO₂, H₂O และ H₂ ตามลำดับ แต่เป็นที่น่าสนใจที่ว่า ก๊าซ CO จะมีปริมาณมากที่สุดในช่วงแรกของการเผาไหม้ ซึ่งลักษณะการกระจายตัวของก๊าซผลิตภัณฑ์จะกล่าวถึงภายหลัง

4.4 การเผาไหม้ (Combustion)

หลังจากเกิดการจุดระเบิดเองแล้ว การเผาไหม้หลักก็จะเข้ามาแทนที่ จากรูปที่ 4.13 แสดงให้เห็นว่า อัตราการปลดปล่อยความร้อนจะมีค่าลดลงต่ำกว่าศูนย์ในช่วง 2 ms แรก เนื่องจากละอองฝอยของสเปรย์รับความร้อนจากอากาศร้อนภายในห้องเผาไหม้ ทำให้เกิดการระเหยของละอองฝอยขึ้น ส่งผลให้สัดส่วนของผสมมีค่าสูงขึ้น และอุณหภูมิก๊าซลดต่ำลงในบริเวณใกล้หัวฉีด ซึ่งช่วงเวลานี้เรียกว่า ช่วงการให้ความร้อน (heating up period) หลังจากนั้น อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีก็ค่อย ๆ เพิ่มขึ้น ส่งผลให้ก๊าซมีอุณหภูมิสูงขึ้นตาม จนในที่สุด เกิดการจุดระเบิดเองขึ้น ก่อนนำไปสู่การเผาไหม้หลัก โดยในช่วงเริ่มต้นของการเผาไหม้หลัก จะมีอัตราการปลดปล่อยความร้อนสูงมาก เนื่องจากอากาศและไอเชื้อเพลิงได้รับการผสมกันได้ดี พร้อมทั้งจะลุกไหม้เมื่ออุณหภูมิสูงพอ และเมื่อปริมาณของผสมส่วนใหญ่ของสเปรย์ถูกเผาไหม้ จึงทำให้อัตราการปลดปล่อยความร้อนลดต่ำลงอย่างมาก เนื่องจากการเผาไหม้จะต้องอาศัยการแพร่ของออกซิเจนผ่านกลุ่มก้อนก๊าซผลิตภัณฑ์เพื่อเข้ามาผสมกับไอเชื้อเพลิงที่เหลืออยู่ภายในสเปรย์ ซึ่งช่วงนี้จะเป็นการเผาไหม้แบบ non-premixed ดังนั้นอัตราการปลดปล่อยพลังงานที่ช่วงเวลาประมาณ 3-4 ms จึงมีค่าค่อนข้างคงที่ และปฏิกิริยาการเผาไหม้ส่วนใหญ่จะเกิดขึ้นในบริเวณใกล้หัวฉีด ซึ่งเป็นรอยต่อระหว่างบริเวณไม่เกิดปฏิกิริยา (non-reactive region) และบริเวณเกิดปฏิกิริยา (reactive region) เนื่องจากออกซิเจนจะถูกดึงดูดเข้ามาในลำตัวของสเปรย์ทางด้านนี้มากที่สุด โดยระยะห่างระหว่างหัวฉีดและรอยต่อนี้จะเรียกว่า ระยะเปลวลอยตัว (lift-off length) ดังนั้นเปลวไฟที่เกิดขึ้นในบริเวณรอยต่อนี้จึงเป็นแบบ premixed และที่เวลา 3.8 ms จะเป็นการสิ้นสุดของการฉีดน้ำมันเชื้อเพลิงเข้าไปในห้องเผาไหม้ ดังนั้นอัตราการปลดปล่อยพลังงานจึงลดลงอย่างเชิง exponential จนกระทั่งสิ้นสุดกระบวนการเผาไหม้



รูปที่ 4.13 อัตราการปลดปล่อยความร้อนจากการเผาไหม้ที่ทำนายได้



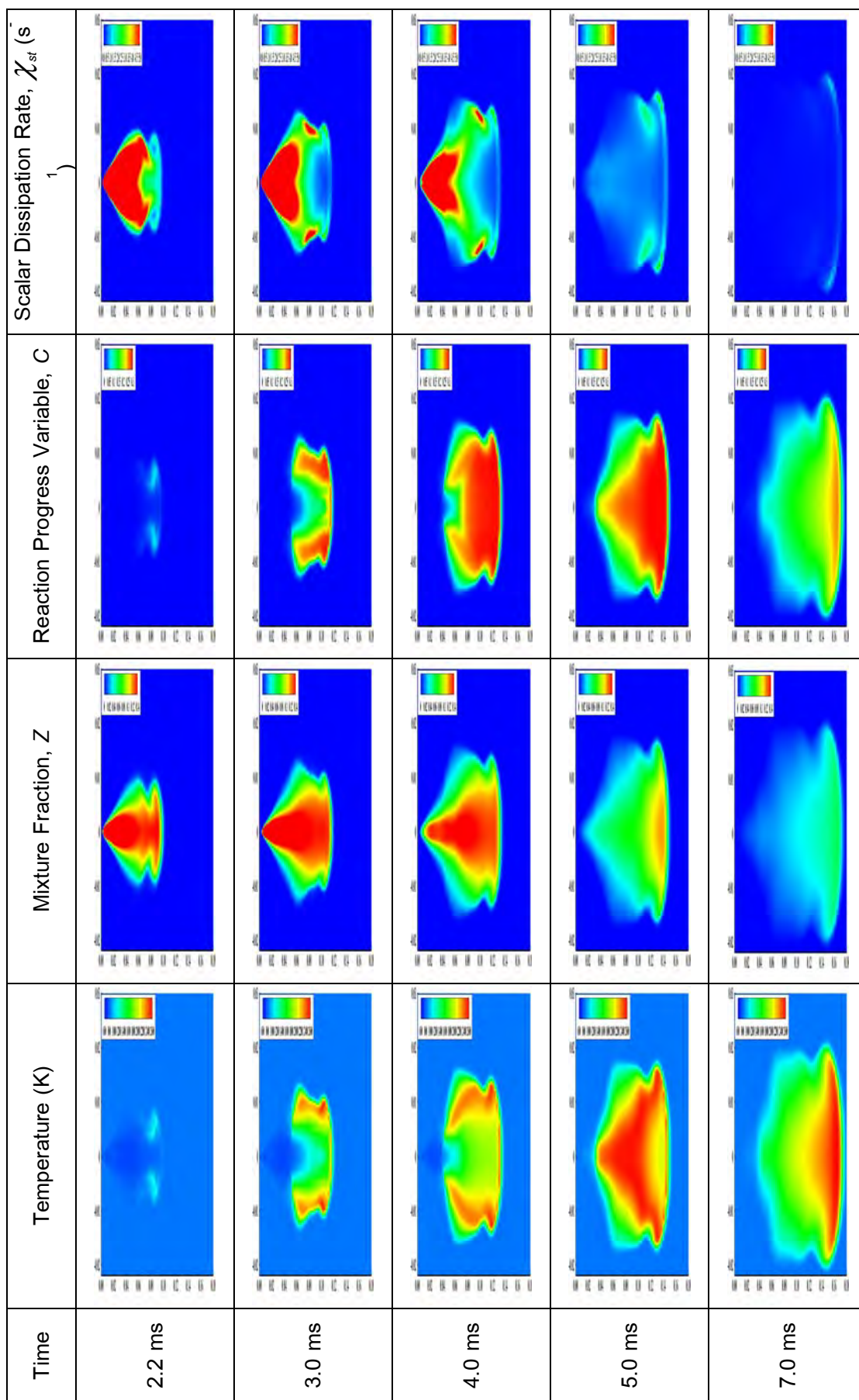
รูปที่ 4.14 การเปลี่ยนแปลงของปริมาณเชื้อเพลิงที่ปรากฏในห้องเผาไหม้

เพื่อเป็นการยืนยันว่า ละอองฝอยโดยส่วนใหญ่ของสเปรย์ในแบบจำลองนี้ เกิดการระเหย กลายเป็นไอเชื้อเพลิง มวลของเชื้อเพลิงในสถานะต่าง ๆ จึงถูกแสดงดังในรูปที่ 4.14 ซึ่งจะเห็นได้ว่า เชื้อเพลิงเหลวโดยส่วนใหญ่ที่ถูกฉีดเข้าไปในห้องเผาไหม้ จะเกิดการระเหยกลายเป็นไออย่างรวดเร็ว โดยคงเหลือแต่มวลเชื้อเพลิงเหลวที่อยู่ใกล้กับหัวฉีดที่ไม่ระเหยและจะมีค่าค่อนข้างคงที่จนกระทั่ง สิ้นสุดกระบวนการฉีดน้ำมันเชื้อเพลิง นั่นหมายความว่า ปริมาณน้ำมันเชื้อเพลิงที่ถูกฉีดเพิ่มเข้าไปมี ค่าใกล้เคียงกับปริมาณที่ถูกทำให้ระเหย ดังนั้นมวลของเชื้อเพลิงเกือบทั้งหมดในห้องเผาไหม้จึงอยู่ ในสถานะก๊าซ และที่เวลาประมาณ 2.2 ms มวลของไอเชื้อเพลิงจะลดลงอย่างรวดเร็ว เนื่องจากการ เผาไหม้แบบ premixed หลังจากนั้นการลดลงของไอเชื้อเพลิงจะช้าลง เนื่องจากรูปแบบการเผาไหม้ เปลี่ยนมาเป็นแบบ non-premixed และเมื่อสิ้นสุดกระบวนการฉีดน้ำมันเชื้อเพลิงที่เวลา 3.8 ms ปริมาณไอเชื้อเพลิงจะลดลงอย่างรวดเร็วในช่วงแรก เนื่องจากการเผาไหม้ในบริเวณใกล้กับหัวฉีด แล้วจึงค่อย ๆ ลดลงจนสิ้นสุดกระบวนการเผาไหม้

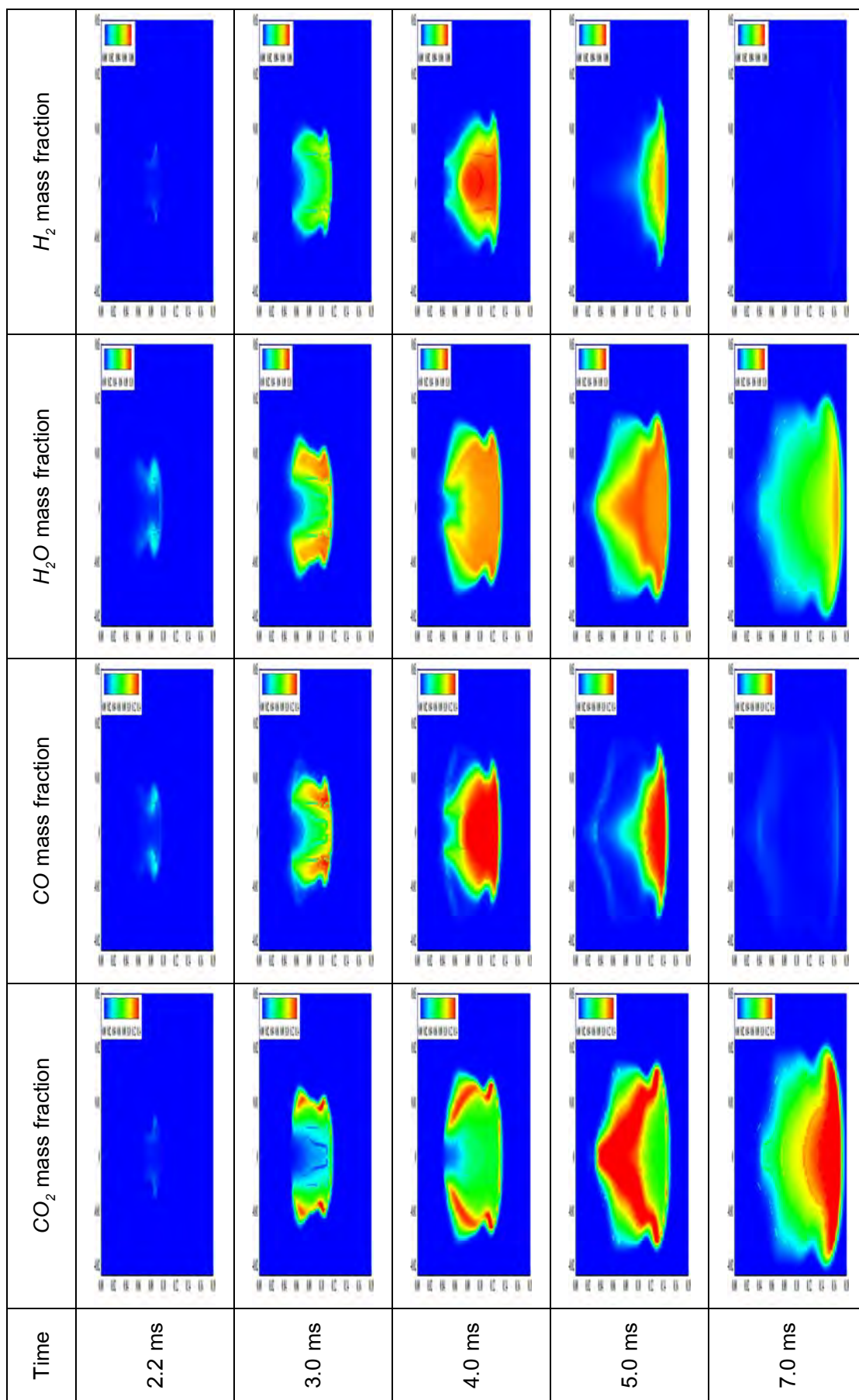
ดังที่ได้กล่าวมาแล้วว่า การจุดระเบิดเองจะเกิดขึ้นในบริเวณที่มี χ_{st} ต่ำ ๆ ซึ่งในรูปที่ 4.15 ก็ได้ยืนยันว่า การจุดระเบิดเองเกิดขึ้นที่บริเวณส่วนหัวของสเปรย์ ซึ่งมีค่า χ_{st} ที่สุด โดยตำแหน่งของ การจุดระเบิดเองจะมีผลอย่างมากต่อรูปร่างของเปลวที่พัฒนาตัวขึ้น ทันทีที่เกิดการจุดระเบิด ค่า C ก็จะเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว ส่งผลให้อุณหภูมิมีค่าสูงขึ้นตามไปด้วย และเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นก็จะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงขึ้นตามด้วย ดังนั้นรูปร่างการกระจายตัวของค่า C และอุณหภูมิจึงมี ลักษณะที่คล้ายกันมาก จากการจุดระเบิดที่บริเวณหัวของสเปรย์ จึงทำให้ละอองของน้ำมันเชื้อเพลิง ในบริเวณดังกล่าวเกิดการระเหยอย่างรวดเร็ว ส่งผลให้เกิดการขยายตัวอย่างมากในบริเวณนั้น และค่าสัดส่วนของผสมก็จะเพิ่มขึ้นตามด้วย หลังจากนั้น เปลวก็จะเคลื่อนลงไปตามเปลือกกรอบนอก

ของสเปรย์ซึ่งมีส่วนผสมใกล้เคียง stoichiometric และในแนวบริเวณดังกล่าวจะมีอุณหภูมิสูงที่สุด ส่วนในบริเวณแกนกลางของสเปรย์ซึ่งเต็มไปด้วยละอองฝอยก็จะมีอุณหภูมิที่ลดต่ำลง เนื่องจากความร้อนบางส่วนจะถูกใช้ในการระเหยละอองฝอย โดยเปลวที่เคลื่อนที่ลงไปทางหัวฉีด จะหยุดการพัฒนาตัวที่ระยะ ๆ หนึ่ง ซึ่งเรียกว่า ระยะเปลวลอยตัว (lift-off length) ดังที่ได้อธิบายไว้ในหัวข้อ 2.3.8 นอกจากนี้ ค่า scalar dissipation rate จะมีค่าสูงมากในบริเวณใกล้หัวฉีด ซึ่งเป็นบริเวณที่ละอองฝอยเกิดการระเหยกายเป็นไอน้ำมากที่สุด หลังจากสิ้นสุดการฉีดน้ำมันเชื้อเพลิงที่เวลา 3.8 ms การเผาไหม้ที่บริเวณหางของสเปรย์ (ใกล้หัวฉีด) จะเกิดขึ้นอย่างรวดเร็ว เนื่องจากออกซิเจนสามารถแพร่เข้ามาทำปฏิกิริยาได้ง่าย และเป็นที่น่าสังเกตว่า ค่า Z และ χ_{st} จะลดลงอย่างรวดเร็วเมื่อสิ้นสุดการฉีดน้ำมันเชื้อเพลิง ในเวลาต่อมา หางของสเปรย์จะค่อย ๆ สั่นลง และรูปร่างของเปลวดูคล้ายกับลูกบอลไฟในที่สุด

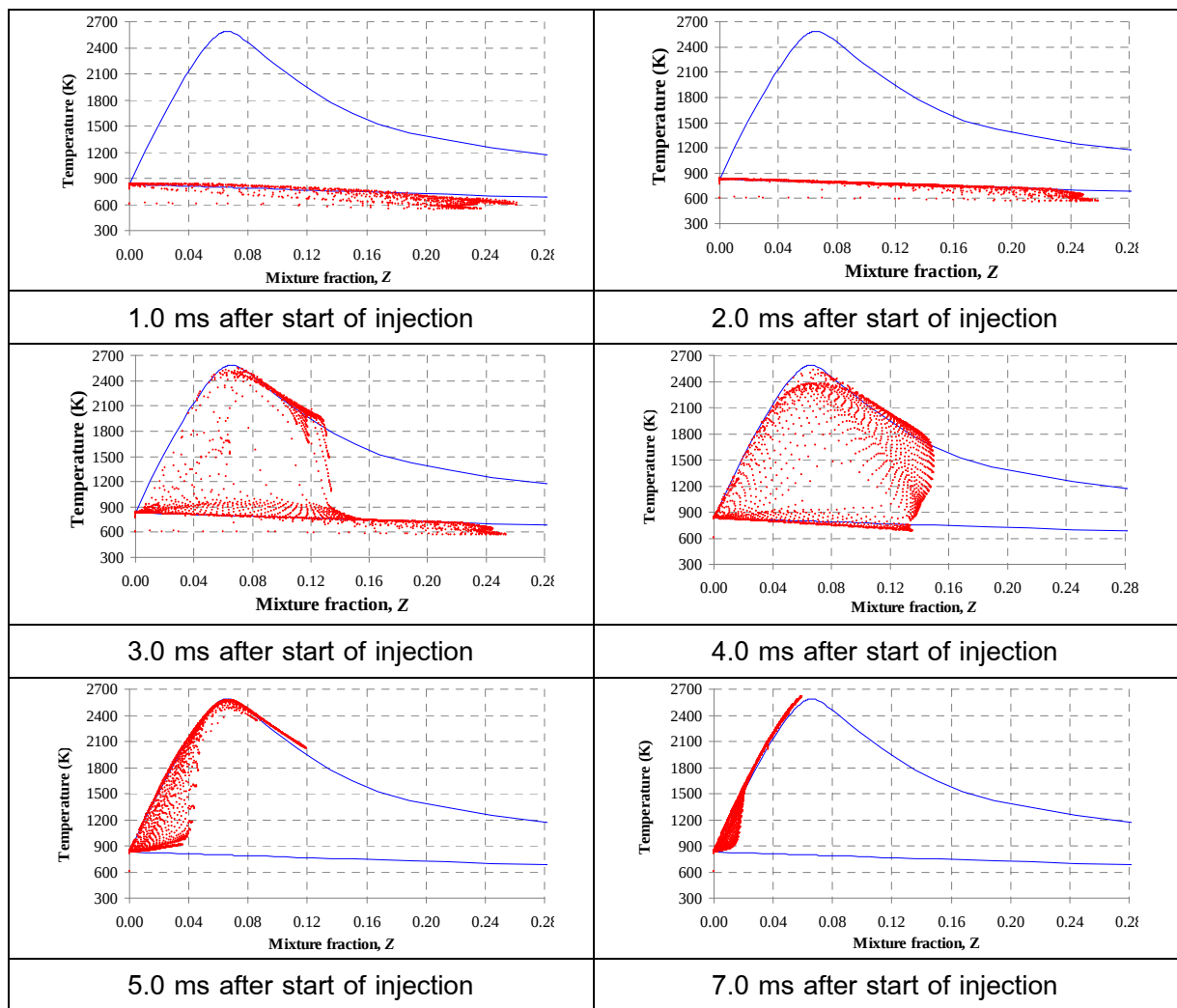
เมื่อพิจารณาการเปลี่ยนแปลงของก๊าซผลิตภัณฑ์หลักที่เกิดขึ้นในห้องเผาไหม้ดังแสดงในรูปที่ 4.16 โดยก๊าซผลิตภัณฑ์จะเริ่มปรากฏเด่นชัด เมื่อเกิดการจุดระเบิดเองขึ้น ซึ่งก๊าซ CO จะโดดเด่นมากในช่วงนี้ ดังที่ได้กล่าวมาแล้วในหัวข้อ 4.2 หลังจากนั้นปริมาณก๊าซผลิตภัณฑ์จะเพิ่มมากขึ้นตามอัตราการเผาไหม้ที่เพิ่มขึ้น ก๊าซ CO_2 โดยส่วนใหญ่จะเกิดขึ้นในบริเวณผิวของสเปรย์ ซึ่งเป็นบริเวณส่วนผสม stoichiometric สำหรับก๊าซ CO และ H_2 จะเกิดขึ้นมากในบริเวณส่วนกลางของสเปรย์ซึ่งเป็นบริเวณที่มีส่วนผสมหนา ส่วนก๊าซ H_2O จะเกิดขึ้นทั้งในบริเวณที่มีส่วนผสมหนาและบาง และเมื่อเวลาผ่านไป ก๊าซ CO และ H_2 จะถูกออกซิไดส์โดยก๊าซออกซิเจนกลายเป็นก๊าซ CO_2 และ H_2O ตามลำดับ ในที่สุด



รูปที่ 4.15 การเปลี่ยนแปลงของการกระจายอุณหภูมิ, สัดส่วนของผสม, reaction progress variable และ stoichiometric scalar dissipation rate ในระหว่างกระบวนการเผาไหม้



รูปที่ 4.16 การเปลี่ยนแปลงของการกระจายตัวของก๊าซผลิตภัณฑ์ในระหว่างกระบวนการเผาไหม้



รูปที่ 4.17 การกระจายตัวของอุณหภูมิที่ค่าสัดส่วนของผสมต่าง ๆ ในระหว่างกระบวนการเผาไหม้

อุณหภูมิของเซลล์ต่าง ๆ ภายในสเปรย์มีลักษณะการกระจายตามค่าสัดส่วนของผสมดังแสดงในรูปที่ 4.17 โดยในช่วง 2 ms แรก ซึ่งเป็นช่วงของการให้ความร้อน อุณหภูมิของเซลล์ทั้งหมดจะอยู่ในบริเวณเส้นการผสมกัน (mixing line) โดยอุณหภูมิของเซลล์ส่วนใหญ่จะมีค่าต่ำกว่าอุณหภูมิผสมกัน เนื่องจากได้รับอิทธิพลจากการระเหยของละอองฝอย สารตั้งต้นจะรับความร้อนจากอากาศร้อนในห้องเผาไหม้ ทำให้อุณหภูมิค่อย ๆ เพิ่มขึ้นจนกระทั่งเกิดการจุดระเบิดเองที่เวลาประมาณ 2.2 ms หลังจากที่มีการติดไฟแล้ว อุณหภูมิของเซลล์ที่ติดไฟจะอยู่ในใกล้กับเส้นสภาวะสมดุล (equilibrium line) ส่วนอุณหภูมิที่อยู่ระหว่างเส้นทั้งสอง โดยส่วนใหญ่คือเซลล์ที่อยู่ในบริเวณระยะลอยตัวของเปลวดังแสดงจากค่า C ในรูปที่ 4.15 และเป็นที่น่าสนใจคือ บริเวณที่มีค่าสัดส่วนของผสมมากกว่า 0.14 จะไม่เกิดปฏิกิริยาเลย ซึ่งอุณหภูมิของเซลล์ดังกล่าวนี้ จะอยู่บริเวณใกล้หัวฉีด เมื่อสิ้นสุดกระบวนการฉีดน้ำมันที่เวลา 3.8 ms ค่าสัดส่วนของผสมที่เซลล์ต่าง ๆ ก็จะลดต่ำลง เซลล์ต่าง ๆ ก็จะมีอุณหภูมิเข้าใกล้อุณหภูมิที่สภาวะสมดุลเพิ่มมากขึ้น จนในที่สุด อุณหภูมิของทุกเซลล์จะวางตัวบนเส้นสภาวะสมดุล

4.5 การเปรียบเทียบผลการทำนายของแบบจำลองกับผลการ

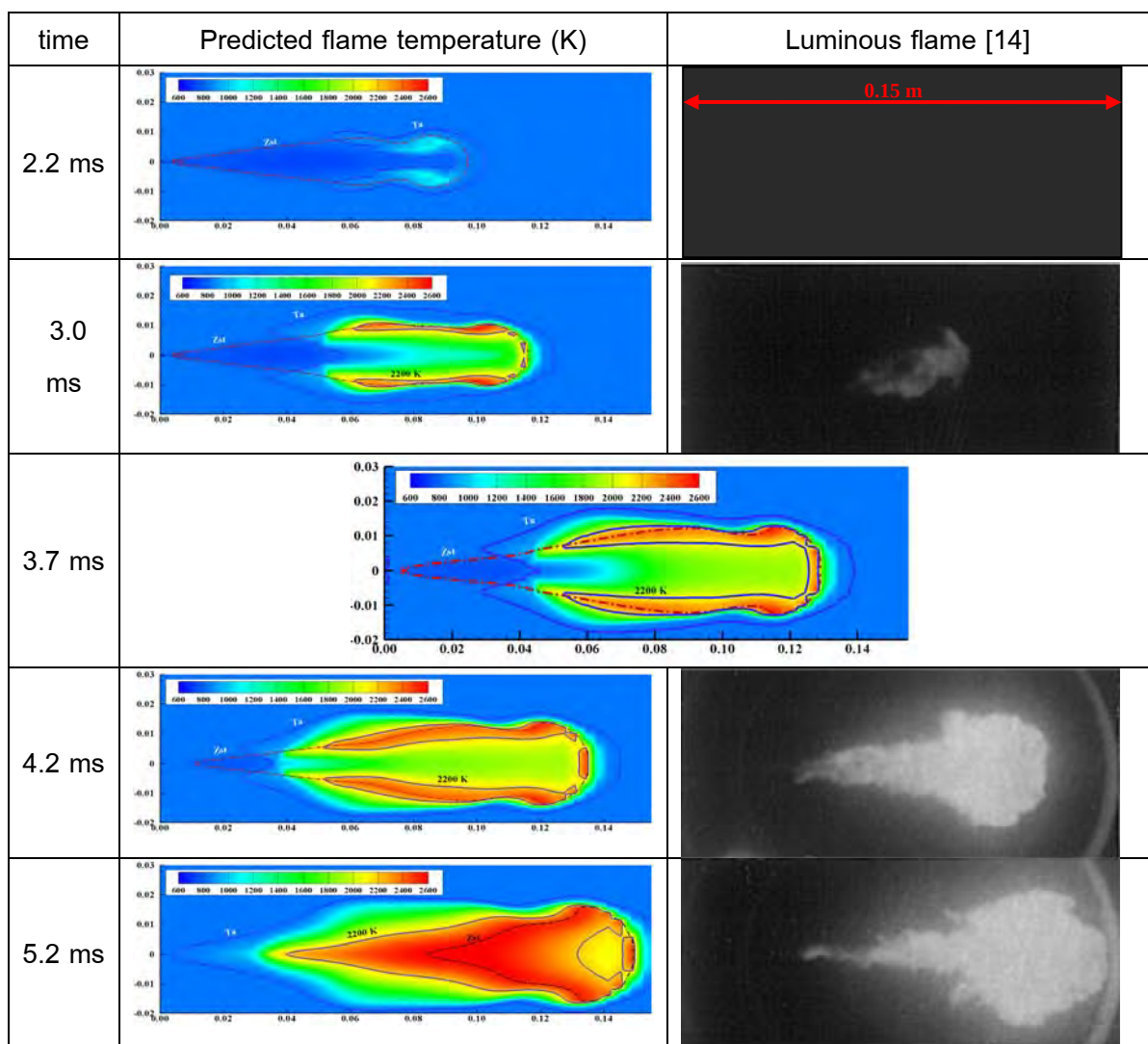
ทดลอง

เพื่อเป็นการทดสอบความน่าเชื่อถือของแบบจำลอง unsteady flamelet/ reaction progress variable ที่ได้พัฒนาขึ้นในการทำนายเวลาหน่วงการจุดระเบิด และการพัฒนาตัวของการเผาไหม้สเปรี๊ยะ จึงได้นำผลการทำนายดังกล่าวไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [14] ซึ่งทำการฉีดน้ำมันดีเซลอุณหภูมิ 298 K ด้วยความดัน 80 MPa เป็นระยะเวลา 3.8 ms รวมปริมาณน้ำมันที่ใช้ 28 mg เข้าสู่ห้องเผาไหม้ซึ่งมีความดัน 2.7 MPa และอุณหภูมิ 830 K โดยหัวฉีดมีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.18 mm สำหรับลักษณะของกริดที่ใช้ในปริมาตรควบคุมดังแสดงในรูปที่ 3.4 ซึ่งผลที่ได้จากการเปรียบเทียบมีดังนี้

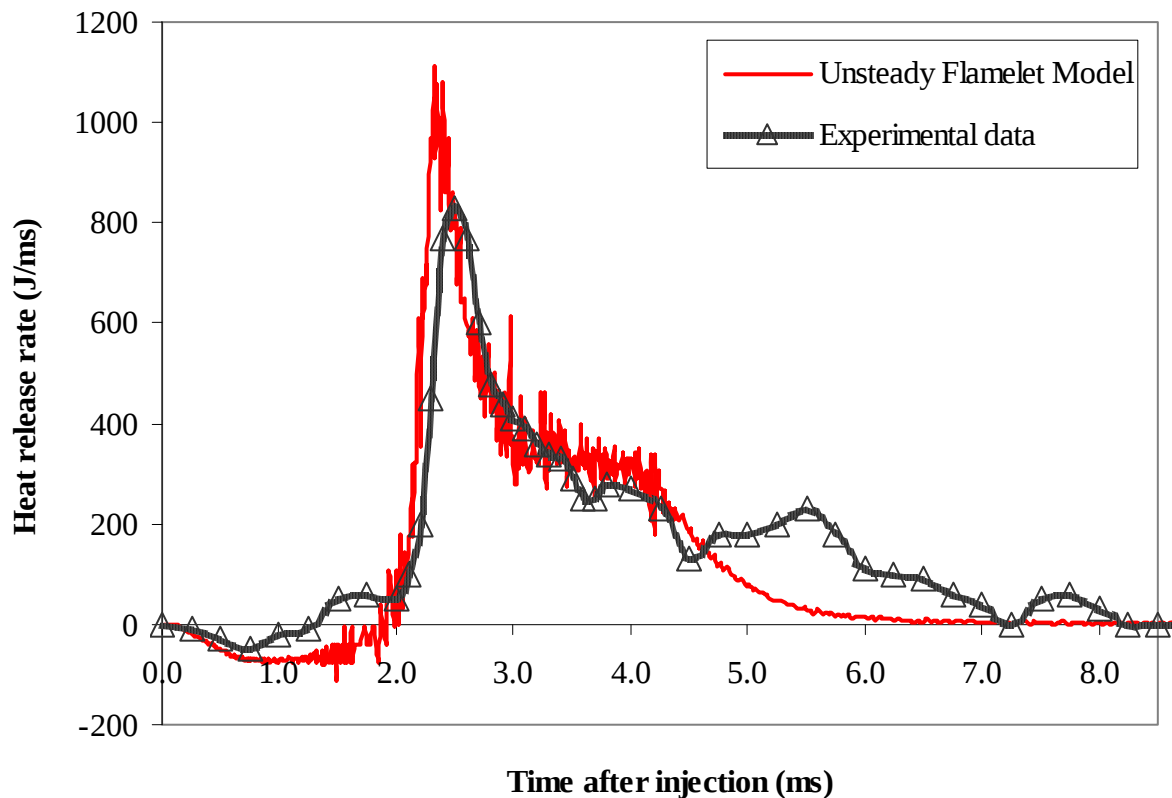
จากการทดลองของ Akiyama และคณะ [14] รายงานว่า เวลาหน่วงการจุดระเบิดเองที่ได้จากการทดลองซึ่งนิยามว่า ณ ช่วงเวลาที่ความดันของห้องเผาไหม้เริ่มสูงขึ้นมีค่าประมาณ 1.4 ms แต่อย่างไรก็ตามประกายไฟแรกที่ปรากฏในภาพถ่ายจะเริ่มที่เวลา 2.8 ms เมื่อนำผลลัพธ์ที่ได้จากแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นมาเปรียบเทียบกับดังแสดงในรูปที่ 4.18 พบว่า ปฏิกริยาการเผาไหม้ที่ทำนายได้จะเริ่มเกิดขึ้นที่บริเวณ stoichiometric contour (เส้น Z_{st}) ของสเปรี๊ยะดังแสดงด้วยอุณหภูมิที่สูงกว่า โดยในรูปจะแสดงเส้น contour ของอุณหภูมิเริ่มต้นในห้องเผาไหม้ด้วย โดยเวลาหน่วงของการจุดระเบิดเองจะทำนายได้ประมาณ 2.2 ms และเกิดขึ้นในบริเวณใกล้เคียงกับส่วนหัวของสเปรี๊ยะ ซึ่งแตกต่างค่อนข้างอย่างมีนัยสำคัญกับผลการทดลอง แต่อย่างไรก็ตาม ภาพถ่ายที่ได้จากการทดลอง ก็ยังยืนยันไม่ได้ถึงตำแหน่งที่เกิดการจุดระเบิด เพียงแต่อ้างอิงจากความดันภายในห้องเผาไหม้ที่เปลี่ยนแปลงเป็นตัวระบุเวลาหน่วงการจุดระเบิด แต่ภาพถ่ายประกายไฟแรกเกิดขึ้นที่เวลา 2.8 ms หลังจากเกิดการจุดระเบิดเองแล้ว เปลวไฟจะขยายไปยังบริเวณใกล้เคียงจนครอบคลุมผิวด้านนอกทั้งหมดของสเปรี๊ยะ ยกเว้นบริเวณใกล้หัวฉีด ซึ่งเปลวลักษณะนี้เรียกว่า เปลวลอยตัว โดยที่บริเวณด้านในของตำแหน่งการลอยตัวของเปลว อุณหภูมิจะค่อย ๆ เพิ่มขึ้นไปตามทิศทางการไหล เนื่องจากการเผาไหม้แบบ partially premixed และเป็นที่น่าสังเกตว่า อุณหภูมิเปลวสูงสุดจะเกิดขึ้นในบริเวณ stoichiometric contour เป็นไปตามทฤษฎีของเปลว non-premixed

ที่เวลา 3.0 ms อุณหภูมิเปลวที่คำนวณได้จากแบบจำลองจะมีค่าสูงกว่าผลการทดลอง ทั้งนี้เนื่องมาจาก การปรากฏของเปลวที่ล่าช้าจากการทดลองทำให้การพัฒนาตัวของเปลวช้ากว่า แต่เป็นที่น่าสนใจว่า ในการทดลอง จะใช้การเปลี่ยนแปลงของความดันมาคำนวณหาอัตราการปลดปล่อยพลังงาน ซึ่งจะให้อัตราการปลดปล่อยพลังงานสูงสุดที่เวลาประมาณ 2.5 ms ดังแสดงในรูปที่ 4.19 โดยความดันที่เพิ่มขึ้น เกิดขึ้นเนื่องจากอุณหภูมิที่สูงขึ้น แต่ทำไมภาพถ่ายจึงไม่ปรากฏ ขนาดเปลวไฟที่ใหญ่เท่าที่ควร สำหรับระยะเปลวลอยตัว ซึ่งนิยามจากระยะจากหัวฉีดมายังอุณหภูมิอ้างอิง ซึ่งในที่นี้จะกำหนดอุณหภูมิอ้างอิงเท่ากับ 2,200 K ตามงานวิจัยของ [136, 137] ที่เวลา 3.7 ms ซึ่งเป็นช่วงเวลาก่อนที่จะสิ้นสุดกระบวนการฉีดน้ำมัน ระยะเปลวลอยตัวที่ได้จากแบบจำลองมีค่าประมาณ 52 mm ส่วนระยะเปลวลอยตัวที่วัดโดยตรงจากภาพถ่ายจะให้ค่าออกมาประมาณ 48

mm เลือกข้อมูลเป็นเวลา 4.2 ms เนื่องจากเป็นช่วงเวลาที่ใกล้เคียงที่สุด นอกจากนี้ จากสหสัมพันธ์ของ Siebers และคณะ [15, 16] ที่ใช้ในการทำนายระยะเปลวลอยตัว ซึ่งให้ค่าออกมาประมาณ 40-55 mm ซึ่งสอดคล้องกับผลการทำนายของแบบจำลองที่พัฒนาขึ้น ต่อมาที่เวลา 4.2 ms เปลวไฟที่ได้จากแบบจำลองต่าง ๆ จะมีความยาวของเปลวที่ใกล้เคียงกับภาพถ่าย แต่ขนาดของหางเปลวจากภาพถ่ายจะแคบกว่า ก่อนที่เปลวไฟจะกระทบกับผนังของห้องเผาไหม้ ที่เวลา 5.2 ms รูปร่างของเปลวไฟที่ได้จากแบบจำลองจะใกล้เคียงกับภาพถ่าย ยกเว้นขนาดที่ยังคงเล็กกว่า จากการเปรียบเทียบข้างต้น จะเห็นได้ว่าแบบจำลอง UFM ร่วมกับ RPV สามารถทำนายการจุดระเบิดและการเผาไหม้ของสเปรย์ดีเซลได้ค่อนข้างดี โดยสามารถอธิบายปรากฏการณ์โดยหลักของเปลวไฟได้อย่างครบถ้วน



รูปที่ 4.18 การเปรียบเทียบระหว่างภาพถ่ายเปลวไฟจากการทดลองของ Akiyama และคณะ [14] และการกระจายตัวของอุณหภูมิเปลวจากแบบจำลอง

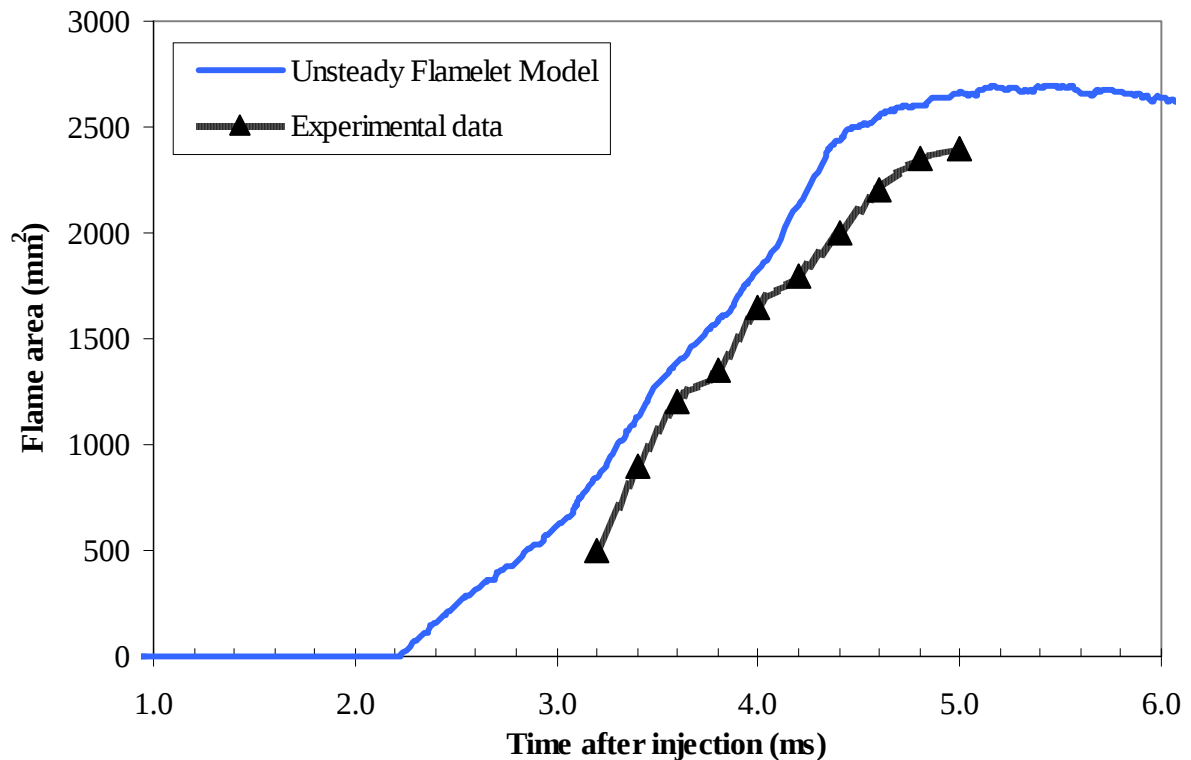


รูปที่ 4.19 อัตราการปลดปล่อยความร้อนจากการเผาไหม้ที่ทำนายได้จากแบบจำลอง
เปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [14]

เมื่อเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงของพลังงานที่ได้จากการเผาไหม้ดังแสดงในรูปที่ 4.19 พบว่า ในช่วงการให้ความร้อน เส้นกราฟจะให้ค่าติดลบ เนื่องจากความร้อนถูกใช้ในการระเหยละอองสเปรย์ ทันทีที่เกิดการจุดระเบิดเองที่เวลา 2.2 ms อัตราการปลดปล่อยพลังงานจะเพิ่มสูงขึ้นอย่างรวดเร็ว และมีค่าสูงสุดที่เวลาประมาณ 2.4 ms แต่ในขณะที่ผลการทดลองเกิดขึ้นที่เวลา 2.5 ms โดยค่าสูงสุดนี้ที่ได้จากแบบจำลองจะมีค่าสูงกว่าผลการทดลองประมาณ 20% แต่อย่างไรก็ตามรูปร่างของบริเวณจุดสูงสุดมีลักษณะที่คล้ายคลึงกัน หลังจากนั้นอัตราการปลดปล่อยพลังงานจะลดลงอย่างมาก ซึ่งเข้าสู่ช่วงการเผาไหม้แบบ non-premixed โดยในช่วงเวลา 2.7-4.5 ms แบบจำลองทำนายได้ค่อนข้างใกล้เคียงกับผลการทดลอง แต่หลังจากนั้น ผลที่ทำนายได้จะมีค่าน้อยกว่าผลการทดลองอย่างมีนัยสำคัญ ทั้งนี้อาจจะเกิดจากอิทธิพลของผนัง ซึ่งในการทดลอง เปลวไฟจะกระทบกับผนังของห้องเผาไหม้ที่เวลา 5.2 ms ดังนั้นลักษณะของเปลวด้านหน้าจึงถูกความดันย้อนกลับจากผนังเข้ามาบดบัง

นอกจากนี้ การพัฒนาตัวของเปลวยังสามารถเปรียบเทียบได้ในเชิงของพื้นที่เปลวดังแสดงในรูปที่ 4.20 ซึ่งจะเห็นได้ว่า เปลวที่ทำนายได้จากแบบจำลองจะเกิดขึ้นก่อนการปรากฏของเปลวจากการทดลองประมาณ 0.6 ms ซึ่งการปรากฏของเปลวที่ล่าช้าในการทดลอง เป็นประเด็นหนึ่งที่ขัดแย้งกับความดันที่เพิ่มขึ้นเนื่องจากอุณหภูมิที่สูงขึ้น แต่อย่างไรก็ตาม ลักษณะของกราฟที่ได้จาก

การทดลองและจากแบบจำลองจะมีลักษณะที่คล้ายกัน ต่างกันเพียงเวลาที่เลื่อนออกไป โดยพื้นที่เปลวสูงสุดที่คำนวณได้จากแบบจำลองจะมีค่ามากกว่าผลการทดลองประมาณ 10% แต่อัตราการพัฒนาของพื้นที่เปลวจะใกล้เคียงกัน



รูปที่ 4.20 การเปลี่ยนแปลงของพื้นที่ของเปลวไฟจากการเผาไหม้ที่ทำนายได้จากแบบจำลองเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [14]

จากการนำแบบจำลอง unsteady laminar flamelet มาคำนวณร่วมกับ reaction progress variable เพื่อประยุกต์ใช้ทำนายการเผาไหม้สเปรย์ในงานวิจัยนี้ ซึ่งผลการเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [14] ให้ผลการเปรียบเทียบเป็นที่น่าสนใจ นอกจากนี้ ระยะเปลวลอยตัว ซึ่งเป็นปรากฏการณ์ที่สำคัญของเปลวแบบ diffusion ที่ทำนายได้จากแบบจำลองนี้ ก็สอดคล้องกับผลการทดลองและสหสัมพันธ์ของ Siebers และคณะ [15, 16] ซึ่งเป็นสมการที่ได้จากผลการทดลอง นั้นแสดงให้เห็นถึง ศักยภาพของแบบจำลองนี้ ที่สามารถอธิบายการจุดระเบิดเอง การพัฒนาตัวของเปลว รวมถึงการลอยตัวของเปลวได้อย่างสมบูรณ์

บทที่ 5

สรุปและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุป

ในงานวิจัยนี้ ได้มุ่งเน้นศึกษาและพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ของสเปรย์สำหรับประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์ดีเซล โดยเริ่มพัฒนาจากแบบจำลองสเปรย์ของ Beck [5] ซึ่งอาศัยหลักการสถิติของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่าง ๆ โดยลักษณะทางกายภาพของสเปรย์จะนำเสนอในรูปของโมเมนต์ 4 ตัว ซึ่งในแต่ละโมเมนต์จะแสดงถึงปริมาตร พื้นที่ผิว รัศมี และจำนวนของละอองของเหลวทั้งหมดตามลำดับ สำหรับชุดสมการควบคุมของก๊าซและของเหลวนั้น ได้ถูกสร้างบนพื้นฐานของค่าเฉลี่ยเชิงโมเมนต์ (moment-average quantities) ซึ่งค่าโมเมนต์เหล่านี้จะใช้ในการสร้างแบบจำลองย่อยของสเปรย์ต่อไป ซึ่งประกอบไปด้วยกระบวนการแตกตัว การชนกัน การระเหยของละออง และการปฏิสัมพันธ์ระหว่างก๊าซและของเหลว โดยความถูกต้อง แม่นยำของแบบจำลองสเปรย์นี้ ได้พิสูจน์ดังปรากฏในผลงานตีพิมพ์ต่อไปนี้ [6-11]

สำหรับแบบจำลองการเผาไหม้ ในที่นี้ เลือกใช้แบบจำลอง unsteady laminar flamelet ซึ่งเป็นแบบจำลองใกล้เคียงสมดุลทางเคมี (near chemical equilibrium model) ร่วมกับ reaction progress variable เพื่อเพิ่มความถูกต้องแม่นยำมากยิ่งขึ้น นอกจากนี้ เพื่อลดความสิ้นเปลืองทรัพยากรในการคำนวณลง ผลลัพธ์ที่ได้จากชุดสมการ flamelet จึงถูกคำนวณไว้ล่วงหน้า และเก็บไว้ใน flamelet library ซึ่งจะเป็นฟังก์ชันกับค่าสัดส่วนของผสม (Z), ความแปรปรวนของค่าสัดส่วนของผสม (Z'^2), stoichiometric scalar dissipation rate (χ_{st}) และ reaction progress variable (ξ) ในการแก้ชุดสมการ flamelet จะใช้ FlameMaster code [149] ช่วยในการคำนวณ โดยใช้กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบโครงร่าง (skeleton chemical kinetic mechanisms) ของ Liu และคณะ [88] ซึ่งใช้เชื้อเพลิง *n*-heptane แทนดีเซลในการคำนวณ เนื่องจากมีค่าออกเทนที่ใกล้เคียงกัน โดยกลไก

นี้ มีส่วนประกอบเคมีจำนวน 43 ชนิดและสมการเคมีทั้งหมดจำนวน 185 สมการ โดยข้อมูลที่คำนวณได้จะถูกนำไปเฉลี่ยเชิง PDF (probability density function averaging) ก่อนที่จะถูกเก็บไว้ใน flamelet library ซึ่งข้อมูลเหล่านี้ได้แก่ อุณหภูมิเปลว อัตราส่วนเชิงมวลของ species ใด ๆ ความหนาแน่นของก๊าซผลิตภัณฑ์ และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี

จากผลการทำนายการจุดระเบิดเองของแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นมานี้ จะเกิดขึ้นที่บริเวณส่วนปลายของสเปรย์ (spray tip) ซึ่งเป็นบริเวณที่มี χ_{st} ต่ำมาก โดย ค่า χ_{st} จะมีค่าสูงมากในบริเวณใกล้หัวฉีด ซึ่งเป็นบริเวณที่ละอองฝอยเกิดการระเหยกลายเป็นไอมากที่สุด ซึ่งผลการจุดระเบิดดังกล่าวสอดคล้องกับการทำนายของ Wright และคณะ [12] ซึ่งใช้วิธี conditional moment closure นอกจากนี้ ตำแหน่งการจุดระเบิดเองเกิดขึ้นที่ค่าสัดส่วนของผสมมีค่ามากกว่า Z_{st} เช่นเดียวกับผลการทำนายของ Wright และคณะ [12] และ Mastorakos และคณะ [13] ซึ่งผลดังกล่าว น่าจะเกิดมาจาก radical ซึ่งจะเกิดการแตกตัวได้ดีในบริเวณผิวเปลือกของสเปรย์ จะมีแนวโน้มแพร่เข้าไปในบริเวณที่มีค่าสัดส่วนของผสมสูง [12] และก๊าซ CO จะโดดเด่นมากในช่วงการจุดระเบิดเอง

หลังจากเกิดประกายไฟที่บริเวณปลายของสเปรย์ เปลวไฟก็เริ่มเคลื่อนที่ลงไปตามแนวเปลือกกรอบนอกของสเปรย์ซึ่งมีส่วนผสมใกล้เคียง stoichiometric ทำให้เกิดอุณหภูมิสูงที่สุด และอุณหภูมิจะลดต่ำลงเมื่อลึกเข้าไปในแกนของสเปรย์ โดยเปลวที่เคลื่อนที่ลงไปทางหัวฉีด จะหยุดการพัฒนาตัวที่ระยะเปลวลอยตัว (lift-off length) หลังจากสิ้นสุดการฉีดน้ำมันเชื้อเพลิง การเผาไหม้ที่บริเวณหางของสเปรย์ (ใกล้หัวฉีด) จะเกิดขึ้นอย่างรวดเร็ว เนื่องจากออกซิเจนสามารถแพร่เข้ามาทำปฏิกิริยาได้ง่าย ทำให้หางของสเปรย์จะค่อย ๆ สั่นลง และรูปร่างของเปลวดูคล้ายกับลูกบอลไฟในที่สุด

เมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [14] ปรากฏว่า เวลาหน่วงการจุดระเบิดเองที่ทำนายได้จากแบบจำลองจะแตกต่างกันค่อนข้างมากกับผลการทดลอง แต่อย่างไรก็ตาม เป็นที่น่าสังเกตว่า ภาพถ่ายที่ได้จากการทดลอง ก็ไม่ได้ยืนยันถึงประกายไฟที่เกิดจากการจุดระเบิด เพียงแต่อ้างอิงจากความดันภายในห้องเผาไหม้ที่เปลี่ยนแปลง หลังจากเกิดการจุดระเบิดเองแล้ว เปลวไฟจะพัฒนาตัวอย่างรวดเร็วจนกลายเป็นเปลวลอยตัว ซึ่งระยะเปลวลอยตัวที่ได้จากแบบจำลองจะมีค่ามากกว่าผลการทดลองอยู่เล็กน้อย และระยะดังกล่าวสอดคล้องกับสหสัมพันธ์ของ Siebers และคณะ [15, 16] ที่ใช้ในการทำนายระยะเปลวลอยตัว ส่วนลักษณะรูปร่างการกระจายตัวของอุณหภูมิที่ทำนายได้จะใกล้เคียงกับภาพถ่ายของเปลวไฟ รวมถึงพฤติกรรมการปลดปล่อยพลังงานจากการเผาไหม้และขนาดของเปลวด้วย จากผลการศึกษาวิจัยที่กล่าวมาข้างต้น สามารถสรุปได้ว่าแบบจำลอง unsteady flamelet ร่วมกับ reaction progress variable สามารถทำนายการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้ของสเปรย์ดีเซลได้ค่อนข้างดี โดยสามารถอธิบายปรากฏการณ์โดยหลักของเปลวไฟได้อย่างครบถ้วน

5.2 ข้อเสนอแนะสำหรับงานวิจัยในอนาคต

งานวิจัยทางด้านการเผาไหม้ของสเปรย์นั้น มีประเด็นที่น่าสนใจมากมาย ซึ่งงานวิจัยนี้ก็เพียงส่วนหนึ่งของงานวิจัยทางด้านนี้ จึงมีอีกหลายประเด็นที่สามารถทำการศึกษาต่อยอดได้จากงานวิจัยชิ้นนี้ ซึ่งหัวข้อดังต่อไปนี้ น่าจะเป็นส่วนเติมเต็ม หรือขยายขอบเขตของงานวิจัยทางด้านนี้

- เนื่องจากแบบจำลอง unsteady laminar flamelet/ reaction progress variable นี้คำนวณอยู่ในระบบ RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) ซึ่งพิจารณาบนพื้นฐานของค่าเฉลี่ย ดังนั้นผลที่เกิดจากการคำนวณจึงเป็นเพียงค่าเฉลี่ย ไม่สามารถบอกรายละเอียดได้มาก จึงทำให้ความแม่นยำของแบบจำลองลดลง ดังนั้นจึงควรใช้คำนวณในระบบ LES (Large Eddy Simulation) แทน ซึ่งจะทำให้ความแม่นยำสูงกว่า แต่อย่างไรก็ตาม เวลาที่ใช้ในการคำนวณย่อมเพิ่มมากขึ้นตาม

- เนื่องจากขาดการเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่แม่นยำและมีรายละเอียดมากกว่านี้ เช่น การกระจายตัวของสัดส่วนของผสมก่อนการเผาไหม้ การกระจายตัวของอุณหภูมิขณะเกิดการเผาไหม้ รวมถึงการกระจายตัวของก๊าซผลิตภัณฑ์ โดยเทคโนโลยีทางด้านการวัดก็มีการพัฒนาอย่างมาก ดังนั้นในอนาคต เครื่องมือวัดที่ไม่เข้าไปรบกวนการเผาไหม้ เช่น laser-induced fluorescence (LIF) หรือ laser-induced incandescence (LII) คงมีบทบาทสำคัญในงานวิจัยทางด้านนี้ โดยเทคนิคนี้ จะให้ความละเอียดและความแม่นยำสูงทั้งในด้านพิกัดตำแหน่งและช่วงเวลา โดยที่ไม่ไปรบกวนการเคลื่อนที่ของก๊าซเลย จึงทำให้ค่าใช้จ่ายในการวัดด้วยเทคนิคนี้มีราคาสูงมาก ผลการทดลองที่ได้จึงไม่มีการตีพิมพ์อย่างแพร่หลาย แต่จะจำกัดอยู่ในวงการแคบ ๆ เช่น บริษัทผู้ผลิตเครื่องยนต์ หรือห้องปฏิบัติการที่มีชื่อเสียง

- เนื่องจากขาดแบบจำลองย่อยการชนกับผนังของห้องเผาไหม้ในแบบจำลองสเปรย์นี้ ซึ่งเครื่องยนต์ดีเซลในปัจจุบันนี้ น้ำมันเชื้อเพลิงจะถูกฉีดเข้าสู่ห้องเผาไหม้ขนาดเล็กด้วยความดันที่สูง ดังนั้นละอองเชื้อเพลิงจึงต้องกระทบกับผนังของห้องเผาไหม้หรือกระบอกสูบอย่างแน่นอน จึงทำให้การกระจายตัวของละอองและไอเชื้อเพลิงเกิดการเปลี่ยนแปลง เนื่องจากผลของการชนกัน การกระดอน และการเกาะติดผนังของละอองเชื้อเพลิง นอกจากนี้ การถ่ายเทความร้อนจากผนังที่ร้อนไปสู่ละอองสเปรย์ก็เป็นอีกประเด็นที่ต้องพิจารณา ถ้ามีละอองสเปรย์ไปเกาะติดผนังมากเกินไป ก็จะทำให้ช่วงเวลาจุดระเบิดเองของสเปรย์ยาวนานยิ่งขึ้น

- เนื่องจากในวิจัยนี้ ไม่ได้พิจารณาทางด้านมลพิษที่เกิดจากการเผาไหม้ของสเปรย์ เช่น เขม่าที่เกิดจากการเผาไหม้ไม่สมบูรณ์ ถึงแม้ว่าจะมีปริมาณออกซิเจนเพียงพอต่อการเผาไหม้อย่างสมบูรณ์ แต่เขม่าก็สามารถเกิดขึ้นได้ ถ้าการผสมกันของเชื้อเพลิงและอากาศไม่ดีพอ หรือช่วงระยะเวลาการเผาไหม้สั้นเกินไป โดยทั่วไปแล้ว เขม่าจะเกิดมากในบริเวณหัวของสเปรย์ และระยะเปลวลอยตัวจะมีผลต่อปริมาณเขม่าที่เกิดขึ้น นอกจากนี้ ก๊าซพิษอีกชนิดที่ควรพิจารณาก็คือ NO_x ซึ่งโดยทั่วไปแล้ว จะเกิดขึ้นในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูง ก๊าซกลุ่มนี้จะก่อปัญหามลพิษในอากาศ เช่น ฝนกรด และนอกจากนี้ ยังมีผลต่อปริมาณโอโซนด้วย ดังนั้นถ้าแบบจำลองสามารถทำนายการ

เกิดก๊าซพิษเหล่านี้ได้แม่นยำ ก็จะนำไปสู่การออกแบบระบบการเผาไหม้ที่มีประสิทธิภาพในการ
ลดก๊าซพิษเหล่านี้ได้

Output ที่ได้จากโครงการ

จากผลการวิจัยที่ได้จากโครงการนี้แสดงให้เห็นว่า แบบจำลอง Unsteady Flamelet Model/ Reaction Progress Variable ที่พัฒนาขึ้นมานี้ สามารถถูกใช้เป็นเครื่องมือในการออกแบบ และช่วยปรับปรุงประสิทธิภาพการเผาไหม้ภายในเครื่องยนต์ดีเซลหรือหัวเผาทางอุตสาหกรรมได้ และผลการศึกษาจากโครงการวิจัยนี้ ยังได้รับการเผยแพร่ในการประชุมวิชาการระดับชาติ และในวารสารวิชาการระดับนานาชาติด้วย ดังต่อไปนี้

1. Dhuchakallaya, I. and Rattanadecho, P., 2012, *"Prediction of Auto-ignition and Combustion in Diesel Spray using Flamelet Model,"* The 26th Conference of the Mechanical Engineering Network of Thailand, Chaing Rai, 24-27 October 2012.
2. Dhuchakallaya, I., Rattanadecho, P. and Watkins, P., 2013, *"Auto-ignition and combustion of diesel spray using unsteady laminar flamelet model,"* Applied Thermal Engineering, Vol. 52, pp. 420-427. (Impact Factor 2.064)

เอกสารอ้างอิง

1. Heywood, J.B., *Internal Combustion Engine Fundamentals* 1988, New York: McGraw-Hill International.
2. Turns, S.R., *An Introduction to Combustion – Concepts and Applications*. 2nd edition ed 2000, New York: 2nd edition, McGraw-Hill.
3. Tang, Q., Zhao, W., Bockelie, M., and Fox, R.O., 2007, "*Multi-Environment Probability Density Function Method for Modelling Turbulent Combustion using Realistic Chemical Kinetics*", *Combustion Theory and Modelling*, Vol. 11, pp. 889–907.
4. Kuan, T.S. and Lindstedt, R.P., 2005, "*Transported Probability Density Function Modeling of a Bluff Body Stabilized Turbulent Flame*", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30, pp. 767–774.
5. Beck, J.C., 2000, Computational Modelling of Polydisperse Sprays without Segregation into Droplet Size Classes, Ph.D. Thesis, UMIST, Manchester.
6. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2002, "*On the Development of Spray Sub-Models Based on Droplet Size Moments*", *Journal of Computational Physics*, Vol. 182, pp. 586-621.
7. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2003, "*The Simulation of Water and Other Non-Fuel Sprays using a New Spray Model*", *Atomization and Sprays*, Vol. 13, pp. 1-26.
8. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2003, "*On the Development of a Spray Model Based on Drop-Size Moments*", *Proceedings of the Royal Society of London - Series A*, Vol. pp. 1365-1394.
9. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2003, "*The Droplet Number Moments Approach to Spray Modelling: The Development of Heat and Mass Transfer Sub-Models*", *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 2, pp. 242-259.
10. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2004, "*The Simulation of Fuel Sprays using the Moments of the Drop Number Size Distribution*", *International Journal of Engine Research*, Vol. 5, pp. 1-21.
11. Watkins, A.P., 2007, "*Modelling of Mean Temperatures Used for Calculating Heat and Mass Transfer in Sprays*", *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 28, pp. 388-406.

12. Wright, Y.M., De Paola, G., Boulouchos, K., and Mastorakos, E., 2005, "*Simulations of Spray Autoignition and Flame Establishment with Two-Dimensional CMC*", Combustion and Flame, Vol. 143, pp. 402-419.
13. Mastorakos, E., Baritaud, T., and Poinso, T.J., 1997, "*Numerical Simulations of Autoignition in Turbulent Mixing Flows*", Combustion and Flame, Vol. 109, pp. 198-223.
14. Akiyama, H., Nishimura, H., Ibaraki, Y., and Iida, N., 1998, "*Study of Diesel Spray Combustion and Ignition using High-Pressure Fuel Injection and a Micro-Hole Nozzle with a Rapid Compression Machine: Improvement of Combustion using Low Cetane Number Fuel*", Society of Automotive Engineers of Japan, Vol. 19, pp. 319-327.
15. Siebers, D.L. and Higgins, B.S., *Flame Lift-off on Direct-Injection Diesel Sprays under Quiescent Conditions*, in SAE Technical Paper Series No. 2001-01-05302001.
16. Siebers, D.L., Higgins, B.S., and Pickett, L.M., *Flame Lift-off on Direct Injection Diesel Fuel Jets: Oxygen Concentration Effects*, in SAE Technical Paper Series No. 2002-01-08902002.
17. Gosman, A.D. and Clerides, D. *Diesel Spray Modeling: a Review*. in 13th Annual conference on Liquid Atomization and Spray Systems: ILASS EUROPE 97. 1997. Florence Italy.
18. Krzeczowski, S.A., 1980, "*Measurement of Liquid Droplet Disintegration Mechanisms*", International Journal of Multiphase Flow, Vol. 6, pp. 227-239.
19. Borisov, A.A., Gel'fand, B.E., Natanzon, M.S., and Kossov, O.M., 1981, "*Droplet Breakup Regimes and Criteria for their Existence*", Journal of Engineering Physics, Vol. 40, pp. 44-49.
20. Pilch, M. and Erdman, C.A., 1987, "*Use of Breakup Time Data and Velocity History Data to Predict the Maximum Size of Stable Fragments for Acceleration-Induced Breakup of a Liquid Drop*", International Journal of Multiphase Flow, Vol. 13, pp. 741-757.
21. Hsiang, L.-P. and Faeth, G.M., 1992, "*Near-Limit Drop Deformation and Secondary Breakup*", International Journal of Multiphase Flow, Vol. 18, pp. 635-652.
22. Hsiang, L.-P. and Faeth, G.M., 1995, "*Drop Deformation and Breakup due to Shock Wave and Steady Disturbances*", International Journal of Multiphase Flow, Vol. 21, pp. 545-560.
23. Liu, A.B. and Reitz, R.D., 1993, "*Mechanisms of Air Assisted Liquid Atomization*", Atomization and Sprays, Vol. 3, pp. 55-75.

24. Dai, Z. and Faeth, G.M., 2001, "*Temporal Properties of Secondary Drop Breakup in the Multimode Breakup Regime*", International Journal of Multiphase Flow, Vol. 27, pp. 217-236.
25. Reitz, R.D. and Diwakar, R., *Structure of High Pressure Fuel Sprays*, in SAE Technical Paper Series No. 8705981987.
26. O'Rourke, P.J. and Bracco, F.V. *Modelling of Drop Interactions in Thick Sprays and a Comparison with Experiments*. in *Conference on Stratified Charge Automotive Engines*, No. C404/80. 1980. Institute of Mechanical Engineers (IMEchE).
27. Kuo, T.W. and Bracco, F.V., *On the Scaling of Transient Laminar, Turbulent and Spray Jets*, in SAE Technical Paper Series No. 8200381982.
28. Bracco F.V., *Modelling of Engine Sprays* in SAE Technical Paper Series No. 8503941985.
29. Reitz, R.D., 1987, "*Modeling Atomization Process in High-Pressure Vaporizing Sprays*", Atomization and Spray Technology, Vol. 3, pp. 309-337.
30. Orme, M., 1997, "*Experiments on Droplet Collisions, Bounce, Coalescence and Disruption* ", Progress in Energy Combustion Science, Vol. 23, pp. 65-79.
31. Brazier-Smith, P.R., Jennings, S.G., and Latham, J., 1972, "*The Interaction of Falling Water Droplets: Coalescence*", Proceedings of the Royal Society of London Series A, Vol. 326, pp. 393-408.
32. Ashgriz, N. and Poo, J.Y., 1990, "*Coalescence and Separation in Binary Collisions of Liquid Drops*", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 221, pp. 183-204.
33. Estrade, J.P., Carentz, H., Lavergne, G., and Biscos, Y., 1999, "*Experimental Investigation of Dynamic Binary Collision of Ethanol Droplets—a Model for Droplet Coalescence and Bouncing*", International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 20, pp. 486-491.
34. Qian, J. and Law, C.K., 1997, "*Regimes of Coalescence and Separation in Droplet Collision*", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 331, pp. 59-80.
35. Jiang, Y.J., Umemura, A., and Law, C.K., 1992, "*An Experimental Investigation Collision Behaviour of Hydrocarbon Droplets*", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 234, pp. 171–190.
36. Yule, A.J., Sharief, R.A., Jeong, J.R., Nasr, G.G., and James, D.D., 2000, "*The Performance Characteristics of Solid-Cone-Spray Pressure-Swirl Atomizers*", Atomization and Sprays, Vol. 10, pp. 627-646.

37. Lefebvre, A.H., *Atomization and Sprays* 1989, New York: An International Combustion Series, Hemisphere.
38. Rosin, P. and Rammler, E., 1933, "*The Laws Governing the Fitness of Powdered Coal*", Journal of the Institute of Fuel, Vol. 7, pp. 29-36.
39. Nukiyama, S. and Tansawa, Y., 1938, "*Experiments on the Atomization of Liquids in an Air Stream*", Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Vol. 4, pp. 86-93.
40. Boulderston, R., Ahseng, C., Yule, A.J., Felton, P.G., and Chigier, N.A., *The Structure of Diesel Injector Sprays*, in CARL IM 81-011981.
41. Chin, J.S. and Lefebvre, A.H. *Some Comment on the Characterisation of Drop Size in Sprays*. in *The 3rd International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems: ICLASS-85*. 1985. London, England.
42. Wang, X.F. and Lefebvre, A.H., 1987, "*Influence of Ambient Air Pressure on Pressure-Swirl Atomisation*", Atomization and Spray Technology, Vol. 3, pp. 209-226.
43. Putnam, A., 1961, "*Integratable Form of Droplet Drag Coefficient*", Journal of the American Rocket Society, Vol. 31, pp. 1467-1468.
44. Chen, X.Q. and Perreira, J.C.F., 1992, "*Numerical Predictions of Evaporating and Non-Evaporating Sprays under Non-Reactive Conditions*", Atomization and Sprays, Vol. 2, pp. 427-433.
45. Liu, A.B., Mather, D., and Reitz, R.D., *Modelling the Effects of Drop Drag and Breakup on Fuel Sprays*, in SAE Technical Paper Series No. 9300721993.
46. Clift, R., Grace, J.R., and Weber, M.E., *Bubbles, Drops, and Particles* 1978, London: Academic Press.
47. Khaleghi, H., 1990, Three Dimension Modelling and Comparison with Experiment of Sprays and Gas Flow in Test Rigs and Diesel Engines, Ph.D. Thesis, UMIST, Manchester.
48. Park, K., 1994, Development of a Non-Orthogonal Grid Computer Code for the Optimisation of Direct-Injection Diesel Engine Combustion Chamber Shapes, Ph.D. Thesis, UMIST, Manchester.
49. Yuen, M.C. and Chen, L.W., 1976, "*On Drag of Evaporating Liquid Droplets*", Combustion Sciences and Technology, Vol. 14, pp. 147-154.
50. Law, C.K., 1976, "*Unsteady Droplet Vaporization with Droplet Heating*", Combustion and Flame, Vol. 26, pp. 17-22.

51. Law, C.K., Prakash, S., and Sirignano, W.A. *Theory of Convective, Transient, Multicomponent Droplet Vaporization*. in *The 16th International Symposium on Combustion*. 1977. Massachusetts, USA.
52. Chiang, C.H., Raju, M.S., and Sirignano, W.A., 1992, "Numerical Analysis of Convecting, Vaporizing Fuel Droplet with Variable Properties", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 35, pp. 1307-1324.
53. Renksizbulut, M. and Haywood, R.J., 1988, "Transient Droplet Evaporation with Variable Properties and Internal Circulation at Intermediate Reynolds Numbers", *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 14, pp. 189-202.
54. Spalding, D.B. *The Combustion of Liquid Fuels*. in *The 4th International Symposium on Combustion*. 1953. Baltimore.
55. Faeth, G.M., 1977, "Current Status of Droplet and Liquid Combustion", *Progress in Energy Combustion Science*, Vol. 3, pp. 191-224.
56. Ranz, W.E. and Marshall, J.W.R., 1952a, "Evaporation from Drops; Part I", *Chemical Engineering Progress*, Vol. 48, pp. 141-146.
57. Ranz, W.E. and Marshall, J.W.R., 1952b, "Evaporation from Drops; Part II", *Chemical Engineering Progress*, Vol. 48, pp. 173-180.
58. Abramzon, B. and Sirignano, W.A., 1989, "Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 32, pp. 1605-1618.
59. Sparrow, E.M. and Gregg, J.L., 1958, "The Variable Fluid-Property Problem in Free Convection", *Transactions of American Society of Mechanical Engineers*, Vol. 80, pp. 879-886.
60. Lyn, W.T. *Study of Burning Rate and Nature of Combustion in a Diesel Engine*. in *The 9th International Symposium on Combustion*. 1962. Pittsburgh: The Combustion Institute.
61. Henein, N.A. and Bolt, J., *Correlation of Air Charge Temperature and Ignition Delay for Several Fuels in a Diesel Engine*, in *SAE Technical Paper Series No. 690252* 1969.
62. Spalding, D.B., *Combustion and Mass Transfer* 1979, New York: Pergamon Press.
63. Crua, C., 2002, *Combustion Processes in a Diesel Engine*, Ph.D. Thesis, University of Brighton, Brighton.
64. Ganippa, L.C., Andersson, S., and Chomiak, J., 2003, "Combustion Characteristics of Diesel Sprays from Equivalent Nozzles with Sharp and Rounded Inlet Geometries", *Combustion Science and Technology*, Vol. 175, pp. 1015-1032.

65. Romphol, K., Wattanavichien, K., and Azetsu, A. *The Fundamental Study on the Characteristics of Palm Diesel Spray Combustion*. in *The 2nd Conference on Energy Network of Thailand (E-NETT)*. 2006. Nakhon Ratchasima, Thailand.
66. Lee, S.W., Murata, Y., and Daisho, Y., 2005, "Spray and Combustion Characteristics of Dimethyl Ether Fuel", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, Vol. 219, Part D, pp. 97-102.
67. Frijters, P.J.M., Vallen, R.G.M., Somers, L.M.T., Luijten, C.C.M., and Baert, R.S.G. *Fuel Effects on Illumination Ignition Delay and Soot Lift-off Length in Diesel Combustion*. in *Third European Combustion Meeting, ECM 2007*. 2007. Chania.
68. Aggarwal, S.K., 1998, "A Review of Spray Ignition Phenomena: Present Status and Future Research", *Progress in Energy Combustion Science*, Vol. 24, pp. 565-600.
69. Kang, S.H., Baek, S.W., and Choi, J.H., 2001, "Autoignition of Sprays in a Cylindrical Combustor", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 44, pp. 2413-2422.
70. Lutz, A.E., Kee, R.J., and Miller, J.A., *SENKIN: A Fortran Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis*, in *Sandia Report SAND 87-8248, UC-41988*.
71. Rente, T., Golovitchev, V.I., and Denbratt, I. *Numerical Study of n-Heptane Spray Auto-Ignition at Different Levels of Pre-Ignition Turbulence*. in *The Fifth International Symposium on Diagnostics and Modelling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA 2001)*. 2001. Nagoya.
72. Zhao, Z., Li, J., Kazakov, A., Zeppieri, S.P., and Dryer, F.L., 2005, "Burning Velocities and a High Temperature Skeletal Kinetic Model for n-Decane", *Combustion Science and Technology*, Vol. 177, pp. 89-106.
73. Soyhan, H.S. and Andrae, J., 2007, "Evaluation of Kinetic Models for Autoignition of Automotive Reference Fuels in HCCI Applications", *Turkish Journal of Engineering and Environmental Sciences*, Vol. 31, pp. 1-8.
74. Valorani, M., Creta, F., Donato, F., Najm, H.N., and Goussis, D.A., 2007, "Skeletal Mechanism Generation and Analysis for n-Heptane with CSP", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 31, pp. 483-490.
75. Halstead, M.P., Kirsch, A., and Quinn, C.P., 1977, "The Autoignition of Hydrocarbon Fuels at High temperature and Pressure – Fitting of a Mathematical Model", *Combustion and Flame*, Vol. 30, pp. 45-60.
76. Schapertons, H. and Lee, W., *Multidimensional Modelling of Knocking Combustion in S.I. Engines*, in *SAE Technical Paper Series No. 850502* 1985.

77. Hamosfakidis, V. and Reitz, R.D., 2003, "*Optimization of a Hydrocarbon Fuel Ignition Model for Two Single Component Surrogates of Diesel Fuel*", Combustion and Flame, Vol. 132, pp. 433-450.
78. Theobald, M.A. and Cheng, W.K., *A Numerical Study of Diesel Ignition*, in ASME Paper No. 87-FE-21987.
79. Sazhina, E.M., Sazhin, S.S., Heikal, M.R., and Marooney, C.J., 1999, "*The Shell Autoignition Model: Applications to Gasoline and Diesel Fuels*", Fuel, Vol. 78, pp. 389-401.
80. Cox, R.A. and Cole, J.A., 1985, "*Chemical Aspects of the Autoignition of Hydrocarbon-Air Mixtures*", Combustion and Flame, Vol. 60, pp. 109-123.
81. Hu, H. and Keck, J.C., *Autoignition of Adiabatically Compressed Combustible Gas Mixtures*, in SAE Technical Paper Series No. 872110/1987.
82. Reitz, R.D. and Rutland, C.J., 1995, "*Development and Testing of Diesel Engine CFD Models*", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 21, pp. 173-196.
83. Belardini, P., Bertoli, C., Beatrice, C., D'Anna, A., and DelGiacomo, N. *Application of a Reduced Kinetic Model for Soot Formation and Burntout in Three Dimensional Diesel Combustion Computations*. in *Proceedings of the 26th Symposium (International) on Combustion*. 1996. Italy: The Combustion Institute, Pittsburgh.
84. Kong, S.C. and Reitz, R.D., *Multidimensional Modelling of Diesel Ignition and Combustion using a Multistep Kinetics Model*, in ASME Paper No. 93-ICE-221993.
85. Gordon, S. and McBride, B.J., *Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications: I. Analysis*, NASA Reference Publication 1311, October 1994.
86. Cowart, J.S., Keck, J.C., Heywood, J.B., Westbrook, C.K., and Pitz, W.J. *Engine Knock Predictions using Fully-Detailed and a Reduced Chemical Kinetic Mechanism*. in *The 23rd International Symposium on Combustion*. 1990. Pittsburgh.
87. Schreiber, M., Sakak, A.S., Lings, A., and Griffiths, J.F. *A Reduced Thermokinetic Model for the Autoignition of Fuels with Variable Octane Ratings*. in *The 25th International Symposium on Combustion*. 1994. Irvine.
88. Liu, S., Hewson, J.C., Chen, J.H., and Pitsch, H., 2004, "*Effects of Strain Rate on High-Pressure Nonpremixed n-Heptane Autoignition in Counterflow*", Combustion and Flame, Vol. 137, pp. 320-339.

89. Najt, P.M. and Foster, D.E., *Compression-Ignited Chemical Kinetic Mechanism for Hydrocarbon Fuels Homogeneous Charge Combustion*, in *SAE Technical Paper Series No. 830264* 1983.
90. Takagi, T., Fang, C.Y., Kaminoto, T., and Okamoto, T., 1991, "*Numerical Simulation of Evaporation, Ignition and Combustion of Transient Sprays*", *Combustion Science and Technology*, Vol. 75, pp. 1-12.
91. Dhuchakallaya, I. and Watkins, A.P., 2011, "*Numerical Modelling of Diesel Spray Auto-ignition and Combustion*", *International Journal of Engine Research*, Vol. 12, pp. 169-180.
92. Westbrook, C.K. and Dryer, F.L., 1981, "*Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames*", *Combustion Sciences and Technology*, Vol. 27, pp. 31-34.
93. Jones, W.P. and Lindstedt, R.P., 1988, "*Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion*", *Combustion and Flame*, Vol. 73, pp. 233-249.
94. Burke, S.P. and Schumann, T.W. *Diffusion Flames*. in *Proceedings of the First Symposium on Combustion, Pittsburgh*. 1928. Swampscott, MA. (Reprint of Proceedings published by The Combustion institute in 1965).
95. Dhuchakallaya, I. and Watkins, A.P., 2010, "*Application of Spray Combustion Simulation in DI Diesel Engine*", *Applied Energy*, Vol. 87, pp. 1427-1432.
96. Rakopoulos, C.D., Antonopoulos, K.A., and Rakopoulos, D.C., 2007, "*Development and Application of Multi-Zone Model for Combustion and Pollutants Formation in Direct Injection Diesel Engine Running with Vegetable Oil or its Bio-Diesel*", *Energy Conversion and Management*, Vol. 48, pp. 1881–1901.
97. Cui, Y., Deng, K., and Wu, J., 2001, "*A Direct Injection Diesel Combustion Model for Use in Transient Condition Analysis*", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, Vol. 215, pp. 995-1004.
98. Hossain, M. and Malalasekera, W., 2005, "*Numerical Study of Bluff-Body Non-Premixed Flame Structures using Laminar Flamelet Model*", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, Vol. 219, pp. 361-370.
99. Lehtiniemi, H., Mauss, F., Balthasar, M., and Magnusson, I., 2006, "*Modeling Diesel Spray Ignition using Detailed Chemistry with a Progress Variable Approach*", *Combustion Science and Technology*, Vol. 178, pp. 1977–1997.

100. Dhuchakallaya, I., 2009, Development and Application of the Drop Number Size Moment Modelling Sprays to Engine Simulations and Application of Combustion Models, The University of Manchester, Manchester.
101. Peters, N., 1984, "*Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Combustion*", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 10, pp. 319-339.
102. Bilger, R.W., Stårner, S.H., and Kee, R.J., 1990, "*On Reduced Mechanisms for Methane---air Combustion in Nonpremixed Flames*", Combustion and Flame, Vol. 80, pp. 135-149.
103. Pitsch, H., Barths, H., and Peters, N., *Three-Dimensional Modeling of NO_x and Soot Formation in DI-Diesel Engines using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach*, in SAE Technical Paper Series No. 9620571996.
104. Peters, N., 1983, "*Local Quenching due to Flame Stretch and Non-premixed Turbulent Combustion*", Combustion Science and Technology, Vol. 30, pp. 1-17.
105. Roberts, P.T. and Moss, J.B., 1981, "*A wrinkled flame interpretation of the open turbulent diffusion flame*", Symposium (International) on Combustion, Vol. 18, pp. 941-950.
106. Drake, M.C., 1988, "*Stretched laminar flamelet analysis of turbulents H₂ and CO/H₂/N₂ diffusion flames*", Symposium (International) on Combustion, Vol. 21, pp. 1579-1589.
107. Liew, S.K., Bray, K.N.C., and Moss, J.B., 1984, "*A stretched laminar flamelet model of turbulent nonpremixed combustion*", Combustion and Flame, Vol. 56, pp. 199-213.
108. Hossain, M., 1999, CFD Modeling of Turbulent Non-premixed Combustion, Loughborough University, UK.
109. Hollmann, C. and Gutheil, E., 1998, "*Flamelet-modeling of Turbulent Spray Diffusion Flames based on a Laminar Spray Flame Library*", Combustion Science and Technology, Vol. 135, pp. 175–192.
110. Ferreira, J.C., 2001, "*Steady and Transient Flamelet Modelling of Turbulent Non-premixed Combustion*", Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 1, pp. 29-42.
111. Darabiha, N., 1992, "*Transient Behavior of Laminar Counterflow Hydrogen-air Diffusion Flames with Complex Chemistry*", Combustion Science and Technology, Vol. 86, pp. 163-181.
112. Egolfopoulos, F.N. and Campbell, C.S., 1995, "*Unsteady Counterflowing Strained Diffusion Flames: Diffusion-limited Frequency Response*", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 318, pp. 1–29.

113. Park, J. and Shin, H.D., 1997, "*Experimental Investigation of the Developing Process of an Unsteady Diffusion Flame*", Combustion and Flame, Vol. 110, pp. 67-77.
114. Pierce, C.D. and Moin, P., 2004, "*Progress-variable Approach for Large Eddy Simulation of Non-premixed Turbulent Combustion*", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 504, pp. 73–97.
115. Ihme, M., Cha, C.M., and Pitsch, H., 2005, "*Prediction of local extinction and re-ignition effects in non-premixed turbulent combustion using a flamelet/progress variable approach*", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 30, pp. 793-800.
116. Ihme, M. and Pitsch, H., 2008, "*Prediction of Extinction and Reignition in Nonpremixed Turbulent Flames using a Flamelet/progress Variable model 1; A Priori Study and Presumed PDF Closure*", Combustion and Flame, Vol. 155, pp. 70–89.
117. Ihme, M. and Pitsch, H., 2008, "*Prediction of Extinction and Reignition in Nonpremixed Turbulent Flames using a Flamelet/progress Variable Model 2; Application in LES of Sandia Flames D and E*", Combustion and Flame, Vol. 155, pp. 90–107.
118. Mauss, F., Keller, D., and Peters, N., 1991, "*A lagrangian simulation of flamelet extinction and re-ignition in turbulent jet diffusion flames*", Symposium (International) on Combustion, Vol. 23, pp. 693-698.
119. Pitsch, H. and Fedotov, S., 2001, "*Investigation of scalar dissipation rate fluctuations in non-premixed turbulent combustion using a stochastic approach*", Combustion Theory and Modelling, Vol. 5, pp. 41-57.
120. Pitsch, H. and Steiner, H., 2000, "*Large-eddy Simulation of a Turbulent Piloted Methane/air Diffusion Flame (Sandia Flame D)*", Physics of Fluids, Vol. 12, pp. 2541-2554.
121. Eswaran, V. and Pope, S.B., 1988, "*Direct Numerical Simulations of Turbulent Mixing of a Passive Scalar*", Physics of Fluids, Vol. 31, pp. 506-520.
122. Pires da Cruz, A., Baritaud, T.A., and Poinso, T.J., 2001, "*Self-Ignition and Combustion Modeling of Initially Nonpremixed Turbulent Systems*", Combustion and Flame, Vol. 124, pp. 65-81.
123. Cant, R.S., Rogg, B., and Bray, K.N.C., 1990, "*On Laminar Flamelet Modelling of Mean Reaction Rate in a Premixed Turbulent Flame*", Combustion Science and Technology, Vol. 69, pp. 53-61.
124. Bekdemir, C., 2008, Numerical Modeling of Diesel Spray Formation and Combustion, Eindhoven University of Technology, Netherlands.

125. Baba, Y. and Kurose, R., 2008, "*Analysis and Flamelet Modelling for Spray Combustion*", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 612, pp. 45-79.
126. Sadasivuni, S.K., Malalasekera, W., and Ibrahim, S.S. *Validation of Unsteady Flamelet/progress Variable Methodology for Non-premixed Turbulent Partially Premixed Flames*. in *Proceedings of the ECM 2009 Fourth European Combustion Meeting*, Vienna University of Technology, Austria. 2009.
127. Dec, J.E., *A Conceptual Model of DI Diesel Combustion Based on Laser-Sheet Imaging*, in *SAE Technical Paper Series No. 970873*1997.
128. Chomiak, J. and Karlsson, A. *Flame Lift-off in Diesel Sprays*. in *The 26th International Symposium on Combustion*. 1996. Pittsburgh.
129. Kosaka, H., Nishigaki, T., Kamimoto, T., Sano, T., Matsutani, A., and Harada, S., 1996, "*Simultaneous 2-D Imaging of OH Radicals and Soot in a Diesel Flame by Laser Sheet Techniques*", Transactions of the SAE, Vol. 105, pp. 1184-1195.
130. Flynn, P.F., Durrett, R.P., Hunter, G.L., zur Loye, A.O., Akinyemi, O.C., Dec, J.E., and Westbrook, C.K., *Diesel Combustion: An Integrated View Combining Laser Diagnostics, Chemical Kinetics, and Empirical Validation*, in *SAE Technical Paper Series No. 1999-01-0509*1999.
131. Pickett, L.M. and Siebers, D.L., 2004, "*Soot in Diesel Fuel Jets: Effects of Ambient Temperature, Ambient Density, and Injection Pressure*", Combustion and Flame, Vol. 138, pp. 114-135.
132. Pickett, L.M. and Siebers, D.L., 2002, "*An Investigation of Diesel Soot Formation Processes using Micro-Orifices*", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 29, pp. 655-662.
133. Pickett, L.M. and Siebers, D.L., 2005, "*Orifice Diameter Effects on Diesel Fuel Jet Flame Structure*", Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Vol. 127, pp. 187-196.
134. Venugopal, R. and Abraham, J., 2007, "*A Numerical Investigation of Flame Lift-off in Diesel Jets*", Combustion Science and Technology, Vol. 179, pp. 2599-2618.
135. Pickett, L.M., Siebers, D.L., and Idicheria, C.A., *Relationship between Ignition Processes and the Flame Lift-off Length in Diesel Fuel Jets*, in *SAE Technical Paper Series No. 2005-01-3843*2005.
136. Tap, F.A. and Veynante, D., 2005, "*Simulation of Flame Lift-off on a Diesel Jet using a Generalized Flame Surface Density Modeling Approach*", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 30, pp. 919-926.

137. Senecal, P.K., Pomraning, E., Richards, K.J., Briggs, T.E., Choi, C.Y., McDavid, R.M., and Patterson, M.A., *Multi-Dimensional Modeling of Direct-Injection Diesel Spray Liquid Length and Flame Lift-off using CFD and Parallel Detailed Chemistry*, in *SAE Technical Paper Series No. 2003-01-1043* 2003.
138. Versteeg, H.K. and Malalasekera, W., *An Introduction to Computational Fluid Dynamics; The Finite Volume Method* 1995, Malaysia: Longman Scientific & Technical.
139. Mostafa, A.A. and Mongia, H.C., 1987, "On the Modelling of Turbulent Evaporating Sprays: Eulerian versus Lagrangian Approach", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 30, pp. 2583-2593.
140. Launder, B.E. and Spalding, D.B., *Lectures in Mathematical Models of Turbulence* 1972, London: Academic Press.
141. Melville, W.K. and Bray, K.N.C., 1979, "A Model of the Two-Phase Turbulent Jet", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 22, pp. 647-656.
142. Nicholls, H., *Stream and Droplet Breakup by Shockwaves*, in *NASA SP-194*, Eds. Harrie and Reardon, pp. 126-128 1972.
143. Faeth, G.M., Hsiang, L.P., and Wu, P.K., 1995, "Structure and Break-Up Properties of Sprays", *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 21, pp. 99-127.
144. Wallis, G.B., *One-Dimensional Two-Phase Flows* 1969, New York: McGraw-Hill.
145. Faeth, G.M., 1983, "Evaporation and Combustion of Sprays", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 9, pp. 1-76.
146. Kim, J.S. and Williams, A., 1993, "Structures of Flow and Mixture Fraction Fields for Counterflow Diffusion Flames with Small Stoichiometric Mixture Fractions", *SIAM Journal on Applied Mathematics*, Vol. 53, pp. 1551-1566.
147. Pitsch, H., Chen, M., and Peters, N., 1998, "Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen/Air Diffusion Flames", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 27, pp. 1057-1064.
148. Issa, R.I., 1986, "Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting", *Journal of Computational Physics*, Vol. 62, pp. 40-65.
149. Pitsch, H., *A C++ Computer Program for 0-D and 1-D Laminar Flame Calculations*, in *RWTH Aachen* 1988.

ภาคผนวก

Manuscript

ชื่อเรื่อง

Auto-ignition and Combustion of Diesel Spray using Unsteady Laminar Flamelet Model

ตีพิมพ์ในวารสาร

Journal of Applied Thermal Engineering

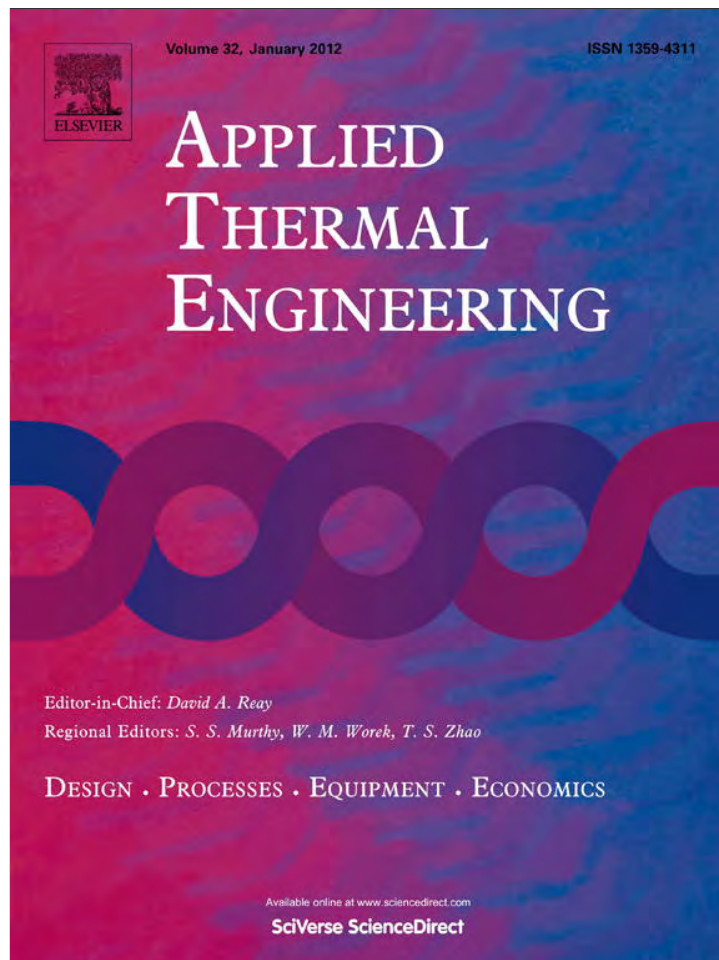
และ

บทความ

ประชุมวิชาการเครือข่ายวิศวกรรมเครื่องกลแห่งประเทศไทย ครั้งที่ 26 (ME-NETT 2012)

ชื่อเรื่อง

การทำนายการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้ในสเปรย์ดีเซลโดยใช้แบบจำลองเฟลมเลต



(This is a sample cover image for this issue. The actual cover is not yet available at this time.)

This article appeared in a journal published by Elsevier. The attached copy is furnished to the author for internal non-commercial research and education use, including for instruction at the authors institution and sharing with colleagues.

Other uses, including reproduction and distribution, or selling or licensing copies, or posting to personal, institutional or third party websites are prohibited.

In most cases authors are permitted to post their version of the article (e.g. in Word or Tex form) to their personal website or institutional repository. Authors requiring further information regarding Elsevier's archiving and manuscript policies are encouraged to visit:

<http://www.elsevier.com/copyright>



Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

Applied Thermal Engineering

journal homepage: www.elsevier.com/locate/apthermeng

Auto-ignition and combustion of diesel spray using unsteady laminar flamelet model

Isares Dhuchakallaya^{a,*}, Phadungsak Rattanadecho^a, Paul Watkins^b^a Department of Mechanical Engineering, Thammasat University, Klong-Luang, Pathumthani 12120, Thailand^b School of Mechanical, Aerospace and Civil Engineering, University of Manchester, M13 9PL, UK

H I G H L I G H T S

- This model is able to capture the main features of the diesel flame structure.
- The flame shapes obtained are closely related to the luminous flames.
- The present model is apparently able to match the experimental results.
- The lifted flame is well represented by this developed model.

A R T I C L E I N F O

Article history:

Received 29 June 2012

Accepted 18 December 2012

Available online 2 January 2013

Keywords:

Auto-ignition

Combustion

Flamelet

Modelling

Spray

A B S T R A C T

This work emphasises the modelling capabilities of the unsteady flamelet/reaction progress variable approach to implement diesel spray flames for capturing the auto-ignition and flame lift-off phenomena. The droplet size distribution based on the moment scheme characterises the poly-disperse spray model [1] employed in this work. The flamelet progress variable solutions embedded in a Reynolds-averaged Navier–Stokes (RANS) framework, together with the probability density function (PDF) approach, signify the turbulence–chemistry interaction. All thermochemical scalars are represented as a function of mean mixture fraction, mixture fraction variance, reaction progress variable and scalar dissipation rate. Mixture fraction is assumed to follow a beta-PDF distribution, because the reaction progress variable and scalar dissipation rate distributions are assumed to be a delta-PDF. In order to assess the capability of this developed model, the predicted results are compared with experimental data [2]. The developed model gives a reasonably good overall prediction performance in terms of auto-ignition, flame development and flame lift-off length. The flame temperature distributions are comparable with the formations of luminous flames. The predicted flame growth rate is consistent with the experimental results but there is a small over-prediction. Therefore, the present approach can accurately and efficiently capture the auto-ignition and flame lift-off phenomena of diesel spray flame.

© 2013 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Due to superior fuel economy, spray combustion is utilised in a wide range of engineering devices, such as gas turbine engines and internal combustion engines. Because the fuel is injected into the high-temperature chamber, the fuel droplets are partially evaporated and then mixed with the oxidiser. The chemical reaction plays a key role in this period until the auto-ignition takes place. The remaining unmixed fuel is then burned more slowly due to limited oxidiser. Therefore, spray combustion can be considered as a partially premixed combustion mode. Thus, standard

combustion models based on the fully premixed or fully non-premixed theories are not exactly appropriate for this concern.

Many studies have been performed to investigate the underlying physics governing partially premixed combustion [3–6]. These studies strived to capture spray combustion accurately and efficiently. In general, the key parameter used to predict the partially premixed lifted flames is the reaction progress variable. The method widely applied to model diffusion flame is the laminar flamelet approach proposed by Peters [7]. The formulations of the flamelet that incorporate the reaction progress variable are the steady flamelet model (SFM) and unsteady flamelet model (UFM).

The basic concept of the laminar flamelet model, as introduced by Peters [7], considers that the turbulent diffusion flames behave locally as an ensemble of laminar stretched flamelets. Each laminar flamelet is subjected to the local flow field, convecting and

* Corresponding author.

E-mail address: dhuchakallaya@yahoo.com (I. Dhuchakallaya).

stretching in terms of the instantaneous scalar dissipation rate at the stoichiometric condition. This model is generally adopted based on a steady state assumption and thus, it is known as the steady flamelet model. The flame structure then can be described just by the local mixture fraction and the scalar dissipation rate as independent variables. Therefore, the thermochemical variables of flame field such as temperature, species mass fractions, density, etc., can be pre-calculated and tabulated into a database; the so-called flamelet library. This makes the SFM popular in turbulent combustion studies. This model has been successfully applied to turbulent combustion [8–10]. Subsequently, many theoretical and experimental studies [10–12] have identified the deficiency of the steady state assumption, in that the laminar flamelet structure cannot sufficiently respond to the rapid changes of scalar dissipation rate in the turbulent flow field. Due to a highly non-homogeneous and transient environment in the spray, the SFM is not able to predict the extinction and re-ignition of these flames. The incorrect lift-off of diffusion flames results in large discrepancies in flow field predictions, which would certainly yield inaccuracies in the prediction of pollutants [6]. In addition, the accuracy of this model decreases as the Damköhler number decreases [13]. The Damköhler number is characterised as the ratio of the turbulent to chemical time scales. When the chemistry is fast compared with the turbulent scale (large Damköhler number), the diffusion flame layer is supposed to be relatively thin. Because the Damköhler number is small, the local flame structure is then far from the assumption of a laminar flamelet.

The local extinction and re-ignition states cannot be described properly by SFM. The reason for this is that the solution space used in SFM is very restrictive. Typically, the ignition and extinction states are defined as the turning points on the S-curve, as shown in Fig. 1. The upper branch indicates the stable burning flames, and the lower branch is the non-reactive solutions. The middle branch is unstable solutions that are obtained from the flamelet equations. In SFM, only the upper and lower branches are used. Because the solutions need to jump between the upper turning point and the lower branch for dissipation rates around the extinction limit, the numerical solutions become unstable. In order to eliminate this weakness of SFM, a relevant time variable is introduced into the flamelet structures. This leads to the unsteady flamelet models. The importance of transient effects in flamelets models is described by Haworth et al. [14]. Many researchers have attempted to apply the unsteady flamelet model to combustion with local extinction and

re-ignition. Mauss et al. [15] investigated the extinction and re-ignition of methane jet diffusion flames based on the unsteady flamelet model. Pitsch and Fedotov [16] developed a stochastic, interacting flamelet model, which extended the unsteady flamelet model to account for re-ignition effects due to the interaction of different flamelets. An application of the unsteady flamelet model to large eddy simulation was also demonstrated for a piloted jet diffusion flame by Pitsch and Steiner [17] and an excellent agreement with experimental data was obtained.

To broaden the ability of the classical steady flamelet model in predicting the extinction and re-ignition of diffusion flames, Peters [4] introduced the reaction progress variable to SFM. Pierce and Moin [6] modified this approach by applying the reaction progress variable instead of the scalar dissipation rate to parameterise the flamelet library, in order to predict the local extinction and re-ignition of non-premixed turbulent combustion. Later, such a methodology was investigated and improved by Ihme and Pitsch [18,19]. Furthermore, the distribution of reaction progress variable with beta- and delta-probability density functions (PDF) for lifted flames in the Reynolds-averaged Navier–Stokes (RANS) and large eddy simulation (LES) frameworks was also studied by Ravikanti [3]. The lift-off length and temperature predictions are very encouraging. However, the presumed delta PDF presents an under-prediction of flame lift-off length. All the above investigations were conducted based on the consideration of a steady flamelet solution with reaction progress variable.

To improve the numerical accuracy, the unsteady flamelet solutions are used in combination with the reaction progress variable to predict the partially premixed flames. This approach was used with reasonable success by Pitsch and Ihme [20] in predicting emissions in non-premixed flames. With this confidence, the present study uses the unsteady flamelet approach with the variations in scalar dissipation rate, coupled with the reaction progress variable approach, to predict the lifted flames of diesel spray, which is considered as partially premixed flames. Certainly, the computational cost of the unsteady flamelet approach is marginally greater than the steady flamelet model. To reduce computational cost, the delta PDF for both the progress variable and scalar dissipation rate and the beta PDF for the mixture fraction, are presumed in this flamelet library. In addition, extensive experimental and numerical investigations [21–23] indicate that the delta PDF is a good approximation for the scalar dissipation rate. Hence, the objective of the present work is to capture efficiently the auto-ignition and flame lift-off for diesel spray flames by means of the unsteady/reaction progress variable combustion model in a RANS framework.

2. Unsteady/progress variable approach

The flamelet model introduced by Peters [4], assumes that the thin reacting layer embedded in a turbulent flow field is much smaller than the Kolmogorov length scale, the smallest length scale. The structure of this reaction zone then remains laminar and diffusive transport occurs in the direction normal to the surface of stoichiometric mixture. Under the unity Lewis number assumption, the one-dimensional flamelet equation can transform into the mixture mass fraction space, as follows:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = \dot{\omega}_i \quad (1)$$

and

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} - \rho \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \right) = -\frac{1}{c_p} \sum_{i=1}^N h_i \dot{\omega}_i \quad (2)$$

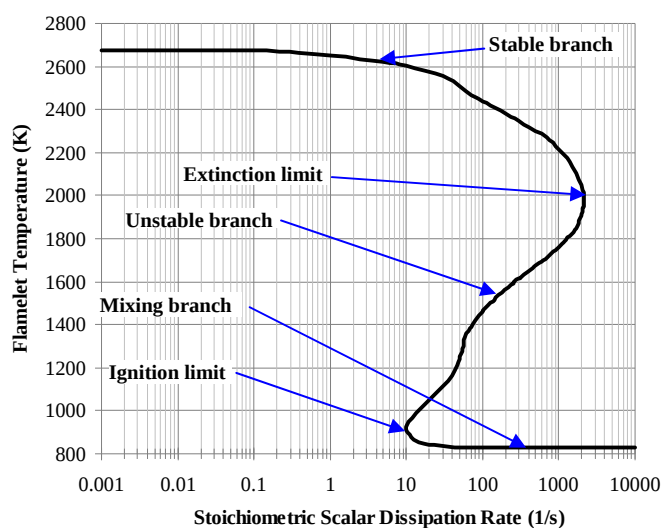


Fig. 1. Unsteady flamelet solution space for *n*-heptane/air flame.

where τ , c_p , Y_i , h_i and $\dot{\omega}_i$ are the time, specific heat at a constant pressure, mass fraction, enthalpy and chemical production rate of the i th species, respectively.

Generally, the distribution of the scalar dissipation rate χ in the Z space is presumed. The popular functional form of such a distribution in a counterflow diffusion flame is an inverse error function, as proposed by Peters [7]; however, other expressions have been proposed [24,25]. The inverse error function can be written as:

$$\chi(Z) = \frac{a_s}{\pi} \exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2 \right\} \quad (3)$$

where a_s is the strain rate, indicating the maximum velocity gradient and erfc^{-1} is the inverse error function. Eliminating the physical space parameter a_s , the scalar dissipation rate at stoichiometric condition is introduced. Thus, the distribution of χ as a function of Z can be rewritten as:

$$\chi(Z) = \chi_{st} \frac{\exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2 \right\}}{\exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z_{st}) \right]^2 \right\}} \quad (4)$$

Thus, the solutions of flamelet equations can be written as $\phi(Z, \chi_{st})$, where ϕ denotes for species mass fractions, temperature or chemical source terms.

As shown in Fig. 2, the S-shaped curve of the unsteady flamelet solutions represents the stoichiometric temperature as the function of stoichiometric scalar dissipation rate. For a given scalar dissipation rate, there are multiple solutions of stoichiometric temperatures. Definitely, a new parameter has to be introduced to parameterise the unsteady flamelet solutions. This parameter, the so-called reaction progress variable C , identifies the unique state of each single flamelet along the S-shaped curve covering all the branches. The reaction progress variable is commonly defined as the summation of product mass in different ways [19,26–28]. In the present work, the definition of Ref. [19] is chosen as follows:

$$C = Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{CO}} + Y_{\text{H}_2\text{O}} + Y_{\text{H}_2} \quad (5)$$

For construction of the flamelet library, the reaction progress variable and scalar dissipation rate are independent parameters together with the mixture fraction. Therefore, each scalar dissipation rate has an individual distribution of reaction progress variable and mixture fraction. In Fig. 2, the vertical dots in the middle branch represent the individual unsteady flamelet solutions between the equilibrium and unburned limits. Thus, each flamelet solution depends on the mixture fraction Z , the reaction progress

variable C and the stoichiometric scalar dissipation rate χ_{st} . The flamelet space for any scalar can be expressed as:

$$\phi = \phi(Z, C, \chi_{st}) \quad (6)$$

The reaction progress variable and scalar dissipation rate are independent of the mixture fraction. These three parameters are then assumed to be independent of each other and thus, the joint PDF is simplified as:

$$\tilde{P}(Z, C, \chi_{st}) = \tilde{P}(Z) \tilde{P}(C) \tilde{P}(\chi_{st}) \quad (7)$$

Here, the distribution of the mixture fraction is assumed to be beta-PDF and a delta-function closure for the reaction progress variable. The distribution of the scalar dissipation rate is assumed to follow a delta-PDF distribution. Hence, the above equation can be represented as:

$$\tilde{P}(Z, C, \chi_{st}) = \beta \left(Z; \tilde{Z}, \tilde{Z}''^2 \right) \delta(C; \tilde{C}) \delta(\chi_{st}; \tilde{\chi}_{st}) \quad (8)$$

The mean scalars $\tilde{\phi}$ can be determined from the instantaneous flamelet solutions by weighting them with a joint PDF as:

$$\tilde{\phi} = \int_0^{\chi_q} \int_0^{C_{\max}} \int_0^1 \phi(Z, C, \chi_{st}) \tilde{P} \left(Z; \tilde{Z}, \tilde{Z}''^2 \right) \tilde{P}(C; \tilde{C}) \tilde{P}(\chi_{st}; \tilde{\chi}_{st}) dZ dC d\chi_{st} \quad (9)$$

where χ_q is the quenching strain rate. With this expression, a flamelet library of all mean scalars $\tilde{\phi}$ can be constructed as a function of the mean values of the mixture fraction $\tilde{Z}$, its variance $\tilde{Z}''^2$, reaction progress variable $\tilde{C}$ and stoichiometric scalar dissipation rate $\tilde{\chi}_{st}$.

The unsteady flamelet solutions employed here are solved by the FlameMaster code developed by Pitsch [29]. The skeletal mechanism for n -heptane with 43 species and 185 reactions of Liu et al. [30] is used. In Fig. 2, for a specific scalar dissipation rate, the initial conditions start from a non-burning flamelet. As the chemical reaction grows, the temperature continues to increase until ignition is reached at some mixture fraction. The development of the temperature profile then ends up at the steady flamelet solution. For n -heptane/air combustion, temperatures up to 2650 K are observed for small χ_{st} and the maximum temperature then drops beneath 2000 K at a value of about 2100 s^{-1} prior to extinction. As seen at $\chi_{st} = 100 \text{ s}^{-1}$, the peaks of stoichiometric temperature

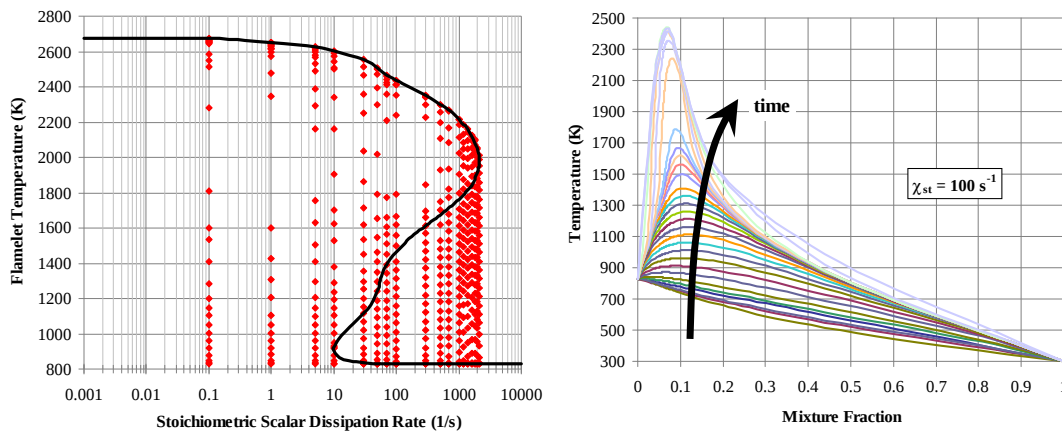


Fig. 2. S-shaped curve for n -heptane/air flame and temperature history at $\chi_{st} = 100 \text{ s}^{-1}$ ($T_f = 298 \text{ K}$, $T_a = 830 \text{ K}$, 27 bar).

slightly shift to lower values of mixture fraction with time. The development of the reaction progress variable distribution in the mixture fraction space for various scalar dissipation rates is also shown in Fig. 3. As the turbulent fluctuation becomes stronger (higher χ_{st}), the peaks of the reaction progress variable distribution profile (graph on the left) are definitely lower. This is because the turbulence significantly disturbs the chemical reactions resulting in a slower burning rate. Again, the time evolution of peaks for the reaction progress variable profile obviously shifts to lower values of mixture fraction. This represents a unique relationship among $\tilde{C}$, $\tilde{Z}$ and $\tilde{\chi}_{st}$ to map a single thermochemical scalar in the unsteady flamelet approach.

As explained above, the mean thermochemical properties stored in the flamelet library are a function of $\tilde{Z}$, $\tilde{Z}''^2$, $\tilde{C}$ and $\tilde{\chi}_{st}$. These quantities can be determined from the transport equations for the reaction progress variable, mixture fraction and its variance. The transport equation for the Favre-averaged reaction progress variable, based on the assumption of unity Lewis number for all species involved, is given as:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{C}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{C}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\bar{\rho} D_C + \frac{\mu_t}{Sc_C} \right) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_i} \right\} + \bar{\omega}_C \quad (10)$$

where D is the diffusion coefficient and Sc is the Schmidt number. $\bar{\omega}$ is the mean chemical source term of $\tilde{C}$. Referring to the definition of $\tilde{C}$, this source term is then defined as the summation of production rates of major combustion products:

$$\bar{\omega}_C = \bar{\omega}_{CO_2} + \bar{\omega}_{CO} + \bar{\omega}_{H_2O} + \bar{\omega}_{H_2} \quad (11)$$

For spray combustion, the mixture fraction is no longer a conserved scalar because of the evaporation of spray droplets [31,32]. In order to take into account the evaporation effect, the transport equation for mixture fraction is modified as:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{Z}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\bar{\rho} D_Z + \frac{\mu_t}{Sc_Z} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right\} + S_m \quad (12)$$

where S_m is the mass transfer rate due to the evaporation of the liquid droplets. The mixture fraction is defined by Bilger [33] as:

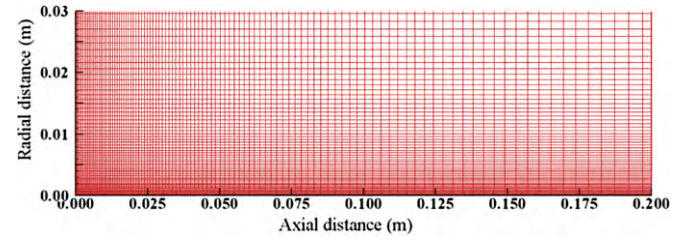
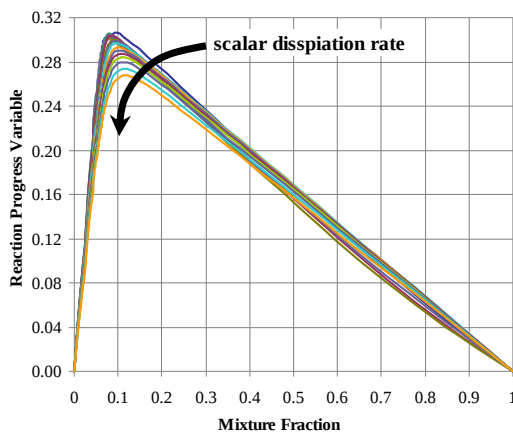


Fig. 4. Grid used in the spray combustion (The domain is 0.2 m long and 0.03 m in radius with 109×73 cells).

$$Z = \frac{2 \frac{Y_C - Y_{C,2}}{M_C} + \frac{1}{2} \frac{Y_H - Y_{H,2}}{M_H} - \frac{Y_O - Y_{O,2}}{M_O}}{2 \frac{Y_{C,1} - Y_{C,2}}{M_C} + \frac{1}{2} \frac{Y_{H,1} - Y_{H,2}}{M_H} - \frac{Y_{O,1} - Y_{O,2}}{M_O}} \quad (13)$$

where M is the molecular mass and the subscripts C , H and O indicate the quantities for the elements carbon, hydrogen and oxygen, respectively. The subscripts 1 and 2 refer to the constant mass fraction in the original fuel and oxidiser streams, respectively.

The mixture fraction variance is also needed when the probability density function must be evaluated. The Favre-averaged balance equation of the mixture fraction variance can be written as:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{Z}''^2}{\partial x_i} = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\bar{\rho} D_{Z''^2} + \frac{\mu_t}{Sc_{Z''^2}} \right) \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_i} \right\} \\ & + 2 \frac{\mu_t}{Sc_{Z''^2}} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2 - \bar{\rho} C_\chi \tilde{\epsilon} \tilde{Z}''^2 \end{aligned} \quad (14)$$

where C_χ is about 2.0.

3. Numerical method and validated configuration

In this study, the main effort focuses on the application of spray on combustion phenomena. In order to simplify, the uncomplicated geometry of the combustion chamber, as studied here, is axisymmetric, as shown in Fig. 4. The Favre-averaged Navier–Stokes approach is sufficiently appropriate to lead to a successful study on the turbulence–chemistry interaction. Based on the finite

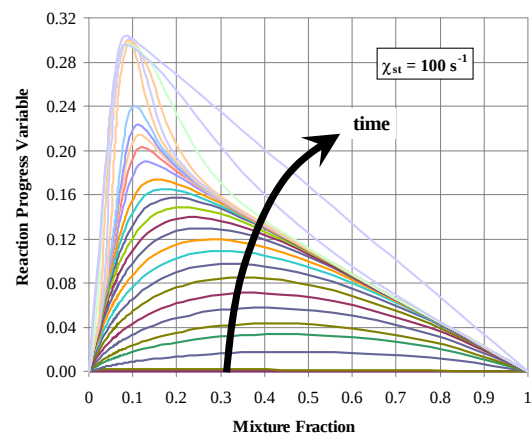


Fig. 3. Reaction progress variable distribution for various scalar dissipation rates and its development.

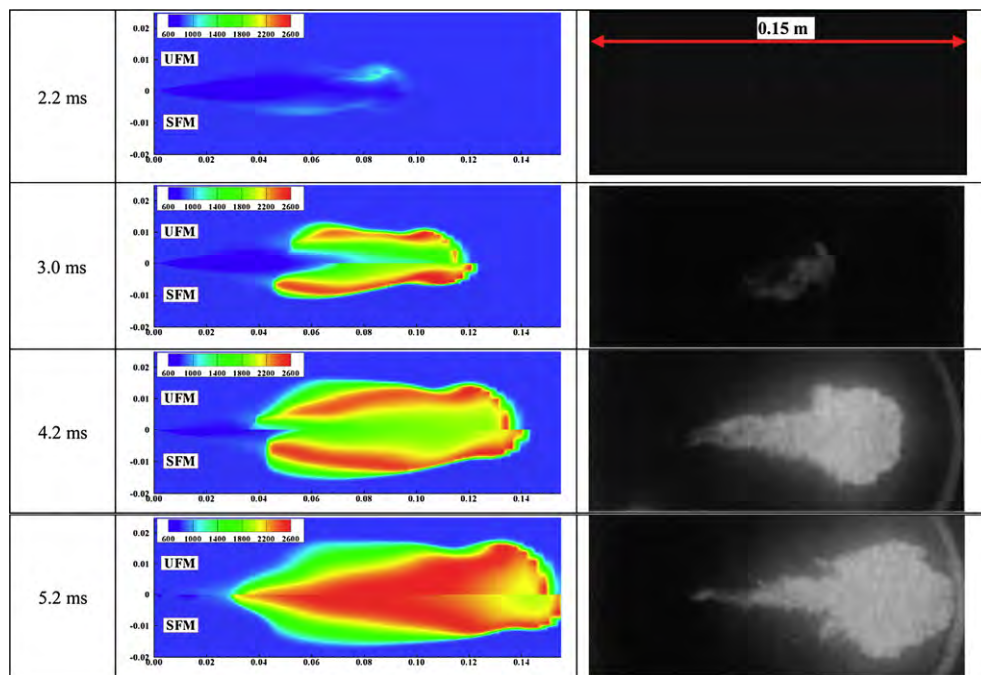


Fig. 5. Comparison between predicted flame temperature distributions and photographs of flame luminosity [2].

volume method, the solution of the transport equation system is carried out in an Eulerian framework. All the conservation or transport equations for both the liquid and gas phases are solved on the same two-dimensional (z, r) axisymmetric orthogonal computational grid. A staggered grid arrangement is adopted for the liquid and gas phase velocity components. Euler implicit temporal differencing and hybrid upwind/central spatial differencing are employed to render all the liquid and gas phase transport equations into a finite volume framework. The sub-models for droplet breakup, collision, evaporation and the interactions between the liquid phase and gas phase, are detailed in Beck and Watkins [34], based on the drop number size moment scheme. In high Reynolds number spray combustion, a standard $k-\epsilon$ turbulent model can perform efficiently due to low computational cost. The wall function of Launder and Spalding [35] is taken into account for the effects of a near wall flow. The solution algorithm is based on the PISO algorithm of Issa [36], with the liquid phase equations added to it.

The accuracy of such an approach has been partially assessed in earlier publications [34,37–43], both in non-reactive and reactive applications. Numerous grid and time-step dependence tests have also been carried out in the earlier publications. The results from those tests have been used to set these parameters in this work.

In the flamelet library generated in this work, the mixture fraction and its variance spaces are divided into 141 and 21 cells, respectively. A set of 18 flamelets is created with the stoichiometric dissipation rate ranging from 0.1 to 2125.13 and the corresponding extinction limit $\chi_{st,q}$ is found to be about 2125.13 s^{-1} . In every single dissipation rate step, the reaction progress variable space is subdivided into 29 flamelets. Hence, the thermochemical properties can be recalled by mapping these flamelets within their validity ranges.

The experimental investigation used for validation of this simulation model is the diesel spray combustion measurements of Akiyama et al. [2]. A 0.18-mm-diameter nozzle is used to inject the

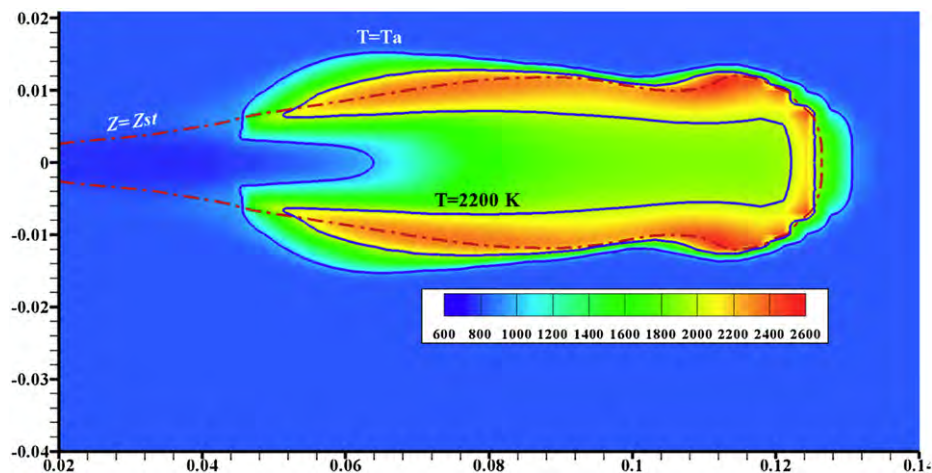


Fig. 6. Lifted flame temperature contour predicted by unsteady flamelet model.

diesel liquid with a maximum pressure of 80 MPa. The air in the combustion chamber is preheated to 830 K and pressurised to 27 bar. The quantity of liquid diesel injected is 28 mg during the 3.8 ms of the injection period. The ignition delay time is evaluated by the combustion chamber pressure history and the flame temperature is analysed by the two-colour method. A spray distribution with a Sauter Mean Radius of 10 microns is presumed in this simulation and the time-step in the calculation is 0.5 μ s.

4. Results and discussion

The temperature evolution from the early stage of ignition to further combustion of the spray, compared with the experimental results of Akiyama et al. [2], is shown in Fig. 5. The upper and lower halves of the plots represent the flame temperature contours predicted by the unsteady and steady flamelet models combined with the reaction progress variable, respectively. In the SFM, the mean chemical source term of reaction progress variable in Eq. (10) is obtained by the PDF–EBU scheme proposed by Dhuchakallaya and Watkins [43]. This source term is a combination of a single-step chemical reaction rate and Eddy break-up model. In Fig. 5, the reactive activity begins at the outer edge of the spray, as shown by means of a locally increased temperature. The ignition kernel of SFM in particular, occurs close to the place where the flame lift-off will settle, whereas this activity is placed further downstream in the UFM. Both models are satisfactory in predicting the ignition delay time at approximately 2.2 ms; however, the first appearance of the significant luminous flame in the experiment is observed later, at around 2.8 ms. The flame then propagates downstream and upstream from the ignition locations. The outer edge of the spray is consequently fully reacted and the combustion region expands to the inner volume and the maximum temperature continues to rise. As seen, the SFM presents a slightly larger high-temperature region than the UFM. In the present work, the flame lift-off length is defined as the height from the nozzle tip to the threshold temperature. Because there is no certain threshold temperature to define the lift-off length in the simulation, the threshold temperature of 2200 K is chosen, as in Refs. [44,45]. The lift-off lengths obtained from both models are relatively comparable at about 50 mm, as the lift-off length measured directly from photographs is around 48 mm. This length corresponds to the approximated power-law scaling of Siebers et al. [46], which gives this value in the range of 40–55 mm. The flame shapes obtained from the UFM are more closely related to the luminous flames than those predicted by SFM, especially in the spray head region.

The lifted flame is represented by the temperature contour, as shown in Fig. 6, taken at the time of 3.7 ms after injection. In the inner region of the spray downstream of the lift-off, the temperature gradually increases due to the partially premixed rich flame. It is clearly shown that higher temperatures appear over the stoichiometric contour, as expected in diffusion flames. The flame lift-off predicted by the unsteady flamelet model is around 51 mm. From this figure, it can be stated that the present model is able to capture, at least qualitatively, the main features of the diesel flame structure.

The predicted flames clearly emerge prior to the flame luminosity, as seen in Fig. 7 and then the discrepancy of the predicted flame areas with the experimental results trends towards stable values. This illustrates that both models give over-predictions of flame propagation. However, the flame area found in the UFM is obviously closer to the experimental results than the SFM prediction. This might be because the source term of reaction progress variable employed in the SFM is based on a chemical time scale that is derived from a single-step irreversible chemical reaction. This naturally provides an over-prediction in reaction rate, as has been

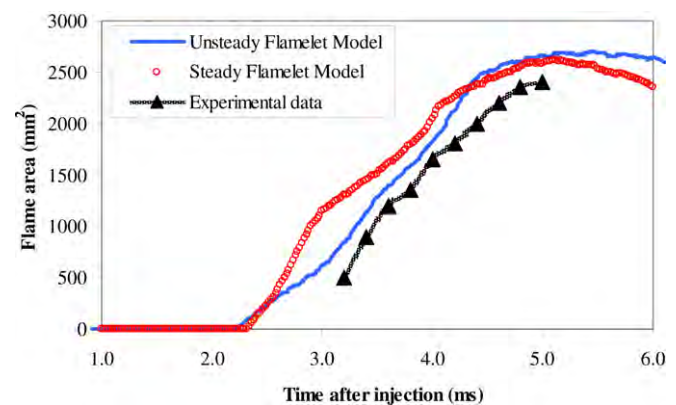


Fig. 7. Development of flame area compared with the experimental results of Akiyama et al. [2].

reported by many researchers. This is also shown in Fig. 5, where the thicker band of high temperature appears in the SFM prediction. As observed in the experiment, the flame front approaches the combustion chamber wall at the time of 5.2 ms. Therefore, the results after the time of 5.2 ms are not considered.

As shown in Fig. 8, the heat release rate in the early stages slightly decreases below zero due to the heating of the liquid droplets. It then increases sharply after ignition leading to the peak reaction rate. Consequently, the shortage of mixing improperly between fuel vapour and air becomes dominant, resulting in the diffusion flame behaviour revealed later on. As shown in the comparison, the SFM prediction apparently correlates well with the experimental data in the early stages of combustion. This is certainly due to the fine-tuning of the modelling constants of $\bar{\omega}_C$ in the PDF–EBU approach, which depends on both the structure of the flame and the chemical reaction. This differs appreciably from the UFM scheme where $\bar{\omega}_C$ is taken from the flamelet database, which requires no further tuning. The peak of experimental results is significantly lower than that predicted by both models. However, in the main combustion, both models function very similarly to the experimental data. Interestingly, a large discrepancy emerges beyond 4.8 ms after injection. This might be due to the disturbance of the wall, which the flame front impacts at a time of 5.2 ms. In all aspects of comparison, the UFM is apparently better able to match the experimental results than the SFM prediction.

The distribution of flame temperature in the mixture fraction space is represented as scatter plots shown in Fig. 9. During the

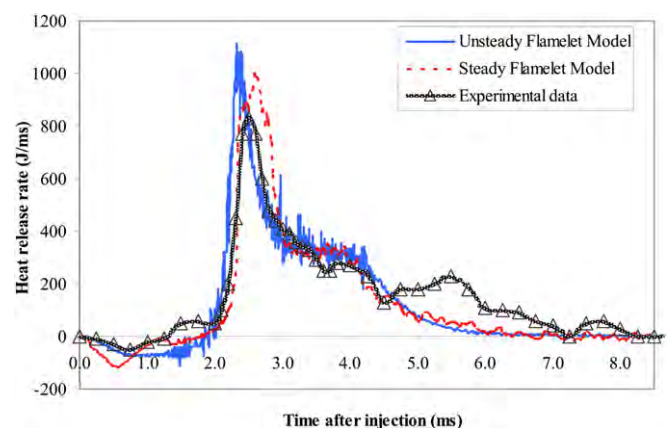


Fig. 8. Time history of heat release rates compared with the measurements of Akiyama et al. [2].

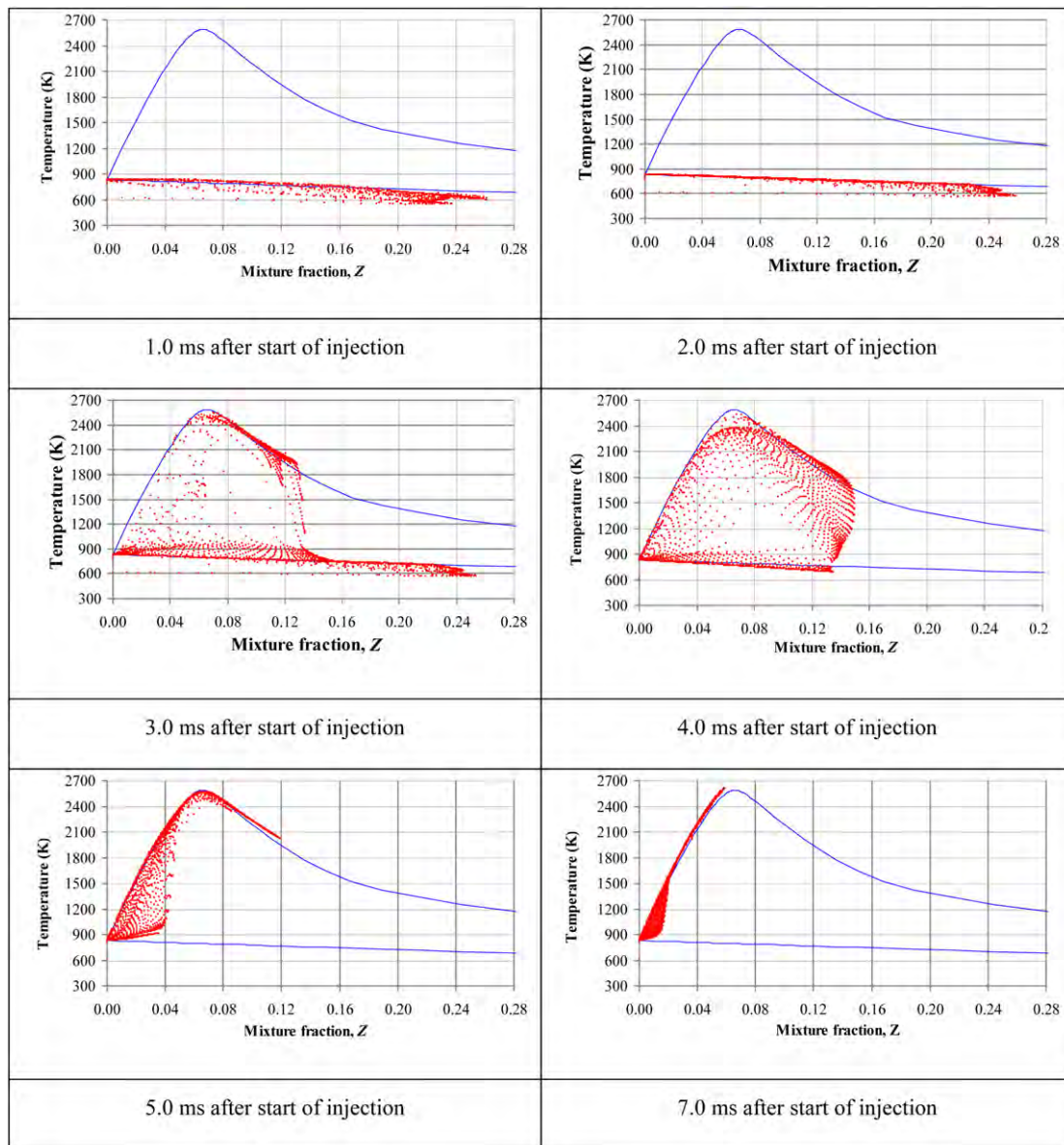


Fig. 9. Scatter plot of predicted temperature in Z space during combustion (blue lines denote to equilibrium states). (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

heating period in the first 2 ms, all temperature data are close to the mixing limit. Some are located beneath this line due to the evaporating cooling of spray droplets. Auto-ignition takes place at a time of 2.2 ms and the temperature then starts rising to continue the main combustion process later on. The predicted temperatures vary between the mixing and equilibrium states, because the lifted flame tries to detach and re-ignite in the period of 3 and 4 ms. Following the end of injection at 3.8 ms, the data begin to depart from the mixing to equilibrium lines. As the spray combustion process continues, the temperatures rise increasingly close to the equilibrium state. Hence, the lifted flame is well represented by this developed model.

5. Conclusions

In the present study, the unsteady flamelet model, combined with the reaction progress variable approach, is implemented to describe and analyse auto-ignition and combustion phenomena

in a turbulent environment for conditions typically encountered in internal combustion engines. The spray model employed is based on the droplet size distribution moments approach introduced by Beck [1]. This simulation study with *n*-heptane as a surrogate for diesel fuel, demonstrates the model's capabilities to capture the spray formation, subsequent auto-ignition and the existence of a lift-off length. The results show that this approach appears to be an effective method for capturing essential flame characteristics, such as auto-ignition and flame lift-off, without the need to apply any additional ignition model, as compared with the experimental results of Akiyama et al. [2]. The predicted flame temperature contours are reasonably comparable to the formations of luminous flames. However, the UFM provides a small over-prediction in flame area but overall, the UFM performs slightly better than the SFM. Therefore, the unsteady flamelet/reaction progress variable model can be applied with confidence for partially premixed lifted flames, such as diesel spray in reciprocating engines.

References

- [1] J.C. Beck, Computational modelling of polydisperse sprays without segregation into droplet size Classes, Ph.D. thesis, UMIST, Manchester, (2000).
- [2] H. Akiyama, H. Nishimura, Y. Ibaraki, N. Iida, Study of Diesel Spray Combustion and Ignition Using High-pressure Fuel Injection and a Micro-hole Nozzle with a Rapid Compression Machine: Improvement of Combustion Using Low Cetane Number Fuel, vol. 19, Society of Automotive Engineers of Japan, 1998, pp. 319–327.
- [3] V.V.S.M. Ravikanti, Advanced Flamelet Modeling of Turbulent Non-premixed and Partially Premixed Combustion, Loughborough University, UK, 2008.
- [4] N. Peters, Turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence, *Journal of Fluid Mechanics* 384 (1999) 107–132.
- [5] H. Pitsch, Unsteady flamelet modeling of differential diffusion in turbulent jet diffusion flames, *Combustion and Flame* 123 (2000) 358–374.
- [6] C.D. Pierce, P. Moin, Progress-variable approach for large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion, *Journal of Fluid Mechanics* 504 (2004) 73–97.
- [7] N. Peters, Laminar diffusion flamelet models in non-premixed combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* 10 (1984) 319–339.
- [8] M. Hossain, CFD Modeling of Turbulent Non-premixed Combustion, Loughborough University, UK, 1999.
- [9] C. Hollmann, E. Gutheil, Flamelet-modeling of turbulent spray diffusion flames based on a laminar spray flame library, *Combustion Science and Technology* 135 (1998) 175–192.
- [10] J.C. Ferreira, Steady and transient flamelet modelling of turbulent non-premixed combustion, *Progress in Computational Fluid Dynamics* 1 (2001) 29–42.
- [11] F.N. Egolfopoulos, C.S. Campbell, Unsteady counterflowing strained diffusion flames: diffusion-limited frequency response, *Journal of Fluid Mechanics* 318 (1995) 1–29.
- [12] J. Park, H.D. Shin, Experimental investigation of the developing process of an unsteady diffusion flame, *Combustion and Flame* 110 (1997) 67–77.
- [13] A.W. Cook, J.J. Riley, G. Kosaly, A laminar flamelet approach to subgrid-scale chemistry in turbulent flows, *Combustion and Flame* 109 (1997) 332–341.
- [14] D.C. Haworth, M.C. Drake, R.J. Blint, Stretched laminar flamelet modeling of a turbulent jet diffusion flame, *Combustion Science and Technology* 60 (1988) 287–318.
- [15] F. Mauss, D. Keller, N. Peters, A Lagrangian simulation of flamelet extinction and re-ignition in turbulent jet diffusion flames, in: *Symposium (International) on Combustion*, vol. 23, 1991, pp. 693–698.
- [16] H. Pitsch, S. Fedotov, Investigation of scalar dissipation rate fluctuations in non-premixed turbulent combustion using a stochastic approach, *Combustion Theory and Modelling* 5 (2001) 41–57.
- [17] H. Pitsch, H. Steiner, Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia flame D), *Physics of Fluids* 12 (2000) 2541–2554.
- [18] M. Ihme, H. Pitsch, Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model 1; a priori study and presumed PDF closure, *Combustion and Flame* 155 (2008) 70–89.
- [19] M. Ihme, H. Pitsch, Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model 2; application in LES of Sandia flames D and E, *Combustion and Flame* 155 (2008) 90–107.
- [20] H. Pitsch, M. Ihme, An unsteady/flamelet progress variable method for LES of nonpremixed turbulent combustion, in: *AIAA Paper* 2004-557, 2005.
- [21] L.K. Su, N.T. Clements, Planar measurements of the full three-dimensional scalar dissipation rate in gas-phase turbulent flows, *Experiments in Fluids* 27 (1999) 507–521.
- [22] H. Pitsch, H. Steiner, Scalar mixing and dissipation rate in large-eddy simulations of non-premixed turbulent combustion, in: *Proceedings of the 28th International Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000.
- [23] V. Eswaran, S.B. Pope, Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar, *Physics of Fluids* 31 (1988) 506–520.
- [24] J.S. Kim, A. Williams, Structures of flow and mixture fraction fields for counterflow diffusion flames with small stoichiometric mixture fractions, *SIAM Journal on Applied Mathematics* 53 (1993) 1551–1566.
- [25] H. Pitsch, M. Chen, N. Peters, Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen/air diffusion flames, *Proceedings of the Combustion Institute* 27 (1998) 1057–1064.
- [26] C. Bekdemir, Numerical Modeling of Diesel Spray Formation and Combustion, Eindhoven University of Technology, Netherlands, 2008.
- [27] Y. Baba, R. Kurose, Analysis and flamelet modelling for spray combustion, *Journal of Fluid Mechanics* 612 (2008) 45–79.
- [28] S.K. Sadasivuni, W. Malalasekera, S.S. Ibrahim, Validation of unsteady flamelet/progress variable methodology for non-premixed turbulent partially premixed flames, in: *Proceedings of the ECM 2009 Fourth European Combustion Meeting*, Vienna University of Technology, Austria, 2009.
- [29] H. Pitsch, in: *A C++ Computer Program for 0-D and 1-D Laminar Flame Calculations*, RWTH Aachen, 1988.
- [30] S. Liu, J.C. Hewson, J.H. Chen, H. Pitsch, Effects of strain rate on high-pressure nonpremixed *n*-heptane autoignition in counterflow, *Combustion and Flame* 137 (2004) 320–339.
- [31] H. Watanabe, R. Kurose, S. Hwang, F. Akamatsu, Characteristics of flamelet in spray flames formed in a laminar counterflow, *Combustion and Flame* 148 (2007) 234–248.
- [32] H. Watanabe, R. Kurose, S. Komori, H. Pitsch, Effects of radiation on spray flame characteristics and soot formation, *Combustion and Flame* 152 (2008) 2–13.
- [33] R.W. Bilger, S.H. Stårner, R.J. Kee, On reduced mechanisms for methane–air combustion in nonpremixed flames, *Combustion and Flame* 80 (1990) 135–149.
- [34] J.C. Beck, A.P. Watkins, On the development of spray sub-models based on droplet size moments, *Journal of Computational Physics* 182 (2002) 586–621.
- [35] B.E. Launder, D.B. Spalding, *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press, London, 1972.
- [36] R.I. Issa, Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting, *Journal of Computational Physics* 62 (1986) 40–65.
- [37] J.C. Beck, A.P. Watkins, The simulation of water and other non-fuel sprays using a new spray model, *Atomization and Sprays* 13 (2003) 1–26.
- [38] J.C. Beck, A.P. Watkins, On the development of a spray model based on drop-size moments, *Proceedings of the Royal Society of London – Series A* 459 (2003) 1365–1394.
- [39] J.C. Beck, A.P. Watkins, The droplet number moments approach to spray modelling: the development of heat and mass transfer sub-models, *International Journal of Heat and Fluid Flow* 2 (2003) 242–259.
- [40] J.C. Beck, A.P. Watkins, The simulation of fuel sprays using the moments of the drop number size distribution, *International Journal of Engine Research* 5 (2004) 1–21.
- [41] A.P. Watkins, Modelling of mean temperatures used for calculating heat and mass transfer in sprays, *International Journal of Heat and Fluid Flow* 28 (2007) 388–406.
- [42] I. Dhuchakallaya, A.P. Watkins, Application of spray combustion simulation in DI diesel engine, *Applied Energy* 87 (2010) 1427–1432.
- [43] I. Dhuchakallaya, A.P. Watkins, Numerical modelling of diesel spray auto-ignition and combustion, *International Journal of Engine Research* 12 (2011) 169–180.
- [44] F.A. Tap, D. Veynante, Simulation of flame lift-off on a diesel jet using a generalized flame surface density modeling approach, *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005) 919–926.
- [45] P.K. Senecal, E. Pomraning, K.J. Richards, T.E. Briggs, C.Y. Choi, R.M. McDavid, M.A. Patterson, Multi-dimensional modeling of direct-injection diesel spray liquid length and flame lift-off using CFD and parallel detailed chemistry, in: *SAE Technical Paper Series No. 2003-01-1043*, 2003.
- [46] D.L. Siebers, B.S. Higgins, L.M. Pickett, Flame lift-off on direct injection diesel fuel jets: oxygen concentration effects, in: *SAE Technical Paper Series No. 2002-01-0890*, 2002.

การทำนายการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้ในสเปรย์ดีเซลโดยใช้แบบจำลองเปลวเลท Prediction of Auto-ignition and Combustion in Diesel Spray using Flamelet Model

อิศเรศ ฐชกัลยา* และ ผดุงศักดิ์ รัตนเดโช

ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ ศูนย์รังสิต
ต.คลองหนึ่ง อ.คลองหลวง จ.ปทุมธานี 12121

*ติดต่อ: disares@engr.tu.ac.th, โทรศัพท์: 02-5643001-9 ต่อ 3276, โทรสาร: 02-5643023

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้ จะศึกษาและพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ของสเปรย์สำหรับประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์ดีเซล โดยจะเริ่มพัฒนาจากแบบจำลองสเปรย์ของ Beck [1] ซึ่งสามารถทำนายการกระจายตัวของสเปรย์ได้ค่อนข้างถูกต้องแม่นยำ และสำหรับการเผาไหม้ จะใช้แบบจำลอง unsteady flamelet ร่วมกับ reaction progress variable ในการคำนวณ ในการสร้าง flamelet library จะใช้กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบโครงร่าง (skeleton chemical kinetic mechanisms) ของ Liu และคณะ [2] ซึ่งมีจำนวนส่วนประกอบเคมี 43 ชนิดและสมการเคมีทั้งหมด 185 สมการ โดยผลการทำนายที่ได้จากแบบจำลองนี้ จะถูกนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [3] ซึ่งผลการเปรียบเทียบอยู่ในเกณฑ์ที่น่าพึงพอใจ ทั้งการพัฒนารูปร่างของเปลวและระยะลอยตัวของเปลว

คำหลัก: การเผาไหม้ / ดีเซล / แบบจำลอง / เปลวเลท / สเปรย์

Abstract

This research investigates on the development of a spray combustion model for diesel engine applications. This spray model is originated from work of Beck [1] in which the model can predict the distribution of spray quite accurately. For combustion analysis, the unsteady flamelet combining with reaction progress variable approach is employed here. For constructing the flamelet library, the skeleton chemical kinetic mechanisms of Liu *et al.* [2] consisting of 43 chemical components and 185 reactions are applied. The results predicted by present developed model are compared with the experimental data of Akiyama *et al.* [3]. The present simulation results are relatively satisfactory with the luminosity flames, both in the flame formation and the lifted-off length.

Keywords: Combustion / Diesel / Model / Flamelet / Spray

1. บทนำ

จากข้อได้เปรียบทางด้านการประหยัดน้ำมันและการเผาไหม้ที่สะอาดกว่า จึงทำให้เทคนิคการฉีดน้ำมันโดยตรงเข้ามามีบทบาทมากขึ้นในเครื่องยนต์ในปัจจุบัน ทั้งในระบบที่จุดระเบิดด้วยแรงอัดและประกายไฟ ดังนั้นจะเห็นได้ว่า มีงานวิจัยจำนวนมากพยายามพัฒนาเทคนิคทางด้านนี้ ทั้งการเพิ่มความดันให้กับหัวฉีด การเพิ่มการหมุนวนของสเปรย์เพื่อให้ผสมกับอากาศได้มากขึ้นด้วยเทคนิคต่าง ๆ ดังนั้นเพื่อตอบสนองต่อการพัฒนาเหล่านี้ งานวิจัยนี้จึงพัฒนาต่อยอด โดยสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อทำนายการเผาไหม้ของสเปรย์ที่เกิดขึ้น

จากงานวิจัยข้างต้น ความสำเร็จของแบบจำลองที่พัฒนาขึ้น จะช่วยลดค่าใช้จ่ายในการทดลองลงได้มาก และช่วยในการออกแบบ และปรับปรุงประสิทธิภาพการเผาไหม้ภายในเครื่องยนต์ดีเซล หรืออุปกรณ์ทางอุตสาหกรรมต่อไป

แบบจำลองนี้จะเริ่มพัฒนาจากแบบจำลองสเปรย์ของ Beck [1] ซึ่งอาศัยหลักการสถิติของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปรย์ขนาดต่าง ๆ โดยลักษณะทางกายภาพของสเปรย์จะนำเสนอในรูปของโมเมนต์ 4 ตัว ซึ่งในแต่ละโมเมนต์จะแสดงถึงปริมาณทั้งหมดของของเหลว พื้นผิว รัศมีและจำนวนของ

ละอองตามลำดับ โดยที่โมเมนต์เหล่านี้จะเป็นตัวแปรสำคัญในแบบจำลองย่อยซึ่งประกอบไปด้วยการแตกตัวของละออง การชนกันของละออง การระเหยของละออง และการปฏิสัมพันธ์ระหว่างก๊าซและของเหลว โดยรายละเอียดจะไม่กล่าวในที่นี้

ส่วนแบบจำลองการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้จะถูกพัฒนาขึ้นมา ซึ่งจะใช้แบบจำลอง laminar flamelet โดยแบบจำลองนี้ มีความน่าเชื่อถือสูง และไม่สิ้นเปลืองทรัพยากรการคำนวณมาก เนื่องจากข้อมูลของค่าเฉลี่ยของตัวแปรเคมีเชิงความร้อนจะถูกเก็บไว้ใน flamelet library โดยแบบจำลองนี้ เริ่มต้นถูกคิดค้นโดย Peters [4] ซึ่งสมมุติว่า ชั้นการแพร่ซึ่งยึดอยู่ภายในบริเวณการไหลแบบปั่นป่วนที่ไม่เกิดปฏิกิริยานั้น บางมาก ดังนั้นปฏิกิริยาเคมีและการแพร่ของโมเลกุลทั้งหมด จะสามารถพิจารณาได้ว่าเป็นโครงสร้างแบบลามินาร์ โดยในแต่ละ flamelet จะแสดงถึงพฤติกรรมการยึดตัวและการยับยั้งของเปลวเนื่องจากอิทธิพลของ scalar dissipation rate โดยรูปแบบของแบบจำลองนี้ ที่นิยมใช้ในการทำนายการเผาไหม้จะเสนออยู่ในรูปของ steady flamelet model (SFM) และ unsteady flamelet model (UFM) สำหรับแบบจำลอง SFM โครงสร้างของเปลวจะสามารถอธิบายได้จากค่า mixture fraction และ scalar dissipation rate ซึ่งแบบจำลองนี้ ได้รับความนิยมในการทำนายการเผาไหม้แบบปั่นป่วน [5-9] เนื่องจากความซับซ้อนที่น้อย และใช้เวลาในการคำนวณไม่มาก แต่แบบจำลองนี้ ก็ไม่สามารถรองรับการเปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็วของ scalar dissipation rate ได้ [9-12] ดังนั้นแบบจำลอง SFM จึงไม่สามารถทำนายการจุดระเบิดหรือการดับลงของเปลวได้ ซึ่งจะส่งผลโดยตรงต่อการทำนายระยะเปลวลอยตัว (lift-off) ที่คลาดเคลื่อน

เพื่อกำจัดจุดด้อยนี้ แบบจำลองการเผาไหม้จึงถูกดัดแปลงเป็น Unsteady Flamelet Model ซึ่งมีตัวแปรของเวลาถูกพิจารณาเพิ่มเข้าไป ทำให้สามารถทำนายสภาวะไม่คงตัวของเปลวไฟที่ลุกไหม้ได้ นอกจากนี้ ยังต้องนำ reaction progress variable (RPV) มาใช้ช่วยเป็นตัวระบุระดับของปฏิกิริยาการเผาไหม้ด้วย จากที่กล่าวมาข้างต้น จึงเป็นที่มาของวัตถุประสงค์ในงานวิจัยนี้คือ เพื่อพัฒนาแบบจำลองที่ใช้สำหรับทำนายการจุดระเบิดเอง และเปลวลอยตัวของสเปร์รี่ดีเซล ด้วยแบบจำลองการเผาไหม้ UFM ร่วมกับ RPV

2. แบบจำลองการเผาไหม้ UFM/RPV

สมการ flamelet จะแสดงค่าสัดส่วนเชิงมวล (mass fraction) ของ species ต่าง ๆ และอุณหภูมิ เป็นฟังก์ชันกับ mixture fraction Z , scalar dissipation rate χ และเวลา τ ดังนี้

$$\frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = \frac{\chi}{2} \frac{1}{Le_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} - \rho \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \right) = - \frac{1}{c_p} \sum_{i=1}^N h_i \dot{\omega}_i \quad (2)$$

เมื่อ τ , c_p , Y_i , h_i และ $\dot{\omega}_i$ คือ เวลา, ความจุความร้อนจำเพาะที่ความดันคงที่, สัดส่วนเชิงมวล, เอนทัลปี และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของ species i ตามลำดับ

รูปแบบสมการของ scalar dissipation rate โดยทั่วไปแล้ว จะสมมุติในรูปของ inverse error function ดังนี้

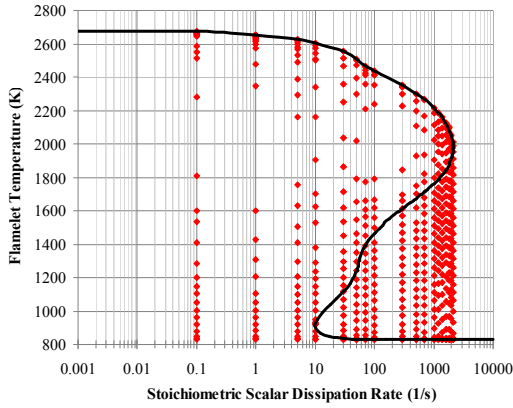
$$\chi(Z) = \frac{a_s}{\pi} \exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2 \right\} \quad (3)$$

เมื่อ a_s คือ strain rate ซึ่งแสดงถึงเกรเดียนความเร็วสูงสุด และ erfc^{-1} คือ inverse error function เพื่อกำจัดตัวแปร a_s ออก โดยทำเป็นสัดส่วนที่สภาวะ stoichiometric จะได้

$$\chi(Z) = \chi_{st} \frac{\exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2 \right\}}{\exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z_{st}) \right]^2 \right\}} \quad (4)$$

รูปโค้งตัว S ซึ่งได้จากผลลัพธ์การคำนวณของแบบจำลอง UFM ดังแสดงในรูปที่ 1 จะเห็นได้ว่า ที่ค่า χ_{st} ใด ๆ จะมีผลลัพธ์ของ flamelet (จุดสีแดง) มากกว่าหนึ่งค่า ดังนั้นจึงต้องใช้ตัวแปร RPV, C มาช่วยระบุตำแหน่งของผลลัพธ์ของ flamelet ให้ชัดเจนมากยิ่งขึ้น และครอบคลุมทุกบริเวณความเป็นไปได้ ของผลลัพธ์ โดยทั่วไปแล้ว RPV จะนิยามเป็นผลรวมของก๊าซผลิตภัณฑ์ ซึ่งชนิดของก๊าซที่เลือกจะแตกต่างกันไปบ้าง [13-16] ในที่นี้ จะเลือกเฉพาะก๊าซผลิตภัณฑ์หลักตามนิยามของ Ihme และ Pitsch [15] คือ

$$C = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O} + Y_{H_2} \quad (5)$$



รูปที่ 1 ผลลัพธ์ของแบบจำลอง UFM จากการเผาไหม้ n-heptane และอากาศ ($T_f=298$ K, $T_a=830$ K, 27 bar)

ในการสร้าง flamelet library ค่า C และ χ_{st} จะสมมุติว่าเป็นตัวแปรอิสระกับ Z ดังนั้นผลลัพธ์ของแต่ละ flamelet จึงขึ้นอยู่กับ Z , C และ χ_{st} โดยการกระจายตัวของ mixture fraction ในที่นี้จะสมมุติว่าเป็นแบบ beta และการกระจายตัวแบบ delta สำหรับ RPV และ scalar dissipation rate มีการกระจายตัวแบบ delta ดังนั้นค่าเฉลี่ยสเกลาร์ $\tilde{\phi}$ ซึ่งหาได้จากผลลัพธ์ชั่วขณะของ flamelet เฉลี่ยถ่วงน้ำหนักกับค่า PDF จึงเขียนได้ดังนี้

$$\tilde{\phi} = \int_0^{\chi_q} \int_0^{C_{\max}} \int_0^1 \phi(Z, C, \chi_{st}) \tilde{P}(Z; \tilde{Z}, \tilde{Z}^2) \tilde{P}(C; \tilde{C}) \tilde{P}(\chi_{st}; \tilde{\chi}_{st}) dZ dC d\chi_{st} \quad (6)$$

เมื่อ χ_q คือ quenching strain rate จากสมการนี้ flamelet library ของค่าเฉลี่ยสเกลาร์ $\tilde{\phi}$ ต่าง ๆ ที่สร้างขึ้นจะเป็นฟังก์ชันกับค่า $\tilde{Z}$, $\tilde{Z}^2$, $\tilde{C}$ และ $\tilde{\chi}_{st}$ ซึ่งค่าเหล่านี้สามารถคำนวณได้จากสมการส่งถ่ายดังต่อไปนี้

สำหรับการเผาไหม้สเปรย์ mixture fraction จะไม่เป็นสเกลาร์ที่คงตัวอีกต่อไป เนื่องจากการระเหยของละอองฝอยของสเปรย์ [17, 18] ดังนั้นอิทธิพลจากการระเหยจึงต้องเพิ่มเข้าไปในสมการส่งถ่ายของ mixture fraction ดังนี้

$$\frac{\partial \tilde{p} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{p} \tilde{U}_i \tilde{Z}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\tilde{p} D_z + \frac{\mu_i}{Sc_z} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right\} + S_m \quad (7)$$

เมื่อ D คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ Sc คือ Schmidt number และ S_m คืออัตราการระเหยของละอองฝอยและ mixture fraction ในที่นี้จะนิยามตาม Bilger [19]

ส่วนค่าความแปรปรวนของ mixture fraction จะถูกใช้ในการคำนวณหารูปร่างของ PDF แบบ beta ซึ่งมีผลอย่างมากต่อการเกิดปฏิกิริยา โดยสมการส่งถ่ายสำหรับค่าความแปรปรวนของ mixture fraction นั้นแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial \tilde{p} \tilde{Z}^2}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{p} \tilde{U}_i \tilde{Z}^2}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\tilde{p} D_{\tilde{Z}^2} + \frac{\mu_i}{Sc_{\tilde{Z}^2}} \right) \frac{\partial \tilde{Z}^2}{\partial x_i} \right\} + 2 \frac{\mu_i}{Sc_{\tilde{Z}^2}} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2 - \tilde{p} C_{\tilde{Z}^2} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Z}^2 \quad (8)$$

โดยที่ค่า Schmidt number สำหรับค่าเฉลี่ยและค่าความแปรปรวนของ mixture fraction โดยทั่วไปแล้วมีค่าทั้งคู่เท่ากับ 0.9 และ $C_{\tilde{Z}}$ เท่ากับ 2.0 [20]

ส่วนสมการส่งถ่ายสำหรับ RPV มีรูปแบบดังนี้

$$\frac{\partial \tilde{p} \tilde{C}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{p} \tilde{U}_i \tilde{C}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\tilde{p} D_c + \frac{\mu_i}{Sc_c} \right) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_i} \right\} + \tilde{\omega}_{\tilde{C}} \quad (9)$$

เมื่อ $\tilde{\omega}$ คืออัตราการเกิดปฏิกิริยาของ $\tilde{C}$ ซึ่งเป็นผลรวมของอัตราการเกิดก๊าซผลิตภัณฑ์หลักดังนี้

$$\tilde{\omega}_{\tilde{C}} = \tilde{\omega}_{CO_2} + \tilde{\omega}_{CO} + \tilde{\omega}_{H_2O} + \tilde{\omega}_{H_2} \quad (10)$$

3. ระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลข

รูปร่างลักษณะของห้องเผาไหม้ จะกำหนดเป็นทรงกระบอกสมมาตร และระเบียบวิธี Favre-averaged Navier-Stokes จะถูกใช้เพื่อแก้ปัญหาของปฏิสัมพันธ์ระหว่างความปั่นป่วนและปฏิกิริยาเคมี โดยอาศัยเทคนิค finite volume ชุดสมการส่งถ่ายต่าง ๆ สำหรับทั้งสถานะก๊าซและของเหลวที่ใช้ในการแก้ปัญหาจะอยู่ในรูปของ Eulerian และการเรียงตัวของกริด staggered จะถูกใช้สำหรับความเร็วของทั้งสถานะก๊าซ และของเหลว วิธี Euler implicit temporal differencing และ hybrid upwind/central spatial differencing จะถูกใช้ในการ discretize ชุดสมการส่งถ่าย ให้อยู่ในรูปของ finite volume สำหรับแบบจำลองความปั่นป่วนจะเลือกใช้

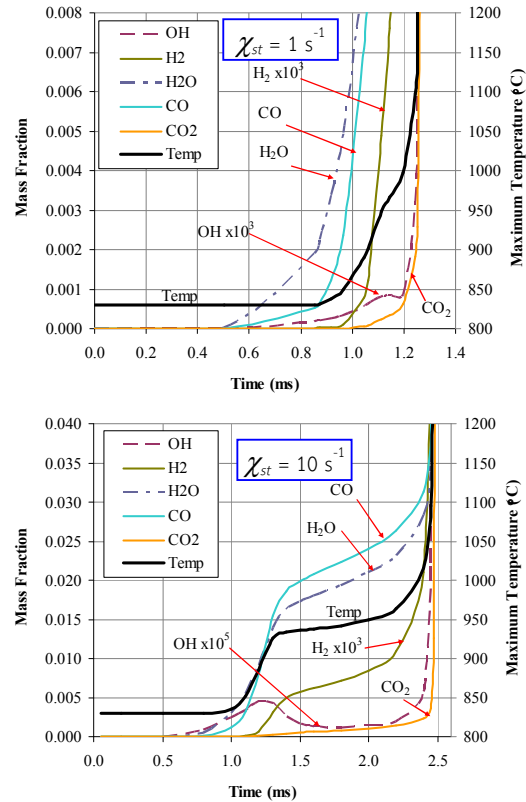
standard $k-\epsilon$ เนื่องจากต้องการเวลาการคำนวณน้อย ประกอบกับการเผาไหม้ของสเปรย์มีค่า Reynolds number ค่อนข้างสูง ส่วนอิทธิพลของการไหลใกล้ผนัง จะเลือกใช้ wall function ของ Launder และ Spalding [21] เข้ามาจัดการ สำหรับกระบวนการหาคำตอบ จะอ้างอิงกระบวนการ PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators) ของ Issa [22] โดยมีการเพิ่มสมการของเหลวเข้าไป กระบวนการ PISO นั้น เป็นการหาคำตอบแบบ non-iterative ที่มีประสิทธิภาพ โดยจะปรับค่าความดัน และความเร็วให้สอดคล้องกันโดยอาศัยเทคนิค operator splitting แล้วหาคำตอบของสมการโมเมนตัม ตามแนวทาง predictor-corrector

4. ผลลัพธ์ของการคำนวณและการวิเคราะห์

flamelet library จะต้องถูกสร้างขึ้นมาก่อน โดยในที่นี้จะใช้ FlameMaster code [23] ช่วยในการคำนวณ โดยจะใช้กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบโครงร่างของ Liu และคณะ [2] ซึ่งใช้เชื้อเพลิง n -heptane แทนดีเซล เนื่องจากมีค่าออกเทนใกล้เคียงกัน มีจำนวนส่วนประกอบเคมี 43 ชนิดและสมการเคมีที่เกี่ยวข้องทั้งสิ้น 185 สมการ โดยใน flamelet library ที่สร้างขึ้นนี้ ประกอบด้วย flamelet จำนวน 522 ชุด ใช้บันทึกข้อมูล 1,545,642 ตำแหน่งตลอดช่วงพิกัดของ $\bar{Z}$, $\bar{Z}^2$, $\bar{C}$ และ χ_{st} โดยในแต่ละตำแหน่งจะบรรจุข้อมูล ได้แก่ อุณหภูมิเปลว สัดส่วนเชิงมวลของ species ต่าง ๆ ความหนาแน่นของก๊าซผสม และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีไว้ ดังนั้นจึงมั่นใจได้ว่า ข้อมูลของตัวแปรอุณหภูมิเชิงเคมีต่าง ๆ ที่ถูกเรียกใช้งานนั้น จะครอบคลุมตลอดทุกมิติของการจุดระเบิด การเผาไหม้ และการดับลงของเปลว

เมื่อพิจารณาการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิและก๊าซผลิตภัณฑ์ในขณะเกิดการจุดระเบิดเองดังแสดงในรูปที่ 2 พบว่า ที่ χ_{st} ต่ำ ๆ เวลาหน่วงของการจุดระเบิดเองจะสั้นกว่ากรณีที่ χ_{st} สูง เนื่องมาจากอิทธิพลของการผสมกันของสารตั้งต้น แต่ที่น่าสังเกตคือ ในช่วงก่อนการจุดระเบิด ก๊าซ CO จะถูกแตกตัวออกมาเป็นจำนวนมาก ส่วนก๊าซ CO_2 จะเข้ามาแทนที่เมื่อเกิดการลุกไหม้แล้ว เนื่องจากการออกซิไดซ์ก๊าซ CO นอกจากนี้ปรากฏการณ์ของเปลวเย็น (cool flame) จะเห็นเด่นชัดเมื่อ χ_{st} สูงขึ้น โดยปรากฏการณ์นี้ พันธะย่อยที่ได้จากการสลายโมเลกุลใหญ่จะรวมตัวเข้าด้วยกันเอง จึงทำให้อุณหภูมิเพิ่มขึ้นเล็กน้อย [2] และเมื่ออุณหภูมิเพิ่มสูงขึ้นจนเพียงพอ การเกิดปฏิกิริยาก็จะรุนแรงมากขึ้นจนเกิดการลุกไหม้ต่อไป

โดยก๊าซผลิตภัณฑ์ส่วนใหญ่ที่เกิดขึ้นได้แก่ CO_2 , H_2O , CO และ H_2 ตามลำดับ



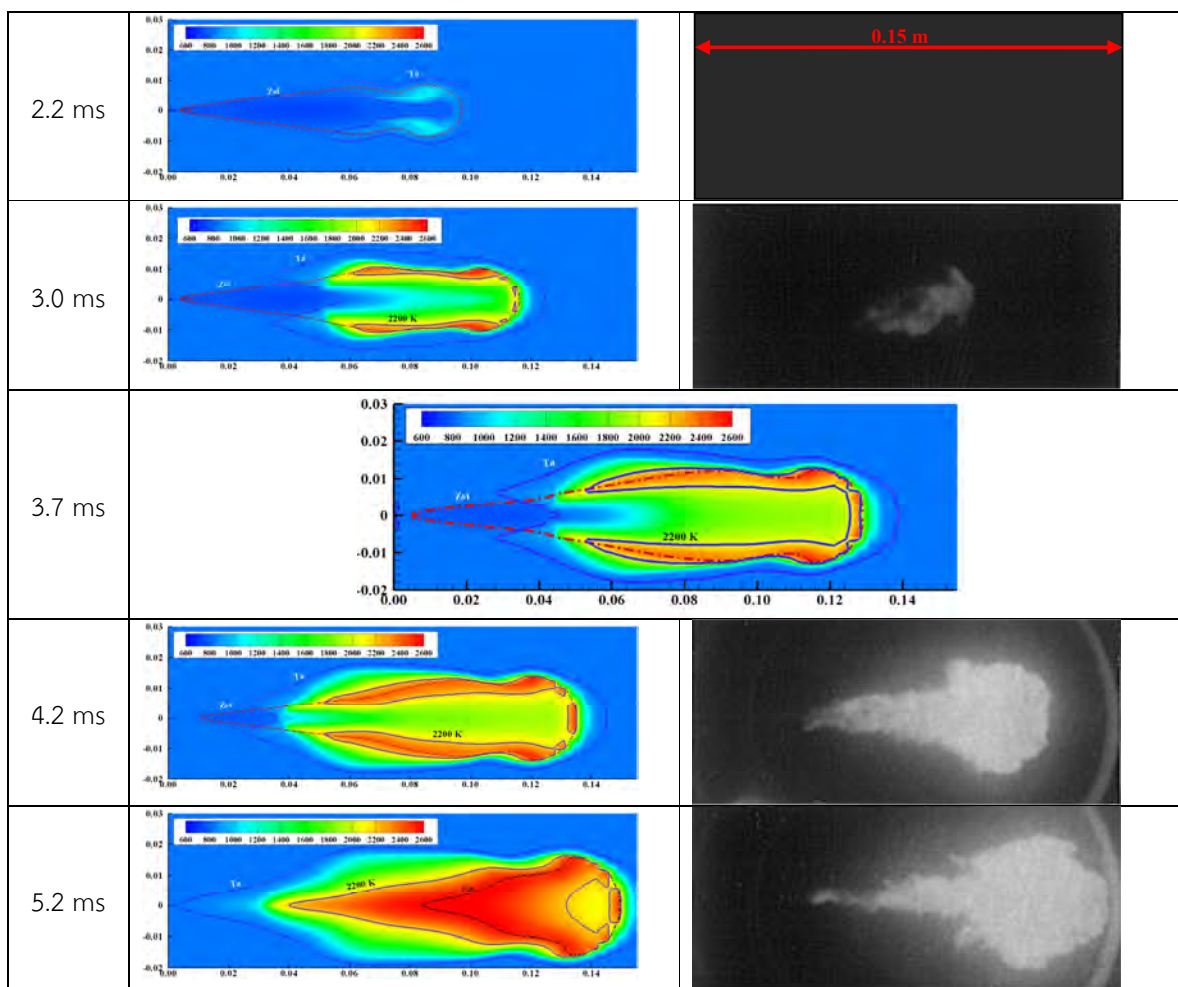
รูปที่ 2 การพัฒนาตัวของอุณหภูมิและก๊าซผลิตภัณฑ์ในขณะเกิดการจุดระเบิดเอง

เพื่อทดสอบความถูกต้องของแบบจำลอง UFM/RPV ที่พัฒนาขึ้นมา จึงได้ทำการเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [3] ดังแสดงในรูปที่ 3 โดยใช้หัวฉีดขนาด 0.18 มม. มีความดันสูงสุด 80 MPa ฉีดเข้าไปในห้องเผาไหม้ที่มีอุณหภูมิ 830 K และความดัน 27 บาร์ ปริมาณน้ำมันดีเซลที่ใช้ 28 มก. ภายในช่วงเวลา 3.8 ms ปฏิกิริยาการเผาไหม้จะเริ่มเกิดขึ้นที่บริเวณ stoichiometric contour ของสเปรย์ดังแสดงด้วยอุณหภูมิที่สูงกว่า เวลาหน่วงของการจุดระเบิดเองทำนายได้ประมาณ 2.2 ms และเกิดขึ้นในบริเวณใกล้กับส่วนหัวของสเปรย์ แต่จากผลการทดลองซึ่งนิยามการจุดระเบิดเองว่า คือช่วงเวลาที่ความดันของห้องเผาไหม้เริ่มสูงขึ้น มีค่าประมาณ 1.4 ms แต่อย่างไรก็ตาม ประกายไฟแรกที่ปรากฏในภาพถ่ายจะเริ่มเกิดขึ้นที่เวลา 2.8 ms หลังจากเกิดการจุดระเบิดแล้ว เปลวจะขยายไปยังบริเวณใกล้เคียงจนครอบคลุมผิวด้านนอกทั้งหมดของสเปรย์

ยกเว้นบริเวณใกล้หัวฉีด ซึ่งเปลวลักษณะนี้เรียกว่า เปลวลอยตัว โดยที่บริเวณด้านในของตำแหน่งการลอยตัวของเปลว อุณหภูมิจะค่อย ๆ เพิ่มขึ้นไปตามทิศทางการไหล เนื่องจากการเผาไหม้แบบ partially premixed และเป็นที่น่าสังเกตว่า อุณหภูมิเปลวสูงสุดจะเกิดขึ้นในบริเวณ stoichiometric contour เป็นไปตามหลักการของเปลว non-premixed

ที่เวลา 3.0 ms อุณหภูมิเปลวที่คำนวณได้จะมีค่าสูงกว่าผลการทดลอง ทั้งนี้เนื่องมาจาก การปรากฏของเปลวที่ล่าช้าจากการทดลองทำให้การพัฒนาตัวของเปลวช้ากว่า สำหรับระยะเปลวลอยตัว ซึ่งนิยามจากระยะจากหัวฉีดมายังอุณหภูมิอ้างอิง ในที่นี้จะกำหนดอุณหภูมิอ้างอิงนี้เท่ากับ 2,200 K ตามงานวิจัยของ [24, 25] ที่เวลา 3.7 ms ซึ่งเป็นช่วงเวลาก่อนที่จะสิ้นสุด

กระบวนการฉีดน้ำมัน ระยะเปลวลอยตัวจากแบบจำลองมีค่าประมาณ 52 มม. ส่วนระยะเปลวลอยตัวที่วัดโดยตรงจากภาพถ่ายจะให้ค่าประมาณ 48 มม. ที่เวลา 4.2 ms เนื่องเป็นช่วงเวลาที่ใกล้เคียงสุด นอกจากนี้ จากสหสัมพันธ์ของ Siebers และคณะ [26, 27] ที่ใช้ในการทำนายระยะเปลวลอยตัว ก็ให้ค่าออกมาประมาณ 40-55 มม. ซึ่งสอดคล้องกับผลการทำนายของแบบจำลองที่พัฒนาขึ้น ต่อมาที่เวลา 4.2 ms เปลวไฟที่ได้จากแบบจำลองจะมีความยาวของเปลวที่ใกล้เคียงกับภาพถ่าย แต่ขนาดของหางเปลวจากภาพถ่ายจะแคบกว่า ก่อนที่เปลวไฟจะกระทบกับผนังของห้องเผาไหม้ ที่เวลา 5.2 ms รูปร่างของเปลวไฟที่ได้จากแบบจำลอง จะใกล้เคียงกับภาพถ่าย ยกเว้นขนาดที่ยังคงเล็กกว่า จากการเปรียบเทียบข้างต้น จะเห็นได้ว่าแบบจำลอง UFM



รูปที่ 3 ผลการเปรียบเทียบการกระจายตัวของอุณหภูมิเปลวและภาพถ่ายเปลวไฟจาก [3]

ร่วมกับ RPV สามารถทำนายการจุดระเบิด และการเผาไหม้ของสเปรย์ดีเซลได้ค่อนข้างดี โดยสามารถอธิบายปรากฏการณ์โดยหลักของเปลวไฟได้อย่างครบถ้วน

5. สรุป

ในงานวิจัยนี้ ได้พัฒนาแบบจำลองการเผาไหม้ unsteady flamelet ใช้งานร่วมกับ reaction progress variable เพื่อทำนายการจุดระเบิดและการเผาไหม้ของสเปรย์สำหรับประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์ดีเซล ซึ่งผลการคำนวณจากแบบจำลองแสดงให้เห็นว่า สามารถอธิบายปรากฏการณ์การเผาไหม้ของสเปรย์ได้อย่างสมบูรณ์ เช่น การจุดระเบิดเอง การพัฒนาตัวของเปลว รวมถึงการลอยตัวของเปลว นอกจากนี้ แบบจำลองนี้ยังสามารถทำนายกระบวนการเผาไหม้ของสเปรย์ได้เป็นที่น่าพึงพอใจเมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [3] โดยรูปร่างของเปลวไฟที่ทำนายได้จะใกล้เคียงกับผลการทดลอง ยกเว้นแต่ขนาดของเปลวที่เล็กกว่า ส่วนระยะเปลวลอยตัวที่ทำนายได้จากแบบจำลองนี้ ก็สอดคล้องกับผลการทดลอง

6. กิตติกรรมประกาศ

ผู้เขียนขอขอบคุณ สำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย และมหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ ที่สนับสนุนทุนในการทำวิจัยครั้งนี้ ภายใต้งานวิจัย MRG5480198 และขอขอบคุณ Professor H. Pitsch ที่อนุเคราะห์ FlameMaster code

7. เอกสารอ้างอิง

1. Beck, J.C., 2000, Computational Modelling of Polydisperse Sprays without Segregation into Droplet Size Classes, Ph.D. Thesis, UMIST, Manchester.
2. Liu, S., Hewson, J.C., Chen, J.H., and Pitsch, H., 2004, "Effects of Strain Rate on High-Pressure Nonpremixed *n*-Heptane Autoignition in Counterflow", Combustion and Flame, Vol. 137, pp. 320-339.
3. Akiyama, H., Nishimura, H., Ibaraki, Y., and Iida, N., 1998, "Study of Diesel Spray Combustion and Ignition using High-Pressure Fuel Injection and a Micro-Hole Nozzle with a Rapid Compression Machine: Improvement of Combustion using Low Cetane Number Fuel", Society of Automotive Engineers of Japan, Vol. 19, pp. 319-327.

4. Peters, N., 1984, "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Combustion", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 10, pp. 319-339.
5. Liew, S.K., Bray, K.N.C., and Moss, J.B., 1984, "A stretched laminar flamelet model of turbulent nonpremixed combustion", Combustion and Flame, Vol. 56, pp. 199-213.
6. Drake, M.C., 1988, "Stretched laminar flamelet analysis of turbulent H_2 and $CO/H_2/N_2$ diffusion flames", Symposium (International) on Combustion, Vol. 21, pp. 1579-1589.
7. Hollmann, C. and Gutheil, E., 1998, "Flamelet-modeling of Turbulent Spray Diffusion Flames based on a Laminar Spray Flame Library", Combustion Science and Technology, Vol. 135, pp. 175-192.
8. Hossain, M., 1999, CFD Modeling of Turbulent Non-premixed Combustion, Loughborough University, UK.
9. Ferreira, J.C., 2001, "Steady and Transient Flamelet Modelling of Turbulent Non-premixed Combustion", Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 1, pp. 29-42.
10. Darabiha, N., 1992, "Transient Behavior of Laminar Counterflow Hydrogen-air Diffusion Flames with Complex Chemistry", Combustion Science and Technology, Vol. 86, pp. 163-181.
11. Egolfopoulos, F.N. and Campbell, C.S., 1995, "Unsteady Counterflowing Strained Diffusion Flames: Diffusion-limited Frequency Response", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 318, pp. 1-29.
12. Park, J. and Shin, H.D., 1997, "Experimental Investigation of the Developing Process of an Unsteady Diffusion Flame", Combustion and Flame, Vol. 110, pp. 67-77.
13. Bekdemir, C., 2008, Numerical Modeling of Diesel Spray Formation and Combustion, Eindhoven University of Technology, Netherlands.
14. Baba, Y. and Kurose, R., 2008, "Analysis and Flamelet Modelling for Spray Combustion", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 612, pp. 45-79.
15. Ihme, M. and Pitsch, H., 2008, "Prediction of Extinction and Reignition in Nonpremixed Turbulent Flames using a Flamelet/progress Variable Model 2; Application in LES of Sandia Flames D and E", Combustion and Flame, Vol. 155, pp. 90-107.
16. Sadasivuni, S.K., Malalasekera, W., and Ibrahim, S.S. Validation of Unsteady Flamelet/progress Variable Methodology

- for Non-premixed Turbulent Partially Premixed Flames. in *Proceedings of the ECM 2009 Fourth European Combustion Meeting, Vienna University of Technology, Austria*. 2009.
17. Watanabe, H., Kurose, R., Hwang, S., and Akamatsu, F., 2007, "Characteristics of Flamelet in Spray Flames Formed in a Laminar Counterflow", *Combustion and Flame*, Vol. 148, pp. 234-248.
 18. Watanabe, H., Kurose, R., Komori, S., and Pitsch, H., 2008, "Effects of Radiation on Spray Flame Characteristics and Soot Formation", *Combustion and Flame*, Vol. 152, pp. 2-13.
 19. Bilger, R.W., Stårner, S.H., and Kee, R.J., 1990, "On Reduced Mechanisms for Methane---air Combustion in Nonpremixed Flames", *Combustion and Flame*, Vol. 80, pp. 135-149.
 20. Pitsch, H., Barths, H., and Peters, N., *Three-Dimensional Modeling of NOx and Soot Formation in DI-Diesel Engines using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach*, in *SAE Technical Paper Series No. 962057* 1996.
 21. Launder, B.E. and Spalding, D.B., *Lectures in Mathematical Models of Turbulence* 1972, London: Academic Press.
 22. Issa, R.I., 1986, "Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting", *Journal of Computational Physics*, Vol. 62, pp. 40-65.
 23. Pitsch, H., *A C++ Computer Program for 0-D and 1-D Laminar Flame Calculations*, in *RWTH Aachen* 1988.
 24. Tap, F.A. and Veynante, D., 2005, "Simulation of Flame Lift-off on a Diesel Jet using a Generalized Flame Surface Density Modeling Approach", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30, pp. 919-926.
 25. Senecal, P.K., Pomraning, E., Richards, K.J., Briggs, T.E., Choi, C.Y., McDavid, R.M., and Patterson, M.A., *Multi-Dimensional Modeling of Direct-Injection Diesel Spray Liquid Length and Flame Lift-off using CFD and Parallel Detailed Chemistry*, in *SAE Technical Paper Series No. 2003-01-1043* 2003.
 26. Siebers, D.L. and Higgins, B.S., *Flame Lift-off on Direct-Injection Diesel Sprays under Quiescent Conditions*, in *SAE Technical Paper Series No. 2001-01-0530* 2001.
 27. Siebers, D.L., Higgins, B.S., and Pickett, L.M., *Flame Lift-off on Direct Injection Diesel Fuel Jets: Oxygen Concentration Effects*, in *SAE Technical Paper Series No. 2002-01-0890* 2002.