



รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการก่อตัวของ
ก๊าซกำมะถันในการเผาไหม้ถ่านหินผง

โดย ผศ.ดร.จารุวัตร เจริญสุข และคณะ

กรกฎาคม 2543

Signature

Signature



รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการก่อตัวของ
ก๊าซกำมะถันในการเผาไหม้ถ่านหินผง

โดย ผศ.ดร.จารุวัตร เจริญสุข และคณะ

วันที่	24 มี.ย. 2543
เลขที่	00291
เอกสารที่	PDF
เลขเรียกหนังสือ	41

0043

กรกฎาคม 2543

สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.)
ชั้น 14 อาคาร เอส เอ็ม ทาวเวอร์
เลขที่ 979/17-21 ถนนพหลโยธิน แขวงสามเสนใน
เขตจตุจักร กรุงเทพฯ 10400
โทร. 0298-0455 โทรสาร 0298-04 6
www.trf.or.th



Sam S

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการก่อดัวของก๊าซ กัมมันต์ในการเผาไหม้ถ่านหินผง

คณะผู้วิจัย สังกัด

- ผศ.ดร.จารุวัตร เจริญสุข ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
- นายวิภู ศรีสืบสาย โครงการภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรม คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
- นายปัญญา แดงวิไลลักษณ์ ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

สนับสนุนโดยสำนักงานกองทุนสนับสนุนงานวิจัย

ชุดโครงการวิจัยหลังปริญญาเอก

กิตติกรรมประกาศ

งานวิจัย ชิ้นนี้สามารถสำเร็จลุล่วงได้ด้วยดีด้วยความสนับสนุนจากหลายหน่วยงานตั้งแต่ต้นสังกัด คือ ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง ในการใช้อุปกรณ์ สถานที่ และเวลาราชการนอกเหนือจากงานสอน ขอขอบพระคุณ ผศ.ดร. บัณฑิต พึ่งธรรมสาร เป็นอย่างสูง และงานภารกิจอื่น ๆ

สำหรับข้อมูลที่เป็นประโยชน์ ประกอบการวิจัยและการแนะแนวทางในการดำเนินการต่าง ๆ ทั้งยัง แนะนำบุคลากรที่เกี่ยวข้องกับการทำ Desulfurization technique ของการไฟฟ้าฝ่ายผลิตแห่งประเทศไทย ซึ่งได้รับความอนุเคราะห์ข้อมูลของโรงไฟฟ้าเป็นอย่างดี

สุดท้ายนี้ใคร่ขอแสดงความขอบคุณอย่างสูงสำหรับการสนับสนุนในด้านเงินทุน จากสำนักงานสนับสนุนการวิจัย หรือ สกว. ซึ่งเป็นแรงผลักดันให้กลุ่มวิจัยสามารถดำเนินการวิจัยชิ้นนี้ให้สำเร็จลุล่วง

ผศ.ดร. จารุวัตร เจริญสุข
นาย ปัญญา แดงวิไลลักษณ์
นาย วิภู ศรีสืบสาย

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ PDF/43/2541

ชื่อโครงการ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการก่อดั้วของก๊าซกำมะถันในการเผาไหม้ถ่านหินผง
นักวิจัย

1. ผศ.ดร.จรรุวัตร เจริญสุข
2. นายวิภู ศรีสืบสาย
3. นายปัญญา แดงวิไลลักษณ์

ที่อยู่ (จดหมายอิเล็กทรอนิกส์) kcjarnuw@kmitl.ac.th

ระยะเวลาที่ทำการวิจัย 2 ปี

วัตถุประสงค์

1. เพื่อพัฒนาโปรแกรมจำลองการเกิดซัลเฟอร์ไดออกไซด์ และนำแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยผงแคลเซียมออกไซด์ มาประกอบเข้ากับโปรแกรมจำลองการเผาไหม้ การไหล การกระจายตัวของก๊าซในห้องเผาไหม้ถ่านหินผง ที่มีอยู่เดิม
2. เพื่อนำแบบจำลองทั้งหมดที่พัฒนานั้นมาเป็นเครื่องมือ ศึกษาหาแนวทางการลดการปลดปล่อยก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ จากการเผาไหม้ถ่านหินผงโดยวิธี Dry Adsorption

ระเบียบวิธีวิจัย

1. ศึกษาจลศาสตร์ของปฏิกิริยาการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ กลไกการก่อดั้วเมื่อทำปฏิกิริยากับออกซิเจน เสนอแนวคิดในการคำนวณการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ จากการเผาไหม้ถ่านหินผง เขียนโปรแกรมเพื่อจำลองการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ รวมเข้ากับโปรแกรมหลัก
2. ทำการทดสอบความแม่นยำ ของแบบจำลองของการเผาไหม้โดยเปรียบเทียบกับผลการทดลอง และทดสอบความแม่นยำ ของการปลดปล่อยสารซัลเฟอร์โดยการคำนวณสมดุลมวล
3. เขียนโปรแกรมคำนวณการเกิดขบวนการ Calcination จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่พบในงานวิจัยที่ตีพิมพ์แล้วในอดีต รวมทั้งเขียนโปรแกรมคำนวณการเกิด Sulfation ของผง CaO
4. ทำการทดสอบความแม่นยำโดยเปรียบเทียบกับผลการทดลองในงานวิจัยในอดีต
5. นำโปรแกรม Calcination และ Sulfation มารวมกับโปรแกรมหลัก โดยทำการเขียนโปรแกรมคำนวณการแลกเปลี่ยนความร้อน มวล โมเมนต์ ระหว่างอนุภาคกับก๊าซ และคำนวณทางเดินอนุภาคในการไหลแบบปั่นป่วน โดยใช้วิธีที่ใช้กับอนุภาคถ่านหิน
6. ทำการทดสอบความถูกต้องของสมดุลมวล โมเมนต์ และพลังงาน ด้วยการคำนวณกรณีพื้นฐานต่าง ๆ
7. นำโปรแกรมคำนวณที่ได้มาทดสอบผลการดูดซับซัลเฟอร์โดยแบ่งเป็นกรณีศึกษาต่างๆ ดังแสดงไว้ในปริญญานิพนธ์ของนักศึกษาของกลุ่มวิจัย (ภาคผนวก)

ผลการวิจัย

พบว่าปัจจัยสำคัญ ที่จำกัดประสิทธิภาพในการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ของห้องเผาไหม้ที่ใช้ในกรณีนี้คือ อุณหภูมิที่ต่ำและเวลาในการทำปฏิกิริยาที่สั้น การใช้แบบจำลองทำให้ทราบแนวโน้มทางเดินของผง

Abstract

Project Code : PDF43/2541

Project Title : Mathematical Model of Sulfur Oxides Formation in Pulverized Coal Combustion

Investigators :

1. Asst.Dr.Jaruwat Charoensuk
2. Mr.Wipoo Sriseubsai
3. Mr.Panya Daungviluilux

E-mail Address : kcjaruw@kmitl.ac.th

Project Period : 2 years

Objective

1. To develop a program for simulating the formation of sulfur dioxide and incorporate a mathematical model of CaO adsorption with the existing program for simulating flow, combustion and species distributions in industrial pulverized combustion
2. To use the program as a tool in an assessment of dry-adsorption technique for desulfurization of pulverized coal combustion

Methodology

1. Carry out a study on chemical kinetic of sulfur dioxide formation and reaction mechanism with oxygen. Propose a concept of calculating the formation rate in pulverized coal combustion condition. Implement the idea in the computer program.
2. Perform calculation trials to test the degree of accuracy of the new program against mass balance and validate the combustion results with published data.
3. Write the computer program to calculate the calcination and sulfation rates using the mathematical models from existing literatures
4. Perform calculation trials to test the degree of accuracy of the new program with the existing bench-top experimental data
5. Incorporate the module into the main program. Calculate mass, heat and momentum balances for the particle. Add a special routine for calculating the particle tracks in turbulent flow.
6. Perform calculation trials to test mass, momentum and heat balances. Check the data transfer between routines
7. Apply the developed model for various case studies as appeared in the appendix

แคลเซียมออกไซด์และปริมาณการดูดซับสะสมของอนุภาคที่เวลาต่าง ๆ ตั้งแต่เริ่มต้นปล่อยอนุภาคจนกระทั่งอนุภาคออกจากห้องเผาไหม้ ซึ่งเป็นสิ่งที่ไม่สามารถสังเกตและวัดได้จากการทดลอง เราสามารถวิเคราะห์และปรับแก้เงื่อนไขต่าง ๆ เพื่อให้อนุภาคมีเวลามากพอและอยู่ในช่วงที่มีอนุภาคนิวเคลียสสูงพอที่จะดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ได้สูงสุด จึงเป็นประโยชน์อย่างยิ่งในการออกแบบเผาไหม้ โดยลดจำนวนครั้งในการทดลองที่มีค่าใช้จ่ายลง

สรุป วิเคราะห์ผล และความเกี่ยวข้องกับงานวิจัยในอดีต

งานวิจัยนี้สามารถพัฒนาโปรแกรมจำลองการก่อตัวและการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ ได้เป็นผลสำเร็จ ทำการทดสอบวิธีการคำนวณกับทฤษฎีพื้นฐาน จากนั้นทำการจำลองการเผาไหม้ของถ่านหิน โดยเปรียบเทียบกับผลการทดสอบที่มีมาในอดีตของนักวิจัยท่านอื่น ความเชื่อถือได้ของการจำลองยังจำกัดอยู่ในช่วงที่อธิบายด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เท่านั้น ทักษะความรู้ที่ใช้ในงานนี้คือพื้นฐานเกี่ยวกับงานที่เคยทำมาก่อนคืองานวิจัยทางด้าน Computational Fluid Dynamic เน้นการประยุกต์ด้าน การเผาไหม้ถ่านหินในงานอุตสาหกรรม

ข้อเสนอแนะ และการนำความรู้ไปใช้ประโยชน์

ความรู้และเครื่องมือที่พัฒนาได้จากงานวิจัยนี้สามารถนำไปใช้ในขบวนการออกแบบห้องเผาไหม้หรือห้องทำปฏิกิริยาใหม่ โดยให้อนุภาคหินปูนอยู่นานและมีอนุภาคนิวเคลียสสูงพอ เมื่อเพิ่มประสิทธิภาพได้แล้วก็น่าจะเป็นอีกแนวทางหนึ่งที่จะนำไปใช้ในการลดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จากการเผาถ่านหินเพื่อผลิตกระแสไฟฟ้า เนื่องจากเป็นวิธีที่มีราคาถูก

Keywords

Finite volume method, dry-adsorption, desulfurisation, coal combustion

เนื้อหางานวิจัย

เนื้อหางานวิจัยได้กล่าวไว้ในวิทยานิพนธ์ของนักศึกษาในโครงการ ทั้ง 2 ท่าน โดยแต่ละท่านได้แบ่งการศึกษาค้นคว้าเป็น 2 ส่วนคือ นายปัญญา แดงวิไลลักษณ์ ทำการศึกษา การก่อตัวของซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ในถ่านหิน ทฤษฎีที่เกี่ยวกับ การสร้างแบบจำลอง และผลได้กล่าวไว้ในวิทยานิพนธ์ ดังแสดงไว้ในสารบัญชของวิทยานิพนธ์ นายวิภู ศรีสืบสาย ทำการศึกษาพัฒนาแบบจำลองของการเกิด ขบวนการ Calcination และ CaO adsorption รวมทั้งทำ Case study กรณีต่างๆ ผลการคำนวณได้ชี้แจง ไว้ในวิทยานิพนธ์ และสามารถสืบค้นได้ตามสารบัญชของวิทยานิพนธ์ เช่นกัน

Executive Summary

งานวิจัยที่ได้รับการสนับสนุนนี้ เป็นความพยายามที่จะจำลอง ปรากฏการณ์การดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในห้องเผาไหม้ถ่านหินผง ซึ่งในอดีตมีผู้พัฒนาแบบจำลองดังกล่าวในระดับห้องปฏิบัติการแล้ว ผู้วิจัยได้ทำการศึกษา และเลือกใช้แบบจำลองปรากฏการณ์ดังกล่าวที่สามารถนำมาสร้างและประกอบเข้ากับโปรแกรมหลักที่ใช้จำลองการเผาไหม้ถ่านหินผงที่มีอยู่ โดยใช้ทักษะและระเบียบวิธีวิจัยที่มีพื้นฐานมาจากการศึกษาในระดับปริญญาเอก มีผู้ร่วมทีมเป็นนักศึกษาระดับปริญญาโททำวิจัยและจบการศึกษาจำนวน ๒ คน เมื่อพัฒนาสำเร็จจึงนำมาทดสอบความสามารถในการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ในห้องเผาไหม้ โดยจำลองขนาดและตำแหน่งการฉีด รวมทั้งการปรับค่าอุณหภูมิของผนังห้องเผาไหม้ต่าง ๆ กัน ผลการคำนวณโดยแบบจำลองในแง่ของการเผาไหม้ การกระจายตัวของก๊าซ และการถ่ายเทความร้อนมีความสอดคล้องกับข้อมูลเชิงทดลองของนักวิจัยในอดีต ผลจากการวิจัยบ่งชี้ว่าสาเหตุที่ทำให้ประสิทธิภาพการดูดซับก๊าซต่ำคือ อนุภาคนั้นอยู่ในช่วงที่มีอุณหภูมิและเวลาไม่เหมาะสมกับการทำปฏิกิริยาดูดซับ ในอนาคตคาดว่าจะทำการหาทุนมาสร้างอุปกรณ์ทดลอง เพื่อทดสอบการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์โดยอนุภาคหินปูนเพื่อเปรียบเทียบกับผลคำนวณ จากนั้นจะใช้แบบจำลองที่พัฒนาขึ้นนี้ช่วยในการจำลองรูปแบบการทำงานของห้องทำปฏิกิริยา ก่อนสร้างจริง

ได้เคยนำส่วนของงานวิจัยออกตีพิมพ์ในวารสาร และการประชุมวิชาการระดับประเทศหลายครั้ง ในส่วนระดับนานาชาติ เคยได้รับการปฏิเสธ ๑ ครั้ง จากวารสาร FUEL เนื่องจากข้อมูลบางส่วนใน Manuscript เกิดการสูญหาย และปริมาณงานในครั้งนั้นยังน้อย ขณะนี้ กำลังเตรียม Manuscript อีกครั้ง โดยเพิ่มเนื้อหา เพื่อส่งตีพิมพ์ในวารสารวิชาการนานาชาติต่อไป

การสร้างนักวิจัยใหม่

จำนวนนักศึกษาที่จบในโครงการ ๒ คน

๑. นายปัญญา แดงวิไลลักษณ์ ขณะนี้ดำรงตำแหน่งผู้ช่วยวิจัย และรอบรรจุเป็นอาจารย์ประจำ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้า เจ้าคุณทหาร ลาดกระบัง วิทยาเขตชุมพร สำเร็จการศึกษาเมื่อวันที่ 10 มีนาคม 2543

หัวข้อวิทยานิพนธ์ " แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการเผาไหม้ของถ่านหินผง "

๒. นายวิภู ศรีสืบสาย ดำรงตำแหน่งอาจารย์ประจำ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้า เจ้าคุณทหาร ลาดกระบัง ภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหการ สำเร็จการศึกษาเมื่อวันที่ 13 กรกฎาคม 2543

หัวข้อวิทยานิพนธ์ " แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยแคลเซียมคาร์บอเนต "

Result

It is found that the combustion condition of the selected furnace is not favorable for adsorption process. This is mainly due to insufficiency in temperature level and residence time. The mathematical solution help us informed with the likely course and location of CaO particle in the combustion chamber. It also provides the calcination period and the accumulative amount of sulfation load versus time from the starting point where the particle is introduced into the chamber and throughout the calculation domain, which is not possible to monitor from an experiment. Analyzing and adjusting the operating condition that yield sufficient time and temperature level could maximize the adsorption efficiency. This help reduce number of experimental trials thus the cost involved.

Conclusion discussion and the relation with previous work

The mathematical model for sulfur dioxide formation CaCO_3 calcination and CaO sulfation has been developed and validated against some essential basic theories. Comparison against the published combustion results were carried out and found satisfactory. The degree of accuracy of the calcination and sulfation models is, however, limited within the range of validity used in establishing the mathematical models. This research work has been performed in conjunction with the research skills and knowledge gained from the previous work in the area of computational fluid dynamics, specifically applied for industrial coal combustion.

Suggestion/Further implication/implementation

A new combustor, chamber or reactor design will benefit from findings and the tool developed from this research. As the particle undergoes sufficient time and temperature level, adsorption efficiency will be improved. A low-cost dry adsorption technique may then be considered as an alternative mean of desulfurization for coal combustion system.

Key words

Finite volume method, dry-adsorption, desulfurization, coal combustion

รายละเอียดหัวหน้าโครงการ

ผศ. ดร. จารุวัตร เจริญสุข

ภาควิชา วิศวกรรมเครื่องกล

คณะ วิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

Tel. 3269987 Ext. 112 Fax 3269053

E-mail kcjamuw@kmitl.ac.th

**MATHEMATICAL MODEL OF SULFUR OXIDE FORMATION
IN PULVERIZED COAL COMBUSTION**

PANYA DAUNGVILUILUX

**A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF
MASTER OF ENGINEERING IN MECHANICAL ENGINEERING
SCHOOL OF GRADUATE STUDIES
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG**

2000

ISBN 974-622-681-9

COPYRIGHT 2000

SCHOOL OF GRADUTE STUDIES

KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

บัณฑิตวิทยาลัย
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ใบรับรองวิทยานิพนธ์

หัวข้อวิทยานิพนธ์ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการ
เผาไหม้ของถ่านหินผง
MATHEMATICAL MODEL OF SULFUR OXIDE FORMATION IN
PULVERIZED COAL COMBUSTION

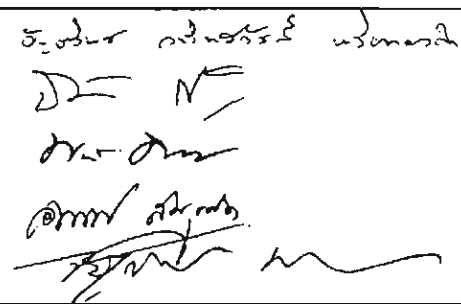
ชื่อนักศึกษา นายปัญญา แดงวิไลลักษณ์

รหัสประจำตัว 40062006

ปริญญา วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชา วิศวกรรมเครื่องกล

อาจารย์ผู้ควบคุมวิทยานิพนธ์ ดร.จารุวัตร เจริญสุข

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์		ลายมือชื่อ
ผศ.ดร.อัญชลีพร	วาริตสวัสดิ์ หล่อทองคำ	
ผศ.ดร.ปิติเชต	สุรักษา	
ผศ.ดร.พงษ์เจต	พรหมวงศ์	
รศ.อัครเดช	สินธุภัก	
ดร.จารุวัตร	เจริญสุข	

วัน/เดือน/ปี ที่สอบ 10 มกราคม 2543 เวลา 12.00 - 13.00 น.

สถานที่สอบ ณ ห้องสอบวิทยานิพนธ์ คณะวิศวกรรมศาสตร์ ตึก 12 ชั้น 4 ห้อง (E12-403)

บัณฑิตวิทยาลัยรับรองแล้ว

(รศ.ดร.มนัส สังวรศิลป์)

คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

วันที่.....10.....เดือน.....พ.ค.....พ.ศ.....๒๕๔๓.....

หัวข้อวิทยานิพนธ์	แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการเผาไหม้ของถ่านหินผง
นักศึกษา	นาย ปิณญา แดงวิไลลักษณ์
รหัสประจำตัว	40062006
ปริญญา	วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชา	วิศวกรรมเครื่องกล
พ.ศ.	2543
อาจารย์ผู้คุมวิทยานิพนธ์	ดร. จารุวัตร เจริญสุข

บทคัดย่อ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ เสนอการศึกษาเรื่องการก่อตัวและการกระจายตัวของออกไซด์ของกำมะถัน ซึ่งเกิดจากการเผาไหม้ถ่านหินผง และสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ โดยใช้วิธี Finite volume โดยพิจารณาของไหลให้เป็นปริมาตรเล็ก ๆ และผสมผสานกับแบบจำลองการสั่นดาปของถ่านหินผงที่ได้พัฒนาแล้ว (FAFNIR) ของ Imperial College of Science, Technology and Medicine (ICSTM) ซึ่งพิจารณาสมการการถ่ายเทเอนทัลปี มวล โมเมนตัม และการเผาไหม้ของถ่านหินผง ลักษณะของห้องเผาไหม้เป็นทรงกระบอกแนวตั้งและเปลวไฟติดลงด้านล่าง มีเส้นผ่านศูนย์กลางภายใน 0.6 เมตร และความยาวรวม 3.0 เมตร เส้นผ่านศูนย์กลางของหัวเผา (d) 0.056 เมตร วัตถุประสงค์ของการศึกษาคือเพื่อเป็นแนวทางในการศึกษาการลดปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ภายในห้องเผาไหม้ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ใช้สมมุติฐานที่ว่ากำมะถันที่ปล่อยออกมาจากถ่านหินในช่วง Devolatilization จำกัดเฉพาะ Organic sulfur ได้รวมตัวกับออกซิเจน ก่อให้เกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ทั้งหมด ปฏิกริยาดังกล่าวเป็นแบบ Fast kinetic reaction ดังนั้นการสั่นดาปจึงถูกควบคุมโดยการผสมแบบปั่นป่วน ผลการศึกษาพบว่าความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์มีปริมาณสะสมที่สูงในช่วง 0.03 – 0.15 เมตร จากทางออกของหัวเผา ผลการเปรียบเทียบระหว่างผลทางทฤษฎีกับผลที่คำนวณมวลรวมทั้งหมดของกำมะถันภายในแบบจำลองมีค่าความผิดพลาดเท่ากับ 5.35% และพิจารณาความแตกต่างของมวลกำมะถันที่เกิดขึ้นในแต่ละหน้าตัดของห้องเผาไหม้ โดยค่าที่คำนวณได้มีความผิดพลาดสูงสุดประมาณ 5% จากผลการจำลองทำให้ทราบว่าก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์มีความเข้มข้นสูงในบริเวณใกล้หัวเผา ซึ่งเป็นบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงเช่นกัน บริเวณดังกล่าวถูกห่อหุ้มด้วยกระแสอากาศที่ปล่อยออกจากหัวเผามีความเข้มข้นของออกซิเจนสูงและอุณหภูมิต่ำ ข้อมูลดังกล่าวจะเป็นประโยชน์ในการศึกษาเพื่อลดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในห้องเผาไหม้ของถ่านหินผงต่อไป

Thesis Title	Mathematical Model of Sulfur Oxide Formation in Pulverized Coal Combustion
Student	Mr. Panya Daungviluilux
Student ID.	40062006
Degree	Master of Engineering
Programme	Mechanical Engineering
Year	2000
Thesis Advisor	Dr. Jarruwat Charoensuk

ABSTRACT

This thesis presents a study on the formation and distribution of sulfur oxide in a pulverized coal combustor. Mathematical model is formulated and the numerical finite volume method is employed. The model is incorporated with the existing model involving enthalpy, mass and momentum transfer equations and the combustion of pulverized coal developed previously at Imperial College of Science, Technology and Medicine (ICSTM). The combustion chamber is vertically down-fire type cylindrical shape with 0.6 m. in inside diameter, 3.0 m. in length and equipped with the burner diameter of 0.056 m. This simulation assumes that the organic sulfur released from coal during the devolatilization process is completely oxidized to sulfur dioxide. Fast kinetic is assumed for the reaction rate of sulfur, thus the oxidation is controlled by turbulent mixing. The results show that high concentration of sulfur dioxide is within 0.03 – 0.15 m. from the burner exit. An overall error of total mass of sulfur dioxide from the simulation is 5.35% normalized with the total sulfur throughput of the furnace. From the simulation results it is shown that high sulfur concentration is found in the high temperature region near the burner. This region was surrounded with low temperature oxygen-rich gas from the secondary jet. This study is an informative data for further study about the reduction of sulfur dioxide emission from the pulverized coal combustor.

กิตติกรรมประกาศ

การทำแบบจำลองทางคณิตศาสตร์และวิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลุล่วงอย่างดีก็ด้วยคำแนะนำ คำปรึกษาและความกรุณาจาก ดร. จารุวัตร เจริญสุข อาจารย์ผู้ควบคุมวิทยานิพนธ์ ผู้วิจัยรู้สึกซาบซึ้งในความอนุเคราะห์และขอกราบขอบพระคุณเป็นอย่างสูง

ขอขอบพระคุณ รศ.ดร. บัณฑิต พึ่งธรรมสาร สถาบันพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารพระนครเหนือ ที่กรุณาให้คำแนะนำและช่วยเหลือข้อมูลเกี่ยวกับเอกสารที่นำมาใช้กับงานวิจัยชิ้นนี้

ขอขอบพระคุณ ผศ.ดร. พงษ์เจต พรหมวงศ์ ที่กรุณาให้คำแนะนำเกี่ยวกับงานวิจัยรวมทั้งการเขียนรูปที่ได้จากแบบจำลอง และขอขอบพระคุณคณาจารย์ทุกท่าน ที่ได้ประสิทธิ์ประสาทวิชาความรู้

ขอขอบคุณ สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) ที่ให้ทุนสนับสนุนในการทำงานวิจัยชิ้นนี้

ขอขอบคุณ นาย นิวัฒน์ นาคะโยธินสกุล นาย ภาสกร เวสสะโกศล นาย วิภู ศรีสืบสาย และ พี่ ๆ น้อง ๆ ปริญญาโทและปริญญาตรีที่ช่วยในงานแปลเอกสาร หาข้อมูลและเป็นกำลังใจในการทำวิทยานิพนธ์ฉบับนี้

สุดท้ายนี้ขอกราบขอบพระคุณ บิดา และ มารดา เป็นอย่างสูง ที่เฝ้าเลี้ยงดู อบรมสั่งสอนและเป็นกำลังใจในการทำวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ตั้งแต่เริ่มต้นจนสำเร็จ

ถ้าปราศจากบุคคลเหล่านี้ วิทยานิพนธ์ฉบับนี้คงไม่สามารถสำเร็จลุล่วงได้ด้วยดี คุณค่าและประโยชน์อันพึงมีจากวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ผู้วิจัยขอบอบแด่ผู้มีพระคุณทุกท่าน ขออำนาจคุณพระศรีรัตนตรัยอำนวยการความสุขสวัสดิ์จึงมีแต่ทุกท่าน

ปัญญา แดงวิไลลักษณ์

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	I
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	II
กิตติกรรมประกาศ.....	III
สารบัญ.....	IV
สารบัญตาราง.....	VI
สารบัญรูป.....	VII
รายการคำย่อและสัญลักษณ์.....	IX
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของการศึกษา.....	1
1.3 สมมติฐานของการศึกษา.....	2
1.4 ทฤษฎีหรือแนวความคิดที่ใช้ในการวิจัย.....	2
1.5 ขอบเขตการวิจัย.....	2
1.6 ขั้นตอนการศึกษา.....	2
1.7 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	3
บทที่ 2 วรรณกรรมปริทรรศน์.....	4
2.1 ถ่านหิน.....	4
2.2 การวิเคราะห์ถ่านหิน.....	5
2.3 การเผาไหม้ถ่านหิน.....	7
2.4 การเผาไหม้ของซาร์.....	8
2.5 กำมะถันภายในถ่านหินระหว่างการเผาไหม้.....	9
2.6 ปฏิกริยาของกำมะถันกับออกซิเจนระหว่างการเผาไหม้.....	10
2.7 คุณสมบัติของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์.....	13
2.8 ผลกระทบของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์.....	14
2.9 มาตรฐานการปล่อยก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์.....	15
2.10 การควบคุมการปล่อยก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์.....	15

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

บทที่ 3 สมการพื้นฐานของแบบจำลอง.....	17
3.1 บทนำ.....	17
3.2 แบบจำลองของก๊าซ.....	17
3.3 แบบจำลองของอนุภาค.....	26
3.4 แบบจำลองการแผ่รังสีความร้อน.....	33
3.5 แบบจำลองของออกไซด์ของกำมะถัน.....	34
บทที่ 4 การประยุกต์วิธี Finite volume กับการถ่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ภายใน ห้องเผาไหม้ของด้านหินผง.....	36
4.1 การประยุกต์ใช้วิธี Finite volume.....	36
4.2 โครงสร้างของโปรแกรมโดยทั่วไป.....	39
4.3 การแก้เมทริกซ์โดยวิธี TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm)	42
4.4 โครงสร้างโปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณ.....	45
บทที่ 5 การจำลองการเผาไหม้ของเตาเผาที่ใช้ด้านหินผง.....	49
5.1 บทนำ.....	49
5.2 ลักษณะห้องเผาไหม้.....	49
5.3 ผลการคำนวณและการวิเคราะห์ผล.....	52
บทที่ 6 สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ.....	63
6.1 สรุปผลงานวิจัย.....	63
6.2 ข้อเสนอแนะ.....	63
เอกสารอ้างอิง.....	64
ภาคผนวก.....	67
ภาคผนวก ก. มาตรฐานอากาศเสียจากโรงงานไฟฟ้า (ใหม่) ภายในประเทศ.....	68
ภาคผนวก ข. ผลการคำนวณที่ได้จากทฤษฎีเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากแบบจำลอง.....	69
ภาคผนวก ค. ผลงานทางวิชาการเกี่ยวกับงานวิทยานิพนธ์ที่ได้รับการตีพิมพ์.....	72
ประวัติผู้เขียน.....	80

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
2.1 คุณสมบัติทางกายภาพและเทอร์โมไดนามิกส์ของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์.....	13
3.1 ค่าคงที่ของแบบจำลองสำหรับแบบจำลองของ K-e	21
5.1 แสดงคุณสมบัติของถ่านหิน.....	51
5.2 แสดงเงื่อนไขการทำงานของเขา.....	52
5.3 แสดงพารามิเตอร์สำคัญที่ใช้โดยแบบจำลองการเผาไหม้ถ่านหินผง.....	52
ผ.ก.1 แสดงมาตรฐานอากาศเสียจากโรงงานไฟฟ้า (ใหม่) ภายในประเทศ.....	68
ผ.ข.1 แสดงอัตราส่วนการเกิดปฏิกิริยาของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์	69

สารบัญรูป

รูปที่	หน้า
2.1 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนของสารองค์ประกอบในกระบวนการกลายเป็นถ่านหิน.....	5
2.2 การเผาไหม้ของถ่านหินผง.....	7
2.3 แบบจำลองการเผาไหม้ของซาร์.....	8
2.4 แสดงถึงปริมาณการเกิดกำมะถันออกไซด์ของสารประกอบ $H_2S-O_2-N_2$ ภายในห้องเผาไหม้.....	10
2.5 การเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากเชื้อเพลิงอย่างง่ายที่มีกำมะถันเป็นส่วนประกอบ.....	11
2.6 การเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของสารประกอบ $H_2S-O_2-N_2$ ภายในห้องเผาไหม้ สารประกอบเริ่มต้นมี O_2 6.06 % N_2 73.5% อัตราการไหล 40.3 ซม. ³ /วินาที.....	12
2.7 การเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นที่ตำแหน่งต่าง ๆ จาก Flame holder.....	12
3.1 การกระจายตัวของอนุภาคโดยใช้วิธี Lagrangian ผ่านเซลล์.....	27
3.2 การเกิดออกไซด์ของกำมะถันของการเผาไหม้สารระเหย.....	34
4.1 เซลล์ของสเกลาร์และเวกเตอร์ในระบบ Staggered grid	36
4.2 สนามความดันที่เกิด Checker-board.....	37
4.3 การถ่ายเท 1 มิติ ของฟลักซ์ผ่านขอบเขตระหว่างตำแหน่ง I และ P.....	38
4.4 รูปร่าง Quadratic function ใช้ใน Quick scheme.....	41
4.5 อธิบายโครงสร้าง PISO algorithm.....	46
4.6 อธิบายโครงสร้างของโปรแกรมหลักที่ใช้คำนวณการเผาไหม้ของถ่านหินผง.....	47
4.7 อธิบายโครงสร้างของ Subroutine ที่คำนวณหาค่าปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์.....	48
5.1 โครงสร้างส่วนบนของเตาเผา.....	49
5.2 โครงสร้างภายนอกของเตาเผาที่ ICSTM.....	50
5.3 โครงสร้างของหัวเผาในห้องเผาไหม้.....	51
5.4 เวกเตอร์ความเร็วของก๊าซที่บริเวณใกล้หัวเผา.....	54
5.5 เส้นทางเดินเฉลี่ยของอนุภาคถ่านหินผงที่บริเวณใกล้หัวเผา.....	54
5.6 การกระจายตัวของความเข้มข้นของสารระเหย % ($V_{volatile}/V_{mix}$) โดยมวล ที่บริเวณ ใกล้หัวเผา.....	55
5.7 การกระจายตัวของความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ % (V_{SO_2}/V_{mix}) โดยมวลที่ บริเวณใกล้หัวเผา.....	55

สารบัญรูป (ต่อ)

รูปที่	หน้า
5.8 การกระจายตัวของความเข้มข้นของก๊าซออกซิเจน % (V_{O_2} / V_{mix}) โดยมวลที่บริเวณ ใกล้หัวเผา.....	56
5.9 การกระจายตัวของอุณหภูมิ ($^{\circ}C$) ที่บริเวณใกล้หัวเผา.....	56
5.10 เปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองของการกระจายตัวของก๊าซออกซิเจน.....	59
5.11 เปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองของการกระจายตัวของอุณหภูมิ ($^{\circ}C$).....	60
5.12 ผลการคำนวณของการกระจายตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์	61
ผ.ข. 1 วิธีการตรวจสอบ Mass balance ของทุก ๆ หน้าตัดของห้องเผาไหม้.....	70

รายการคำย่อและสัญลักษณ์

A	พื้นที่หน้าตัด
A_p	พื้นที่หน้าตัดของอนุภาค
$A_{E,P,W}$	ตัวแปร ไร้มิติที่ตำแหน่ง E, P, W ตามลำดับ
$ACOM$	ค่าคงที่ที่ได้จากการทดลอง
$BCOM$	ค่าคงที่ที่ได้จากการทดลอง
C	คาร์บอนอะตอม
C_D	สัมประสิทธิ์แรงฉุด (Drag coefficient)
c_p	ค่าความจุความร้อนจำเพาะของอนุภาค
D	สัมประสิทธิ์การแพร่
D_C	สัมประสิทธิ์การแพร่สำหรับการเผาไหม้ของซาร์
D_e	สัมประสิทธิ์การแพร่ที่ตำแหน่ง e
D_w	สัมประสิทธิ์การแพร่ที่ตำแหน่ง w
D_0	สัมประสิทธิ์การแพร่ที่ตำแหน่งผิวของซาร์
d	เส้นผ่านศูนย์กลางของหัวเผา
d_p	เส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค
E	พลังงานการกระตุ้นของปฏิกิริยา
E_{val}	พลังงานการกระตุ้นของถ่านหิน
F_d	แรงฉุด
F_e	แรงกระทำที่ตำแหน่ง e
F_i	แรงกระทำภายนอกที่ตำแหน่งต่าง ๆ
F_w	แรงกระทำที่ตำแหน่ง w
f	Overall in-scattering factor
g	แรงโน้มถ่วงของโลก
g_e	ฟลักซ์ของการพาและการกระจายที่ตำแหน่ง e
g_i	ฟลักซ์ของการพาและการกระจายทั้งหมด
g_w	ฟลักซ์ของการพาและการกระจายที่ตำแหน่ง w
H	ไฮโดรเจนอะตอม
H_C	ความร้อนของคาร์บอนภายในซาร์
h	สัมประสิทธิ์การพาความร้อน

รายการคำย่อและสัญลักษณ์ (ต่อ)

K	พลังงานจลน์ของความปั่นป่วน
K_A	ค่าคงที่ของ Arrhenius
K_C	สัมประสิทธิ์ของอัตราปฏิกิริยาเคมีทั้งหมด
K_d	สัมประสิทธิ์ของอัตราการแพร่ของก๊าซออกซิเจน
K_e	สัมประสิทธิ์ของ Equivalent absorption
K_g	สัมประสิทธิ์การควบกลืนของก๊าซ
K_p	การสะสมของพื้นที่ภาพฉายของอนุภาคต่อหน่วยปริมาตรก๊าซ
K_1	สัมประสิทธิ์ของอัตราปฏิกิริยาเคมี
K_0	Frequency factor สำหรับ ปฏิกิริยาของซาร์
k_0	ค่าคงที่ของปฏิกิริยาสำหรับ Devolatilization
k_g	ค่าการนำความร้อนของก๊าซ
L_v	ความจุความร้อนจำเพาะของการเปลี่ยนสถานะ
M	น้ำหนักของโมเลกุล
m	น้ำหนัก
m_f	มวลของอนุภาค
O	ออกซิเจนอะตอม
P_e	Peclet number
P_{o_2}	ความดันย่อยของออกซิเจน
P_0	ความดันบรรยากาศ
Pr	Prandtl number
p	ความดัน
Q	ค่าความร้อนทั้งหมด
$\dot{Q}$	การถ่ายเทความร้อนระหว่างอนุภาคและก๊าซ
$\dot{q}_b$	ฟลักซ์ของความร้อน
$\dot{q}_w$	ฟลักซ์ของความร้อนที่ผ่านผนัง
R_d	เส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยของอนุภาค
Re	ค่า Reynolds number
Re_p	ค่า Reynolds number ของอนุภาค
R_m	อัตราเชิงปริมาตรของ Mass efflux

รายการคำย่อและสัญลักษณ์ (ต่อ)

R_{SO_2}	อัตราการเกิดปฏิกิริยาของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์
R_u	ค่าคงที่สากลของก๊าซ
R_v	อัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหย
r	พิกัดตามแนวรัศมี
r_p	ระยะทางจากแกนสมมาตรของอนุภาค
$\bar{r}_w$	การสะท้อนรังสีเฉลี่ยที่ผนัง
S	กัมมะดินอะตอม
S_m	อัตราการสะสมของมวลต่อหน่วยปริมาตร
$\bar{S}_m$	Source term ของการถ่ายโอนมวลสารสู่ก๊าซจากอนุภาคของแข็ง
$\bar{S}_{m,u}, \bar{S}_{m,v}, \bar{S}_{m,w}$	การถ่ายโอนของโมเมนตัมที่เกิดขึ้นในปริมาตรควบคุมเนื่องจากมวลจากอนุภาคของแข็งทิศทางด้านแนวแกน ตามแนวรัศมี และตามแนวเส้นรอบวง ตามลำดับ
S_i	Stoichiometric ratio ของสารระเหย
$S_{v,i}$	อัตราการเปลี่ยนแปลงของโมเมนตัมต่อหน่วยปริมาตร
T	อุณหภูมิสัมบูรณ์
T_g	อุณหภูมิสัมบูรณ์ของก๊าซ
T_p	อุณหภูมิสัมบูรณ์ของอนุภาค
T_R	อุณหภูมิของการแผ่รังสี
T_0	อุณหภูมิที่ตำแหน่งผิวของซาร์
t	เวลา
$\bar{\tau}_{ij}$	Viscous stresses
$\bar{U}_g$	ค่าความเร็วที่เวลาเฉลี่ยของก๊าซ
$\bar{U}_p$	ค่าความเร็วที่เวลาเฉลี่ยของอนุภาค
u	ความเร็วตามแนวแกน
u_{disp}	ความเร็วในการแพร่ของอนุภาคทิศตามแนวแกน
u_r	สัดส่วนของความเร็ว
V	ปริมาณสะสมของสารระเหยที่ปล่อยออกมา
V^*	ปริมาณทั้งหมดของสารระเหยภายในด้านหิน
v	ความเร็วตามแนวรัศมี
v_{disp}	ความเร็วในการแพร่ของอนุภาคทิศตามแนวรัศมี

รายการคำย่อและสัญลักษณ์ (ต่อ)

w	พิกัดตามแนวเส้นรอบวง
X	สัดส่วนโดยโมล
x_s	สัดส่วนโดยมวลของกำมะถัน
x_{ub}	สัดส่วนที่ไม่ได้เผาไหม้ของมวลดั้งเดิมของซาร์
y	ระยะห่างจากผนัง
y^+	ตัวแปรไร้มิติของการไหลใกล้ผนัง
z	พิกัดตามแนวแกน
$[\]$	เทอมของมิติ
Σ	ผลของการบวก
α	สัมประสิทธิ์แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเร่งของอนุภาคกับความเร็วสัมพัทธ์
δ_{ij}	Kronecker delta
ε	อัตราการสลายตัวของความปั่นป่วน
$\bar{\varepsilon}_p$	การแผ่รังสีเฉลี่ยของอนุภาค
$\bar{\varepsilon}_w$	การแผ่รังสีเฉลี่ยที่ผนัง
γ_{vol}	อัตราของ Mass efflux เกิดขึ้นจาก Devolatilization ภายในปริมาตรควบคุม
Γ	สัมประสิทธิ์การนำความร้อนหรือสัมประสิทธิ์พาความร้อน
φ	ตัวแปรของกลไกสำหรับปฏิกิริยาของซาร์
κ	ค่าคงที่ของ Von Karman
μ	ความหนืดสัมบูรณ์
μ_{ed}	Eddy viscosity
μ_{eff}	Effective viscosity
μ_l	Laminar viscosity
μ_t	Turbulent viscosity
ρ	ความหนาแน่นของก๊าซ
ρ_p	ความหนาแน่นของของอนุภาค
η	สัดส่วนของความร้อนที่เข้าสู่อนุภาค
σ	ค่าคงที่ของ Stefan-Boltzman
$\sigma_{h,t}$	ค่า Prandtl number ของการไหลแบบปั่นป่วน
τ	ความเค้นเฉือน

รายการคำย่อและสัญลักษณ์ (ต่อ)

τ_{ij}	Reynolds stresses
τ_w	ความเค้นเฉือนที่ผนัง
ϕ	ค่าคุณสมบัติของการไหล
ϕ'	ค่าคุณสมบัติของการไหลที่มีการแกว่งไปมา
$\bar{\phi}$	ค่าเฉลี่ยของคุณสมบัติของการไหล
ω	Solid angle
ASTM	American Society for Testing and Materials
CFD	Computational Fluid Dynamics
ICSTM	Imperial College of Science, Technology and Medicine
PISO	Pressure Implicit Split Operator
PSICT	Partical Source In Cell Techniques
SAO	Single Annular Orifice
TDMA	Tri-Diagonal Matrix Algorithm

บทที่ 1

บทนำ

ความก้าวหน้าทางด้านอุตสาหกรรมเป็นผลให้มีการใช้พลังงานเพิ่มมากขึ้น ถ่านหินเป็นแหล่งพลังงานชนิดหนึ่งที่มีราคาถูกกว่าน้ำมัน และมีปริมาณสำรองมากกว่าจึงสามารถนำไปใช้ในอุตสาหกรรมอย่างกว้างขวาง เช่นใช้เป็นเชื้อเพลิงผลิตกระแสไฟฟ้า เป็นต้นกำเนิดความร้อนในอุตสาหกรรม และในกิจกรรมอื่น ๆ อีกหลายอย่าง กลุ่มประเทศที่พัฒนาแล้วจะมีการใช้ถ่านหินในอัตราเพิ่มโดยเฉลี่ย 1.6 เปอร์เซ็นต์/ปี ส่วนประเทศในโลกที่สามจะมีการใช้ถ่านหินเพิ่มในอัตราไม่เท่ากัน โดยในทวีปเอเชียจะมีการขยายตัวของการใช้อย่างมาก คาดว่าในปี พ.ศ. 2548 ประเทศจีนจะใช้ถ่านหินเพิ่มขึ้นเกือบเป็น 2 เท่าของการใช้ในปัจจุบัน [1] การนำถ่านหินมาใช้ทดแทนพลังงานจากน้ำมันมีปัญหาจากกำมะถันซึ่งจะก่อให้เกิดมลพิษ โดยกำมะถันซึ่งเป็นองค์ประกอบหนึ่งของถ่านหินจะทำปฏิกิริยากับออกซิเจนในอากาศเกิดเป็นก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (SO_2) ซึ่งเป็นก๊าซที่ก่อให้เกิดอันตรายต่อสุขภาพและสิ่งแวดล้อม และจะก่อให้เกิดฝนกรด จึงมีความจำเป็นต้องกำจัดกำมะถันออกจากถ่านหิน ซึ่งจะต้องเสียค่าใช้จ่ายสูง

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

ออกไซด์ของกำมะถันที่ปล่อยออกมาจากการเผาถ่านหิน ซึ่งมีปริมาณกำมะถันสูงในโรงไฟฟ้า นับเป็นปัญหาทางสิ่งแวดล้อมที่สำคัญ ดังเช่นกรณีของโรงไฟฟ้าแม่เมาะ [2] ความสามารถในการคาดคะเนปริมาณออกไซด์ของกำมะถันจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ จะช่วยแก้ปัญหาได้มากทั้งในขั้นตอนของการออกแบบอุปกรณ์ การปฏิบัติการ การควบคุมมลพิษให้ได้ตามข้อกำหนดมาตรฐานทางราชการว่าด้วยการปล่อยออกไซด์ของกำมะถัน ปัจจุบันเครื่องมือการคาดคะเนในรูปแบบของการคำนวณเชิงตัวเลข (Numerical solution) ได้มีการพัฒนาอย่างมากและได้รับการยอมรับมากขึ้นเรื่อย ๆ อย่างไรก็ตามเนื่องจากความซับซ้อนของปัญหา โดยเฉพาะในกรณีของการเผาถ่านหินผง (Pulverized coal) นั้น แบบจำลองที่ใช้ในการคาดคะเนนั้นยังต้องมีการพัฒนาเพื่อเพิ่มความแม่นยำและความแม่นยำอีกมาก ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงขอเสนอการจำลองการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ผสมผสานกับแบบจำลองการสันดาปของถ่านหินผงที่ได้พัฒนาไว้แล้ว [3]

1.2 วัตถุประสงค์ของการศึกษา

1. ศึกษาการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์
2. พัฒนาแบบจำลองการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของกำมะถันในสภาวะการเผาไหม้ของถ่านหินผง

1.3 สมมติฐานของการศึกษา

1. กัมมะถันที่ทำปฏิกิริยาในห้องเผาไหม้จำกัดเฉพาะ Organic sulfur และถูกปล่อยออกมาจากถ่านหินในช่วง Devolatilization ทั้งหมดผสมกับอากาศอย่างสมบูรณ์ภายในห้องเผาไหม้
2. กัมมะถันภายในสารระเหย (Volatile) จะรวมตัวกับออกซิเจนก่อให้เกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ทั้งหมด
3. ปฏิกิริยาของกัมมะถันกับออกซิเจนเป็นแบบ Fast kinetic reaction ดังนั้นกัมมะถันรวมตัวกับออกซิเจนด้วยอัตราการรวมตัวที่สัมพันธ์กับอัตราการกระจายตัวของ Turbulent eddy

1.4 ทฤษฎีหรือแนวความคิดที่ใช้ในการวิจัย

1. Kinetic rate ของปฏิกิริยาที่กัมมะถันรวมกับอากาศสูงกว่า อัตราการผสม (Mixing rate) ของ Turbulent eddy [4]
2. ก๊าซซัลเฟอร์มอนอกไซด์ (SO) ที่เกิดขึ้นในห้องเผาไหม้มีสถานะไม่เสถียรและทำปฏิกิริยากับออกซิเจนอย่างรวดเร็ว [5]
3. มีก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (SO₂) เกิดขึ้นเพียงเล็กน้อย [5]

1.5 ขอบเขตการวิจัย

สร้างแบบจำลองการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ผสมผสานกับแบบจำลองการสันดาปของถ่านหินหินที่ได้พัฒนาแล้ว (FAFNIR) โดย Imperial College of Science, Technology and Medicine (ICSTM)

1.6 ขั้นตอนการศึกษา

- 1.6.1 ศึกษากลไกและจลนพลศาสตร์ (Kinetics) ของปฏิกิริยาที่นำไปสู่การเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ภายใต้ภาวะการเผาไหม้ของถ่านหินผง
- 1.6.2 นำข้อมูลที่ได้มาสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์และประกอบเข้ากับแบบจำลองรวมซึ่งถูกพัฒนาขึ้นมาสำหรับการเผาไหม้ของถ่านหินผงพร้อมทั้งเขียน โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่จำเป็น
- 1.6.3 ทดสอบและแก้ไขแบบจำลองที่สร้างขึ้น โดยเปรียบเทียบผลกับข้อมูลที่ได้จากการวัดของผลงานที่มีผู้อื่นทำไว้แล้ว [3]

1.7 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

สามารถทำนายการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ เพื่อเป็นแนวทางในการศึกษาการลดปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ภายในห้องเผาไหม้ของถ่านหินผง

บทที่ 2

วรรณกรรมปริทรรศน์

2.1 ถ่านหิน [1]

ถ่านหิน (Coal) มีสถานะเป็นของแข็ง ไม่มีรูปผลึกที่แน่นอน โดยทั่วไปมีสีเข้มตั้งแต่สีน้ำตาลถึงสีดำสนิท ประกอบด้วย คาร์บอน สารระเหย ความชื้น และแร่ธาตุต่าง ๆ ในปริมาณน้อย ถ่านหินเป็นทรัพยากรธรรมชาติที่มีคุณค่ามากเพราะเป็นแหล่งพลังงานที่สำคัญ และสามารถนำมาใช้ให้เกิดประโยชน์ได้เป็นอย่างดี ถ่านหินเกิดจากการเปลี่ยนแปลงที่ใช้เวลาหลายล้านปีของซากพืชภายใต้ความดันและความร้อนจนกลายมาเป็น พีต (Peat) ลิกไนต์ (Lignite) ซับบิทูมินัส (Sub-bituminous) บิทูมินัส (Bituminous) และแอนทราไซต์ (Anthracite) ตามลำดับ ถ่านหินตามแหล่งต่าง ๆ ในโลกนี้จึงมีคุณสมบัติต่างกันขึ้นกับชนิดของซากพืช อายุการเปลี่ยนแปลง และสภาพสิ่งแวดล้อมของแหล่งที่เกิด การจำแนกถ่านหินมีหลายระบบที่ใช้กันมากได้แก่ การจำแนกถ่านหินตาม รैंก (Rank) คำศัพท์เป็นการวัดความสมบูรณ์ของการเปลี่ยนแปลงทางธรณีวิทยาที่กลายเป็นถ่านหิน สถาบัน American Society for Testing and Materials (ASTM) ได้กำหนดค่าคุณสมบัติของถ่านหินเป็นเกณฑ์โดยแยกการจำแนกถ่านหินออกเป็น พีต ลิกไนต์ ซับบิทูมินัส บิทูมินัส แอนทราไซต์ ลักษณะทั่วไปของประเภทถ่านหินดังที่ได้กล่าวมานี้อาจกล่าวโดยย่อได้ดังนี้

พีต ประกอบด้วยซากพืชซึ่งบางส่วนได้สลายตัวไปแล้ว มีปริมาณออกซิเจนและความชื้นสูง พีตนับได้ว่าเป็นผลผลิตขั้นแรกในกระบวนการกลายเป็นถ่านหิน (Coalification process)

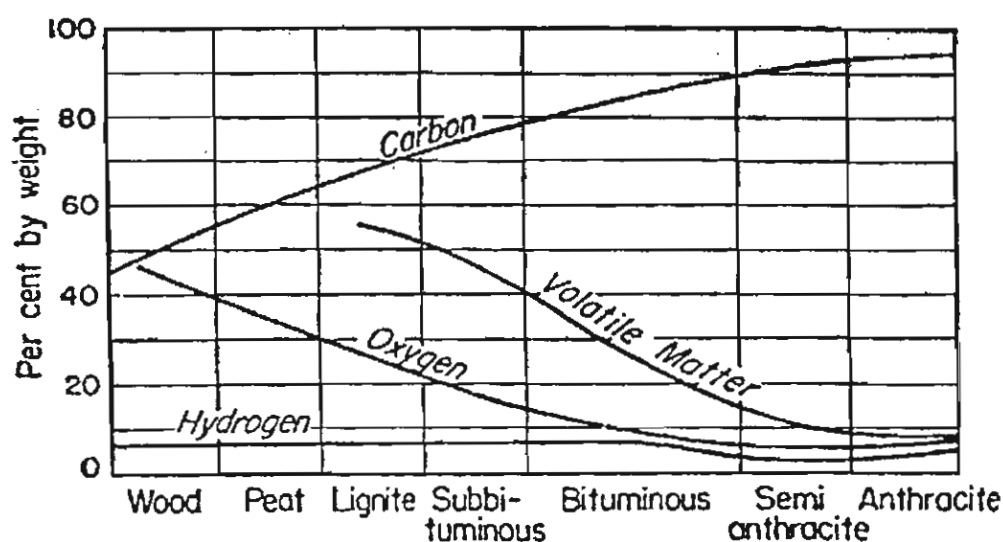
ลิกไนต์ มีซากพืชเหลือปรากฏอยู่เล็กน้อย มีปริมาณออกซิเจนค่อนข้างสูงและมีปริมาณความชื้นสูงถึง 30-70 เปอร์เซ็นต์ เป็นถ่านหินที่ใช้เป็นเชื้อเพลิง

ซับบิทูมินัส มีลักษณะสีดำคล้ายขี้ผึ้ง มีประมาณความชื้นประมาณ 10 เปอร์เซ็นต์ ถ่านหินประเภทนี้มีคุณค่ามากสำหรับใช้เป็นเชื้อเพลิงในการผลิตไฟฟ้า

บิทูมินัส เป็นถ่านหินเนื้อแน่นมีลักษณะแข็ง และมักจะประกอบขึ้นด้วยชั้นถ่านหินสีดำสนิทที่มีลักษณะเป็นมันวาว มีปริมาณคาร์บอน 69 –86 เปอร์เซ็นต์ และมีความชื้น 1.5-7 เปอร์เซ็นต์ ใช้เป็นถ่านหินเพื่อการถลุงโลหะได้

แอนทราไซต์ เป็นถ่านหินที่มีลักษณะดำเป็นเงามัน มีความวาวสูง มีปริมาณคาร์บอนสูงถึง 86 เปอร์เซ็นต์ขึ้นไป มีปริมาณความชื้นต่ำมากและมีค่าความร้อนสูง แต่จุดไฟติดยาก

ในการจำแนกถ่านหินตามค่าศักดินี้ถ้าเป็นถ่านหินประเภท Higher-rank coal จะถูกจัดตามเปอร์เซ็นต์ของ คาร์บอนคงตัว (Fixed carbon) คิดแบบ Dry basis แต่ถ้าเป็นถ่านหินประเภท Low-rank coal จะถูกจัดตาม ค่าความร้อน (Heating value) คิดแบบ Moist basis รูปที่ 2.1 แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงสัดส่วนของปริมาณองค์ประกอบในกระบวนการกลายเป็นถ่านหิน



รูปที่ 2.1 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนของสารองค์ประกอบในกระบวนการกลายเป็นถ่านหิน [1]

จะเห็นได้ว่าเมื่อกระบวนการกลายเป็นถ่านหิน เปอร์เซ็นต์ของคาร์บอนจะเพิ่มขึ้น แต่เปอร์เซ็นต์ของสารอื่นจะลดลง

2.2 การวิเคราะห์ถ่านหิน [1]

การวิเคราะห์ถ่านหินมีประโยชน์เพื่อ

- ก) การจำแนกถ่านหิน
- ข) การกำหนดราคาค่าถ่านหินตามคุณภาพ
- ค) การควบคุมคุณภาพถ่านหิน
- ง) การเลือกใช้หรือออกแบบอุปกรณ์เผาไหม้
- จ) การคำนวณปริมาณ เช่นปริมาณถ่านหิน และปริมาณอากาศที่ต้องใช้ในการเผาไหม้ เป็นต้น

การวิเคราะห์ถ่านหินมีสองแนวทาง คือ การวิเคราะห์แบบประมาณ (Proximate analysis) และการวิเคราะห์แบบแยกธาตุ (Ultimate analysis)

การวิเคราะห์แบบประมาณ มักรายงานค่าความร้อน (Calorific value หรือ Heating value) และปริมาณกำมะถัน และยังมีการวิเคราะห์หาปริมาณสารดังต่อไปนี้ คาร์บอนคงตัว สารระเหย ความชื้น จี๊แก๊ส ฯลฯ

การวิเคราะห์แบบแยกธาตุ ไม่ใช่เป็นการวิเคราะห์ที่ทำกันเป็นประจำ แต่เป็นการวิเคราะห์ที่มีประโยชน์ในการจัดประเภทของถ่านหิน และมีประโยชน์ในการคำนวณเกี่ยวกับการเผาไหม้ เช่นการคำนวณหาปริมาณอากาศที่ต้องการเพื่อการเผาไหม้ ซึ่งจะวิเคราะห์หาปริมาณของธาตุดังต่อไปนี้ คาร์บอน ออกซิเจน ไฮโดรเจน ไนโตรเจน ซัลเฟอร์ ฯลฯ

ความชื้น (Moisture): ในถ่านหินแบ่งได้เป็น Free moisture และ Inherent moisture ซึ่ง Free moisture เป็นความชื้นส่วนที่ให้เราเห็นว่าถ่านหินนั้นชื้น ถ่านหินที่ชื้นมักเกาะติดกับภาชนะหรือเครื่องมือทำให้การไหลโดยน้ำหนักของมันเองได้ไม่ดี Inherent moisture คือความชื้นที่ยังเหลืออยู่ในถ่านหินหลังจากได้ Free moisture ออกจากถ่านหินแล้ว เราอาจใช้ Inherent moisture เป็นแนวทางบอกศักย์ของถ่านหินได้ High rank coal มี Inherent moisture น้อย ลิกไนต์อาจมี Inherent moisture มากกว่า 50 เปอร์เซ็นต์ ความชื้นไม่มีคุณค่าทางด้านความร้อน ในการเผาไหม้ถ่านหินจะต้องสูญเสียค่าความร้อนเกือบ 0.1 เปอร์เซ็นต์ ต่อทุก ๆ 1 เปอร์เซ็นต์ของความชื้นในถ่านหิน

ค่าความร้อน คือปริมาณความร้อนที่ได้จากการเผาไหม้ถ่านหินหนึ่งหน่วยน้ำหนักอย่างสมบูรณ์ ค่าความร้อนนี้อาจรายงานได้ 2 วิธี คือ ค่าความร้อนทั้งหมด (Gross calorific value) หรือ Higher heating value และ ค่าความร้อนสุทธิ (Net calorific value) หรือ Lower heating value ค่าความร้อนทั้งหมดเป็นปริมาณความร้อนที่ได้จากการเผาไหม้ถ่านหิน

ค่าความร้อนทั้งหมดอาจประมาณได้จาก Dulong's formula [1] ดังนี้

$$Q = [8,080 \times \%C + 34,460(\%H_2 - O_2 / 8) + 2,250 \times \%S] / 100 \quad (2.1)$$

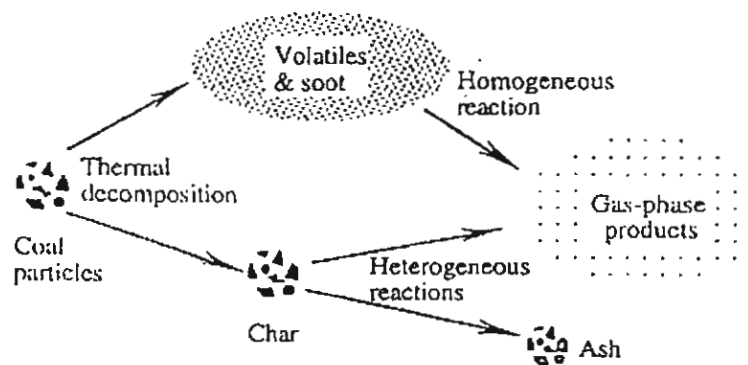
โดยที่ Q คือ ค่าความร้อนทั้งหมดมีหน่วยเป็น kcal/kg และ %C, %H₂, %O₂, %S เป็นเปอร์เซ็นต์ของคาร์บอน เปอร์เซ็นต์ไฮโดรเจน เปอร์เซ็นต์ออกซิเจน และเปอร์เซ็นต์กำมะถัน ในถ่านหิน ตามลำดับ Dulong's formula ใช้ประมาณค่าความร้อนทั้งหมดของถ่านหินประเภท High rank ได้แก่ ถ่านหิน บิทูมินัส และ แอนทราไซต์ ได้ดี แต่ถ้าใช้กับถ่านหินประเภท Low rank แล้วค่าที่ได้จะไม่ค่อยถูกต้อง

Swelling property: ถ่านหินจำพวก High rank มักจะพองตัว (Swell) ที่อุณหภูมิสูง และจะเกาะกับก้อนถ่านหินที่อยู่ข้าง ๆ รวมเป็นก้อนคาร์บอน ปฏิกิริยานี้เรียก Agglutination หรือ Coking ถ่านหินพวกนี้เรียกรวม ๆ ว่า Swelling หรือ Coking coal ตัวอย่างถ่านหินนี้ได้แก่ บิทูมินัส ส่วนถ่านหินพวก Low rank coal จะคงรูปร่างของมันอยู่ได้ที่อุณหภูมิสูง ถ่านหินพวกนี้ได้แก่ ลิกไนต์ และซับบิทูมินัส

Ash-fusion temperature: คืออุณหภูมิที่ขี้เถ้าของถ่านหินเริ่มหลอม Ash-fusion temperature มีประโยชน์ในการออกแบบหรือเลือกใช้ชนิดของอุปกรณ์เผาไหม้

2.3 การเผาไหม้ถ่านหิน [3]

ถ่านหินแต่ละชนิดมีโครงสร้างทางเคมีที่แตกต่างกัน ซึ่งเป็นผลให้ชนิดของถ่านหินที่แตกต่างกันขึ้นอยู่กับชนิดของสสาร ช่วงเวลา อุณหภูมิ ฯลฯ ที่ถูกทับถม ถ่านหินแต่ละชนิดมีสสารส่วนใหญ่ประกอบไปด้วยคือ คาร์บอน ไฮโดรเจน และ มีสสารอื่น ๆ อีกปริมาณเล็กน้อยคือ ออกซิเจน ไนโตรเจน กำมะถัน และโลหะที่อยู่ในขี้เถ้า ถ่านหินผงเมื่อเข้าไปสู่บริเวณการเผาไหม้จะรวมกับออกซิเจน ซึ่งปฏิกิริยาดังกล่าวจะสามารถอธิบายได้ดังรูปที่ 2.2



รูปที่ 2.2 การเผาไหม้ของถ่านหินผง [3]

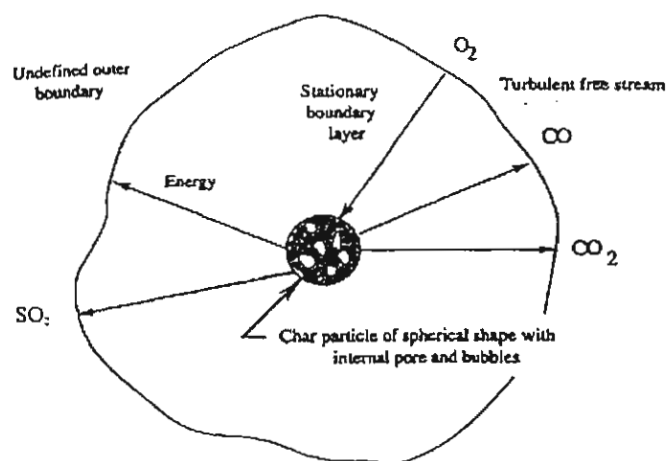
2.3.1 ความร้อนจากการเผาไหม้ถ่านหิน อนุภาคของถ่านหินถูกป้อนเข้าไปในบริเวณห้องเผาไหม้ที่มีอุณหภูมิสูง ถ่านหินจะติดไฟและเกิดการเผาไหม้อย่างรวดเร็ว เป็นผลมาจากการพาความร้อน (Convection) จากก๊าซรอบข้างและการแผ่รังสีจากเปลวไฟ อัตราการเพิ่มอุณหภูมิอาจสูงถึง 10^5 K/s ภายใต้ภาวะของเตาเผาแบบถ่านหินผง ที่อุณหภูมิเกิน 600 K อนุภาคของถ่านหินจะปล่อยสารระเหย และน้ำมันดิน (Tar) รวมตัวกับออกซิเจน ซึ่งก่อให้เกิดความร้อน ก๊าซ และสารต่าง ๆ เช่น คาร์บอนไดออกไซด์ น้ำ ออกไซด์ของไนโตรเจน ออกไซด์ของกำมะถัน ฯลฯ

ของแข็งที่เหลือคือชาร์ (Char) ซึ่งมีสารประกอบส่วนใหญ่คือ คาร์บอน และสารไม่ติดไฟมีปริมาณเล็กน้อย ช่วงเวลาของถ่านหินที่ปลดปล่อยสารระเหยอยู่ในช่วง 5-100 มิลลิวินาที [6] มีตัวแปรหลายตัวที่ส่งผลกับอัตราการปลดปล่อยสารระเหย เช่น ลักษณะห้องเผาไหม้ ชนิดของถ่านหิน ขนาดของอนุภาค ความร้อนแฝง อุณหภูมิที่ทางออก ความดันของอากาศภายนอก ฯลฯ [7]

2.3.2 การเผาไหม้ของสารระเหย การเผาไหม้ของสารระเหย ขึ้นอยู่กับส่วนประกอบทางเคมีของสารระเหยพร้อมกับเงื่อนไขของสภาพแวดล้อมรอบข้าง เช่น อุณหภูมิ องค์ประกอบทางเคมี และความเข้มข้นของก๊าซที่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาการเผาไหม้ ตัวแปรเหล่านี้มีความสัมพันธ์โดยตรงกับอากาศพลศาสตร์ และกระบวนการถ่ายเทความร้อนในบริเวณที่เกิดปฏิกิริยา เพื่อให้การคำนวณง่ายขึ้นมีข้อสมมุติอยู่บางประการเช่น ไม่คำนวณผลของอนุภาคเขม่า และการเผาไหม้ของสารระเหยสัมพันธ์กันกับอัตราการผสมแบบปั่นป่วนของสารระเหยกับออกซิเจน แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้สารระเหยสามารถจำแนกออกได้เป็น 2 กลุ่มคือ 1) แบบจำลองที่อาศัยข้อมูลทางสถิติของการกวัดแกว่งเทอร์บิวเลนต์ (Turbulent fluctuation) และค่าอัตราการผสม เช่น แบบจำลองที่พัฒนาโดย [8, 9] 2) แบบจำลองที่อาศัยอัตราการสลายตัวของกระแสไหลวน (Eddy) โดย [10] แบบจำลองถูกพัฒนาโดยพิจารณาอัตราการแพร่กระจายแบบปั่นป่วนควบคู่กับความเข้มข้นของออกซิเจน สารระเหย และผลผลิตที่ได้จากการเผาไหม้ [11]

2.4 การเผาไหม้ของชาร์

ได้มีการศึกษาเกี่ยวกับการเผาไหม้ของแข็งชาร์ ที่เหลือจากการเผาไหม้ของสารระเหยอย่างกว้างขวาง ซึ่งรายละเอียดสามารถศึกษาได้จากงานวิจัยของ [12]



รูปที่ 2.3 แบบจำลองการเผาไหม้ของชาร์ [13]

การเผาไหม้ของชาร์เป็นปฏิกิริยาที่แตกต่างจากการเผาไหม้ของสารระเหย ซึ่งการเผาผลาญส่วนใหญ่จะอาศัยเวลาในการเผาไหม้จากรายงานของ [14] เวลาที่เผาไหม้ของชาร์อยู่ในช่วง

ประมาณ 300 มิลลิวินาที ในทำนองเดียวกันการเผาไหม้ของชาร์ก็ทำให้เกิดปฏิกิริยาหลายชนิดซึ่งไม่สามารถจำลองใช้กับเงื่อนไขง่าย ๆ ได้มีการวิเคราะห์แบบจำลองการเผาไหม้ของชาร์โดย [13] แบบจำลองปัจจุบันที่นำมาใช้ของการเผาไหม้ของชาร์ โดยคำนึงถึง 2 กระบวนการคือ 1) อัตราการกระจายของออกซิเจนและความร้อนผ่านพื้นผิวของอนุภาค 2) อัตราปฏิกิริยาพลังงานจนพลศาสตร์ทางเคมี

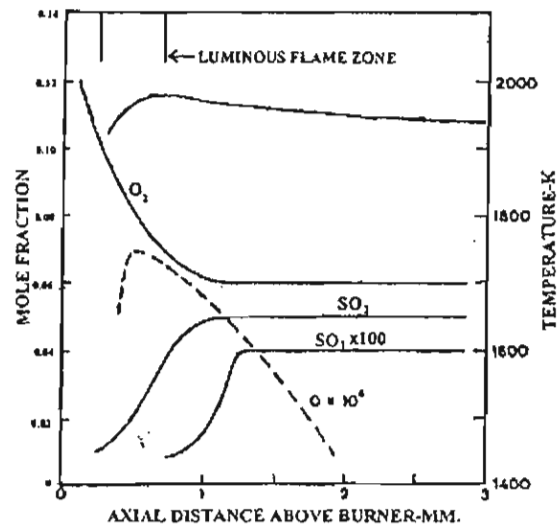
2.5 กำมะถันภายในถ่านหินระหว่างการเผาไหม้

กำมะถันภายในถ่านหินจะอยู่ในรูปของสารประกอบ แร่ไพไรต์ (Pyrites) Organic sulfur และ Sulfate sulfur ที่ปะปนมากับถ่านหิน [1] เมื่อเกิดการเผาไหม้กำมะถันจะติดไฟจะเกิดออกไซด์ของกำมะถันคือ ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ซัลเฟอร์ไตรออกไซด์ และ ซัลเฟอร์ไตรออกไซด์ พร้อมกับให้ความร้อนออกมา ก๊าซที่เกิดขึ้นนั้นเป็นมลพิษและสามารถเปลี่ยนแปลงเป็นสารกัดกร่อนและเป็นอันตรายต่อสุขภาพได้

2.5.1 สารประกอบไพไรต์ สารประกอบไพไรต์ คือแร่ของโลหะที่ประกอบกับกำมะถัน Pyritic sulfur เป็นสาเหตุหนึ่งที่ทำให้เกิดปัญหาในการทำงานของเตาเผา แร่ไพไรต์ที่มีอยู่ในถ่านหินส่วนใหญ่มีขนาดอนุภาคประมาณ 2-3 ไมโครเมตรและมีลักษณะเป็นก้อนกลม ในการที่จะนำแร่ไพไรต์ออกจากถ่านหินขั้นตอนแรกอาจทำได้โดยกรรมวิธีการล้าง แม้ว่าอนุภาคที่เป็นอิสระของแร่ไพไรต์ภายในถ่านหินจะถูกกำจัดได้บางส่วนแต่แร่ไพไรต์ภายในถ่านหินบางชนิดจะมีขนาดเล็กมากเกินที่จะหลุดออกมาได้ ดังนั้นการนำถ่านหินมาใช้ประโยชน์อาจจะต้องกำจัดแร่ไพไรต์ออกจากถ่านหินเสียก่อนโดยกรรมวิธีอื่น ๆ อีกเช่น การนำแร่ไพไรต์ออกจากถ่านหินผงในระหว่างการบดหรือที่หัวเผา เนื่องด้วยมีอยู่หลายวิธีที่จะกำจัดแร่ไพไรต์ เช่น ใช้แม่เหล็กสามารถที่จะดึงดูดอนุภาคของไพไรต์ ให้แยกออกมาจากถ่านหินโดยใช้สนามแม่เหล็กที่มีความเข้มข้นสูง

2.5.2 Organic sulfur ปริมาณกำมะถันภายใน Organic sulfur มีปริมาณประมาณครึ่งหนึ่งของกำมะถันทั้งหมดภายในถ่านหิน Organic sulfur เมื่อเผาไหม้กับอากาศแล้วกำมะถันจะรวมตัวกับออกซิเจนส่วนใหญ่จะเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ และมีกำมะถันส่วนน้อยที่รวมตัวกับออกซิเจนที่บริเวณผิวของเปลวไฟเพราะบริเวณนั้นจะมีอากาศส่วนเกินมากจึงก่อให้เกิดก๊าซซัลเฟอร์ไตรออกไซด์ จากรูปที่ 2.4 สามารถอธิบายถึงการเกิดกำมะถันออกไซด์ภายในห้องเผาไหม้ซึ่งซัลเฟอร์ไดออกไซด์จะมีผลต่อเตาหม้อไอน้ำไม่มากนัก แต่เมื่อก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ทำปฏิกิริยากับออกซิเจนก็จะเปลี่ยนจาก SO_2 ไปเป็น SO_3 และในภายหลังจะเปลี่ยนไปอยู่ในรูปของกรดซัลฟิวริก ซึ่งเป็นการนำไปสู่ปัญหาที่รุนแรงต่อสุขภาพและสิ่งแวดล้อม ส่วนประกอบเหล่านี้ถูกสร้างด้วย Alkali iron ไตรซัลเฟต ภายใต้ตะกอนกากของแร่ที่ซึ่งมี SO_3 ที่ระดับสูง มันเป็นสิ่งที่

จะเกิดขึ้นในกระบวนการนำถ่านหินมาใช้แต่ในปัจจุบันได้มีการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ และการทดลอง เพื่อที่จะหาแนวทางการลดระดับกำมะถันให้มากที่สุดเพื่อกำจัดปัญหาเหล่านี้



รูปที่ 2.4 แสดงถึงปริมาณการเกิดกำมะถันออกไซด์ของสารประกอบ $H_2S-O_2-N_2$ ภายในห้องเผาไหม้ [15]

2.5.3 Sulfate sulfur จำนวนของ Sulfate sulfur ในถ่านหินทั่ว ๆ ไปจะมีปริมาณไม่เกิน 2-3% ของกำมะถันทั้งหมด กำมะถันส่วนใหญ่จะอยู่ในรูปของสารประกอบไพไรต์ และ Organic sulfur เมื่อ Sulfate sulfur เกิดการเผาไหม้ผลิตภัณฑ์ที่ได้จาก Sulfate sulfur จะอยู่ภายในขี้เถ้า โดยทั่ว ๆ ไป Sulfate sulfur สามารถละทิ้งได้ในการคำนวณค่า เพื่อหาปริมาณกำมะถันที่ออกมาจากก๊าซไอเสีย

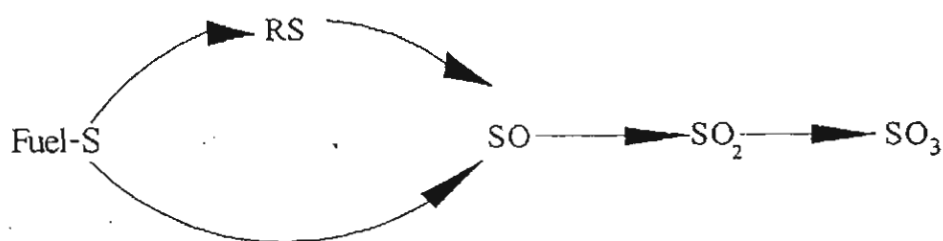
2.6 ปฏิกริยาของกำมะถันกับออกซิเจนระหว่างการเผาไหม้

ไพไรต์ และ Organic sulfur ที่ปลดปล่อยออกมาจากถ่านหินพร้อมกับสารระเหยจะเกิดการเปลี่ยนแปลงทางเคมีภายใต้เงื่อนไขของการเผาไหม้ซึ่งเป็นรูปแบบที่ซับซ้อน ในส่วนนี้เป็นสาเหตุมาจากการแพร่กระจายที่เกิดขึ้นจริงภายในบริเวณการเผาไหม้ ซึ่งบริเวณส่วนกลางของเปลวไฟเชื้อเพลิงจะมีปริมาณมากเกินกว่าอากาศจะเกิดสภาวะ Fuel rich ซึ่งในบริเวณนั้นต้องการอากาศมาผสมเพิ่มเพื่อการเผาไหม้ที่สมบูรณ์ การหลีกเลี่ยงปัญหาดังกล่าวสามารถทำได้โดยทำให้เกิดการไหลแบบปั่นป่วนของอากาศและเชื้อเพลิง โดยมีการพัฒนาและศึกษาปัจจัยเหล่านี้ในทางวิศวกรรมขั้นสูง เพื่อที่จะนำมาออกแบบหัวเผาให้มีประสิทธิภาพสำหรับเตาเผาที่มีขนาดใหญ่

ได้มีการศึกษาการเกิดปฏิกริยาของกำมะถันภายในเปลวไฟ โดยพิจารณาจากการทดลองแบบง่าย เพื่อจะสามารถควบคุมเงื่อนไขของการเผาไหม้ได้ ซึ่งพิจารณาจากเปลวไฟของเชื้อเพลิงที่

มีกำมะถันผสมอยู่โดยผสมกับอากาศภายใต้สภาวะ Premix เช่น ใช้สารประกอบ H_2S เป็นเชื้อเพลิง ลักษณะของเปลวไฟที่มองเห็นจะมีความหนาน้อยมากประมาณ 0.5 มม. และบริเวณสูงกว่าการเกิดปฏิกิริยาสามารถมองเห็นได้โดยใช้เครื่องมือทำการศึกษา [16]

ข้อมูลส่วนใหญ่ที่ได้จากการศึกษาปฏิกิริยาเคมีของกำมะถันภายในเปลวไฟ ทำการศึกษาจลนพลศาสตร์ของเชื้อเพลิงที่มีกำมะถันเป็นส่วนประกอบ เช่น H_2S , CS_2 , COS และ CH_3SH เพื่อศึกษาถึงความสัมพันธ์ของอัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารเหล่านี้กับออกซิเจนจะเป็นข้อมูลขั้นต้นสำหรับการศึกษาปฏิกิริยาของสารประกอบที่ซับซ้อนของ Organic sulfur กับออกซิเจนต่อไป ซึ่งสารประกอบที่ซับซ้อนนี้จะพบในถ่านหินและน้ำมันที่มีความเข้มข้นสูง การศึกษาต่อไปนี้จะพิจารณากลไกของการเกิดสารประกอบของกำมะถันอย่างง่าย เพื่อผลิตภัณฑ์ที่มีกำมะถันเป็นส่วนประกอบ กลไกสำหรับการทำปฏิกิริยากับออกซิเจนของเชื้อเพลิงที่มีกำมะถันเป็นสารประกอบอย่างง่ายถึงแม้จะไม่สามารถอธิบายการเกิดปฏิกิริยาของถ่านหินได้อย่างสมบูรณ์ แต่ก็มีความสอดคล้องที่อุณหภูมิของเปลวไฟ ลำดับกระบวนการเกิดปฏิกิริยาของเชื้อเพลิง ดังรูปที่ 2.5

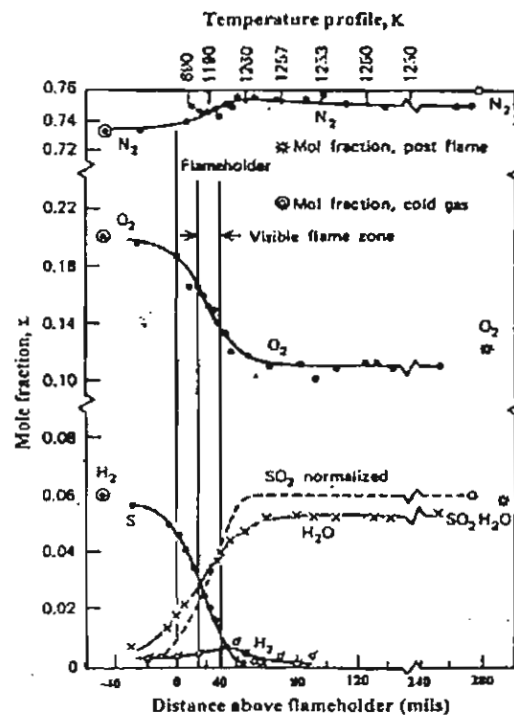


รูปที่ 2.5 การเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากเชื้อเพลิงอย่างง่ายที่มีกำมะถันเป็นส่วนประกอบ

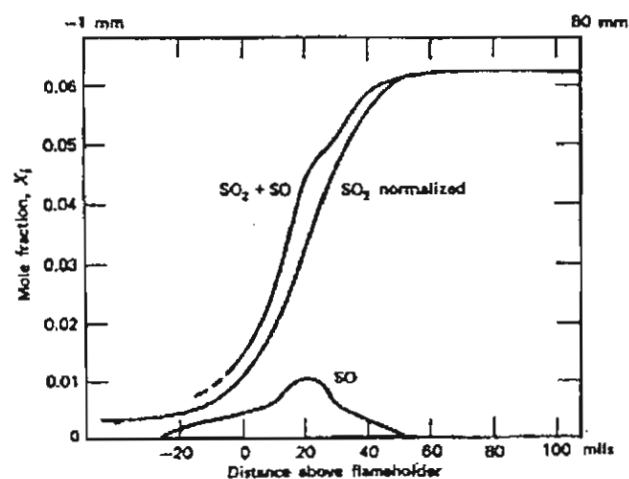
ซึ่ง RS เป็นพันธะที่มีกำมะถันเป็นสารประกอบเช่น HS, CS, CH_3S ซึ่งเป็นข้อมูลสำคัญในการแสดงการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่ถูกสร้างอย่างรวดเร็วในเปลวไฟ รูปที่ 2.6 อธิบายการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของสารประกอบ $H_2S-O_2-N_2$ ภายในห้องเผาไหม้ ซึ่งแสดงให้เห็นว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาอยู่ในระดับเดียวกันกับปฏิกิริยาการเผาไหม้ กระบวนการเกิด SO_2 จะเกิดขึ้นอย่างรวดเร็วในระดับเดียวกันกับการทำปฏิกิริยาระหว่างกำมะถันกับพันธะ O-H ประกอบกับรูป 2.7 จากการสังเกตพบว่าก๊าซ SO ซึ่งเกิดขึ้นในห้องเผาไหม้มีสถานะไม่เสถียรและทำปฏิกิริยากับออกซิเจนอย่างรวดเร็ว ด้วยปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นดังนี้



ความสัมพันธ์ของความเข้มข้นของ SO_2 และ SO จากสมการข้างบนสามารถคำนวณได้จากอุณหภูมิศาสตร์ที่พิจารณาจากตำแหน่งอุณหภูมิของก๊าซ



รูปที่ 2.6 การเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของสารประกอบ $\text{H}_2\text{S}-\text{O}_2-\text{N}_2$ ภายในห้องเผาไหม้ สารประกอบเริ่มต้นมี O_2 6.06 % N_2 73.5% อัตราการไหล 40.3 ซม.³/วินาที [5]



รูปที่ 2.7 การเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นที่ตำแหน่งต่าง ๆ จาก Flame holder [15]

ปฏิกิริยาที่สำคัญของการเกิดก๊าซ SO_3 ในเปลวสามารถอธิบายได้ด้วยสมการปฏิกิริยาดังนี้



ปฏิกิริยาที่ 2.5 จะเกิดขึ้นอย่างรวดเร็วที่บริเวณใกล้เปลวไฟเป็นเพราะว่าความเข้มข้นของออกซิเจนมีปริมาณมากเกินไป ก๊าซบางส่วนจะมีเกิดปฏิกิริยาดังสมการที่ 2.5 และจะแปลงกลับเป็นก๊าซ SO_2 ในภายหลังโดยสมการดังนี้



2.7 คุณสมบัติของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นก๊าซมลพิษที่ปล่อยมาจากการเผาไหม้เชื้อเพลิงที่มีกำมะถันเป็นองค์ประกอบ เช่น ถ่านหิน ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นก๊าซไม่มีสี แต่มีรส ที่ระดับความเข้มข้นสูงมากพอจะที่มีกลิ่นเหม็น ระคายจมูก สามารถละลายน้ำได้ดี คุณสมบัติทางกายภาพ และเทอร์โมไดนามิกส์ของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ แสดงในตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 คุณสมบัติทางกายภาพและเทอร์โมไดนามิกส์ของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ [17]

Property	Value
<i>mol wt.</i>	64.06
<i>mp, °C</i>	-72.70
<i>bp, °C</i>	-10.02
$\Delta \bar{H}_{\text{fusion}}, \text{kJ/mol}^a$	7.40
$\Delta \bar{H}_{\text{vaporisation at } -10.0^\circ\text{C}}, \text{kJ/mol}^a$	24.92
<i>vapor density at 0°C, 101.3 kPa (= 1 atm), air = 1</i>	2.263
<i>liquid density at -20°C, g/cm³</i>	1.50
<i>critical temperature, °C</i>	157.6
<i>critical pressure, kPa^b</i>	7911
<i>critical volume, cm³/g</i>	122.0
$\Delta \bar{G}^\circ_{\text{formation, gas at } 25^\circ\text{C}}, \text{kJ/mol}^a$	-300.19
$\Delta \bar{H}^\circ_{\text{formation, gas at } 25^\circ\text{C}}, \text{kJ/mol}^a$	-296.2
$\Delta \bar{S}^\circ_{\text{formation, gas at } 25^\circ\text{C}}, \text{J/(mol-K)}^a$	248.1
$C_p(\text{gas at } 25^\circ\text{C}), \text{J/(mol-K)}^a$	39.9
<i>dielectric constant at -16.5°C</i>	17.27
<i>dipole moment at 25°C, C-m^c</i>	3.87×10^{-30}

ตารางที่ 2.1 (ต่อ)

Property	Value
<i>vapor pressure, kPa^b at</i>	
10° C	230
20° C	330
30° C	462
40° C	630
<i>solubility in water (at 101.3 kPa, g/100g H₂O)</i>	
0° C	22.971
10° C	16.413
20° C	11.577
30° C	8.247
40° C	5.881

^a To convert J to cal, divide by 4.184

^b To convert kPa to psi, multiply by 0.145

^c To convert C-m to D, divide by 3.3366×10^{-30}

2.8 ผลกระทบของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

2.8.1 ผลกระทบต่อสุขภาพ เมื่อได้รับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์โดยการหายใจที่มีความเข้มข้นตั้งแต่ 20 พีพีเอ็มขึ้นไป จะทำให้ระคายเคืองหายใจไม่ออก อาเจียน และถ้าได้สัมผัสแบบเฉียบพลันที่ความเข้มข้นประมาณ 50 พีพีเอ็ม จะทำให้ระคายเคืองจมูกและคอ ทำให้ไอและน้ำมูกไหล ที่ระดับนี้ผู้ที่ได้รับจะสามารถทนได้ไม่เกิน 15 นาที ถ้าได้รับพิษแบบเฉียบพลัน จะก่อให้เกิดโรคระบบทางเดินหายใจ ตั้งแต่อาการไอเรื้อรัง ไปจนถึงการทำลายปอดอย่างถาวร ในขณะที่ความเข้มข้นระดับสูง ๆ ปอดจะไม่สามารถทำงานได้เต็มที่ จนเกิดการระคายเคืองกับหลอดลมและทำให้เกิดปอดบวมจนอาจถึงตายได้ในเวลาไม่กี่วัน [17] เมื่อปี ค.ศ. 1952 ในกรุงลอนดอนได้มีคนตายเป็นจำนวนมาก สาเหตุจากการเผาไหม้เชื้อเพลิงถ่านหิน [18] เรียกวิกฤตการณ์ครั้งนี้ว่า “London Blank Fog”

2.8.2 ผลกระทบต่อทัศนวิสัยในการมอง ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ทำปฏิกิริยากับไอน้ำในอากาศได้เป็นกรดซัลฟิวริก ซึ่งเป็นละอองฝอย (Aerosols) ลอยอยู่ในอากาศ ซึ่งละอองฝอยนี้จะมีผลกระทบต่อทัศนวิสัยในการมองเห็น

2.8.3 ผลกระทบต่อวัสดุ สิ่งก่อสร้างที่เป็นหินปูนและหินอ่อนเมื่อดูดซึมก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ก๊าซนี้จะเข้าไปแทนที่คาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) ในแคลเซียมคาร์บอเนต (CaCO_3) เกิดเป็นแคลเซียมซัลเฟต (CaSO_4) ซึ่งมีความหนาแน่นน้อยกว่าแคลเซียมคาร์บอเนต จึงมีการขยายตัวในโครงสร้างของแคลเซียมคาร์บอเนตเกิดขึ้น ทำให้โครงสร้างเกิดรอยร้าวและสึกกร่อนในที่สุด [19] ผลของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จะแตกต่างกันระหว่างเขตเมืองและอุตสาหกรรมกับเขตชนบท เช่น ในเขตชนบทมีความคงทนของสีประมาณ 12 ปี ส่วนเขตเมืองและอุตสาหกรรมมีความคงทนของสีน้อยกว่า 6 ปี เขตชนบทมีอัตราการสึกกร่อนของทองแดงประมาณ 0.1–0.6 ไมโครเมตรต่อปี ในเขตเมือง และอุตสาหกรรมเป็น 0.9 – 2.2 ไมโครเมตรต่อปี [20]

2.8.4 ฝนกรด ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในบรรยากาศละลายผสมกับฝนกลายเป็นฝนกรดทำให้เกิดอันตรายต่อมนุษย์ พืช สัตว์และสิ่งก่อสร้างต่าง ๆ

2.9 มาตรฐานการปล่อยก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

ในประเทศไทยกรมควบคุมมลพิษได้กำหนดค่ามาตรฐานสำหรับโรงไฟฟ้าแม่เมาะโดยไม่ให้ปล่อยก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เกินกว่า 300 ไมโครกรัม-ลูกบาศก์เมตร-ชั่วโมง ตารางที่ ผ.ก.1 แสดงมาตรฐานอากาศเสียจากโรงงานไฟฟ้า (ใหม่) ภายในประเทศ [21]

นอกจากตารางดังกล่าวแล้วประเทศต่าง ๆ ได้เพิ่มความเข้มงวดเกี่ยวกับการตรวจสอบมลภาวะของโรงงานอุตสาหกรรมที่ใช้ถ่านหินเป็นเชื้อเพลิงและได้วางมาตรการต่าง ๆ ขึ้นดังนี้ [22]

- ก. โรงงานที่ใช้ถ่านหินเป็นเชื้อเพลิงจะปล่อยกำมะถันออกมาได้เป็นปริมาณไม่เกินที่มาตรฐานกำหนดไว้ ทั้งนี้โดยการคัดเลือกใช้ถ่านหินที่มีปริมาณกำมะถันต่ำ
- ข. ให้โรงงานติดตั้งเครื่องดักจับ (Scrubber) ก๊าซพิษ เช่น NO_x และ SO_x ก่อนปล่อยออกทางปล่อง
- ค. ให้เปลี่ยนไปใช้พลังงานอื่นที่มีปริมาณกำมะถันและไนโตรเจนต่ำ
- ง. ถ้าจะใช้ถ่านหิน ควรใช้เทคโนโลยีที่ได้พัฒนาแล้ว และสามารถลดปริมาณก๊าซพิษได้ดี ซึ่งเทคโนโลยีดังกล่าว นอกจากจะช่วยลดมลภาวะแล้วยังช่วยลดต้นทุนการผลิตอีกส่วนซึ่งจะเป็นประโยชน์แก่ผู้ใช้เอง
- จ. หากไม่สามารถทำได้ให้ปิดโรงงาน

2.10 การควบคุมการปล่อยก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

การควบคุมการปล่อยก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จากการเผาไหม้ถ่านหินมีหลายวิธี [20] ได้แก่

ก. การใช้ถ่านหินที่มีกำมะถันต่ำ

ข. การแยกกำมะถันออกจากถ่านหินก่อนการเผาไหม้

ค. การกำจัดระหว่างการผลิตไฟฟ้าในเตาเผา

ง. การกำจัดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์หลังการเผาไหม้ แบ่งเป็น 3 วิธี คือ [23]

- ระบบฉีดแห้ง
- ระบบกึ่งแห้ง
- ระบบเปียก

จ. การเปลี่ยนถ่านหินเป็นก๊าซเชื้อเพลิงและน้ำมัน

บทที่ 3

สมการพื้นฐานของแบบจำลอง

3.1 บทนำ

บทนี้จะกล่าวถึงสมการทางคณิตศาสตร์ในแบบจำลองการสันดาปของถ่านหินผงที่พัฒนาขึ้นโดย [3] แบบจำลองจะนำไปใช้ในการจำลองกระบวนการเผาไหม้ของถ่านหินผงตามรายละเอียดที่จะกล่าวถึงในบทถัดไป

นอกจากนี้ จึงได้กล่าวถึงสมการทางคณิตศาสตร์สำหรับปฏิกิริยาการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์โดยพัฒนาจากพื้นฐานความรู้ที่กล่าวไว้ในบทที่ 2 ในขั้นแรกจะกล่าวถึงสมการที่อธิบายพลศาสตร์การไหลของก๊าซในห้องเผาไหม้แบบปั่นป่วนซึ่งใช้แบบจำลอง K-ε มาอธิบายพฤติกรรมดังกล่าวและจากนั้นจะเป็นสมการการเผาไหม้ของก๊าซและของแข็ง สมการแสดงการแลกเปลี่ยนมวล โมเมนตัม ความร้อน ระหว่างอนุภาคถ่านหินและก๊าซร้อน สมการการถ่ายเทความร้อนในรูปของการพา การแผ่และการแผ่รังสี รวมถึงสมการอธิบายการถ่ายเทมวลสารของก๊าซชนิดต่าง ๆ

3.2 แบบจำลองของก๊าซ [3]

สมการทางคณิตศาสตร์สำหรับก๊าซอยู่บนพื้นฐานของ Eulerian ซึ่งสมมูลคุณสมบัติเฉพาะเพื่อพิจารณาปริมาตรควบคุมภายใต้การคำนวณและกระทำอย่างต่อเนื่องเพื่อให้ได้ค่าที่ถูกต้องโดยการนำสมการของ Reynolds ซึ่งเป็นอัตราการเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติเฉพาะที่ตำแหน่งและเวลา ซึ่งอัตราการสร้างและ Net flux ของคุณสมบัตินั้น ๆ สมการการถ่ายเทสำหรับมวล โมเมนตัม และพลังงานจะแสดงในภายหลัง

3.2.1 การไหลของอากาศพลศาสตร์ สมมุติว่าของไหลที่พิจารณาอยู่ในสถานะก๊าซและอัดตัวได้สมการอนุรักษ์มวลจะเขียนได้ดังนี้

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = S_m \quad (3.1)$$

I II III

- เมื่อ
- I คือ อัตราการเปลี่ยนแปลงของมวลต่อหน่วยปริมาตร
 - II คือ มวลที่ไหลเข้าหรือออกที่เกิดจากการเคลื่อนที่ของการไหล
 - III คือ อัตราการสะสมสำหรับการใช้ของมวลต่อหน่วยปริมาตร

สมการการของ Navier-Stokes สำหรับการไหลของของไหลสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \rho g_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + S_{v,i} \quad (3.2)$$

I II III IV V VI

I : อัตราการสะสมของโมเมนตัมต่อหน่วยปริมาตร

II : อัตราของโมเมนตัมที่เข้าหรือออกที่เกิดจากการเคลื่อนที่ของการไหล

III: แรงโน้มถ่วงต่อหน่วยปริมาตรของของไหล (กรณีส่วนใหญ่สามารถตัดทิ้งได้ ยกเว้นสำหรับการไหลที่มี Froude number ต่ำ)

IV : เกรเดียนต์ของแรงดันจากกับพื้นผิวปริมาตรควบคุมต่อหน่วยพื้นที่ซึ่งเกิดจากความดัน Hydrostatic

V : เกรเดียนต์ของแรงเฉือนสัมผัสและแรงดันจากกับพื้นผิวปริมาตรควบคุมซึ่งเกิดจากความเค้นความหนืด ซึ่งอาจจะเขียนให้อยู่ในรูปของเกรเดียนต์ของความเร็วเฉลี่ย ได้ดังนี้

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.3)$$

VI: อัตราการเปลี่ยนแปลงของโมเมนตัมต่อหน่วยปริมาตร (เนื่องจากการแลกเปลี่ยนมวล และโมเมนตัมระหว่างอนุภาคของแข็งกับก๊าซ) ภายในปริมาตรควบคุม

3.2.1.1 สมการความต่อเนื่องและโมเมนตัมเฉลี่ยของการไหลแบบปั่นป่วน การไหลแบบปั่นป่วนคือการเคลื่อนที่แบบยุ่งเหยิงและมีค่าไม่แน่นอนเปลี่ยนแปลงตลอดเวลา มีอยู่ 2 วิธีที่ใช้ในการพิจารณา

วิธีที่ 1. ตัวแปรต่าง ๆ สามารถแบ่งออกเป็นค่าที่คงที่ซึ่งเป็นค่าเฉลี่ยและส่วนที่แกว่งไปมา ดังเช่นสมการ

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.4)$$

$$\bar{\phi} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt \quad (3.5)$$

ดังนั้นค่าคุณสมบัติของการไหลแบบปั่นป่วนจะประกอบด้วยค่าเฉลี่ยของคุณสมบัติของการไหล ($\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}, \bar{p}, \text{ etc.}$) และค่าของคุณสมบัติที่มีการแกว่งไปมาคือ ($u', v', w', p', \text{ etc.}$)

วิธีที่ 2. แนะนำโดย [24] วิธีนี้จะช่วยให้ง่ายในรูปแบบของสมการความต่อเนื่องเฉลี่ยโดย

$$\bar{\phi} = \bar{\phi} + \phi'' \quad (3.6)$$

$$\bar{\phi} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\bar{\rho} \Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \rho \phi dt \quad (3.7)$$

$$\bar{\rho} \bar{\phi} = \overline{\rho \phi} \quad (3.8)$$

การกำหนดนี้เราสามารถที่จะรวมไว้ในสมการความต่อเนื่อง และสมการ Navier-Stokes ดังสมการต่อไปนี้

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_j)}{\partial x_j} = \bar{S}_m \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = \bar{\rho} g_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''})}{\partial x_j} + \bar{S}_{v,i} \quad (3.10)$$

ค่า $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ จากสมการ 3.10 เรียกว่า Reynolds stresses ซึ่งเกิดขึ้นจากการไหลแบบปั่นป่วนนั่นเอง

3.2.1.2 แบบจำลองการไหลแบบปั่นป่วน สมการทางคณิตศาสตร์ซึ่งเป็นแบบจำลองการไหลแบบปั่นป่วนที่ใช้ในการศึกษาครั้งนี้คือ Two equation K-ε model ของ W.P. Jones [25] เป็นที่รู้กันคืออยู่แล้วว่าแบบจำลองของ K-ε มีข้อเสียเมื่อนำไปใช้ทำนายการไหลที่มีรูปร่างที่ซับซ้อน เช่นการไหลที่มีความเร็วของอากาศสวนสูง ซึ่งแบบจำลองชั้นสูง เช่นแบบจำลอง Algebraic stress และ Reynolds stresses จะดีกว่าการใช้แบบจำลอง K-ε แต่แบบจำลองที่นำมาใช้นี้มีความเสถียรสูงจึงเหมาะกับการใช้งานในกรณีที่มีการเผาไหม้

แบบจำลอง K-ε ที่นำมาใช้กับการไหลแบบปั่นป่วนในครั้งนี้เป็นไปตามข้อสมมติฐานของ Boussinesq ที่ว่า Reynolds stresses เป็นสัดส่วนกับเกรเดียนต์ของความเร็วเฉลี่ย สมการของ Boussinesq ถูกแก้ไขสามารถจะเขียนได้ดังนี้ [26]

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j = \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\bar{\rho} K + \mu_{ed} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) - \mu_{ed} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$$



ซึ่ง K คือค่าพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน เพื่อให้่ายขึ้นสมมุติว่าค่า μ_{ed} คือ Eddy viscosity δ_{ij} คือ 3×3 Diagonal unit vector ในการไหล 3 มิติ โดยนำข้อสมมติฐานของ Boussinesq มาแทนในสมการโมเมนตัมเฉลี่ยและความเค้นเฉือนเฉลี่ยที่เกิดขึ้นจากความหนืดเชิงโมเลกุล (Molecular viscosity) ภายในเทอมเกรเดียนต์ของความเร็ว สมการโมเมนตัมเฉลี่ยสำหรับการไหลแบบปั่นป่วนสามารถเขียนสมการได้ดังนี้

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \bar{\rho} g_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \mu_{eff} \left[-\frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_K}{\partial x_K} \delta_{ij} + \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{p} K}{\partial x_j} \delta_{ij} + \bar{S}_{v,i} \quad (3.12)$$

μ_{eff} จากสมการข้างบนเป็นผลจากความหนืดเชิงโมเลกุลและผลจากการปั่นป่วน ในการไหลที่มีค่าความปั่นป่วนสูงค่าความหนืดเทอร์บิวเลนต์ (Turbulent viscosity) จะมากกว่าค่าความหนืดเชิงโมเลกุล ($\mu_t \ll \mu_{ed}$) อาจจะเขียนได้ดังนี้

$$\mu_{eff} \approx \mu_{ed} \quad (3.13)$$

หมายเหตุอย่างไรก็ตามผลที่เกิดขึ้นนี้ไม่สามารถใช้ได้กับบริเวณใกล้กำแพง ที่ซึ่งการไหลเป็นแบบลาร์มินาร์

พลังงานจลน์ของความปั่นป่วน

สมการพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนที่ใช้ในการศึกษาครั้งนี้เป็นของ [27]

$$\underbrace{\bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial K}{\partial x_j}}_I = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{ed}}{\sigma_K} + \mu_1 \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right]}_{II} - \underbrace{\bar{\rho} \tilde{u}_i^* \tilde{u}_j^* \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}_{III} - \underbrace{\bar{\rho} \varepsilon}_{IV} \quad (3.14)$$

I: การถ่ายเทพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนโดยการเคลื่อนที่เฉลี่ยของก๊าซ

II: การฟุ้งกระจายของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนและงานของแรงเฉือนเนื่องจากความเค้นหนืดและการแกว่ง

คือ Prandtl / Schmidt number สำหรับการกระจายแบบปั่นป่วน

III: คืองานของความเค้นเฉือนของ Reynolds stresses อาจจะแสดงในรูปแบบของความเร็วได้ดังนี้

$$-\bar{\rho} \tilde{u}_i^* \tilde{u}_j^* \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = \mu_{ed} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \bar{\rho} K \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \quad (3.15)$$

IV: คือพจน์ของการสลายตัว สามารถเขียนได้ดังนี้

$$\varepsilon = \frac{\mu_t}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j^*}{\partial x_i} \right)^2$$

การสลายตัวของความปั่นป่วน

การสลายตัวของความปั่นป่วน ε คืออัตราการสลายตัวของพลังงานแบบปั่นป่วน สมการการถ่ายเทของการสลายตัวของความปั่นป่วนสามารถเขียนได้ดังนี้ [25]

$$\overline{\rho u_j} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{ed}}{\sigma_\varepsilon} + \mu_1 \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] - C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{K} \left[\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] - C_{\varepsilon 2} \overline{\rho} \frac{\varepsilon^2}{K} \quad (3.16)$$

ซึ่ง σ_ε คือ Prandtl / Schmidt number สำหรับอัตราการกระจาย และ $C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$ และ C_μ คือ ค่าคงที่ Eddy viscosity อาจจะแสดงอยู่ในเทอมของพลังงานจลน์แบบปั่นป่วน และอัตราการสลายตัวของมันคือ

$$\mu_{ed} = C_\mu \overline{\rho} \frac{K^2}{\varepsilon} \quad (3.17)$$

ค่าของตัวแปรที่แนะนำให้ใช้ในแบบจำลองตามตารางที่ 3.1

ตารางที่ 3.1 ค่าคงที่ของแบบจำลองสำหรับแบบจำลองของ K- ε [25]

σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_μ
1.0	1.3	1.44	1.92	0.99

3.2.2 สมการการถ่ายเทของปริมาณสเกลาร์ สมการการถ่ายเทของพลังงานและก๊าซที่มีการเผาไหม้สามารถเขียนรูปแบบคล้ายสมการโมเมนตัม สมการการถ่ายเทเหล่านี้มีอยู่ 3 องค์ประกอบ 1) การพา 2) แพร่ 3) การสร้างหรือการสลายตัว

$$\frac{\partial(\overline{\rho \phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho u_j \phi})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} - \overline{\rho u_j'' \phi''} \right) + \overline{S_\phi} \quad (3.18)$$

พจน์แรกภายในวงเล็บทางขวามือของสมการเป็นผลการแพร่ของคุณสมบัติ (ϕ) และ พจน์ที่สองเป็นผลจากความปั่นป่วน ผลของความปั่นป่วนอาจจะแสดงในรูปคล้ายกับกรณีของโมเมนตัมได้ดังนี้

$$-\overline{\rho u_j'' \phi''} = \frac{\mu_{ed}}{\sigma_{\phi,i}} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \quad (3.19)$$

ซึ่ง $\sigma_{\phi,i}$ คือ Schmidt number ในกรณีของก๊าซ หรือค่า Prandtl number ในกรณีของ เอนทัลปี จากสมการ 3.18 สามารถเขียนได้ดังนี้

$$\frac{\partial(\bar{p}\tilde{\phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{p}\tilde{u}_j\tilde{\phi})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu_{ed}}{\sigma_{\phi,i}} + D_{\phi} \right) \frac{\partial\tilde{\phi}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}_{\phi} \quad (3.20)$$

สำหรับการไหลแบบปั่นป่วนที่มีการเผาไหม้จะมีข้อสมมุติว่า Schmidt และ Prandtl number เป็นค่าคงที่

3.2.3 สมการในรูปของพิกัดทรงกระบอก สมการที่ใช้ในการคำนวณถูกเขียนอยู่ในรูป พิกัดทรงกระบอกโดยพิจารณาให้เป็นแบบสมมาตรได้ตามสมการข้างล่างนี้

3.2.3.1 สมการความต่อเนื่อง

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\bar{\rho}\tilde{v}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho}\tilde{u}) = \bar{S}_m \quad (3.21)$$

$\bar{S}_m$ คือ แหล่งในการสร้างสำหรับการถ่ายเทของอนุภาคในระหว่างการเผาไหม้

3.2.3.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัม

ทิศทางการแนวรัศมี

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\bar{\rho}\tilde{v}\tilde{v}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{v}) = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\mu_{eff} \frac{\partial\tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial\tilde{v}}{\partial z} \right) + \bar{S}_v + \bar{S}_{m,v} \quad (3.22)$$

$$\text{ซึ่ง } \bar{S}_v = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\mu_{eff} \frac{\partial\tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial\tilde{v}}{\partial z} \right) + \frac{\bar{\rho}\tilde{v}^2}{r} - 2\mu_{eff} \frac{\tilde{v}}{r^2} \quad (3.23)$$

และ $\bar{S}_{m,v}$ คือ การถ่ายโอนของโมเมนตัมที่เกิดขึ้นในปริมาตรควบคุมโดยอนุภาคของแข็งทิศทางการแนวรัศมี

ทิศทางการแนวแกน

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{u}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{u}) = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\mu_{eff} \frac{\partial\tilde{u}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial\tilde{u}}{\partial z} \right) + \bar{S}_u + \bar{S}_{m,u} \quad (3.24)$$

$$\text{ซึ่ง } \bar{S}_u = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\mu_{eff} \frac{\partial\tilde{u}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial\tilde{u}}{\partial z} \right) \quad (3.25)$$

และ $\bar{S}_{m,w}$ คือ การถ่ายโอนของโมเมนตัมเกิดขึ้นในปริมาตรควบคุมโดยอนุภาคของแข็งทิศทางการ
แนวแกน

ทิศทางการแนวเส้นรอบวง (ทิศ θ)

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{w}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{w}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{w}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right) + \bar{S}_w + \bar{S}_{m,w} \quad (3.26)$$

$$\text{ซึ่ง} \quad \bar{S}_w = -\tilde{w} \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{v}}{r} + \frac{\mu_{eff}}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mu_{eff}}{\partial r} \right) \quad (3.27)$$

และ $\bar{S}_{m,w}$ คือ การถ่ายโอนของโมเมนตัมที่เกิดขึ้นในปริมาตรควบคุมโดยอนุภาคของแข็งทิศทางการ
ตามแนวเส้นรอบวง

3.2.3.3 สมการการถ่ายเทความร้อนปั่นป่วน พลังงานจลน์ของความปั่นป่วนและอัตรา
การสลายตัวของมันสามารถแสดงให้อยู่ในรูปแบบได้ดังนี้

สมการการเคลื่อนย้ายพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \tilde{v} K) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \tilde{u} K) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_K} \frac{\partial K}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_K} \frac{\partial K}{\partial z} \right) + G + \bar{\rho} \varepsilon \quad (3.28)$$

$$\text{ซึ่ง } G = \mu_{eff} \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\tilde{v}}{r} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right)^2 + \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\tilde{w}}{r} \right) \right]^2 \right\} \quad (3.29)$$

สมการการเคลื่อนย้ายของอัตราการสลายตัวของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \tilde{v} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \tilde{u} \varepsilon) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{K} G + C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{K} \quad (3.30)$$

3.2.3.4 การเคลื่อนย้ายของสเกลาร์

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{\phi}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\phi}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{eff} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{eff} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial z} \right) + \bar{S}_\phi \quad (3.31)$$

$$D_{eff} = D_\phi + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{\phi,\varepsilon}} \quad (3.32)$$

3.2.4 การคำนวณค่าที่บริเวณผนัง บริเวณที่ใกล้ผนังจะใช้สมการก่อนหน้าในการคำนวณค่าจะได้ค่าที่ไม่ถูกต้อง ซึ่งมีอยู่ 2 ข้อสมมติฐานที่ใช้ในการคำนวณการถ่ายเทของโมเมนตัม พลังงานจลน์ของความปั่นป่วนและความร้อนที่บริเวณใกล้ผนังนั้นคือ 1) ความเค้นเฉือนของของไหลเท่ากับความเค้นเฉือนที่ผนัง 2) ผลของการพาและแพร่มีปริมาณน้อยดังนั้น อัตราการเกิดพลังงานความปั่นป่วนอาจจะเท่ากับอัตราการสลายตัว [28]

y^+ คือ ตัวแปรไร้มิติของการไหลใกล้ผนังสามารถเขียนได้ดังนี้

$$y^+ = \frac{\bar{\rho} u_\tau y}{\mu_t} \quad (3.33)$$

ซึ่ง y คือระยะทางห่างจากผนัง และ u_τ คือสัดส่วนของความเร็วสามารถเขียนได้ดังนี้

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (3.34)$$

ซึ่ง τ_w คือ ความเค้นเฉือนที่ผนัง ขอบเขตของการไหลใกล้ผนังสามารถพิจารณาได้ 2 บริเวณคือ

- 1) $0 < y^+ < 11.63$: เป็นบริเวณของการไหลแบบราบเรียบซึ่งการฟุ้งกระจายแบบราบเรียบคือส่วนสำคัญ ($\mu_t \gg \mu_l$) และสมมุติการไหลเป็นแบบ Newtonian
- 2) $11.63 < y^+ < 300$: เป็นบริเวณของการไหลแบบปั่นป่วนซึ่งการฟุ้งกระจายแบบปั่นป่วนคือส่วนสำคัญ ($\mu_t \gg \mu_l$)

3.2.4.1 สมการอนุพันธ์โมเมนตัมที่บริเวณใกล้ผนัง ความเค้นเฉือนของการอนุพันธ์โมเมนตัมที่บริเวณใกล้ผนัง มีอยู่ 2 ขอบเขต คือ

- 1) ชั้นการไหลแบบราบเรียบ: ในชั้นนี้ความเค้นเฉือน คือผลที่ได้จากความหนืด และเกรเดียนต์ของความเร็ว ซึ่งจะขนานกับผนัง ($\tau = \mu_l \frac{d\tilde{u}}{dy} = \tau_w$)
- 2) ชั้นการไหลแบบปั่นป่วน: ในชั้นนี้ความเค้นเฉือนเกิดขึ้นโดย $\tau = \mu_t \frac{d\tilde{u}}{dy} = \tau_w$ ซึ่งค่า Eddy viscosity มีค่าเท่ากับ $\mu_t = \bar{\rho} \kappa y u_\tau$ [28] และ κ เป็นค่าคงที่ของ Von Karman รูปแบบของความเค้นเฉือนได้มาจาก

$$\tau = \bar{\rho} \kappa^{1/2} C_\mu^{1/4} \frac{\kappa \tilde{u}}{\ln(y^+)} \quad (3.35)$$

3.2.4.2 สมการพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนและการสลายตัวที่บริเวณใกล้ผนัง
สมการพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนไม่คำนวณผลของการพาและการแพร่ อัตราการก่อตัวของ
พลังงานจลน์ของความปั่นป่วนเท่ากับอัตราการสลายตัว

$$-\bar{\rho}\tilde{u}''\tilde{v}''\frac{\partial\tilde{u}}{\partial y}=\bar{\rho}\varepsilon \quad (3.36)$$

เมื่อใช้กับข้อสมมติฐานของ Boussinesq สำหรับการไหลที่ใกล้ผนังความเค้นเฉือนสามารถ
เขียนได้ดังนี้

$$\tau_{turb}=-\bar{\rho}\tilde{u}''\tilde{v}''=\mu_t\frac{\partial\tilde{u}}{\partial y} \quad (3.37)$$

โดยพิจารณาความเค้นเฉือนที่ใกล้ผนังและชั้นของการไหล อัตราการก่อตัวและอัตราการ
สลายตัวของพลังงานจลน์ที่บริเวณใกล้ผนังสามารถเขียนได้ดังนี้

$$K=C_\mu^{-1/2}\frac{\tau_w}{\rho} \quad (3.38)$$

$$\varepsilon=\frac{C_\mu^{3/4}K^{3/2}}{\kappa y} \quad (3.39)$$

3.2.4.3 พลังงานของการถ่ายเท สมมติว่าฟลักซ์ของความร้อน $\dot{q}_b$ ในชั้นของ
ขอบเขตเป็นค่าคงที่สามารถเขียนได้ดังนี้

$$\dot{q}_b=\Gamma_{eff}\frac{dh}{dy}=\dot{q}_w,\Gamma_{eff}=\Gamma+\Gamma_t \quad (3.40)$$

ซึ่ง Γ_{eff} คือ สัมประสิทธิ์การนำความร้อนประสิทธิผล

1) ในชั้นของการไหลแบบราบเรียบ ($0 < y^+ < 11.63$) $\dot{q}_w=\frac{\mu}{\sigma_h}\frac{dh}{dy}$ ซึ่ง σ_h คือ Prandtl number

ของการไหลแบบราบเรียบ

2) ในชั้นของการไหลแบบปั่นป่วน ($11.63 < y^+ < 300$) $\dot{q}_w=\frac{\mu_t}{\sigma_{h,t}}\frac{d\tilde{h}}{dy}$ ซึ่ง $\sigma_{h,t}$ คือ Prandtl

number ของการไหลแบบปั่นป่วน [29] Jayatilke ฟลักซ์ของความร้อนสามารถแสดงได้ดังนี้

$$\dot{q}_w=\frac{\bar{\rho}u_\tau(\tilde{h}+h_w)}{\sigma_{\phi,t}\left[u^++P\left(\frac{\sigma_\phi}{\sigma_{\phi,t}}\right)\right]} \quad (3.41)$$

สมการ 3.42 แทนความต้านทานของการถ่ายเทความร้อน

$$\text{ซึ่ง} \quad P\left(\frac{\sigma_{\phi}}{\sigma_{\phi,i}}\right) = 9.29 \left[\frac{\sigma_{\phi}^{3/4}}{\sigma_{\phi,i}} + 1 \right] \quad (3.42)$$

3.2.5 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ของก๊าซ การเผาไหม้ของก๊าซโดยใช้ถ่านหินผงไม่สามารถอธิบายได้ด้วยการเผาไหม้แบบ Premixed หรือการแพร่กระจาย ได้มีแบบจำลองอยู่หลายวิธีที่ได้เสนอการจำลองการเผาไหม้ของถ่านหินผง [30] แบบจำลองของ [11] ซึ่งเป็นแบบจำลองที่ง่ายและใช้เวลาคำนวณได้รวดเร็วสำหรับการใช้ในการฝึกหัด อัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหยถูกกำหนดให้มีความสัมพันธ์กับอัตราการเสื่อมสลายของกระแสน้ำมัน ซึ่งเปลี่ยนแปลงส่วนกลับของเวลาของ Large scale eddies โดยขึ้นอยู่กับค่า $\frac{\varepsilon}{K}$ แบบจำลองจะขึ้นอยู่กับความเข้มข้นของออกซิเจน เชื้อเพลิงและผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการเผาไหม้ค่าอัตราของปฏิกิริยาสามารถแสดงได้ดังนี้

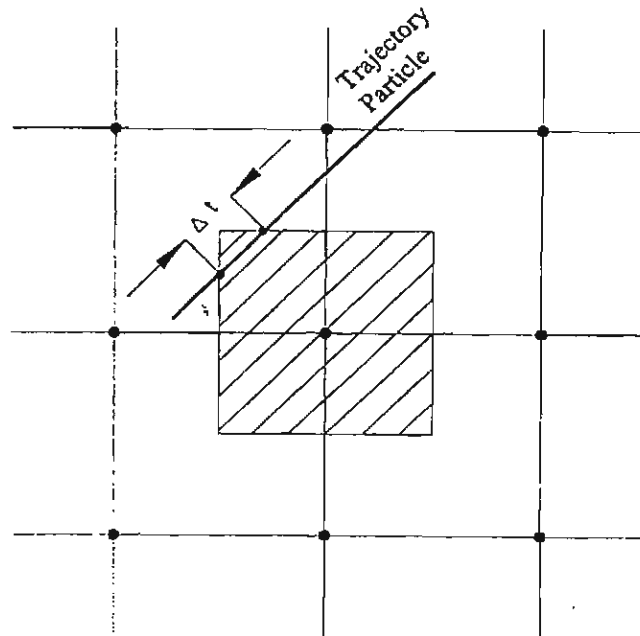
$$R_v = ACOM \rho \frac{\varepsilon}{K} \min\left(\tilde{\phi}_{fuel}, \frac{\tilde{\phi}_{ox}}{S_i}, BCOM \frac{\tilde{\phi}_{pr}}{1+S_i}\right) \quad (3.43)$$

R_v คือ ค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหย ACOM และ BCOM คือ ค่าคงที่ที่ได้จากการทดลอง ϕ_{fuel} คือ สัดส่วนโดยมวล (Mass fraction) ของสารระเหย ϕ_{ox} คือ สัดส่วนโดยมวลของออกซิเจน ϕ_{pr} คือ สัดส่วนโดยมวลของผลิตภัณฑ์จากการเผาไหม้ ซึ่งประกอบด้วยไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ และ S_i คือปริมาณ Stoichiometric ratio ของสารระเหย

3.3 แบบจำลองของอนุภาค [3]

การกระจายตัวของอนุภาคถ่านหินในห้องเผาไหม้ถูกจำลองโดยใช้วิธี Lagrangian สมมุติว่าอนุภาคของถ่านหินผงถูกปล่อยเข้าไปมีลักษณะเป็นทรงกลมและความหนาแน่นที่ทางเข้ามีค่าคงที่ โดยกำหนดตำแหน่งแน่นอน การกระจายขนาดของถ่านหินผงเหล่านั้นถูกแบ่งเป็นช่วง ๆ โดยแต่ละช่วงจะแทนด้วยขนาดเฉลี่ยของช่วงนั้น ๆ

การถ่ายเทของมวล โมเมนตัม และพลังงานของอนุภาคและก๊าซเกี่ยวข้องกับตำแหน่ง ซึ่ง Source terms สำหรับการคำนวณด้วย Eulerian สามารถหาค่าได้โดยใช้ Partical Source In Cell Techniques (PSICT) [30] จากรูปที่ 3.1 การกระจายตัวของอนุภาคเพื่อหาคำตอบสำหรับขนาดของอนุภาคและตำแหน่งเริ่มต้นโดยวิธีของ Lagrangian



รูปที่ 3.1 การกระจายตัวของอนุภาคโดยใช้วิธี Lagrangian ผ่านเซลล์

จากรูป ปริมาณของมวลโมเมนต์ และพลังงานที่ถ่ายเทจากอนุภาคคือ การอินทิเกรตอัตราการถ่ายเทดังกล่าวในช่วง Δt

3.3.1 สมการอนุรักษ์มวล การถ่ายเทมวลจากอนุภาคสู่ก๊าซสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\frac{dm_p}{dt} = -R_m \quad (3.44)$$

ซึ่ง R_m คืออัตราเชิงปริมาตรของ Mass efflux จากอนุภาคสู่ก๊าซโดยการปลดปล่อยสารระเหยหรือสารในการเผาไหม้ เครื่องหมายลบหน้า R_m หมายความว่ามวลของเฟสอนุภาคลดลง

3.3.1.1 แบบจำลองการปล่อยสารระเหย การศึกษาหาค่าการปลดปล่อยสารระเหยในอดีตบ่งชี้ว่าแบบจำลองของ [31] มีความเหมาะสมสำหรับจำลองการปลดปล่อยสารระเหยของถ่านหิน ได้มีการคิดแบบจำลองนี้โดยอัตราของสารระเหยที่ปล่อยออกมาถูกอธิบายในรูปของ Arrhenius function รวมกับกลุ่มของตัวแปรที่ได้จากการสังเกตในการทดลอง เขียนสมการได้ดังนี้

$$R_m = \frac{dV}{dt} = K_A (V^* - V) \quad (3.45)$$

V คือปริมาณสะสมของสารระเหยที่ปล่อยออกมา V^* คือ ปริมาณทั้งหมดของสารระเหยภายในถ่านหิน และค่า K_A คือ ค่าที่แสดงในรูปของ Arrhenius ได้ดังนี้

$$K_A = k_0 \exp\left(-\frac{E_{vol}}{R_u T}\right) \quad (3.46)$$

R_u คือค่าคงที่สากลของก๊าซ (Universal gas constant) T คือ ค่าอุณหภูมิสัมบูรณ์ k_0 คือค่าคงที่ของปฏิกิริยาสำหรับ Devolatilization ซึ่งหาได้จากการทดลองและให้ไว้ในบทที่ 5 และ E_{vol} คือค่าพลังงานการกระตุ้นของถ่านหิน

3.3.1.2 แบบจำลองการเผาไหม้ของซาร์ การจำลองการเผาไหม้ของซาร์เสนอโดย [32] ซึ่งสมมติว่าผลิตภัณฑ์ที่ได้ออกมาจะรวมตัวกับออกซิเจนอย่างสมบูรณ์ได้เป็นก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ แบบจำลองดังกล่าวใช้อธิบายอัตราการเผาไหม้ของซาร์ ซึ่งอัตรานี้ควบคุมโดย 2 กระบวนการ คือ อัตราจลนพลศาสตร์ของซาร์ และอัตราการแพร่ของออกซิเจนที่พื้นผิวของอนุภาคถ่านหิน

ปฏิกิริยาของซาร์เกิดขึ้นจากจลนพลศาสตร์ทางเคมี

อัตราปฏิกิริยาพลังงานจลน์ของซาร์และออกซิเจนอาจจะเขียนได้ดังนี้

$$R_c = K_c \{(P_{O_2})_o\}^n \quad (3.47)$$

ซึ่ง

$$K_c = K_0 \exp\left(-\frac{E}{R_u T}\right)^n \quad (3.48)$$

P_{O_2} คือความดันของออกซิเจนที่พื้นผิวของอนุภาค และ K_c คือสัมประสิทธิ์ของอัตราปฏิกิริยาทางเคมีกำลัง n มีค่าเท่ากับ 1 ถูกแนะนำโดย [14] K_0 คือ Frequency factor สำหรับปฏิกิริยาของซาร์ และ E คือผลกระทบบกับพลังงานการกระตุ้นปฏิกิริยาของซาร์

ปฏิกิริยาของซาร์เกิดขึ้นด้วยการแพร่ของออกซิเจน

แบบจำลองสำหรับอัตราการเผาไหม้ของอนุภาคที่เกิดขึ้นด้วยการแพร่ของออกซิเจนเป็นข้อกำหนดโดย [14]

$$R_c = K_d \{(P_{O_2})_\infty - (P_{O_2})_o\} \quad (3.49)$$

ซึ่ง

$$K_d = \frac{D_c M_c \phi}{\left\{ \frac{R_d}{2} \left(\frac{T_p + T_g}{2} \right) \right\}} \quad (3.50)$$

และ

$$D_c = D_0 \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T_g}{T_0} \right)^{1.75} \quad (3.51)$$

$(P_{O_2})_{\infty}$ คือ ความดันย่อยของออกซิเจน (Partial pressure) ของก๊าซรอบข้างที่พื้นผิวของอนุภาค M_c คือ มวลของอนุภาคคาร์บอน ϕ คือ ตัวแปรของกลไกกำหนดให้เท่ากับ 1.0 สำหรับการเกิดคาร์บอนมอนอกไซด์ R_d คือ เส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยของอนุภาค T_p และ T_g คือ อุณหภูมิสมบูรณ์ของอนุภาคและก๊าซตามลำดับ D_0 , P_0 และ T_0 ตามลำดับ คือ ค่าของการแพร่กระจายความดัน และอุณหภูมิมีค่าดังนี้ $(3.13 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s})$ $(1.013 \times 10^5 \text{ Pa})$ และ (1500 K) ตามลำดับ

อัตราการเผาไหม้ของสารจากจลนพลศาสตร์ทางเคมีและการแพร่ของออกซิเจน

อัตราปฏิกิริยารวมเกิดขึ้นภายใต้เงื่อนไขการเกิดปฏิกิริยาของสาร ถ้าอุณหภูมิสูงหรือค่า Reactivity variety ของถ่านหินมีค่าสูง อัตราปฏิกิริยารวมถูกควบคุมโดยอัตราการแพร่ของออกซิเจน แต่ถ้ามีบริเวณที่มีออกซิเจนมากกับอุณหภูมิของอนุภาคค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นอยู่กับอัตราจลนพลศาสตร์ของการเกิดปฏิกิริยาไปยังพื้นผิวของถ่านหิน K_i คือ ค่าสัมประสิทธิ์ของอัตราทั้งหมดคาดว่าจะเขียนได้ดังนี้

$$K_i = \frac{1}{\left\{ \left(\frac{1}{K_c} \right) + \left(\frac{1}{K_d} \right) \right\}} \quad (3.52)$$

อัตราการเผาไหม้สำหรับเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค (d_p) สามารถเขียนได้ดังนี้คือ

$$\frac{\partial m}{\partial t} = K_i \pi d_p^2 P X_{O_2} \quad (3.53)$$

ซึ่ง P คือ ความดันของก๊าซ X_{O_2} คือ สัดส่วนโดยโมลของออกซิเจนในบริเวณก๊าซรอบข้าง

3.3.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัมของอนุภาค

3.3.2.1 การเคลื่อนที่เฉลี่ยของอนุภาค การสมดุลโมเมนตัมของอนุภาคที่เคลื่อนที่อาจจะเขียนได้ดังนี้

$$\frac{dm_p \tilde{u}_i}{dt} = \sum \bar{F}_i \quad (3.54)$$

พจน์ทางด้านขวามือของสมการเป็นผลจากแรงกระทำภายนอก (การเปลี่ยนแปลงของความดัน ผลของ Coriolis ผลของ Magnus แรงโน้มถ่วงและแรงฉุดที่เกิดขึ้นโดยความแตกต่างของความเร็วระหว่างอนุภาคและการไหลแบบปั่นป่วน) ในการเผาไหม้ของถ่านหินสมมุติว่าแรงที่เกิดขึ้นจากการเปลี่ยนแปลงความดัน แรงโน้มถ่วงและผลของ Magnus มีค่าน้อยสามารถตัดทิ้งในคำนวณได้ [30] ดังนั้นแรงฉุดอาจจะเขียนในรูปสมการได้ดังนี้ [33]

$$F_d = C_D \rho \frac{A_p}{2} (\tilde{U}_g - \tilde{U}_p) |\tilde{U}_g - \tilde{U}_p| \quad (3.55)$$

ซึ่ง
$$C_D = (1 + 0.15 \text{Re}_p^{0.687}) \frac{\text{Re}_p}{24} \quad (3.56)$$

$\tilde{U}_g$ คือค่าความเร็วที่เวลาเฉลี่ยของก๊าซ $\tilde{U}_p$ คือค่าความเร็วที่เวลาเฉลี่ยของอนุภาคถ่านหิน A_p คือพื้นที่หน้าตัดของอนุภาค ρ คือค่าความหนาแน่นของก๊าซ C_D คือสัมประสิทธิ์แรงฉุด และ Re_p คือ ค่า Reynolds number ของอนุภาคกำหนดโดย :

$$\text{Re}_p = \frac{\rho |\tilde{U}_g - \tilde{U}_p| d_p}{\mu} \quad (3.57)$$

ซึ่ง μ คือความหนืดจลนพลศาสตร์ของก๊าซ และ d_p คือเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค สมการสำหรับสมดุลของโมเมนตัมอาจจะเขียนในรูปพิกัดทรงกระบอกได้ดังนี้

$$\text{ทิศทางการแนวแกน} : \frac{d\tilde{u}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{u}_p - \tilde{u}_g) \quad (3.58)$$

$$\text{ทิศทางการแนวรัศมี} : \frac{d\tilde{v}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{v}_p - \tilde{v}_g) + \frac{\tilde{w}_p^2}{r_p} \quad (3.59)$$

$$\text{ทิศทางการแนวเชิงมุม} : \frac{d\tilde{w}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{w}_p - \tilde{w}_g) + \frac{\tilde{v}_p \tilde{w}_p}{r_p} \quad (3.60)$$

ซึ่ง $\alpha = \frac{18\mu C_D \text{Re}_p}{24\rho_p d_p^2}$ และ r_p คือระยะทางจากแกนสมมาตรของอนุภาค

3.3.2.2 การกระจายของอนุภาคเกิดขึ้นจากความปั่นป่วน แบบจำลองของ Lockwood [9] ใช้อธิบายการกระจายตัวของอนุภาคเกิดขึ้นจากความปั่นป่วน ซึ่งความเร็วในการ

กระจายของอนุภาคสมมุติว่ามีความสัมพันธ์กับความเร็วของก๊าซที่แกว่งไปมาสามารถเขียนสมการได้ดังนี้

$$u_{disp.} = c_{1d} (\overline{u^{n^2}})^{1/2} \quad (3.61)$$

$$v_{disp.} = c_{2d} (\overline{v^{n^2}})^{1/2} \quad (3.62)$$

ซึ่งค่า C_{1d} และ C_{2d} คือค่าคงที่ที่ได้จากการทดลองซึ่งถูกสมมุติโดย [9] เท่ากับ 1 ประยุกต์กับข้อสมมติฐานของ Boussinesq ความเร็วที่แกว่งไปมาสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\overline{u^{n^2}} = -c_a 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} K \quad (3.63)$$

$$\overline{v^{n^2}} = -c_b 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{2}{3} K \quad (3.64)$$

ซึ่งค่า C_a และ C_b คือค่าคงที่เฉพาะเท่ากับ 1 ความเร็วของการกระจายสามารถแสดงอยู่ในพจน์ของการเปลี่ยนแปลงความเร็วเฉลี่ยและพลังงานจลน์

$$u_{disp.} = c_1 \left(-c_a 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} K \right)^{1/2} \quad (3.65)$$

$$v_{disp.} = c_2 \left(-c_b 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{2}{3} K \right)^{1/2} \quad (3.66)$$

ดังนั้น

$$\frac{d\tilde{u}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{u}_p \pm u_{disp.} - \tilde{u}_g) \quad (3.67)$$

$$\frac{d\tilde{v}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{v}_p \pm v_{disp.} - \tilde{v}_g) + \frac{\tilde{w}^2}{r_p} \quad (3.68)$$

สมมุติว่าการไหลเป็นแบบสมมาตรตามแนวแกน ผลก่อกำให้เกิดการกระจายของอนุภาคในทิศทางตามแนวเชิงมุมสามารถละทิ้งได้

$$\frac{d\tilde{w}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{w}_p - \tilde{w}_g) + \frac{\tilde{v}_p \tilde{w}_p}{r_p} \quad (3.69)$$

แบบจำลองสำหรับการกระจายของอนุภาคในการไหลแบบปั่นป่วนซึ่งการทำนายเป็นวิธีของ [34]

3.3.3 สมการอนุรักษ์พลังงาน การเปลี่ยนแปลงพลังงานความร้อนภายในอนุภาคเป็นจากการรวมการถ่ายเทความร้อนของอนุภาคและความร้อนที่เกิดขึ้นโดยการเผาไหม้ของสารความร้อนที่ปล่อยออกมากับการสูญเสียน้ำหนักในระหว่างการเผาไหม้ของสารและความร้อนของการระเหยในระหว่างกระบวนการปล่อยสารระเหยสมการสมดุลอุณหพลศาสตร์กลายเป็น

$$\frac{d(m_p c_p T_p)}{dt} = m_p \dot{Q}_i - c_p T_p \left(-\frac{dm_p}{dt} \right) - L_v \frac{dm_p}{dt} \quad (3.70)$$

ซึ่ง

$$\dot{Q}_i = \dot{Q}_{conv.} + \dot{Q}_{rad.} + \dot{Q}_{comb.}$$

L_v คือค่าความจุความร้อนจำเพาะของการเปลี่ยนสถานะจากของแข็งเป็นก๊าซของถ่านหิน

c_p คือค่าความจุความร้อนจำเพาะของอนุภาค

T_p คืออุณหภูมิสัมบูรณ์ของอนุภาค

การคำนวณสำหรับการพาความร้อน แผ่รังสี และแหล่งกำเนิดความร้อนเนื่องจากการเผาไหม้ได้ให้ไว้ดังนี้

3.3.3.1 การถ่ายเทความร้อนโดยการพา สมมติว่ารูปแบบของอุณหภูมิที่พื้นผิวของอนุภาคและภายในบรรยากาศของก๊าซรอบข้าง ซึ่งอัตราการพาความร้อนสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\dot{Q}_{conv.} = \frac{\pi d_p^2 h (T_g - T_p)}{m_p} \quad (3.71)$$

d_p คือเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค m_p คือมวลของอนุภาค และ h คือสัมประสิทธิ์การพาความร้อน ให้เท่ากับ

$$h = Nu \frac{k_g}{d_p} \quad (3.72)$$

ซึ่ง $Nu = 2.0 + 0.6 Re^{0.5} Pr^{0.33}$

การนำความร้อนของก๊าซ k_g ซึ่งแนะนำโดย [32] เขียนได้ดังนี้

$$k_g = 6.379 \times 10^{-5} T_g + 6.446 \times 10^{-3}$$

3.3.3.2 การถ่ายเทความร้อนเกิดขึ้นโดยการแผ่รังสี สมมุติให้ระบบเป็นแบบ Gray system คือการแผ่รังสีที่ Emissivity กับ Absorptivity เท่ากัน และอนุภาคมีลักษณะเป็นทรงกลม สมการการถ่ายเทความร้อนที่เกิดขึ้นโดยการแผ่รังสี สามารถเขียนได้ดังนี้

$$\dot{Q}_{rad} = \pi \sigma \epsilon_p \frac{d_p^2}{m_p} (T_R^4 - T_p^4) \quad (3.73)$$

ซึ่ง σ คือค่าคงที่ของ Stefan-Boltzman เท่ากับ $5.67 \times 10^{-8} \text{ J/m}^2\text{sK}^4$ ϵ_p คือการแผ่รังสีของพื้นผิวอนุภาค T_p คือ อุณหภูมิของอนุภาค และ T_R อุณหภูมิจากการแผ่รังสี

3.3.3.3 แหล่งกำเนิดความร้อนของผลิตภัณฑ์ด้วยการเผาไหม้ของซาร์ H_c คือค่าความร้อนของคาร์บอนภายในซาร์ สามารถเขียนได้ดังนี้

$$\dot{Q}_{comb.} = \frac{\eta H_c}{m_p} \left(-\frac{dm_p}{dt} \right) \quad (3.74)$$

ซึ่ง η คือ สัดส่วนของความร้อนที่เข้าสู่อนุภาคต่อความร้อนที่เกิดขึ้นจากการเผาไหม้โดยอนุภาค ปล่อยความร้อนออกสู่ก๊าซรอบข้างซึ่งสัมพันธ์กับปฏิกิริยาเคมี, Field [14]

3.4 แบบจำลองการแผ่รังสีความร้อน [3]

สำหรับการหาค่าของอุณหภูมิการแผ่รังสีได้ใช้ แบบจำลองการกระจายตัวของการแผ่รังสีแบบไม่เสถียร โดย [35] ในการศึกษา ซึ่งร่วมกับ เทคนิคที่เรียกว่า Truncated moment expansion [30, 36] แบบจำลองสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{3K_e} \nabla T_R^4 \right) = (K_g + \bar{\epsilon}_p K'_p) T_R^4 - K_g T_g^4 - \bar{\epsilon}_p K'_p \bar{T}_p^4 \quad (3.75)$$

$$\text{ซึ่ง} \quad T_R = \frac{1}{4\sigma} \int_{4\pi} I d\omega \quad (3.76)$$

$$\text{และ} \quad K_e = K_g + K'_p [\bar{\epsilon}_p + (1 - \bar{\epsilon}_p)(1 - f)] \quad (3.77)$$

T_R คืออุณหภูมิการแผ่รังสี σ คือค่าคงที่ของ Stefan-Boltzman T_g คือ อุณหภูมิสมบูรณ์ของก๊าซ $\bar{T}_p$ คืออุณหภูมิสมบูรณ์เฉลี่ยของอนุภาค K_g คือสัมประสิทธิ์การดูดกลืนของก๊าซ K'_p คือพื้นที่ภาพฉายของอนุภาคด้วยขนาดทั้งหมดต่อ 1 หน่วยปริมาตรของก๊าซ K_e คือสัมประสิทธิ์

การดูดกลืนของของผสม ก๊าซ และ อนุภาคถ่านหิน ϵ คือตัวแปรของการกระจาย และ $\bar{\epsilon}_p$ คือการแผ่รังสีเฉลี่ยของอนุภาคโดยเขียนได้ดังนี้ $\epsilon_p = x_{ub} + 0.6(1 - x_{ub})$ ซึ่ง x_{ub} คือ สัดส่วนที่ไม่ได้เผาไหม้ของมวลตั้งเดิมของชาร์

การแผ่รังสีความร้อนที่บริเวณผนังสามารถ คำนวณได้โดยการสมมติว่าผนังมีการแผ่รังสีเท่ากับการดูดกลืนรังสีและที่สำหรับรังสีตั้งนั้น $\epsilon_w + r_w = 1$ สมการสำหรับเงื่อนไขที่ผนังอาจจะเขียนได้ดังนี้

$$-\frac{1}{3K_e} \frac{\partial T_R^4}{\partial n} = \frac{1}{2} \frac{\{(1 - \bar{r}_w)T_R^4 - \bar{\epsilon}_w \bar{T}_w^4\}}{(1 + \bar{r}_w)} \quad (3.78)$$

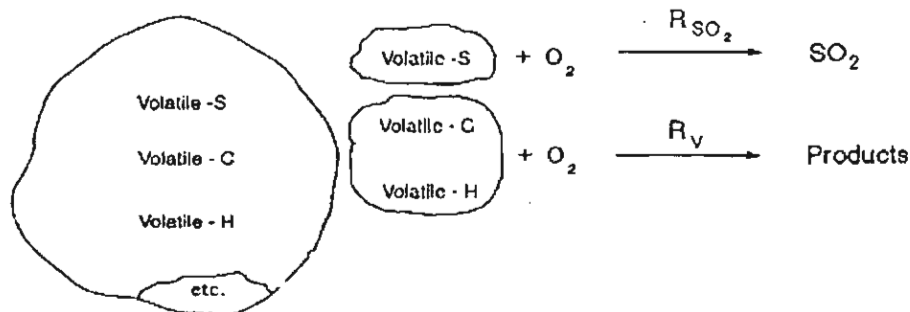
ซึ่ง $\bar{T}_w$ คืออุณหภูมิสมมุติเฉลี่ยของผนัง $\bar{\epsilon}_w$ คือการแผ่รังสีเฉลี่ยที่ผนัง และ $\bar{r}_w$ คือการสะท้อนรังสีเฉลี่ยที่ผนัง อัตราสุทธิของการถ่ายเทพลังงานเนื่องมาจากการแผ่รังสีของก๊าซและอนุภาคต่อ 1 หน่วยปริมาตรอาจจะแสดงได้ดังนี้

$$S_{g,h} = 4\sigma K_g (T_R^4 - T_g^4) \quad (3.79)$$

$$\text{และ} \quad S_{p,h} = 4\sigma \bar{\epsilon}_p K'_p (T_R^4 - T_g^4) \quad (3.80)$$

3.5 แบบจำลองของออกไซด์ของกำมะถัน [3, 4, 5, 37]

ถ่านหินเมื่อถูกทำให้ร้อนจะปลดปล่อยสารระเหยโดยส่วนที่เหลือในรูปของแข็งคือคาร์บอนและขี้เถ้า สารระเหยที่มีกำมะถันเป็นองค์ประกอบจะเผาไหม้โดยรวมตัวกับอากาศจะก่อให้เกิดออกไซด์ของกำมะถันและก๊าซอื่น ๆ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้ได้สมมติว่ากำมะถันในสารระเหยเมื่อเผาไหม้ได้รวมตัวกับออกซิเจนด้วยอัตราการรวมตัวที่สัมพันธ์กับอัตราการผสมกันของกระแสปั่นป่วน เนื่องจากอัตราทางจลนพลศาสตร์ของปฏิกิริยาดังกล่าวสูงกว่าอัตราการผสมของกระแสปั่นป่วน [37] จากรูปที่ 3.2 สามารถอธิบายการเกิดออกไซด์ของกำมะถันที่ประกอบอยู่ภายในสารระเหยได้



รูปที่ 3.2 การเกิดออกไซด์ของกำมะถันของการเผาไหม้สารระเหย

จากปฏิกิริยาดังรูปที่ 3.2 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้ได้ใช้สมมติฐานที่ว่ากำมะถันในสารระเหยรวมตัวกับออกซิเจนเกิดเป็นก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ทั้งหมด สมมติฐานดังกล่าวเป็นผลจากการสังเกตที่ว่าก๊าซซัลเฟอร์มอนอกไซด์ ซึ่งเกิดขึ้นในห้องเผาไหม้มีสถานะไม่เสถียรและทำปฏิกิริยากับออกซิเจนอย่างรวดเร็ว ขณะที่ก๊าซ SO_2 นั้นถูกสร้างเพียงเล็กน้อย [5] การเผาไหม้ของถ่านหินภายในห้องเผาไหม้ที่สารตั้งต้นไม่ได้ผสมกันมาก่อนนั้น เมื่ออุณหภูมิห้องเผาไหม้สูงกว่า $1000^\circ C$ อัตราการเกิดปฏิกิริยาเชิงจลพลศาสตร์จะสูงกว่าอัตราการผสมกันของสารตั้งต้น ดังนั้นจึงทำปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วเมื่อผสมกัน การผสมกันแบบปั่นป่วนจึงมีอิทธิพลต่อปฏิกิริยาทั้งหมดกล่าวคือปฏิกิริยาจะถูกควบคุมโดยอัตราการผสมของความปั่นป่วนซึ่งยังเป็นสมมติฐานที่ใช้สำหรับเชื้อเพลิง และอากาศที่เข้ามาผสมกันในห้องเผาไหม้ (Non-premixed combustion) เช่นกัน ความสัมพันธ์พื้นฐานระหว่างอัตราการก่อตัวของซัลเฟอร์ไดออกไซด์กับอัตราการเผาไหม้ของสารระเหยคือสมการข้างล่างนี้

$$R_{SO_2} = x_s \cdot R_v \quad (3.81)$$

R_{SO_2} คือค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ x_s คือสัดส่วนโดยมวลของกำมะถัน R_v คืออัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหย ซึ่งได้จากสมการ 3.43

บทที่ 4

การประยุกต์วิธี Finite volume กับการก่อตัวของ ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ภายในห้องเผาไหม้ของถ่านหินผง

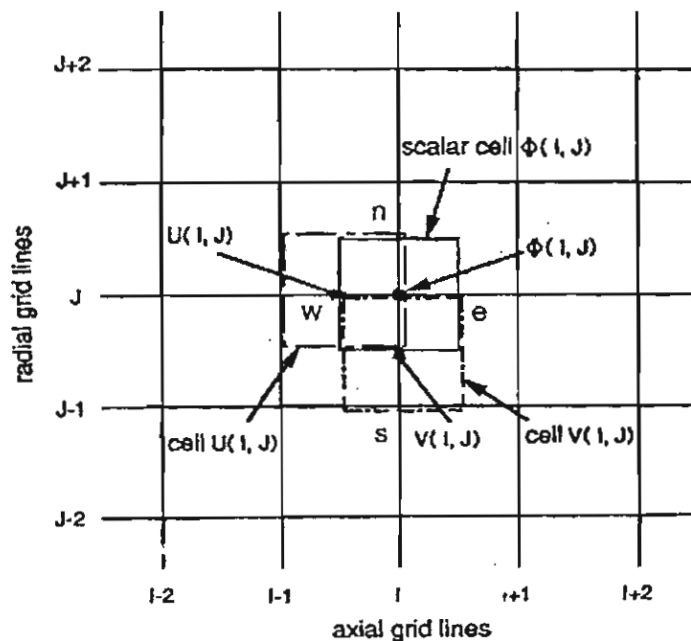
4.1 การประยุกต์ใช้วิธี Finite volume [10]

สมการที่ให้ไว้พิสูจน์ในบทที่ 3 เป็นการพิจารณาสมการทางคณิตศาสตร์ของระบบการเผาไหม้ของถ่านหินผงที่เกิดขึ้นในปริมาตรควบคุม (Control volume) สมการที่นำมาใช้จะอยู่ในรูปของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย โดยพิจารณาการแก้ปัญหาด้วยวิธี Finite volume ซึ่งเป็นวิธีหนึ่งในการวิเคราะห์เชิงตัวเลข (Numerical method) รูปแบบทั่ว ๆ ไปของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยของระบบการเผาไหม้ถ่านหินผงสามารถเขียนสมการให้อยู่ในรูปของการพา การฟุ้งกระจาย และ Source term ให้อยู่รวมกันดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial x_i} [\rho \bar{u}_i \bar{\Phi}] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Gamma_{\phi, eff} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_i} \right] + S_{g, \phi} + S_{p, \phi} \quad (4.1)$$

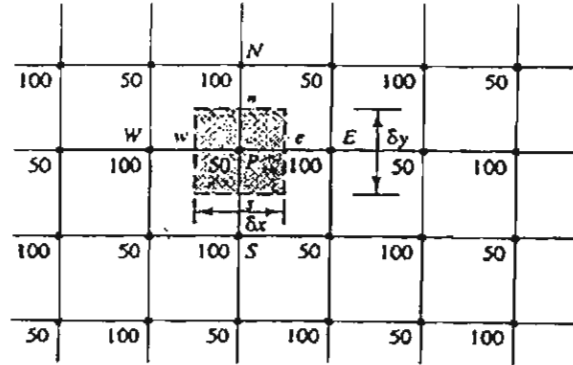
$S_{g, \phi}$ คือ Source term ของก๊าซ

$S_{p, \phi}$ คือ Source term ของอนุภาคของแข็ง



รูปที่ 4.1 เซลล์ของสเกลาร์และเวกเตอร์ในระบบ Staggered grid [38]

การแบ่งกริดของห้องเผาไหม้เป็นแบบ Staggered grid ดังรูปที่ 4.1 ในการแบ่งกริดแบบธรรมดาจะเกิดปัญหา เช่น บางกรณีสนามความดันอาจจะเป็น Checker-board ซึ่งค่าความสูงต่ำของความดันสามารถแสดงได้ดังรูป 4.2 ที่เกิดปัญหาของ Checker-board



รูปที่ 4.2 สนามความดันที่เกิด Checker-board [38]

ความดันที่ e และ w หาค่าได้โดย Linear interpolation เทอมของเกรเดียนต์ของความดัน $\partial p / \partial x$ ในสมการ u-momentum เขียนได้ดังนี้

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{p_e - p_w}{\delta x} = \frac{\left(\frac{p_E + p_P}{2} \right) - \left(\frac{p_P + p_W}{2} \right)}{\delta x} \\ &= \frac{p_E - p_W}{2\delta x} \end{aligned} \quad (4.2)$$

และ เกรเดียนต์ของความดัน $\partial p / \partial y$ สำหรับในสมการ v-momentum เขียนได้ดังนี้

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{p_N - p_S}{2\delta y} \quad (4.3)$$

นำค่าความดันที่รูป 4.2 แทนลงในสมการ 4.2 และ 4.3 จะพบว่า เกรเดียนต์ทุก ๆ จุดมีค่าเป็นศูนย์ ทำให้คำตอบที่ได้มาไม่สามารถเกิดขึ้นได้ในความเป็นจริง เป็นผลมาจากเกรเดียนต์ของความดัน ในโมเมนต์หายไป ดังนั้นเพื่อเป็นการแก้ปัญหาดังกล่าวแบบจำลองห้องเผาไหม้นี้จึงได้แบ่งกริดเป็นแบบ Staggered grid เสนอโดย [11]

การแก้ปัญหแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยวิธี Finite volume จะจัดสมการให้อยู่ในรูปแบบของปริมาตรควบคุมโดยทำการอินทิเกรตสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยภายในขอบเขตของปริมาตรที่มีขนาดจำกัด ซึ่งสมการต่างๆ ไปของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \bar{u}_i \bar{\Phi} - \Gamma_{\phi, eff} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_i} \right] - S_{\phi, i} = 0 \quad (4.4)$$

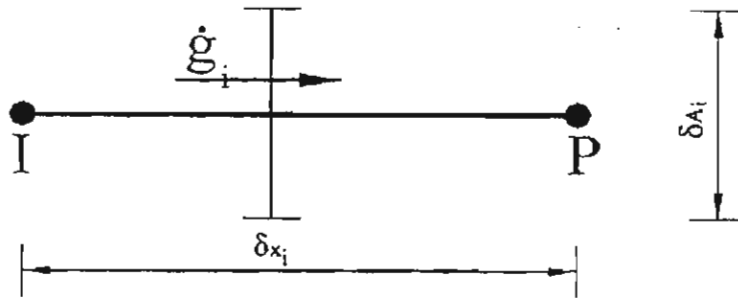
รูปอินทิเกรตสมการ 4.2 ภายในปริมาตรควบคุมสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\sum \int_{A_i} \left(\rho \bar{u}_i \bar{\Phi} - \Gamma_{\phi, eff} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_i} \right) dA_i - \int_V S_{\phi, i} \cdot dV = 0 \quad \text{เมื่อ } i = n, w, s, e$$

$$-\dot{g}_w + \dot{g}_e - \dot{g}_s + \dot{g}_n - \int_V S_{\phi, T} \cdot dV = 0 \quad (4.5)$$

เมื่อ

$$\dot{g}_i = \int_{A_i} \left(\rho \bar{u}_i \bar{\Phi} - \Gamma_{\phi, eff} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_i} \right) \cdot dA_i \quad (4.6)$$



รูปที่ 4.3 การถ่ายเท 1 มิติ ของฟลักซ์ผ่านขอบเขตระหว่างตำแหน่ง I และ P

ค่าอินทิเกรตของ $\dot{g}_i$ คือฟลักซ์ของการพาและการกระจายทั้งหมดที่ผ่านพื้นผิวของปริมาตรควบคุม สามารถหาค่าได้ของคำตอบแบบแม่นยำ การถ่ายเท 1 มิติของฟลักซ์ผ่านขอบเขต A_i ดังรูปที่ 4.3 สามารถเขียนได้ดังนี้

$$\dot{g}_i = F_i \left(\Phi_P + \frac{\Phi_P - \Phi_I}{\exp(P_{e_i}) - 1} \right) \quad (4.7)$$

เมื่อ

$$P_{e_i} = \frac{(\rho u)_e (\delta x)_e}{\Gamma_e} = \frac{F_e}{D_e} \quad \text{ค่า Peclet number ที่ตำแหน่งเซลล์}$$

จากสมการ 4.5 แทนลงในปริมาตรควบคุม ซึ่ง $\dot{g}_e - \dot{g}_w = 0$ จะได้สมการดังนี้

$$F_e \left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\exp(P_{e_e}) - 1} \right) - F_w \left(\phi_W + \frac{\phi_W - \phi_P}{\exp(P_{e_w}) - 1} \right) = 0 \quad (4.8)$$

ซึ่งสามารถเขียนให้อยู่ในแบบฟอร์มพื้นฐานได้ดังนี้

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W$$

เมื่อ

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{F_e}{\exp(F_e/D_e) - 1} \\ a_W &= \frac{F_w \exp(F_w/D_w)}{\exp(F_w/D_w) - 1} \\ a_P &= a_E + a_W + (F_e - F_w) \end{aligned} \quad (4.9)$$

4.2 โครงสร้างของโปรแกรมโดยทั่วไป [38]

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้ได้ทำการคำนวณความเร็ว ความดัน อุณหภูมิ คุณสมบัติต่าง ๆ ของการเผาไหม้ ฯลฯ ภายในห้องเผาไหม้ โดยใช้สมการ ความต่อเนื่อง โมเมนตัม การถ่ายเทพลังงานของความร้อน อัตรานำ $\bar{p}, \bar{u}, \bar{v}, \bar{w}, K, \epsilon$ สมการการเผาไหม้ ฯลฯ แต่ความดันไม่มีสมการที่เกี่ยวข้องแต่จะรวมกับความเร็วในสมการโมเมนตัมโดยนำวิธี PISO algorithm (Pressure Implicit Split Operator) ซึ่งโครงสร้างของ PISO สามารถอธิบายโดยรูป 4.5 และการหาค่าตัวแปรของสมการโดยใช้วิธี Hybrid scheme แก้สมการโมเมนตัม เพื่อหาค่า $\bar{p}, \bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ แล้วใช้วิธี Quick scheme แก้สมการการเคลื่อนย้ายเพื่อหาค่า K, ϵ คุณสมบัติต่าง ๆ ของการเผาไหม้ โดยจะใช้วิธี TDMA ในการแก้สมการเพื่อให้ได้คำตอบของระบบสมการ

4.2.1 The Hybrid scheme ค่าจากสมการข้างบนอยู่นั้นจัดให้อยู่ในรูปอย่างง่ายของคำตอบแบบแม่นยำ ซึ่งได้มาจากการอินทิเกรตสมการ 4.4 ความสัมพันธ์ที่เชื่อมต่อกันระหว่างวิธี Exponential scheme และ Hybrid scheme สามารถที่จะเขียนสัมประสิทธิ์ a_E หรือตัวแปรไร้มิติ a_E/D_e เหมือนกับฟังก์ชันของ Peclet number P_e จาก สมการ 4.7 ได้ดังนี้

$$\frac{a_E}{D_e} = \frac{P_e}{\exp(P_e) - 1} \quad (4.10)$$

สำหรับ $P_e < -2$

$$\frac{a_E}{D_e} = -P_e$$

สำหรับ $-2 \leq P_e \leq 2$

$$\frac{a_E}{D_e} = 1 - \frac{P_e}{2}$$

สำหรับ $P_e > 2$,

$$\frac{a_e}{D_e} = 0$$

สามารถเขียนให้อยู่ในรูปสมการได้ดังนี้

$$\frac{\dot{g}_i}{(\rho \bar{u} A)_i} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[(1 + P_e^{-1}) \bar{\Phi}_I + (1 - P_e^{-1}) \bar{\Phi}_p \right] & \text{for } -2 < P_e < 2 \\ \bar{\Phi}_I & \text{for } P_e > 2 \\ \bar{\Phi}_p & \text{for } P_e < -2 \end{cases} \quad (4.11)$$

นำสมการ 4.9 มาแทนในสมการ 4.3 เพื่อจะได้สมการดังนี้

$$(a_p - S_\phi) \bar{\Phi}_p = \sum a_i \bar{\Phi}_I + S_u + S_{p,\phi} \quad (4.12)$$

ซึ่ง Source term ของสมการ 4.3 จะมีค่าดังนี้

$$\int_V S_{\phi,T} dV = S_{g,\phi} + S_{p,\phi}$$

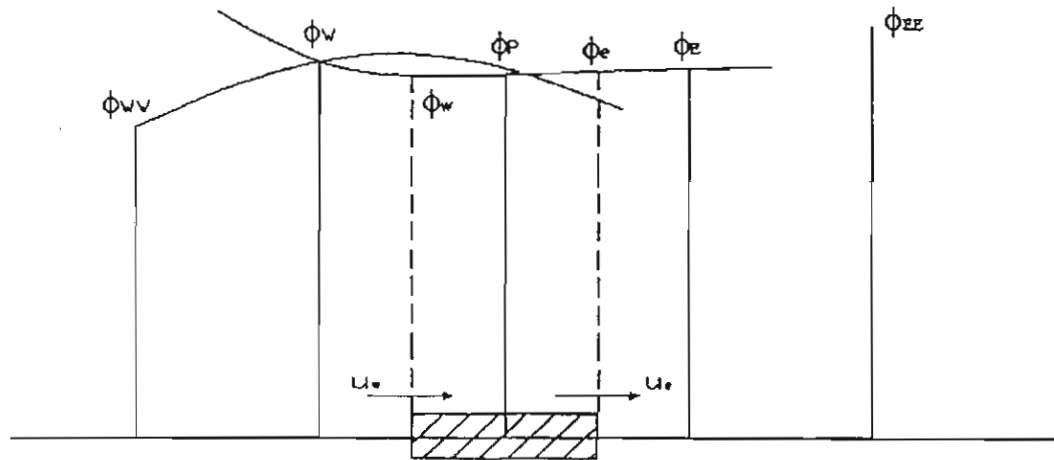
และ Source term ของก๊าซมีค่าเท่ากับ

$$S_{g,\phi} = S_u + S_\phi \bar{\Phi}_p$$

สัมประสิทธิ์ของสมการ 4.10 กำหนดได้ดังนี้

$$\begin{aligned} a_p &= \sum_i a_i = a_n + a_w + a_s + a_e \\ \sum_i a_i \bar{\Phi}_I &= a_n \bar{\Phi}_n + a_w \bar{\Phi}_w + a_s \bar{\Phi}_s + a_e \bar{\Phi}_e \\ a_i &= (\rho \bar{u} A f)_i = \left[\left(\frac{\rho \bar{u}}{2} - \frac{\mu}{\delta I} \right) A \right]_i \end{aligned}$$

4.2.2 The Quick scheme เป็นวิธีที่ใช้ 3 จุดประมาณค่าแบบสมการกำลังสอง ที่ผิวหน้าของปริมาตรควบคุมโดยที่ค่าของตัวแปร จะได้มาจากฟังก์ชัน Quadratic ที่ผ่านจุด 2 จุดที่อยู่แต่ละด้านของผิวหน้าและผ่านโหนดของตัวแปรที่อยู่ก่อนหน้านี



WW	W	w	P	e	E	EE
I-2	I-1	i-1	I	i+1	I+1	I+2

รูปที่ 4.4 รูปร่าง Quadratic function ใช้ใน Quick scheme [38]

สูตรในการแปลงค่าคือ $\Phi_{face} = \frac{6}{8}\Phi_{i-1} + \frac{3}{8}\Phi_i - \frac{1}{8}\Phi_{i-2}$

ถ้า $F_w > 0$ และ $F_e > 0$

$$\Phi_w = \frac{6}{8}\Phi_W + \frac{3}{8}\Phi_P - \frac{1}{8}\Phi_{WW}$$

$$\Phi_i = \frac{6}{8}\Phi_P + \frac{3}{8}\Phi_E - \frac{1}{8}\Phi_w$$

ถ้า $F_s > 0$ และ $F_n > 0$

$$\Phi_s = \frac{6}{8}\Phi_S + \frac{3}{8}\Phi_P - \frac{1}{8}\Phi_{SS}$$

$$\Phi_n = \frac{6}{8}\Phi_P + \frac{3}{8}\Phi_N - \frac{1}{8}\Phi_s$$

ถ้า $F_w < 0$ และ $F_e < 0$

$$\Phi_w = \frac{6}{8}\Phi_P + \frac{3}{8}\Phi_W - \frac{1}{8}\Phi_E$$

$$\Phi_e = \frac{6}{8}\Phi_E + \frac{3}{8}\Phi_P - \frac{1}{8}\Phi_{EE}$$

ถ้า $F_s < 0$ และ $F_n < 0$

$$\Phi_s = \frac{6}{8}\Phi_P + \frac{3}{8}\Phi_S - \frac{1}{8}\Phi_N$$

$$\Phi_n = \frac{6}{8}\Phi_N + \frac{3}{8}\Phi_P - \frac{1}{8}\Phi_{NN}$$

เมื่อรวมสมการทั้งหมดและทำการจัดรูปใหม่จะได้

$$a_P \Phi_P = a_E \Phi_E + a_W \Phi_W + a_{EE} \Phi_{EE} + a_{WW} \Phi_{WW} + a_N \Phi_N + a_S \Phi_S + a_{NN} \Phi_{NN} + a_{SS} \Phi_{SS} + a_P^0 \Phi_P^0 + S_U$$

โดยที่

$$\Phi = u, v, T, P$$

$$a_P = a_E + a_W + a_{EE} + a_{WW} + a_N + a_S + a_{NN} + a_{SS} + a_P^0 + \Delta F - S_P$$

$$\Delta F = F_e - F_w + F_n - F_s$$

$$a_w = D_w + \frac{6}{8}\alpha_w F_w + \frac{1}{8}\alpha_e F_e + \frac{3}{8}(1 - \alpha_w)F_w$$

$$a_{ww} = -\frac{1}{8}\alpha_w F_w$$

$$a_E = D_e - \frac{3}{8}\alpha_e F_e - \frac{6}{8}(1-\alpha_e)F_e - \frac{1}{8}(1-\alpha_w)F_w$$

$$a_{EE} = \frac{1}{8}(1-\alpha_e)F_e$$

$$\alpha_w = 1 \text{ สำหรับ } F_w > 0 \text{ และ } \alpha_e = 1 \text{ สำหรับ } F_e > 0$$

$$\alpha_w = 0 \text{ สำหรับ } F_w < 0 \text{ และ } \alpha_e = 0 \text{ สำหรับ } F_e < 0$$

$$a_s = D_s + \frac{6}{8}\alpha_s F_s + \frac{1}{8}\alpha_n F_n + \frac{3}{8}(1-\alpha_s)F_s$$

$$a_{ss} = -\frac{1}{8}\alpha_s F_s$$

$$a_n = D_n - \frac{3}{8}\alpha_n F_n - \frac{6}{8}(1-\alpha_n)F_n - \frac{1}{8}(1-\alpha_s)F_s$$

$$a_{nn} = \frac{1}{8}(1-\alpha_n)F_n$$

$$\alpha_s = 1 \text{ สำหรับ } F_s > 0 \text{ และ } \alpha_n = 1 \text{ สำหรับ } F_n > 0$$

$$\alpha_s = 0 \text{ สำหรับ } F_s < 0 \text{ และ } \alpha_n = 0 \text{ สำหรับ } F_n < 0$$

$$a_p^0 = \frac{\rho^0 \Phi_p^0}{\Delta t}$$

$$S_U = S_u \Delta V$$

$$S_p = S_p \Delta V$$

4.3 การแก้เมทริกซ์โดยวิธี TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm)

ในการพิจารณาปัญหาการเผาไหม้ของถ่านหินผงในห้องเผาไหม้โดยใช้ วิธี PISO มีลำดับการทำงานดังรูปที่ 4.5 จะได้สมการซึ่งสามารถจัดรูปให้อยู่ในรูปเมทริกซ์ได้ ซึ่งจะใช้ TDMA ในการแก้เมทริกซ์ เพื่อให้ได้คำตอบที่เราต้องการโดยสามารถอธิบายได้ดังนี้

เมื่อเราได้สมการของแต่ละโหนด ซึ่งสามารถเขียนอยู่ในรูป

$$\begin{array}{rcl}
 \phi_1 & & = C_1 \\
 -\beta_2 \phi_1 + D_2 \phi_2 - \alpha_2 \phi_3 & & = C_2 \\
 -\beta_3 \phi_2 + D_3 \phi_3 - \alpha_3 \phi_4 & & = C_3 \\
 -\beta_4 \phi_3 + D_4 \phi_4 - \alpha_4 \phi_5 & & = C_4 \\
 \vdots & & \vdots \\
 -\beta_n \phi_{n-1} + D_n \phi_n - \alpha_n \phi_{n+1} & & = C_n \\
 \phi_{n+1} & & = C_{n+1}
 \end{array}$$

โดย ϕ คือค่าคุณสมบัติใด ๆ ที่พิจารณาภายในห้องเผาไหม้ (เช่น ความเร็วในทิศทางต่าง ๆ ความดัน ออกซิเจน ความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ เป็นต้น) เราสามารถเขียนรูปทั่วไปของสมการในแต่ละแถวได้ดังนี้

$$-\beta_j \phi_{j-1} + D_j \phi_j - \alpha_j \phi_{j+1} = C_j$$

สำหรับ ϕ_2 ถึง ϕ_n สามารถเขียนในรูปทั่วไปได้ต่อไปนี้

$$\phi_2 = \frac{\alpha_2}{D_2} \phi_3 + \frac{\beta_2}{D_2} \phi_1 + \frac{C_2}{D_2}$$

$$\phi_3 = \frac{\alpha_3}{D_3} \phi_4 + \frac{\beta_3}{D_3} \phi_2 + \frac{C_3}{D_3}$$

$$\phi_n = \frac{\alpha_n}{D_n} \phi_{n+1} + \frac{\beta_n}{D_n} \phi_{n-1} + \frac{C_n}{D_n}$$

ในขั้นตอนการหาคำตอบ เราจะให้วิธี Back-substitution ยกตัวอย่างเช่นในการหาค่าของ ϕ_3 เราจะใช้ค่าของ ϕ_2 มาแทนในสมการของ ϕ_3 จึงจะได้คำตอบตามต้องการ ซึ่งสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\phi_3 = A_3 \phi_4 + C'_3$$

โดย

$$A_3 = \frac{\alpha_3}{D_3 - \beta_3 A_2}$$

และ

$$C'_3 = \frac{\beta_3 C'_2 + C_3}{D_3 - \beta_3 A_2}$$

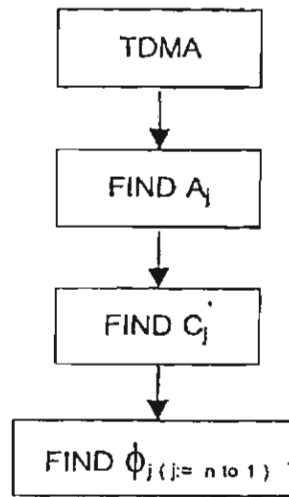
เราสามารถเขียนในรูปทั่วไปได้ดังนี้

$$\phi_j = A_j \phi_{j+1} + C'_j$$

$$A_j = \frac{\alpha_j}{D_j - \beta_j A_{j-1}}$$

$$C'_j = \frac{\beta_j C'_{j-1} + C_j}{D_j - \beta_j A_{j-1}}$$

สำหรับการแก้สมการหาค่า ϕ จะเริ่มการหาค่า A_j และ C_j สำหรับทุกค่า j ($j=1$ ถึง $j=n$) แล้วจึงหาค่า ϕ ย้อนกลับจาก ϕ_n ไปหา ϕ_1 หรือเขียนเป็นขั้นตอนดังนี้



สำหรับปัญหาใน 2 มิติ สมการเริ่มต้นที่ใช้ในการสร้างเมทริกซ์จะอยู่ในรูป

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_u$$

ในการแก้สมการเราจะเริ่มทำในแนว N-S ก่อน (ทิศ r) ดังนั้นสมการ จึงเป็น

$$-a_S \phi_S + a_P \phi_P - a_N \phi_N = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u$$

กำหนดให้

$$\begin{aligned} \alpha_j &= a_N \\ \beta_j &= a_S \\ D_j &= a_P \\ C_j &= a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u \end{aligned}$$

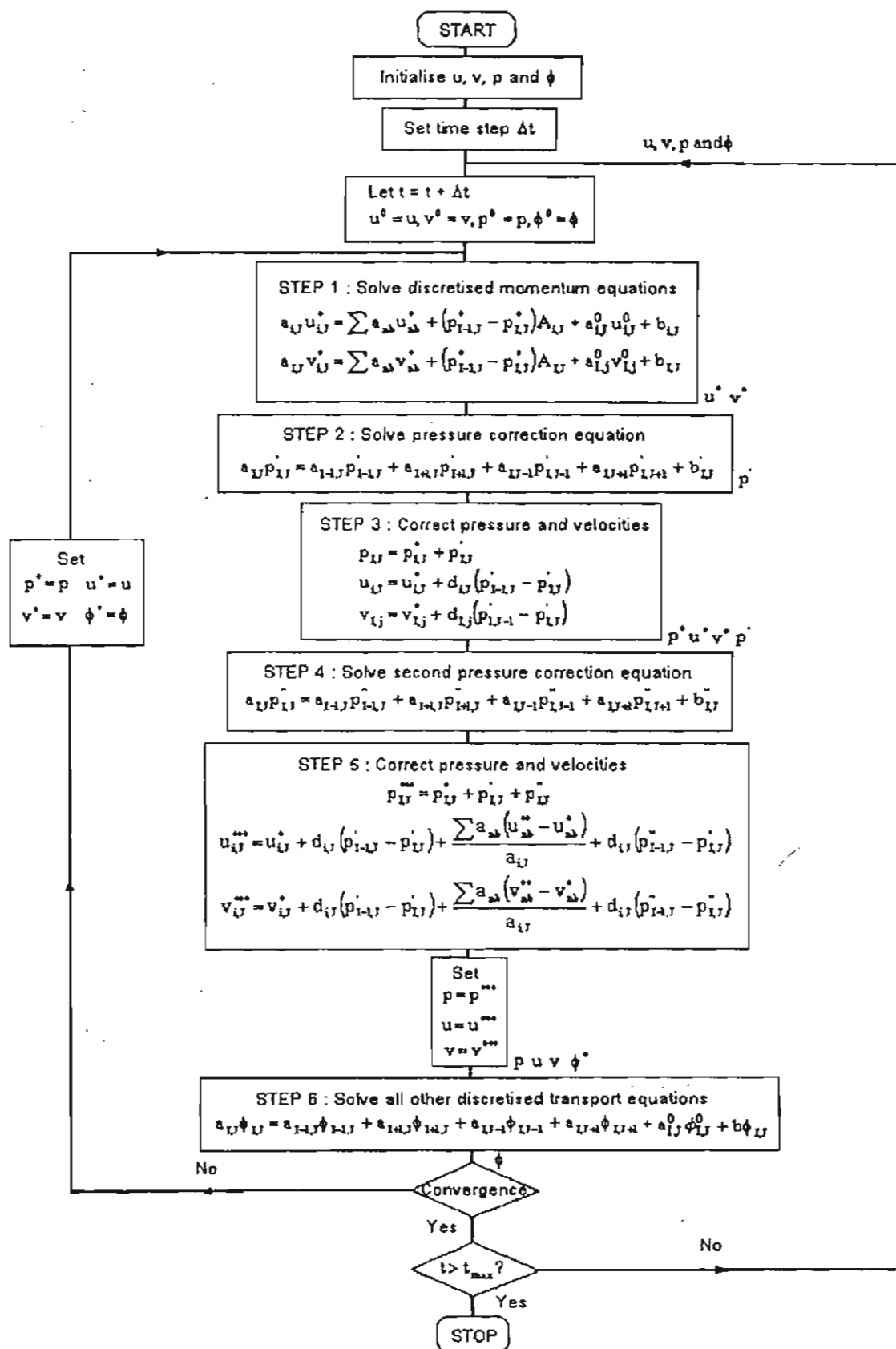
จากนั้นจึงใช้ขั้นตอนในข้างต้นแก้สมการหาค่า ϕ ในแนว N-S ก่อนโดยกำหนดค่าเริ่มต้น (Initial) สำหรับ ϕ ที่เราไม่ทราบค่า (ยกตัวอย่างเช่น ϕ_W สำหรับแนวกวาดแถวแรก ($i=1$) ในการหาค่าในรอบที่ 1 (Iteration ครั้งที่ 1)

หลังจากหาค่า ϕ ในแนว N-S ทุก ๆ แนวแล้ว (จบ Iteration ครั้งที่ 1) จึงเริ่มทำซ้ำจนกว่าค่าความแตกต่างระหว่าง ϕ_{new} และ ϕ_{old} จะน้อยกว่าค่าที่ตั้งไว้ ($|\phi_{new} - \phi_{old}| \leq e$) และวิธี TDMA ที่อธิบายข้างต้นนี้จะถูกเขียนไว้ใน Subroutine ที่ชื่อ LISOLV ซึ่งเป็นส่วนหนึ่งของโปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณคุณสมบัติต่าง ๆ

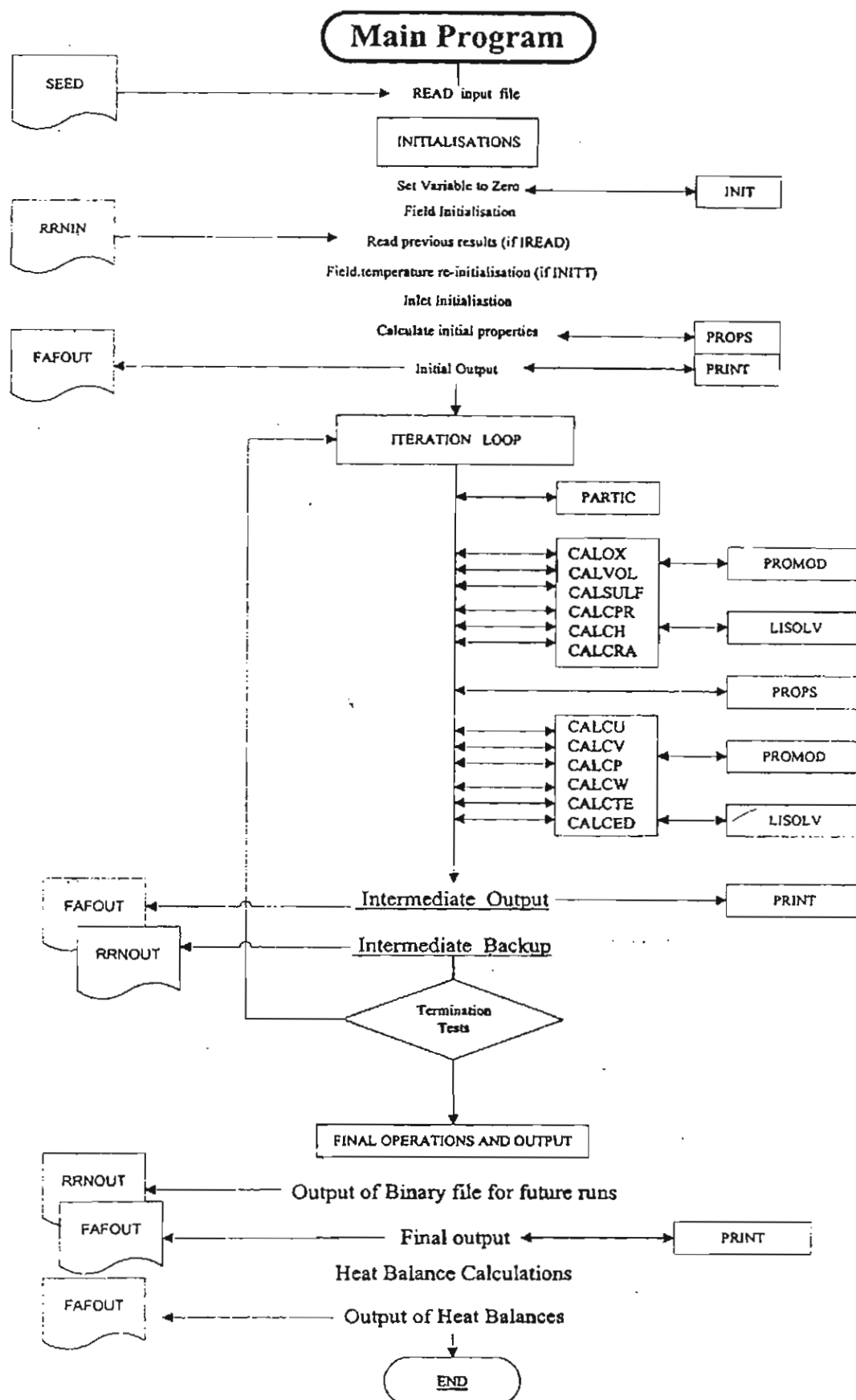
4.4 โครงสร้างโปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณ

ประกอบด้วยโปรแกรมหลัก (Main program) และ โปรแกรมย่อย (Subroutine) ต่าง ๆ ดังนี้

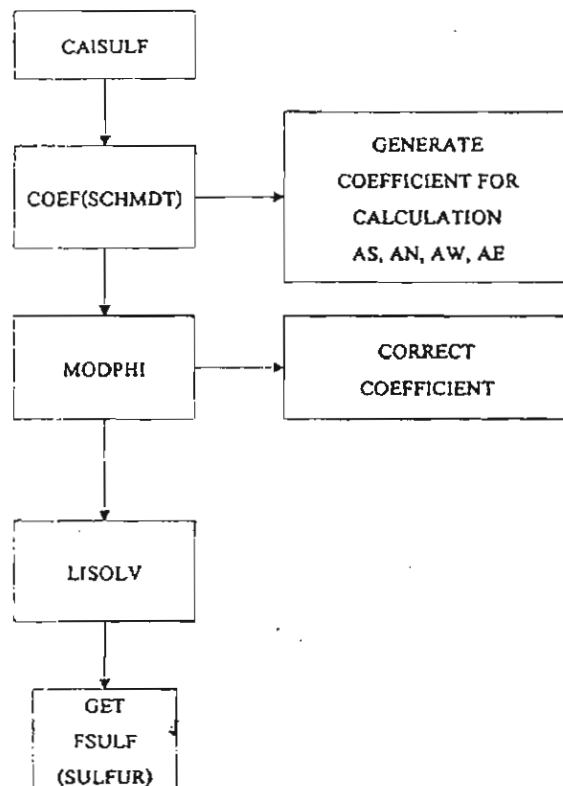
- โปรแกรมหลัก (Main program) ทำหน้าที่จัดลำดับการทำงานของ Subroutine ต่าง ๆ ให้ทำงานตามขั้นตอน
- โปรแกรมย่อย (Subroutine) ทำหน้าที่คำนวณค่าของพารามิเตอร์ต่าง ๆ ที่ต้องใช้ประกอบด้วย
- SEED ทำหน้าที่เป็น Input file ซึ่งเก็บค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆ ไว้ในตัวแปรที่กำหนดขึ้น
- INIT ทำหน้าที่กำหนดค่าของตัวแปรที่ใช้ในการคำนวณให้มีค่าเป็นศูนย์ก่อนเริ่มการคำนวณ
- PROPS ทำหน้าที่คำนวณความหนืดของของไหล
- PARTIC ทำหน้าที่คำนวณหาอนุภาคของแข็งภายในห้องเผาไหม้
- CALOX ทำหน้าที่คำนวณหาออกซิเจนภายในห้องเผาไหม้
- CALVOL ทำหน้าที่คำนวณหาสารระเหยภายในห้องเผาไหม้
- CALSULF ทำหน้าที่คำนวณหาซัลเฟอร์ไดออกไซด์ภายในห้องเผาไหม้
- CALCPR ทำหน้าที่คำนวณหาผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการเผาไหม้ภายในห้องเผาไหม้
- CALCH ทำหน้าที่คำนวณเอนทัลปีภายในห้องเผาไหม้
- CALCRA ทำหน้าที่คำนวณการแผ่รังสี ภายในห้องเผาไหม้
- CALCU ทำหน้าที่คำนวณความเร็วในทิศตามความยาวของห้องเผาไหม้ ($\bar{z}$ Direction)
- CALCV ทำหน้าที่คำนวณความเร็วในทิศทางรัศมีของห้องเผาไหม้ ($\bar{r}$ Direction)
- CALCP ทำหน้าที่คำนวณค่าของความดัน และแก้ไขค่าของความเร็วในทิศทาง $\bar{z}$ และ $\bar{r}$
- CALCW ทำหน้าที่คำนวณความเร็วในทิศทางวนรอบแกนของห้องเผาไหม้ ($\bar{\theta}$ Direction)
- CALCTE ทำหน้าที่คำนวณค่าพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน (K) ภายในห้องเผาไหม้
- CALCED ทำหน้าที่คำนวณค่าอัตราการสลายตัวของความปั่นป่วน (ε) ภายในห้องเผาไหม้
- PROMOD ประกอบด้วย MODU, MODV, MODW, MODU1, MODP, MODH และทำหน้าที่แก้ไข ค่าของสัมประสิทธิ์ในการคำนวณ ความเร็ว ความดัน เอนทัลปี ออกซิเจน ซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ฯลฯ
- LISOLV ทำหน้าที่แก้สมการที่ได้จากการสร้างสัมประสิทธิ์และ Source term โดยอาศัย TDMA (จากบทที่ 4) ในการแก้สมการหาค่าของพารามิเตอร์ใด ๆ
- PRINT ทำหน้าที่สร้าง Output file ที่ได้จากการคำนวณ



รูปที่ 4.5 อธิบายโครงสร้าง PISO algorithm [38]



รูปที่ 4.6 อธิบายโครงสร้างของโปรแกรมหลักที่ใช้คำนวณการเผาไหม้ของถ่านหินผง [3]



รูปที่ 4.7 อธิบายโครงสร้างของ Subroutine ที่คำนวณหาค่าปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

ซึ่งลำดับการทำงาน โครงสร้างของโปรแกรมหลักนี้สามารถแสดงโดยรูปที่ 4.6 เป็น Flowchart ที่อธิบายขั้นตอนการทำงานของโปรแกรมหลัก เมื่อโปรแกรมหลักรับค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆ ที่ใช้ในการคำนวณเข้ามาแล้ว (ค่าพารามิเตอร์นี้จะรับมาจาก Input file ที่ชื่อ SEED) จะทำการแยกข้อมูลสำหรับโปรแกรมย่อยแต่ละชุดเพื่อทำการคำนวณหาคำตอบที่เราต้องการ (FAFOUT) ซึ่งจะได้ค่าคุณสมบัติต่าง ๆ เช่น ความเร็ว ความดัน เอนทัลปี ออกซิเจน ความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ฯลฯ ที่ตำแหน่งต่าง ๆ ภายในห้องเผาไหม้ รูปที่ 4.7 เป็น Flowchart แสดงลำดับการทำงานสำหรับ Subroutine CALSULF ทำหน้าที่คำนวณหาปริมาณความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่เกิดขึ้นภายในห้องเผาไหม้

บทที่ 5

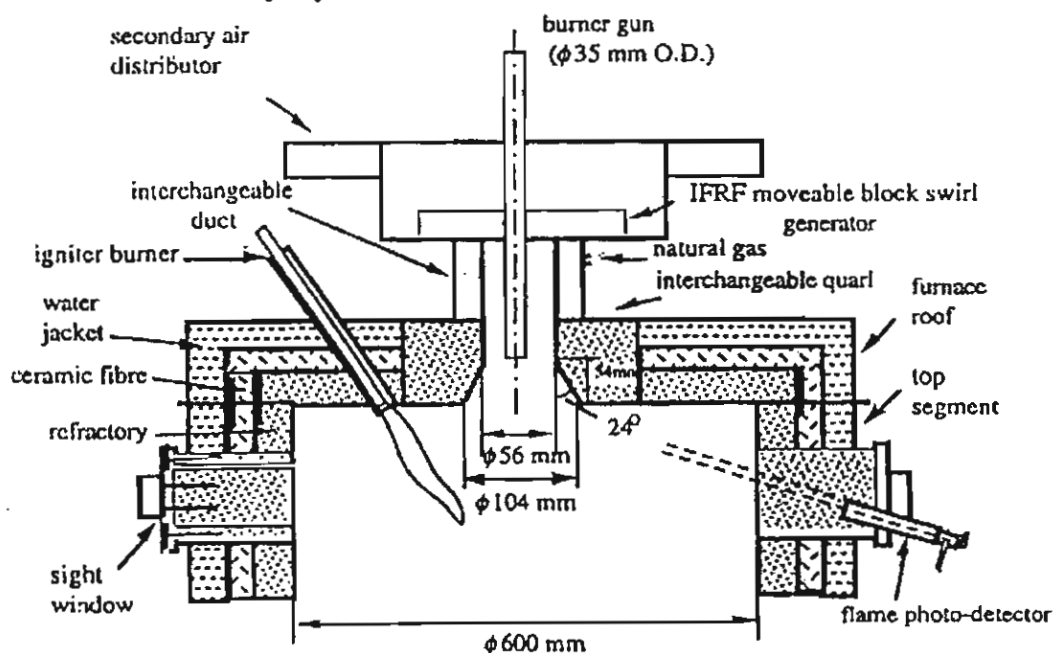
การจำลองการเผาไหม้ของเตาเผาที่ใช้ถ่านหินผง

5.1 บทนำ

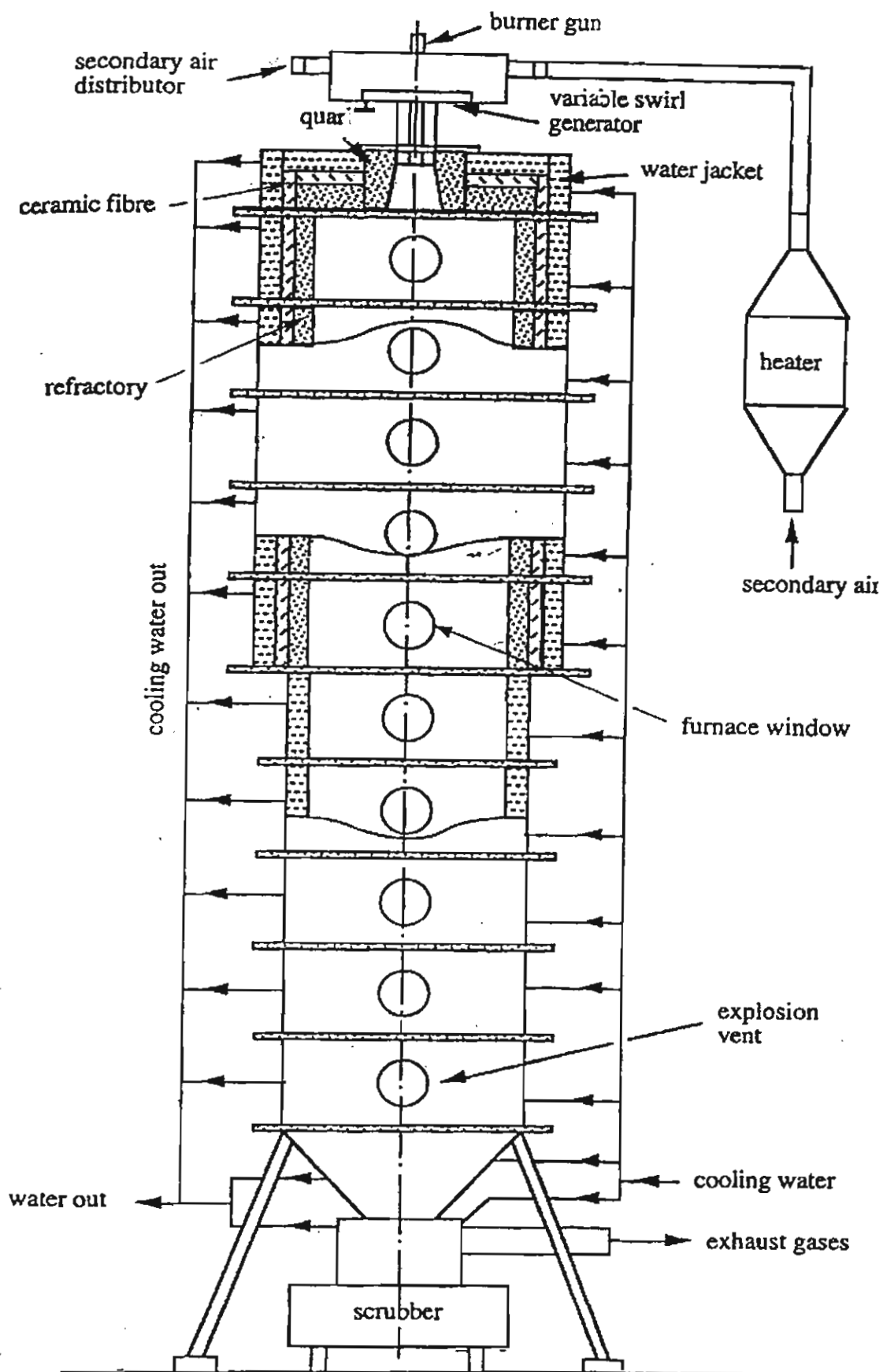
บทนี้เสนอผลการจำลองการก่อตัวและปริมาณออกไซด์ของกำมะถัน ภายในห้องเผาไหม้ ซึ่งเกิดจากการเผาไหม้ถ่านหินผง ด้วยวิธี Finite volume โดยพิจารณาเนื้อที่ในห้องเผาไหม้ประกอบ ด้วยปริมาตรเล็ก ๆ ดังรายละเอียดที่กล่าวไว้ในบทที่ 4 ผสมผสานกับแบบจำลองการสันดาปของ ถ่านหินผงที่ได้พัฒนาแล้ว (FAFNIR) โดย (ICSTM) ซึ่งพิจารณาสมการการถ่ายเทมวล โมเมนตัม พลังงานและการเผาไหม้ของถ่านหินผง

5.2 ลักษณะห้องเผาไหม้ [37]

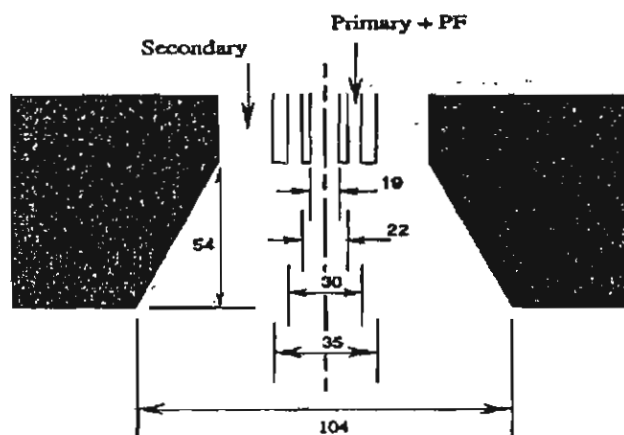
จากรูปที่ 5.1 แสดงโครงสร้างส่วนบนของเตาเผา ซึ่งมีหัวเผาติดตั้งอยู่ และรูปที่ 5.2 แสดง โครงสร้างภายนอกของเตาเผาที่ ICSTM มีลักษณะเป็นทรงกระบอกแนวตั้งและเปลวไฟติดลงด้านล่าง มีเส้นผ่านศูนย์กลางภายใน 0.6 เมตร และความยาวรวม 3.0 เมตร เส้นผ่านศูนย์กลางของหัวเผา (d) 0.056 เมตร มีการสร้างคอนกรีตทนไฟที่บริเวณใกล้หัวเผาเพื่อป้องกันการสูญเสียความร้อน ข้อมูลของอุปกรณ์การทดลองแสดงไว้ใน [37] รูปร่างของโครงสร้างหัวเผาที่ใช้มีชื่อว่า Single Annular Orifice (SAO) แสดงอยู่ในรูปที่ 5.3



รูปที่ 5.1 โครงสร้างส่วนบนของเตาเผา [37]



รูปที่ 5.2 โครงสร้างภายนอกของเตาเผาที่ ICSTM [37]



รูปที่ 5.3 โครงสร้างของหัวเผาในห้องเผาไหม้ [37]

การวิเคราะห์คุณสมบัติของถ่านหินผงและขนาดของอนุภาคเฉลี่ยที่ใช้ในการแบบจำลองการเผาไหม้นี้แสดงไว้ในตารางที่ 5.1 เงื่อนไขต่าง ๆ ที่ใช้การทดลองของเตาเผาสรุปไว้ในตารางที่ 5.2 แสดง ตารางที่ 5.3 แนะนำพารามิเตอร์ของพลังงานจลน์ที่ใช้โดยแบบจำลองการเผาไหม้ถ่านหินผงนี้ [37]

ตารางที่ 5.1 แสดงคุณสมบัติของถ่านหิน [37]

การวิเคราะห์แบบประมาณ	(% น้ำหนัก)
สารระเหย	35.8
คาร์บอนคงตัว	53.7
ความชื้น	6.3
การวิเคราะห์แบบแยกธาตุ	(% น้ำหนัก)
คาร์บอน	83.1
ไฮโดรเจน	4.35
ไนโตรเจน	1.29
กำมะถัน	1.55
ออกซิเจน	9.71
Partical size distribution:	(% น้ำหนัก)
0-10 μm	15.0
10-25 μm	25.0
25-40 μm	20.0
40-75 μm	20.0
>75 μm	20.0
ปริมาณความร้อน (MJ/kg)	29.29

ตารางที่ 5.2 แสดงเงื่อนไขการทำงานของเตา [37]

ช่องตรงกลางหัวเผา:	
อัตราการไหลของอากาศ, kg/s	2.777×10^{-4}
Swirl number	0.0
อุณหภูมิ, K	353
ช่องหัวเผาแรก:	
อัตราการไหลของอากาศ, kg/s	8.833×10^{-3}
Swirl number	0.0
อุณหภูมิ, K	353
ช่องหัวเผาที่สอง:	
อัตราการไหลของอากาศ, kg/s	3.344×10^{-2}
Swirl number	1.03
อุณหภูมิ, K	573
อากาศส่วนเกินในการเผาไหม้, (%)	15

ตารางที่ 5.3 แสดงพารามิเตอร์สำคัญที่ใช้โดยแบบจำลองการเผาไหม้ผ่านหินผง [37]

Kinetic parameters	E (J/kg-mol)	k_p, K_o
Devolatilization	7.4×10^7	$8.36 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$
Char reaction	1.02×10^8	$0.86 \text{ kg.s.Nm}^{-4}$

5.3 ผลการคำนวณและการวิเคราะห์ผล

การก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นผลมาจากความร้อน และปริมาณความเข้มข้นของออกซิเจน ในขณะที่เดียวกันเมื่อเกิดการเผาไหม้ถ่านซึ่งเป็นส่วนหนึ่งของสารระเหยรวมตัวกับออกซิเจนส่งผลต่อการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ซึ่งจะติดไฟพร้อมกับให้ความร้อนออกมา ดังนั้นจากความสัมพันธ์ของรูปที่ 5.4 ถึง 5.12 สามารถอธิบายการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ได้เป็นอย่างดี

5.3.1 วิเคราะห์ผลจากการไหลของอากาศพลศาสตร์ เส้นทางเดินเฉลี่ยของอนุภาค ความเข้มข้นของสารระเหย ความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ความเข้มข้นของออกซิเจนและการกระจายอุณหภูมิ จากรูปที่ 5.4 เราสามารถเห็น การไหลวนบริเวณทางออกของหัวเผา สนามการไหลนี้กำหนดทางเดินของอนุภาคผ่านหินผง บริเวณของการไหลวนที่มีการไหลย้อนกลับของ

อนุภาคอยู่ในช่วง 0.09-0.14 เมตร จากทางออกของหัวเผา การไหลกลับทิศทางของอนุภาคเหล่านี้ทำให้เข้าสู่บริเวณที่กำลังเผาไหม้ ทำให้อนุภาคปลดปล่อยสารระเหยอย่างสมบูรณ์ในบริเวณอุณหภูมิสูง กรณีดังกล่าวเกิดจากออกซิเจนถูกใช้ในการเผาไหม้เกิดการผสมอย่างรุนแรงเกิดขึ้นระหว่างกระแสการไหลไปข้างหน้าของกระแสการไหลจากช่องทางเข้า Secondary inlet กับกระแสการไหลย้อนกลับยังถึงกลางหัวเผาก่อให้เกิดการเผาไหม้อย่างต่อเนื่อง

รูป 5.5 แสดงทางเดินของอนุภาคด้านหิน จากรูปในช่วงระยะ 0.05-0.18 เมตรจากทางออกของหัวเผา อนุภาคของด้านหินมีการไหลย้อนกลับจะสัมพันธ์กับช่วงของอากาศไหลวนในรูปที่ 5.4 ทำให้อนุภาคของด้านหินได้ผสมกับอากาศเกิดการเผาไหม้ ช่วงการไหลวนของอนุภาคนี้เมื่อได้รับความร้อนอนุภาคจะปลดปล่อยสารระเหย ปกคลุมก้อนคาร์บอนแข็ง การเผาไหม้นี้เป็นการรวมตัวของสารระเหยกับออกซิเจนเกิดการเผาไหม้ในสถานะก๊าซในช่วงดังกล่าว จนกระทั่งสารระเหยที่ปลดปล่อยออกมาถูกเผาไหม้จนหมด ภายในปฏิกิริยาดังกล่าวจะเกิดก๊าซอื่น ๆ อีกหลายชนิด เช่น ก๊าซคาร์บอนที่ประกอบอยู่ในสารระเหยจะถูกปล่อยออกมาพร้อมกับการทำปฏิกิริยาของสารระเหยกับออกซิเจน ฯลฯ ส่วนที่เหลือจากการเผาไหม้ของก๊าซจะอยู่ในรูปของแข็งคือคาร์บอนจะรวมตัวกับออกซิเจนเกิดการเผาไหม้ของของแข็งจะอยู่ในช่วงประมาณ 0.25 เป็นต้นไปจนกระทั่งการเผาไหม้อนุภาคจนหมด

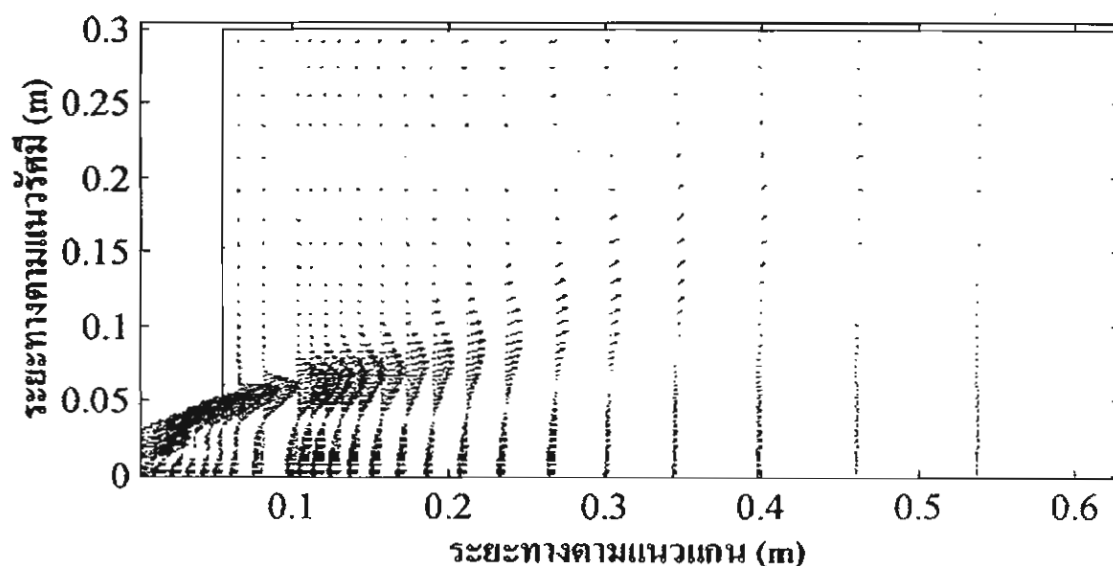
รูปที่ 5.6 แสดงความเข้มข้นของสารระเหยที่ปล่อยออกมาจากอนุภาคด้านหินผง จากรูปสังเกตได้ว่าปริมาณความเข้มข้นของสารระเหยปล่อยออกมาก อยู่ในช่วง 0.05-0.18 เมตร จากทางออกของหัวเผา ลักษณะที่เกิดขึ้นนี้มีความสัมพันธ์และอธิบายได้ด้วยรูปที่ 5.4 และ 5.5 บริเวณที่มีปริมาณความเข้มข้นของสารระเหยสูงนั้นเกิดขึ้นจากอนุภาคที่ป้อนเข้าสู่ห้องเผาไหม้มีเส้นทางเดินดังรูปที่ 5.5 และเป็นผลมาจากการไหลของอากาศพลศาสตร์ดังรูปที่ 5.4 ผสมกับปริมาณความร้อนที่เหมาะสม จึงเกิดการปลดปล่อยสารระเหยในช่วงดังกล่าว

รูปที่ 5.7 แสดงการกระจายตัวความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ก๊าซคาร์บอนในสารระเหยเมื่อเผาไหม้ได้รวมตัวกับออกซิเจนเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ความเข้มข้นของก๊าซดังกล่าวจะมากในช่วง 0.03-0.15 เมตร จากทางออกของหัวเผา ปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นจะสัมพันธ์กับรูปที่ 5.6 บริเวณที่มีสารระเหยปริมาณสูงก็จะปล่อยก๊าซคาร์บอนออกมาในปริมาณสูงเช่นกัน ส่วนบริเวณ 0.05-0.15 เมตร ตามแนวรัศมีของห้องเผาไหม้จะเกิดการสะสมปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์อยู่ในปริมาณไม่สูงนักเกิดจากการพาของอากาศใน Secondary air สะสมด้านบนต่อไป

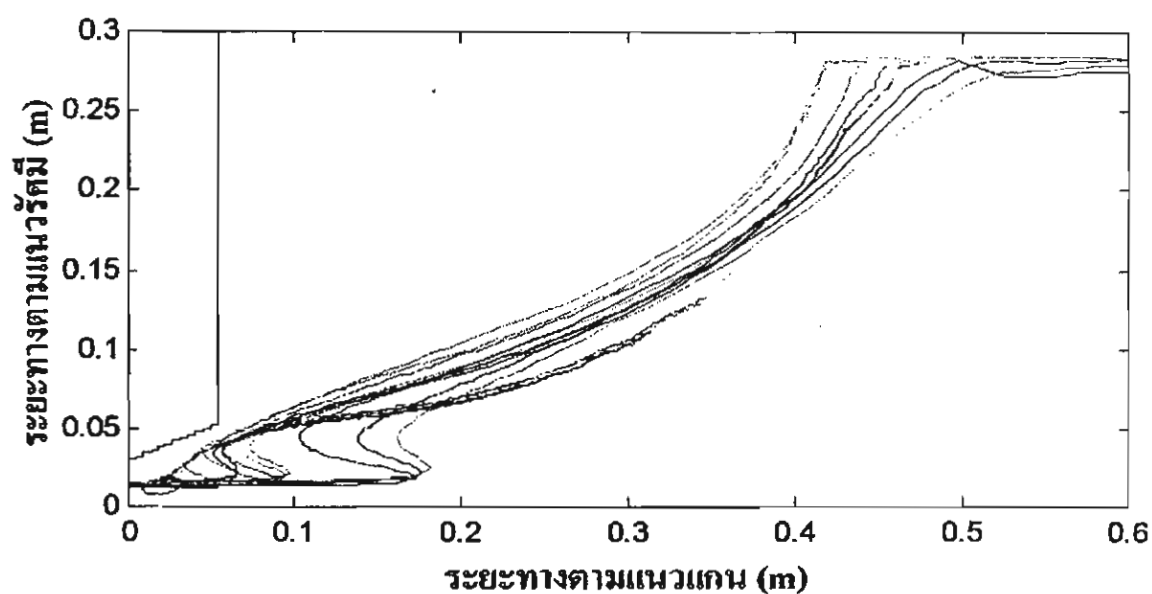
รูปที่ 5.8 แสดงความเข้มข้นของออกซิเจนภายในห้องเผาไหม้ จากรูปช่วง 0.03-0.18 เมตรจากทางออกของหัวเผา จะเห็นได้ว่ามีปริมาณความเข้มข้นของออกซิเจนน้อย ซึ่งเกิดจากความสัมพันธ์ของรูปที่ 5.4-5.7 ในบริเวณดังกล่าว เกิดการเผาไหม้ของก๊าซดังนั้นออกซิเจนจึงถูกใช้ในการทำปฏิกิริยา นอกจากนี้ส่วนที่อยู่ด้านบนที่ระยะทาง 0.5 เมตรจากทางออกของหัวเผา ที่มีปริมาณความ

เข้มข้นของออกซิเจนต่ำเพราะในบริเวณนั้นอุณหภูมิเกิดการเผาไหม้ในรูปของแข็งจึงมีการใช้ออกซิเจนในการทำปฏิกิริยาเช่นกัน

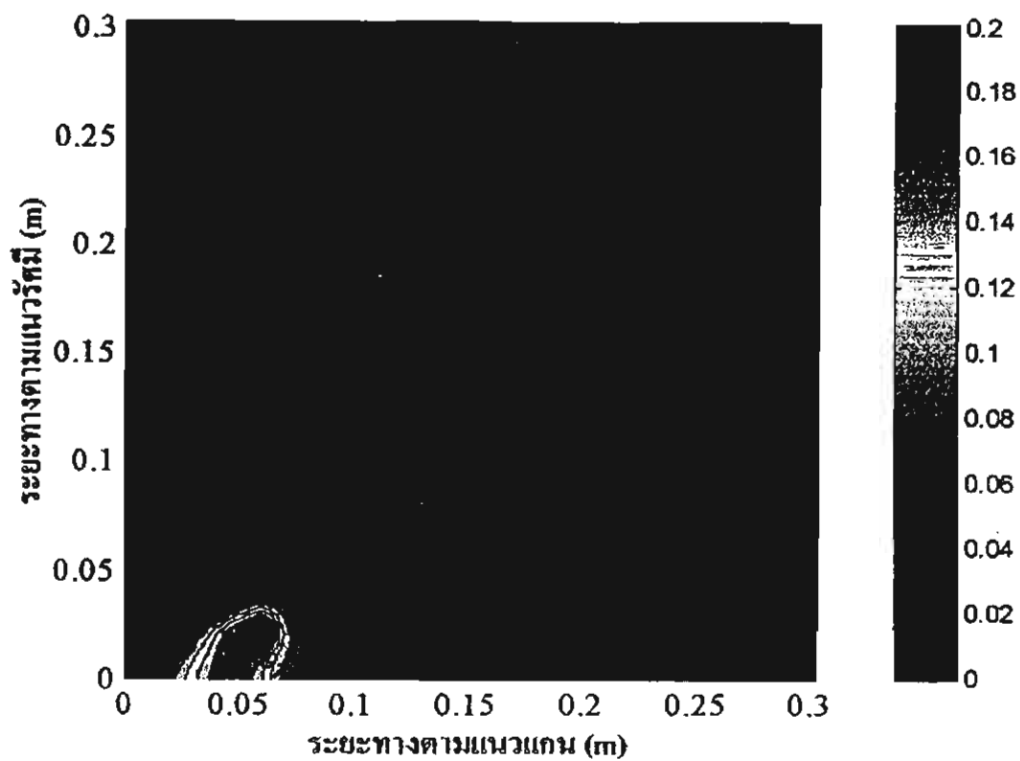
รูปที่ 5.9 แสดงอุณหภูมิที่เกิดขึ้นภายในห้องเผาไหม้ บริเวณที่มีความร้อนสูงจะอยู่ในช่วง 0.08–0.18 เมตร จากทางออกของหัวเผา เนื่องมาจากที่บริเวณนั้นเกิดการสะสมของความร้อนที่ได้จากการเผาเนื่องมาจากการเผาไหม้สารระเหย ในช่วง 0.3–0.55 เมตรจากทางออกของหัวเผา คำนวนของรูปที่มีอุณหภูมิสูงเกิดจากการเผาไหม้ของคาร์บอนกับอากาศที่บริเวณดังกล่าว



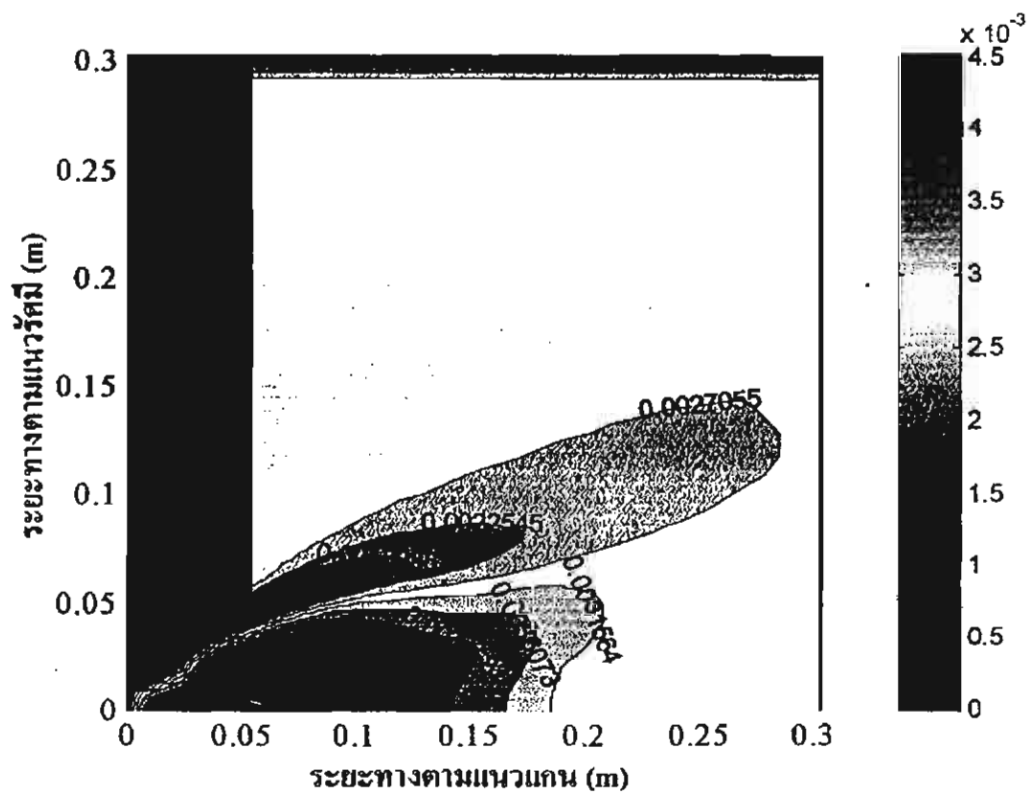
รูปที่ 5.4 เวกเตอร์ความเร็วของก๊าซที่บริเวณใกล้หัวเผา



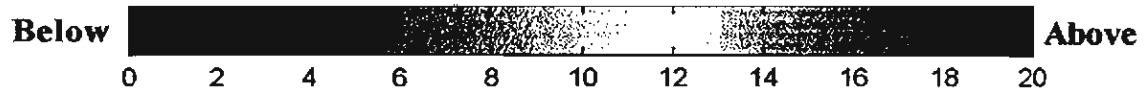
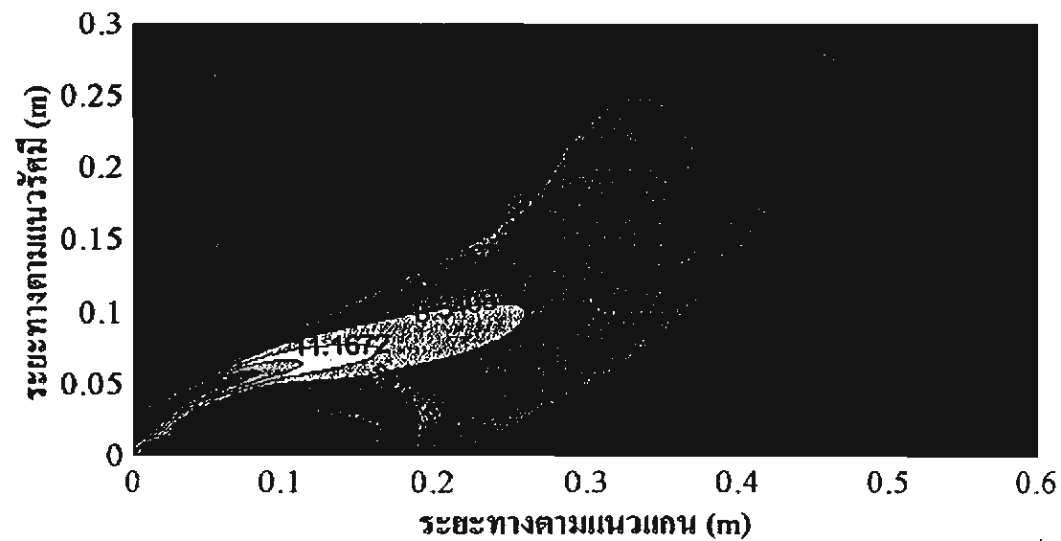
รูปที่ 5.5 เส้นทางเดินเฉลี่ยของอุณหภูมิด้านหินผงที่บริเวณใกล้หัวเผา



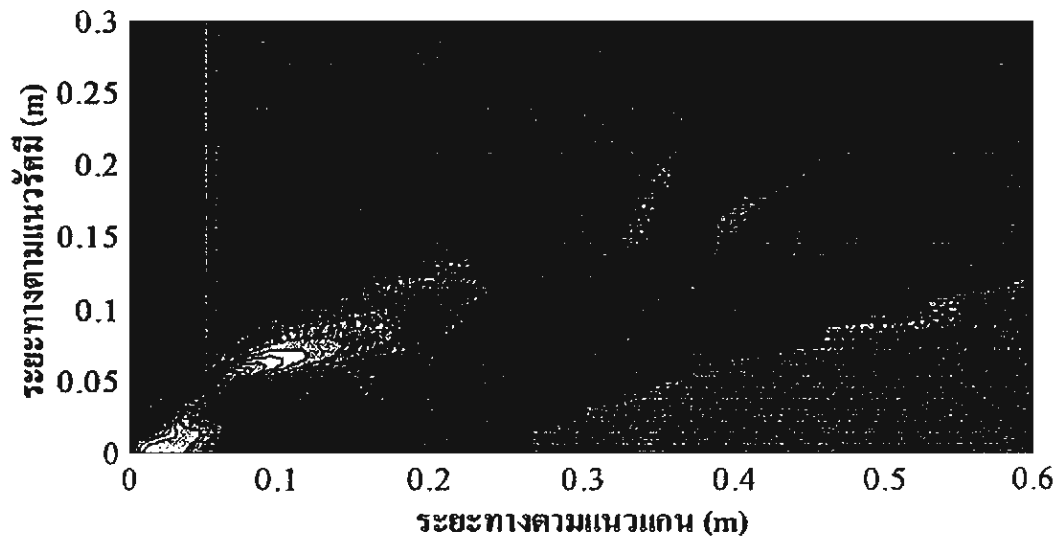
รูปที่ 5.6 การกระจายตัวของความเข้มข้นของสารระเหย $\% (V_{volatile}/V_{mix})$ โดยมวล
ที่บริเวณใกล้หัวเผา



รูปที่ 5.7 การกระจายตัวของความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ $\% (V_{SO_2}/V_{mix})$ โดยมวลที่
บริเวณใกล้หัวเผา



รูปที่ 5.8 การกระจายตัวของความเข้มข้นของก๊าซออกซิเจน % (V_{O_2} / V_{mix}) โดยมวล ที่บริเวณใกล้หัวเผา



รูปที่ 5.9 การกระจายตัวของอุณหภูมิ $^{\circ}C$ ที่บริเวณใกล้หัวเผา

5.3.2 เปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทดลองและค่าที่ได้จากการทำนายของออกซิเจนและอุณหภูมิ รูปที่ 5.10 และ 5.11 แสดงกราฟเปรียบเทียบการกระจายความเข้มข้นของออกซิเจนและอุณหภูมิที่ได้จากการทดลองและค่าที่ได้จากการทำนายตามลำดับ ที่ระยะตามแนวแกนที่วัดจากระนาบทางออกของหัวเผาที่แตกต่างกัน ค่าที่ได้จากการทดลองและค่าที่ได้จากการทำนายสอดคล้องกันเป็นอย่างดีโดยเฉพาะอย่างยิ่งในบริเวณใกล้หัวเผา ซึ่งเกิดการเผาไหม้มากที่สุด ดังนั้นจึงมั่นใจได้ว่าอากาศพลศาสตร์และการเผาไหม้มีความถูกต้อง การเปรียบเทียบนี้แสดงให้เห็นว่าแบบจำลองการไหลปั่นป่วนของ K-ε แบบจำลองการปลดปล่อยสารระเหยและแบบจำลองการเผาไหม้สามารถพอที่จะจำลองการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการเผาไหม้ของถ่านหินผงได้

กราฟที่ลดลงของความเข้มข้นของออกซิเจนที่ตำแหน่ง $x/d=1.1, 1.6$ และ 2.2 นั้นเป็นบริเวณที่เกิดการทำปฏิกิริยาและการเผาไหม้ของสารระเหยที่บริเวณใกล้การไหลวนของหัวเผา (จากรูป 5.8) ค่าที่ได้จากการทำนายมีค่าต่ำกว่าซึ่งจะเหมือนกันทุก ๆ ค่าของความเข้มข้นของออกซิเจนที่บริเวณการไหลวนภายนอกที่ตำแหน่งประมาณที่ 1.5 ของ r/d ออกซิเจนจะถูกดูดซับน้อยซึ่งเป็นผลจากแบบจำลองการเผาไหม้ของชาร์ที่ยังไม่สมบูรณ์มากนักและการแพร่กระจายของ Secondary jet โดยผลของแรงเหวี่ยงจากศูนย์กลาง ส่วนค่าที่ได้จากการทำนายมีค่าสูงกว่าเล็กน้อยที่บริเวณการไหลวนภายนอกใกล้หัวเผาและที่ $x/d=12.9$ การทำนายมีค่าสูงกว่าเนื่องจากอัตราการดูดซับออกซิเจนของอนุภาคที่ใกล้หมดการเผาไหม้ของชาร์ ซึ่งเป็นผลมาจากผลการทำนายของแบบจำลองของชาร์ อัตราการปลดปล่อยของปฏิกิริยาของคาร์บอนจะมีค่าสูงเมื่ออุณหภูมิในห้องเผาไหม้สูง (อุณหภูมิรอบ ๆ ของอนุภาคในการทำนายประมาณ $1250 - 1650$ °C) อัตราของปฏิกิริยาจะช้ากว่าอัตราแผนพลศาสตร์ เนื่องจากการขาดแคลนออกซิเจนที่พื้นผิวของอนุภาค นอกจากนี้อนุภาคของชาร์ที่ชั้นตอนนี้อาจจะเปลี่ยนแปลงขนาดและปริมาณการดูดซับออกซิเจนของคาร์บอนคงตัวที่แตกต่างกัน ขณะที่แบบจำลองของชาร์ที่ใช้ในแบบจำลองนี้อยู่บนพื้นฐานที่ว่าขนาดของอนุภาคมีค่าคงที่ การเผาไหม้ของชาร์ที่ช้าเป็นผลให้ค่าที่ได้จากการทำนายความเข้มข้นของออกซิเจนที่ $x/d=12.9$ ที่ตำแหน่งด้านขวามือของรูป 5.10 สูงกว่าการทดลอง แม้ว่าความแตกต่างระหว่างการทำนายที่เกิดขึ้นนี้สามารถสังเกตเห็นได้ชัดเจน แต่ก็เกิดขึ้นในบริเวณที่ห่างจากหัวเผา อย่างไรก็ตามส่วนสำคัญของบริเวณการเผาไหม้ การไหลวนของก๊าซและการไหลเข้าของอากาศช่องที่สองที่บริเวณใกล้หัวเผ่าจะทำนายได้ดี

จากรูป 5.11 กราฟระหว่างการทำนายกับการวัดของอุณหภูมิมักมีความสอดคล้องกันเป็นอย่างดี ดังนั้นแบบจำลองเหมาะสมที่จะนำไปใช้ในการทำนายได้ ซึ่งเป็นผลมาจากการจำลองการถ่ายเทความร้อน และข้อสมมุติที่ใช้สำหรับเงื่อนไขขอบเขตอย่างเหมาะสม

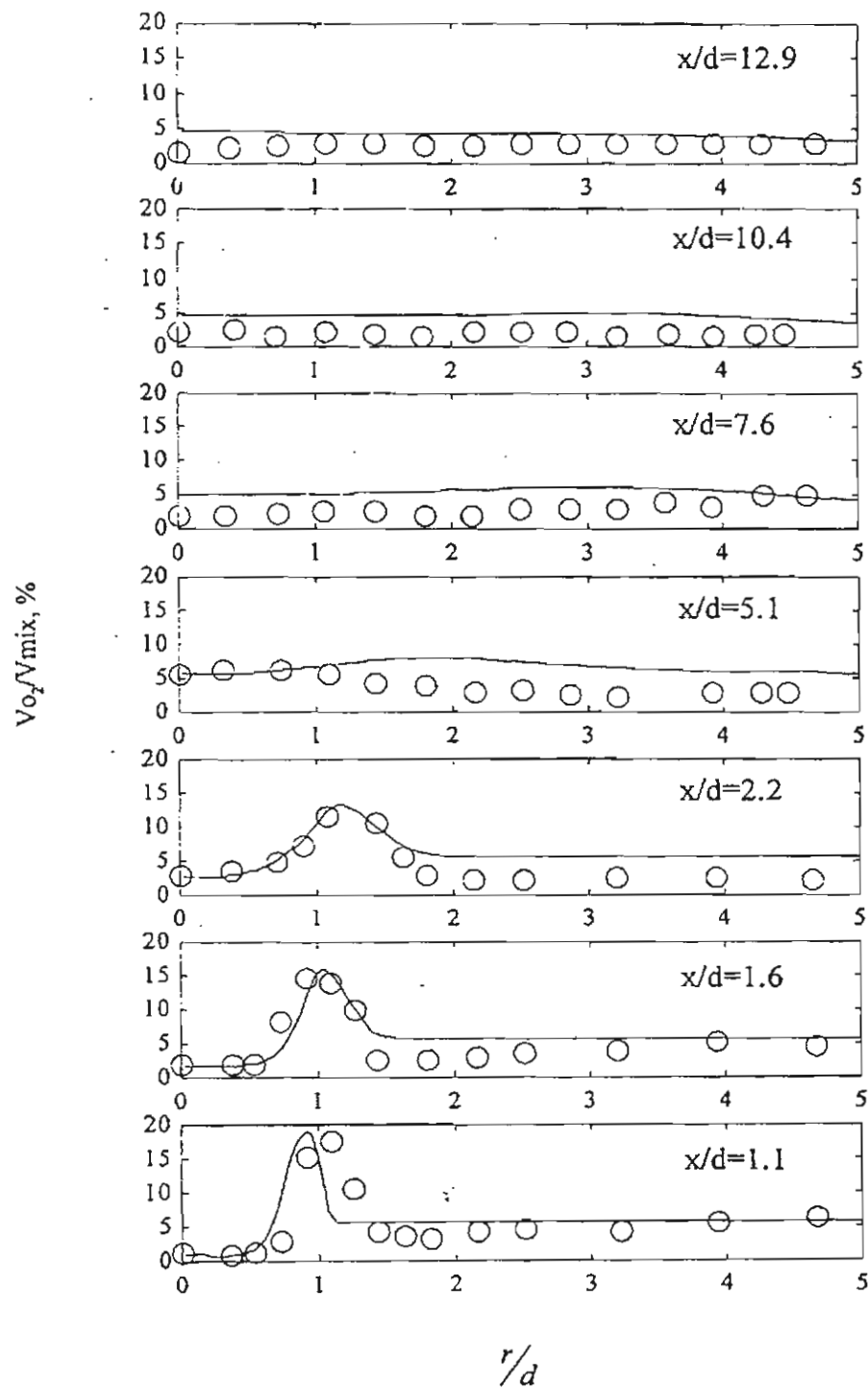
อุณหภูมิสูงสุดอยู่ในบริเวณการไหลวนใกล้ทางออกของหัวเผา ซึ่งเป็นผลของการสะสมพลังงานที่สูงในการไหลวนแบบ Toroidal อยู่ระหว่าง Secondary jet และบริเวณการไหลวนใกล้ทางออกหัวเผา ที่ระยะ $x/d = 1.1, 1.6$ และ 2.2 เห็นได้ว่าการลดลงของอุณหภูมียังรวดเร็วเกิด

ชั้นบริเวณ Secondary jet และต่อจากบริเวณนั้นอุณหภูมิมีค่าคงที่เกิดจากการเผาไหม้ของกระแสไหลวนภายนอกใกล้ผนังห้องเผาไหม้ เห็นได้ว่าตั้งแต่ $x/d = 1.1$ ถึง 12.9 มีค่าของอุณหภูมิที่คำนวณได้สูงกว่าค่าที่ได้จากการทดลองเล็กน้อย แต่จากการทดลองจริงที่ผนังมีการสูญเสียความร้อน ดังนั้นถ้าห้องเผาไหม้เป็น Adiabatic อุณหภูมิที่วัดได้ที่ผนังจะมีค่าสูงมากกว่านี้ อุณหภูมิสูงสุดที่ได้จากการทำนาย 1440 °C ในบริเวณการไหลวนใกล้หัวเผาที่ $x/d=2.2$ จากการทดลองมีค่า 1340 °C ที่ตำแหน่งเดียวกัน

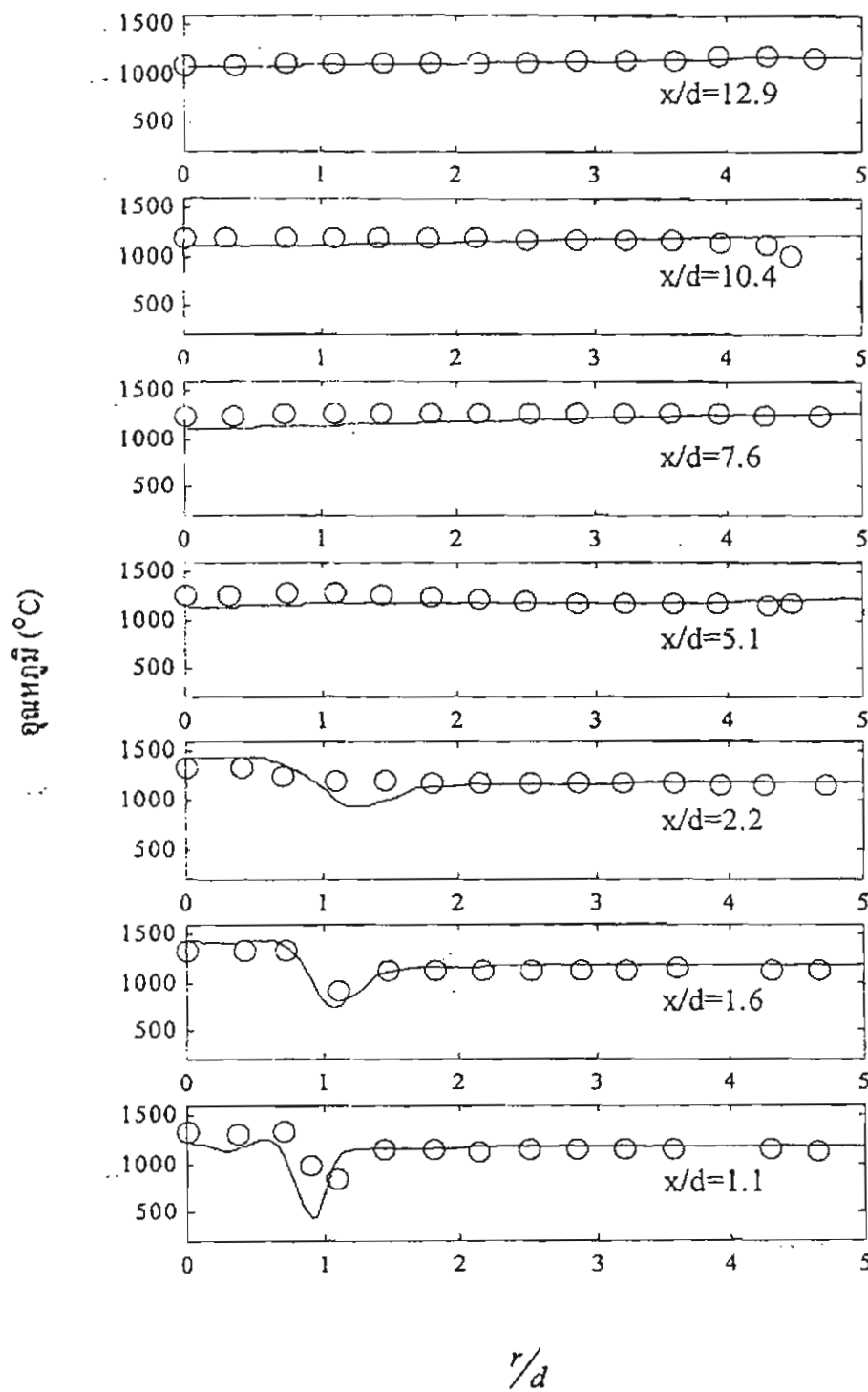
การทำนายการกระจายของอุณหภูมิที่ต่ำกว่าการทดลองในกระแสการไหลความเร็วสูงที่ตำแหน่ง $x/d = 1.1, 1.6$ และ 2.2 เป็นผลมาจากการทำนายได้ประเมินผลที่เกิดจากการแพร่กระจายความร้อนของการถ่ายเทพลังงานต่ำเกินไปและเกิดขึ้นจากการผิดพลาดของการถ่ายเทความร้อนในสภาวะการไหลแบบปั่นป่วน ที่ $x/d = 5.1$ มีค่าอุณหภูมิสูงสุดที่ได้จากการทดลองบริเวณใกล้แกนกลางห้องเผาไหม้ขึ้นอยู่กับการถ่ายเทพลังงานของผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการเผาไหม้ (เห็นได้จากกราฟรูปที่ 5.10 ออกซิเจนถูกดูดซับมากที่สุด) อย่างไรก็ตามอุณหภูมิที่คำนวณได้มีความแตกต่างเพียงเล็กน้อยจากค่าที่วัดได้จากการทดลอง นอกจากนี้อาจจะมีสาเหตุมาจากการทำนายอัตราของปฏิกิริยาการเผาไหม้ของคาร์บอนไป ปรากฏให้เห็นในการทำนายที่ตำแหน่งใกล้แกนกลางห้องเผาไหม้ที่ตำแหน่ง $x/d = 5.1, 7.6$ และ 10.4

5.3.3 ผลการคำนวณความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ภายในห้องเผาไหม้ รูป 5.12 คือกราฟแสดงการแพร่กระจายความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ที่ระยะตามแนวแกนที่วัดจากระนาบทางออกของหัวเผาที่แตกต่างกัน ที่ระยะ $x/d = 1.1, 1.6$ และ 2.2 เป็นบริเวณที่เกิดการเผาไหม้มากที่สุด จากที่ระยะดังกล่าวตั้งแต่เส้นผ่านศูนย์กลางห้องเผาไหม้ถึง $r/d = 0.36$ เห็นได้ว่ามีความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์มากที่สุด เพราะที่บริเวณนั้นมีการแพร่กระจายของสารระเหยสูงรวมตัวกับออกซิเจนเกิดการเผาไหม้สูงสุด ดังนั้นกัมมะถันที่หลุดออกมาจากสารระเหยได้รวมตัวกับออกซิเจนในบริเวณนั้นจึงก่อให้เกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่ตำแหน่งนั้นๆ มีปริมาณสูง บริเวณ $r/d = 0.5$ ถึง $r/d = 0.85$ ความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ลดลงอย่างรวดเร็วเนื่องมาจากกระแสของ Secondary jet พุ่งเข้าห้องเผาไหม้ และที่ $r/d = 1.5$ จนถึงผนังห้องเผาไหม้สังเกตได้ว่าความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์มีปริมาณคงที่เนื่องมาจากที่กระแสไหลวนภายนอกที่เกิดขึ้นใกล้ผนังและไม่มีการก่อดวงของก๊าซดังกล่าวที่บริเวณนั้น

ที่ระยะ $x/d = 5.1, 7.6, 10.4$ และ 12.9 สังเกตได้จากกราฟว่าที่ระยะนี้มีปริมาณความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ค่อนข้างคงที่ เนื่องมาจากบริเวณดังกล่าว เกิดการเผาไหม้ของสารระเหยจนหมดเหลือเฉพาะการเผาไหม้ของคาร์บอน ดังนั้นกัมมะถันภายในอนุภาคได้หลุดออกมาพร้อมสารระเหยจนหมดแล้ว



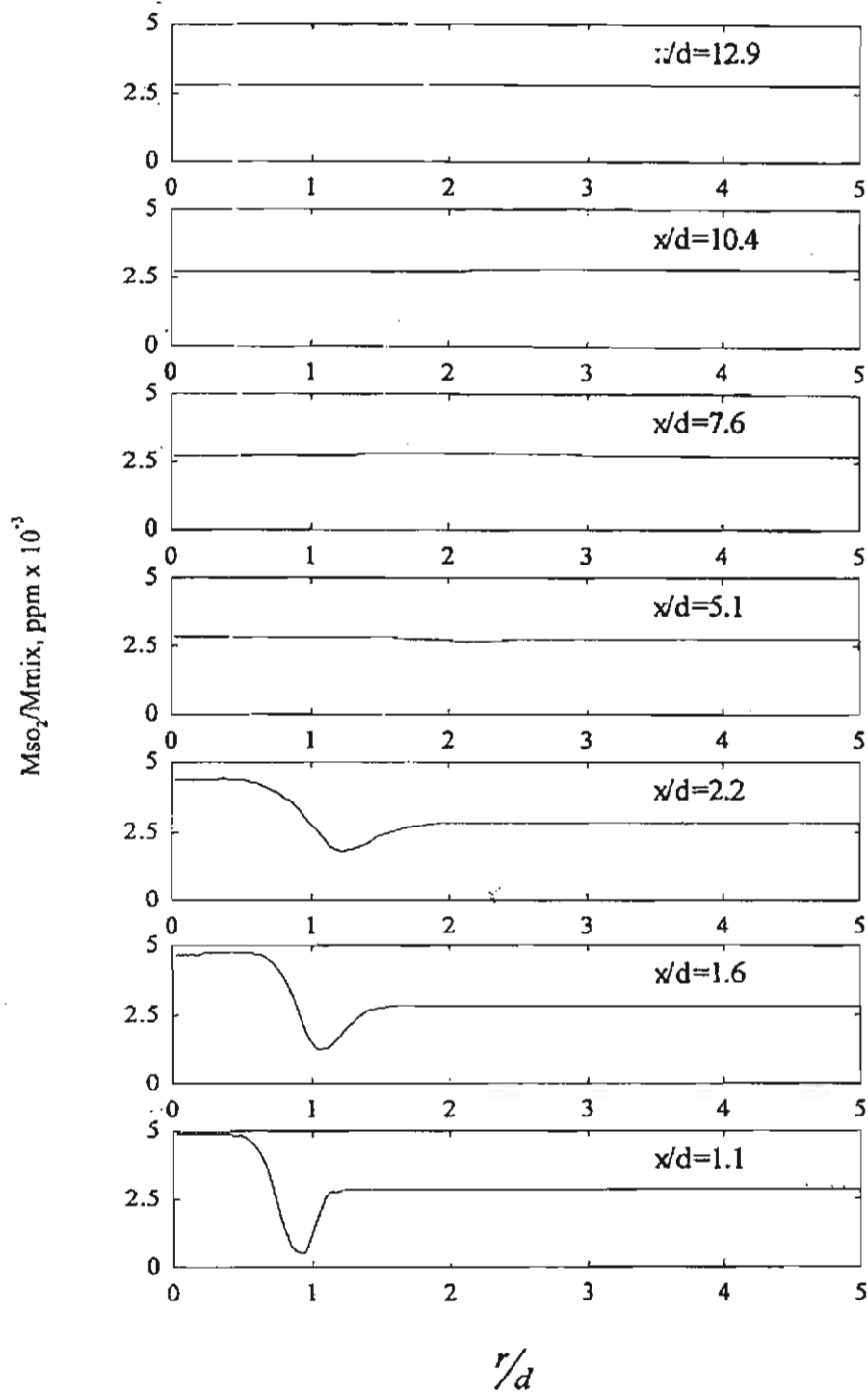
รูปที่ 5.10 เปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองของการกระจายตัวของก๊าซออกซิเจน



— ค่าที่ได้จากการทำนายจากแบบจำลอง

○ ค่าที่ได้จากการทดลอง [3]

รูปที่ 5.11 เปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองของการกระจายตัวของอุณหภูมิ (°C)



— ค่าที่ได้จากการทำนายจากแบบจำลอง

รูปที่ 5.12 ผลการคำนวณของการกระจายตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

5.3.4 วิเคราะห์ผล การเปลี่ยนแปลงทางกายภาพ เคมี และคุณสมบัติเกี่ยวกับความร้อนถูกพิจารณาารวมกันภายในปริมาตร โดยกฎการอนุรักษ์มวล โมเมนตัม และพลังงาน การเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติต่าง ๆ ของปริมาตรข้างเคียง ปริมาณกำมะถันที่ป้อนเข้าห้องเผาไหม้เท่ากับ 9.621×10^{-6} kg/s ทางทฤษฎีก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ซึ่งเกิดจากการผสมกันระหว่างกำมะถันที่หลุดออกจากสารระเหยรวมตัวกับออกซิเจนจะมีค่าเท่ากับ 1.9242×10^{-5} kg/s แบบจำลองที่สร้างขึ้นนี้มีปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่คำนวณจากทางออกของห้องเผาไหม้เท่ากับ 2.033×10^{-5} kg/s ค่าความผิดพลาดระหว่างผลทางทฤษฎีกับผลที่คำนวณได้เท่ากับ 5.35% และได้ทำการตรวจสอบความถูกต้องอีกอย่างหนึ่งคือ พิจารณามวลของกำมะถันที่ไหลเข้าลบกับมวลไหลออกและลบกับ Source team ที่เกิดขึ้นในแต่ละหน้าตัดของห้องเผาไหม้ ค่าที่คำนวณได้มีความผิดพลาดสูงสุดประมาณ 5% (ภาคผนวก ข.)

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้ได้นำไปใช้ในการจำลองการเผาไหม้ของถ่านหินผง และคุณสมบัติการถ่ายเทความร้อน ได้ผลเป็นที่น่าพอใจในส่วนของแบบจำลองการก่อตัวของกำมะถันนั้นก็ได้ผลเป็นที่น่าพอใจ ภายได้ข้อสมมุติฐานที่ให้ไว้ในบทนำ กล่าวคือ “ กำมะถันที่อยู่ในโครงสร้างของถ่านหินในรูปของ Organic sulfur จะปลดปล่อยออกมาทั้งหมดและทำปฏิกิริยาได้เป็น ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ” อย่างไรก็ตามจากรูป 5.10 และ 5.11 ค่าที่ผิดพลาดเล็กน้อยระหว่างแบบจำลองกับการทดลองจริงสามารถสังเกตเห็นได้ สาเหตุใหญ่เนื่องมาจากอัตราการลดลงของ Jet เร็วเกินไปในทิศทางตามแนวแกน และผลเนื่องจากการไหลวน ความไม่สอดคล้องนี้ มีผลน้อยมากต่อการกระจายตัวของก๊าซต่าง ๆ ในบริเวณที่เกิดการเผาไหม้ ทำให้มีความมั่นใจมากขึ้นในการนำไปใช้และพัฒนาแบบจำลองนี้ต่อไป

สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ

6.1 สรุปผลงานวิจัย

การสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์โดยประยุกต์จากวรรณกรรมปริทรรศน์จากบทที่ 2 สมการพื้นฐานของแบบจำลองในบทที่ 3 กระบวนการหาคำตอบในบทที่ 4 และข้อสมมุติฐาน ทฤษฎีหรือแนวความคิดที่ใช้ในการวิจัยต่าง ๆ ในบทหน้า จากความรู้ดังกล่าวได้นำมาสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการเผาไหม้ของถ่านหินผง โดยผสมผสานกับแบบจำลองการสันดาปของถ่านหินผงที่ได้พัฒนาแล้วโดย ICSTM ซึ่งค่าความเข้มข้นของออกซิเจนและอุณหภูมิที่ได้จากการทดลองเปรียบเทียบกับค่าที่ได้จากการทำนายสอดคล้องกันเป็นอย่างดีโดยเฉพาะอย่างยิ่งในบริเวณใกล้หัวเผา ซึ่งเกิดการเผาไหม้มากที่สุด ดังนั้นจึงมั่นใจได้ว่าอากาศพลศาสตร์และการเผาไหม้มีความถูกต้องในบริเวณนี้ ผลการศึกษาพบว่าความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์มีปริมาณสะสมที่สูงในช่วง 0.03 – 0.15 เมตร จากทางออกของหัวเผา ผลการเปรียบเทียบระหว่างผลทางทฤษฎีกับผลที่คำนวณรวมทั้งหมดของกำมะถันภายในแบบจำลองมีค่าความผิดพลาดเท่ากับ 5.35% และพิจารณาความแตกต่างของมวลกำมะถันที่เกิดขึ้นในแต่ละหน้าตัดของห้องเผาไหม้ โดยค่าที่คำนวณได้มีความผิดพลาดสูงสุดประมาณ 5% จากผลการจำลองทำให้ทราบว่าก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์มีความเข้มข้นสูงในบริเวณใกล้หัวเผา ซึ่งเป็นบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงเช่นกัน บริเวณดังกล่าวถูกห่อหุ้มด้วยกระแสน้ำวนที่ปล่อยออกจากหัวเผาที่มีความเข้มข้นของออกซิเจนสูงและอุณหภูมิต่ำ ข้อมูลดังกล่าวจะเป็นประโยชน์ในการศึกษาเพื่อลดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในห้องเผาไหม้ของถ่านหินผงต่อไป

6.2 ข้อเสนอแนะ

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันนี้ มีจำกัดอยู่หลายอย่างเช่น ห้องเผาไหม้ที่นำมาวิเคราะห์จะต้องมีลักษณะเป็นทรงกระบอก มีความสมมาตรตามแนวแกนทุก ๆ หน้าตัดของห้องเผาไหม้ ฯลฯ แบบจำลองการไหลแบบปั่นป่วนที่ใช้ในการศึกษาค้างนี้คือ Two equation K-ε model เป็นที่รู้กันคืออยู่แล้วว่าแบบจำลองของ K-ε มีข้อเสียเมื่อนำไปใช้ทำนายการไหลที่มีรูปร่างที่ซับซ้อน และมีการหมุนควงสูง (High swirl number) โปรแกรมของแบบจำลองนี้มีขนาดใหญ่ มีหลายสมการและหลายตัวแปรที่เกี่ยวข้อง ในการใช้งานน่าจะใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ตั้งแต่ Pentium 200 Hz ขึ้นไป หรือ Super computer เพื่อสะดวกและรวดเร็วในการใช้งาน อีกประการหนึ่งน่าจะนำงานวิจัยชิ้นนี้เปรียบเทียบกับผลการทดลองโดยการวัดค่าความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ภายในห้องเผาไหม้ที่เกิดขึ้นจริง เพื่อจะทำให้แบบจำลองนี้น่าเชื่อถือยิ่งขึ้นและเป็นข้อมูลเพื่อลดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในห้องเผาไหม้ของถ่านหินผงต่อไป

เอกสารอ้างอิง

- [1] เกริกชัย สุกาญจน์จทิ. ใอน้ำและพลังงานจากถ่านหิน. กรุงเทพมหานคร : โรงพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย. 2529. หน้า 2-14.
- [2] ขุนขวม. 2541, 28 สิงหาคม. "ท้องถิ่นเมืองไทย โรงไฟฟ้าแม่เมาะ." แนวหน้า.
- [3] Charoensuk J. "The Application of Mathematical Model for Scaling Pulverized Coal Combustors." Ph.D Thesis. University of London and the Diphoma of Membership of the Imperial College. 1996.
- [4] William B., Sarofim A.F. **Fossil Fuel Combustion**. New york : John Wiley & Sons, Inc. 1991
- [5] Levy A., Merryman E.L. "The Microstructure of Hydrogen Sulphide Flames." *Combustion and Flame.*, Vol.9, September 1965. pp. 229-240.
- [6] Kobayashi H., Howard J.B. and Sarofim A.F. "Coal Devolatilization at High Temperature." *The Sixteenth International Symposium on Combustion.*, The Combustion Institute., 1976.
- [7] Howard H. C. **Pyrolytic Reaction of Coal**. Chemistry of Coal Utilization. Supplementary Volume. John Wiley & Sons. 1963. pp. 340-394.
- [8] Elghobashi S.E., Pun W.M. "A Theoretical and Experimental Study of Turbulent Diffusion Flames in Cylindrical Furnaces." *The Fifteenth International Symposium on Combustion.*, The Combustion Institute., 1975.
- [9] Lockwood F.C., Naguib A.S. "The Prediction of the Fluctuations in the Properties of Free, Round – jet, Turbulent Diffusion Flames." *Combustion and Flame.*, Vol.24, 1975.
- [10] Spalding D.B. "Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames." *The Thirteenth International Symposium on Combustion.*, The Combustion Institute., 1971.
- [11] Magnussen B.F., Hjertager B.H. "On Mathematical Modelling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion." *The Sixteenth International Symposium on Combustion.*, The Combustion Institute., 1976.
- [12] Smoot L.D., Pratt D.T. **Pulverised Coal Combustion and Gasification: Theory and Applications for Continuous Flow Processes**. New York : Plenum Publishing Corp. 1979.
- [13] Field M.A., Gill D.W., Morgan B.B. and Hawksley P.G.W. **Combustion of Pulverised**

- Coal. BCURA, Leatherhead, Surrey, England. Publisher : Cheney & Sons Ltd., Banbury, England. 1967.
- [14] Pershing D.W., Wendt J.O.L. "Pulverised Coal Combustion : The Influence of Flame Temperature and Coal Composition on Thermal and Fuel NO_x." The Sixteenth International Symposium on Combustion., The Combustion Institute., 1976.
- [15] Levy A., Merryman E.L. "Mechanisms of Formation of Sulfur Oxides in Combustion." Environ. Sci. Technol. 4. 1970.
- [16] Demerdache A., Sugden T.M. "Some Reaction of Sulphur Compounds in Flames" in The Mechanism of Corrosion by Fuel Impurities. London : Johnson H.R. and Littler D.J., Eds., Butterworths Scientific Publications. 1963. pp.216 – 227.
- [17] เทพวิฑูรย์ ทองศรี. "การปล่อยก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จากการใช้เชื้อเพลิงภายในประเทศ." วิทยานิพนธ์ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาเทคโนโลยีสิ่งแวดล้อม สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี, 2535 หน้า 29.
- [18] นารา พัทธ์ชัยธรรมพ, "มลภาวะในการใช้ถ่านหินเป็นเชื้อเพลิง." ข่าวสารการธรณี, ปีที่ 38 ฉบับที่ 10, 2536. หน้า 28- 34.
- [19] วรวิทย์ รักแต่งงาน, "คุณสมบัติการจับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของหินปูนธรรมชาติและสารประกอบแคลเซียมเหลือทิ้ง." วิทยานิพนธ์ปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี หน้า 64.
- [20] IEA Coal Research, "Review in Coal Science" : The Problems of Sulfur. London : Johnson H.R. and Littler D.J., Eds., Butterworths Scientific Publications. 1989. pp.1 – 52.
- [21] กรมควบคุมมลพิษ(กพ.). "มาตรฐานคุณภาพอากาศ." [Online]. Available : <http://www.pcd.go.th.1999>.
- [22] สุวพันธ์ นิลายน. "สภาพอากาศกับปัญหาผลกระทบโรงไฟฟ้าพลังงานความร้อนแม่เมาะ." วารสาร กฟผ, ปีที่ 1, เล่มที่ 4, 2533. หน้า 32 - 39.
- [23] กัลยาพร พรณานิธิ, "ซัลเฟอร์ไดออกไซด์ทำไมต้องเป็น "ระบบเปียก". " ข่าวสาร กฟผ., ปีที่ 23, ฉบับที่ 8, 2536, หน้า 14 – 18.
- [24] Favre A. "Equations des Gaz Turbulence Compressibles." Journal des Mechanique., Vol.4, 1965.
- [25] Jones W.P., Launder B.E. "The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence." International Journal of Heat and Mass Transfer., Vol.15, 1972.
- [26] Sloan D.G., Smith P.G., and Smoot L.D. "Modelling of Swirl in Turbulent Flow Systems." Progress in Energy Combustion Science., Vol.12, 1986.

- [27] Brodkey R.S. **The Phenomena of Fluid Motions**. Addison-Wesley Publishing Company., Reading, MA., 1967.
- [28] Hinze J.O. **Turbulence**. London : McGraw – Hill. 1975.
- [29] Jayatilleke C.L.V. "The Influence of Prandtl Number and Surface Roughness on the Resistance of the Laminar Sub – Layer to Momentum and Heat Transfer." *Progress in Heat and Mass Transfer.*, Vol.1, Pergamon Press, 1969.
- [30] Rizvi S.M.A. "Prediction of Flow, Combustion and Heat Transfer in Pulverized Coal Flames." Ph.D. Thesis. University of London and the Diphoma of Membership of the Imperial College. 1985.
- [31] Anson D., Tindall D. "A General Expression For the Discharge Coefficient of a Burner Register." *Journal of the Institute of Fuel.*, Vol.40, 1957.
- [32] Baum M.M., Street P.J. "Predicting the Combustion Behaviour of Coal Particles." *Combustion Science and Technology.*, Vol.3, 1971.
- [33] Wallis G.B. **One – Dimensional Two – Phase Flow**. New York : McGraw-Hill. 1969
- [34] Perera S.V.L. "Private Communication." Thermofluids Section. ICSTM, London. 1996.
- [35] Gibb J. "Internal Note : Central Electrical Generating Board." NRM 85., 1973, See Rizvi, 1985.
- [36] Gibb J. "Analytic Solution to a Two - Dimensional Cartesian Geometry." Central Electrical Generating Board. 1977, See Rizvi, 1985.
- [37] Abbas T. "In-flame Measurement of N-Pollutant and Burnout in a Pulverised-Coal-Fired Furnace.", Ph.D. Thesis. University of London and the Diphoma of Membership of the Imperial College. 1993.
- [38] Versteeg H.K., Malalasakera W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics : The Finite Volume Method**. Malaysia : John Wiley & Son Inc. 1995.

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก.

มาตรฐานอากาศเสียจากโรงงานไฟฟ้า (ใหม่) ภายในประเทศ

ผ.ก.1 แสดงมาตรฐานอากาศเสียจากโรงงานไฟฟ้า (ใหม่) ภายในประเทศ

สารมลพิษ	ค่าปริมาณของสารเจือปนที่ระบาย ออกจากโรงงาน			วิธีการตรวจวัด
	ถ่านหิน	น้ำมัน	ก๊าซธรรมชาติ	
ซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (ส่วนในล้านส่วน)				USEPA วิธีที่ 6 หรือ 8
โรงไฟฟ้าขนาด > 500 เมกกะวัตต์	320	320	20	
300 - 500 เมกกะวัตต์	450	450	20	
< 300 เมกกะวัตต์	640	640	20	
NO _x as NO ₂ จากโรงไฟฟ้าทุกขนาด (ส่วนในล้านส่วน)	350	180	120	USEPA วิธีที่ 7
ฝุ่นละอองจากโรงไฟฟ้าทุกขนาด (มก./ลบ.ม.)	120	120	60	USEPA วิธีที่ 8

หมายเหตุ :

1. มาตรฐานควบคุมการปล่อยทิ้งอากาศเสียจากโรงไฟฟ้าซึ่งมีผลบังคับกับโรงไฟฟ้าที่ได้รับใบอนุญาตประกอบกิจการโรงงานหรือใบอนุญาตขยายโรงงานหลังจากวันที่ประกาศในราชกิจจานุเบกษานี้เท่านั้น
2. การวัดค่าก๊าซ หรือสารเจือปนในอากาศแต่ละชนิดให้คำนวณผลที่ความดัน 1 บรรยากาศ หรืออุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียสที่สภาวะแห้ง (Dry basis) โดยมีปริมาตรอากาศส่วนเกินในการเผาไหม้ (Excess air) ร้อยละ 50 หรือที่ปริมาณออกซิเจนร้อยละ 7

แหล่งที่มา : พระราชบัญญัติส่งเสริมและรักษาคุณภาพสิ่งแวดล้อมแห่งชาติ พ.ศ.2535 โดยออกเป็นประกาศกระทรวงวิทยาศาสตร์ เทคโนโลยีและสิ่งแวดล้อม เรื่อง กำหนดมาตรฐานควบคุมการปล่อยทิ้งอากาศเสียจากโรงไฟฟ้า และเรื่องกำหนดให้โรงไฟฟ้าเป็นแหล่งกำเนิดมลพิษที่จะต้องถูกควบคุมการปล่อยทิ้งอากาศเสียออกสู่สิ่งแวดล้อมเมื่อวันที่ 25 ธันวาคม พ.ศ.2538

ภาคผนวก ข.

ผลการคำนวณที่ได้จากทฤษฎีเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากแบบจำลอง

เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนักของถ่านหิน ได้จากการวิเคราะห์แบบแยกธาตุ
ประกอบด้วย

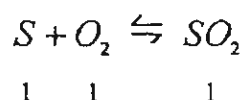
คาร์บอน	83.1	%
ไฮโดรเจน	4.35	%
ไนโตรเจน	1.29	%
กำมะถัน	1.55	%
ออกซิเจน	9.71	%

อัตราการป้อนถ่านหิน 0.0039 kg/s

∴ ปริมาณของกำมะถันที่เข้าสู่ห้องเผาไหม้ (ทางทฤษฎี) คือ เรเดียน

$$\text{ปริมาณของกำมะถัน (ทางทฤษฎี)} = 0.0039 \times 0.0155 / (2\pi) = 9.621 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$$

ปริมาณกำมะถันรวมตัวกับออกซิเจนเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์สามารถคำนวณได้ดังนี้



ตารางที่ ผ.ข.1 แสดงอัตราส่วนการเกิดปฏิกิริยาของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

ธาตุ	น้ำหนักมวลโมเลกุล	โมล
S	32	1
O ₂	32	1
SO ₂	64	1

จะเห็นว่า ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์หนักเป็นสองเท่าของกำมะถัน

∴ ปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่เกิดขึ้นภายในห้องเผาไหม้เท่ากับ $1.9242 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$

จากแบบจำลองสามารถคำนวณปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่ทางออกได้

เท่ากับ $2.033 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$

ค่าความผิดพลาดของปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่ทางออก

$$= \frac{|1.9242 \times 10^{-5} - 2.033 \times 10^{-5}|}{2.033 \times 10^{-5}}$$

$$= 5.35 \%$$

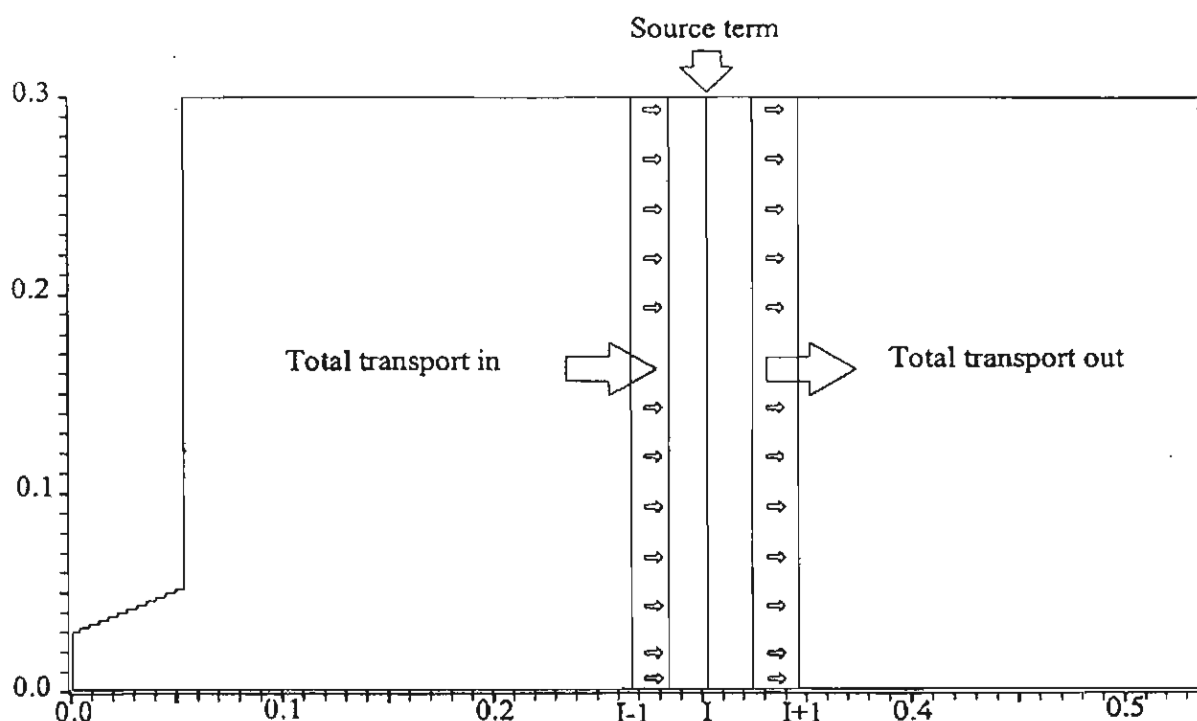
สมการที่ใช้ ตรวจสอบ Mass balance ของ ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่ทุกหน้าตัดภายในห้องเผาไหม้

$$= [\text{Total transport in} - \text{Total transport out} - \text{Source term}]$$

Total transport in คือ ค่าการถ่ายเทรวมทั้งหมดของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่หน้าตัดทางเข้าของเซลล์ ซึ่งมีผลของการพาและการแพร่

Total transport out คือ ค่าการถ่ายเทรวมทั้งหมดของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่หน้าตัดทางออกของเซลล์ ซึ่งมีผลของการพาและการแพร่

Source term คือ พจน์ของ Source ที่เกิดจากการถ่ายเทภายในปริมาตรของเซลล์



รูป ผ.ข. 1 วิธีการตรวจสอบ Mass balance ของทุก ๆ หน้าตัดของห้องเผาไหม้

จากโปรแกรมค่า Mass balance ที่มีการตรวจสอบ พบว่าที่ตำแหน่ง

$$x/d = 1.1 \quad \text{มีค่าความคลาดเคลื่อน} = 2.1389 \%$$

$x/d = 5$	มีค่าความคลาดเคลื่อน	=	4.3442 %
$x/d = 10$	มีค่าความคลาดเคลื่อน	=	0.2658 %
$x/d = 20$	มีค่าความคลาดเคลื่อน	=	0.0071 %
$x/d = 30$	มีค่าความคลาดเคลื่อน	=	0.00253 %
$x/d = 40$	มีค่าความคลาดเคลื่อน	=	0.00166 %
$x/d = 50$	มีค่าความคลาดเคลื่อน	=	0.00531 %

จะเห็นว่าค่าความคลาดเคลื่อนมีการสะสมมากขึ้นของแต่ละหน้าตัด อาจเกิดจากการใช้เทคนิคของการปิดเศษ เพื่อทำการแก้ค่าตัวหารไม่ให้เป็นศูนย์ โดยนำค่า 1.0×10^{-30} มาบวกกับตัวหาร

ภาคผนวก ค.

ผลงานทางวิชาการเกี่ยวกับงานวิทยานิพนธ์ที่ได้รับการตีพิมพ์



ISSN 0125-1724

วิศวกรรม

ลาดกระบัง

คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

LADKRABANG ENGINEERING JOURNAL

ปีที่ 16 ฉบับที่ 3

กันยายน 2542

1. การคำนวณหาขนาดกระแสของสาย XLPE ที่ขนาดแรงดัน 12 kV. และ 24 kV. เมื่อติดตั้งใน Duct Bank 1
สุทัศน์ หิลา นัทสน์ กฤษณจินดา ศุภี บรรจงจิตร
2. การคำนวณหาพิคกิ้งกระแสของสายเคเบิลโดยคำนึงถึงผลกระทบของฮาร์โมนิก 7
สมชัย จิรรุ่งโรจน์กุล นัทสน์ กฤษณจินดา ศุภี บรรจงจิตร
3. การวิเคราะห์ข้อแตกต่างของหม้อแปลงจำหน่ายชนิดจุ่มน้ำมันเมื่อออกแบบสร้างตามข้อกำหนดเดิมเปรียบเทียบกับข้อกำหนดใหม่ 13
ตามมาตรฐานการไฟฟ้าส่วนภูมิภาค
ฉวีวิธ ทัดสวน ปัญญา มาลีวัตร ศุภี บรรจงจิตร นัทสน์ กฤษณจินดา บุญเลิศ สือเฉย
4. การค้นหาโรเตอร์สล็อตฮาร์โมนิกส์เพื่อวัดความเร็วมอเตอร์เหนี่ยวนำแบบโรตอร์จวบความเร็ว 19
เฉลิมชาติ มานพ อมรรัตน์ สุโคตร วิจิตร กิณเรศ
5. ค่าการสูญเสียในมอเตอร์เหนี่ยวนำเนื่องจากแรงดันฮาร์โมนิกส์ เมื่อคิดผลของ Skin Effect และ Stray Load Loss 25
ธนัสดา รัตนะ วิจิตร กิณเรศ
6. การศึกษาเชิงตัวเลขของการฉีดของไหลเข้ากระบอกแม่แบบเรียบเชิงระนาบและเชิงสมมาตร 31
พงษ์เจต พรหมวงศ์ ปัญญา รวมภักดีกุล
7. แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการเผาไหม้ของถ่านหินผง 37
จารุวัตร เจริญสุข ปัญญา นตงวิไลลักษณ์
8. การคำนวณและออกแบบสมรรถนะใบจักรเรือ 43
อัศวเดช สิมธุภัก จารุพันธุ์ หนูสมตน
9. เทคนิคการเขียน G-code เครื่องจักร CNC ด้วยภาษาเบสิก 49
บุญชู สิลางจระจิต ทวี เทศเจริญ อัศวเดช สิมธุภัก
10. กังหันลมสำหรับพื้นที่ภาคตะวันออกเฉียงเหนือของประเทศไทย 55
มงคล มงคลวงศ์โรจน์ ฉัตรชัย งามโชคชัย
11. การคำนวณหาความเร็วลมที่หายไปของเครื่องมือวัดลมเรดิโอไอโอโดโลฟ 61
สุทธิ พานิชการ สุวิพล สิริธัชวาท กรียงไกร พงษ์โรจนกรณ
12. การศึกษาการกระจายคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า ELF จากปรากฏการณ์ฟ้าผ่า 66
ชจิตพรพรณ มกระธัย ณรงค์ เหมกรณ
13. การจัดสรรช่องสัญญาณดาวเทียมสำหรับสถานีวิทยุสื่อสารในดาวเทียมวงโคจรต่ำ 72
กิตติเจริญ สุชัยศิริกุล กิตยา จันทร์ชานา เอกพล ใจรักธรรม สุทธิ พานิชการ สุวิพล สิริธัชวาท
14. การถอดรหัสข้อมูล POCSAG ด้วยไมโครคอนโทรลเลอร์และการประยุกต์ใช้งาน 78
กัญญ์ สิริธัชประเสริฐ ไกรสิน สงวัฒนา
15. การเพิ่มประสิทธิภาพของการเรียงระหว่างพุ่มสายโทรศัพท์กับลูกข่ายของระบบวิทยุสื่อสารเฉพาะกลุ่ม 84
กมล น้อยทองเล็ก กอบชัย เดชหาญ
16. A Monolithic Patch Antenna on a Semi-insulated Si Substrate for Active Integrated Antenna 90
Sathaporn Prunwong, Prakit Tangtisanon, Jun-ichi Takada and Shigen Kawasaki
17. เยาวลิสติก อัลกอริทึม การจัดกลุ่มงานบนโปรแกรมแบบขนาน 95
ศิวดีชัย คัมชะจระ บรรจง ปิยะธาร
18. เครื่องวิเคราะห์ค่าค่าพารามิเตอร์ของตัวควบคุม PID แบบอัตโนมัติ 101
หิทยา ปานนิล ประสิทธิ์ จุลเสวีวงศ์ ประภาส อุดคภูมิพันธุ์ กิตติ ศิเรศพร
19. การออกแบบตัวควบคุม PID ด้วยวิธีทางเดินของราก 107
อาจินต์ นามสำราญ ประสิทธิ์ จุลเสวีวงศ์ ประภาส อุดคภูมิพันธุ์ วิริยะ กองรัตน์
20. วงจรคิมอูเตตสัญญาณเอพเอ็มแบบควอดราเจอร์เฟสโดยใช้วงจรดิฟเฟอเรนเชียล 113
อธิฏ มงคลจิด วิชา แสงพิสิทธิ์ จริยา เลิศจรัสพร้อมดี วินัย ศิลารวม
21. เครื่องเปรียบเทียบแรงดันไฟฟ้ามาตรฐานแบบมัลติแซนแนล 119
วันชัย อินสุศักดิ์ วิทยา หิพย์สุวรรณพร วิริยะ กองรัตน์ เวคิน ปิยรัตน์

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถัน จากการเผาไหม้ของถ่านหินผง

Mathematical Model of Sulfur Oxide Formation in Pulverized Coal Combustion

จารุวัตร เจริญสุข ปัญญา แดงวิไลลักษณ์

ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

บทคัดย่อ

บทความนี้ เสนอการศึกษาเรื่องการก่อตัวและปริมาณออกไซด์ของกำมะถัน ซึ่งเกิดจากการเผาไหม้ถ่านหินผง และสร้างแบบจำลอง โดยใช้วิธี Finite Volume โดยพิจารณาของไหลให้เป็นปริมาตรเล็กๆ และผสมผสานกับแบบจำลอง การสันดาปของถ่านหินผงที่ได้พัฒนาแล้ว (FAFNIR) โดย Imperial College of Science, technology and Medicine (ICSTM) ซึ่งพิจารณาสมการการถ่ายเทมวล โมเมนตัม พลังงานและการเผาไหม้ของถ่านหินผง การเผาไหม้ของแข็งและ ของเหลวในแบบจำลองนี้ได้ผสมกันทางกายภาพอย่างดีด้วยการคำนวณ ผลจากการจำลองเทียบกับผลการทดลองพบว่าเป็นที่น่าพอใจ

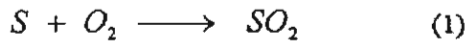
Abstract

A simplified mathematical model of Sulfur oxides formation has been proposed in this paper. The model is used in the simulation of pulverized coal combustion. A finite volume method is used, considering the problem within a small volume that interacts with others under the laws of momentum mass and heat conservation. The model is incorporated into FAFNIR which has already been developed at ICSTM. Reaction rate of Sulfur is assumed to be related to a decay rate of turbulent eddies in proportion to the reaction rate of volatile. The predicted oxygen mass fraction and temperature in the near burner zone are in good agreement with experimental data.

1. บทนำ

ถ่านหินเป็นเชื้อเพลิงชนิดหนึ่งที่ยังมีการนำมา ใช้อย่างแพร่หลายจนถึงปัจจุบัน เนื่องจากมีราคาถูกกว่า น้ำมันถ่านหินสามารถนำไปใช้ในอุตสาหกรรมอย่าง กว้างขวาง เช่น ใช้เป็นเชื้อเพลิงผลิตกระแสไฟฟ้า และ กิจกรรมอื่น ๆ การนำมาใช้ทดแทนพลังงานจากน้ำมันจึง มีปัญหาจากกำมะถัน ซึ่งก่อให้เกิดมลพิษ เป็นอันตราย ต่อสุขภาพและสิ่งแวดล้อม ถ่านหินเมื่อถูกทำให้ร้อนจะ ปลดปล่อยสารระเหย, โดยส่วนที่เหลือในรูปของแข็งคือ

คาร์บอนและเถ้า สารระเหยจะเผาไหม้กับอากาศและก่อให้เกิดออกไซด์ของกำมะถัน และก๊าซอื่น ๆ แบบจำลองทาง คณิตศาสตร์นี้ได้สมมุติว่ากำมะถันในสารระเหยเมื่อเผาไหม้ ได้รวมตัวกับออกซิเจนด้วยอัตราการรวมตัวที่สัมพันธ์กับ อัตราการผสมกันของกระแสน้ำปั่น่วน เนื่องจากอัตราทางจลน์ ศาสตร์ของปฏิกิริยาดังกล่าวสูงกว่าอัตราการผสมของ กระแสน้ำปั่น่วนนั่นเอง[1]และเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยสม การปฏิกิริยาดามสมการ(1) ทั้งหมด



สมมุติฐานดังกล่าวเป็นผลจากการสังเกตที่ว่าก๊าซ SO ซึ่งเกิดขึ้นในห้องเผาไหม้ มีสถานะไม่เสถียรและทำปฏิกิริยากับออกซิเจนอย่างรวดเร็ว ขณะที่ก๊าซ SO₂ นั้นถูกสร้างเพียงเล็กน้อย[11]

2. สมการพื้นฐานของปัญหา

กระบวนการที่เกิดขึ้นภายในห้องเผาไหม้อาจจะอธิบายได้ด้วยความสัมพันธ์ทางคณิตศาสตร์โดยประกอบไปด้วยกระบวนการต่าง ๆ เช่น กระบวนการทางกายภาพ เคมี และพลังงานที่ซับซ้อน จึงจำเป็นต้องเปรียบเทียบผลที่คำนวณได้กับค่าที่ได้จากการทดลอง สมการทางคณิตศาสตร์ที่ใช้อธิบายการไหลของของไหลภายในห้องเผาไหม้คือ Reynolds - averaged Equations โดยใช้อธิบายสมการอนุพันธ์มวล โมเมนตัมและพลังงานของปริมาตรควบคุม ซึ่งสามารถเขียนได้ดังนี้[4]

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = S_m \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij}) + S_u \quad (3)$$

ซึ่ง

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad \tau_{ij} = -\overline{\rho u'_i u'_j} \quad (4)$$

S_m และ S_u และ Sink หรือ Source terms ของมวลและโมเมนตัมภายในปริมาตรควบคุมเล็ก ๆ ตามลำดับ, $\bar{\tau}_{ij}$ คือค่าเฉลี่ยของ viscous stress tensor, u_i และ u_j คือ tensor ของความเร็วเฉลี่ย, ρ คือ ความหนาแน่น, μ คือ laminar viscosity, τ_{ij} คือ Reynolds stresses ซึ่งแทนการถ่ายเทโมเมนตัมเนื่องจากการกระจายของความปั่นป่วน ซึ่งเป็นตัวแปรที่สำคัญในการเผาไหม้ของถ่านหินผง สมการที่ใช้อธิบายพฤติกรรม ดังกล่าวในแบบจำลองนี้ คือ สมการ k และสมการ ε ซึ่งเป็นสมการอธิบายการถ่ายเทพลังงานจลน์ของ Turbulence (k) และอัตราการหายไปของพลังงานจลน์ (dissipation rate) (ε) [8] ซึ่งอาจแทนในรูป

สมการทางคณิตศาสตร์ได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_e}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G - \rho \varepsilon \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varepsilon) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_e}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \\ &+ \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} G - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \end{aligned} \quad (6)$$

ซึ่ง G แทนอัตราการสร้างพลังงานจลน์ของ Turbulent ส่วน, $\rho \varepsilon$ คืออัตราการหายไปของพลังงานจลน์, G กำหนดโดย

$$G = \mu_e \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] \quad (7)$$

$$\text{และ} \quad \mu_e = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (8)$$

μ_e คือ ความหนืดปั่นป่วน, ตัวแปร C_μ , $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k , และ σ_ε คือค่าคงที่ที่ได้จากการทดลองของสมการการถ่ายเทของพลังงานของความปั่นป่วน เงื่อนไขที่ขอบสำหรับพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนและอัตราการหายไปของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนจะแทนในสมการต่อไป โดยสมมุติว่าอัตราการก่อตัวของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนจะเท่ากับอัตราการหายไปของมันที่บริเวณใกล้เคียง

$$k = C_\mu^{1/2} \frac{\tau_w}{\rho} \quad \text{และ} \quad \varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{\kappa y} \quad (9)$$

โดย κ คือค่าคงที่ Von Karman, y คือระยะห่างจากผนัง นอกจากการพิจารณาด้านอากาศพลศาสตร์แล้ว ยังพิจารณาการแพร่กระจายของอุณหภูมิและ Mass fraction ของ อากาศ, สารระเหย, คาร์บอนไดออกไซด์, ซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ฯลฯ แบบจำลองของคุณสมบัติเหล่านี้ถูกเขียนในรูปแบบสมการคณิตศาสตร์ได้ดังนี้

$$\frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(D_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} - \overline{\rho u'_j \phi'}) \right] + S_\phi \quad (10)$$

S_s เป็นเทอม sink หรือ source ที่เกิดขึ้นในการเผาไหม้ ค่าด้านซ้ายมือของสมการเป็นผลจากการพาของคุณสมบัติที่พิจารณา(ϕ), เทอมแรกด้านขวามือเป็นผลของการแพร่ และเทอมที่สองในวงเล็บเป็น Turbulence flux ซึ่งถูกกำหนดในแบบจำลองเหมือนกับกรณีของสมการเคลื่อนย้ายของโมเมนตัม

$$-\overline{\rho u'_j \phi'} = \frac{\mu_e}{\sigma_{\phi,i}} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \quad (11)$$

μ_e คือค่า eddy viscosity ของการไหล, $\sigma_{\phi,i}$ คือค่า Schmidt หรือ Prandtl numbers ของคุณสมบัติที่พิจารณา แบบจำลองที่นำมาใช้ ได้มาจาก [6]และ[7] สำหรับการถ่ายเทโมเมนตัมและ ถ่ายเทความร้อนใกล้ผนัง ในแบบจำลองนี้อัตราของสารระเหยที่ปล่อยออกมาถูกอธิบายในรูปของ Arrhenius function รวมกับกลุ่มของตัวแปรที่ได้จากการสังเกตจากการทดลอง เขียนสมการได้ดังนี้ [2]

$$\frac{DV}{Dt} = K(V^* - V) \quad (12)$$

ซึ่งค่า V^* คือจำนวนรวมทั้งหมดของสารระเหยในถาดหิน, V คือจำนวนเชิงสะสมของสารระเหยที่ปล่อยออกมาและ K คือค่าคงที่ กำหนดได้ดังนี้

$$K = k_0 \exp\left(-\frac{E_{vol}}{RT}\right) \quad (13)$$

K คือ ค่าสัมประสิทธิ์ของพลังงานจลน์ทางเคมี, k_0 คือค่าคงที่ของปฏิกิริยา ซึ่งแบบจำลองถูกเสนอโดย[3] ใช้อธิบายอัตราการเผาไหม้ของ Char อัตรานี้ควบคุมโดย 2 กระบวนการ คือปฏิกิริยาเนื่องจาก Kinetic rate ของ Char และการแพร่ของออกซิเจนที่พื้นผิวของอนุภาคถ่านหิน

$$\frac{Dm}{Dt} = K_s \pi d^2 P X_{O_2} \quad (14)$$

K_s คือค่าสัมประสิทธิ์ของปฏิกิริยาของ Char, d คือเส้นผ่าศูนย์กลางของอนุภาค Char, P คือค่าความดันย่อยของออกซิเจนและ X_{O_2} คือค่า Mass fraction ของออกซิเจน ค่าอัตราปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นระหว่างสารระเหยกับออกซิเจน ถูกสมมุติให้มีความสัมพันธ์กับอัตราการเสื่อมสลายของ Turbulent eddies ซึ่งเปลี่ยนแปลงโดยตรงกับเวลากับ large scale eddies โดยขึ้นอยู่กับค่า ϵ/k [14]

$$R_v = A \rho \frac{E}{k} \text{MIN}\left(\phi_{fuel}, \frac{\phi_{ox}}{S}, B \frac{\phi_{pr}}{1+S}\right) \quad (15)$$

R_v คือค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาของก๊าซ volatile, A และ B คือค่าคงที่ที่ได้จากการทดลอง, ϕ_{fuel} คือ Mass fraction ของ volatile, ϕ_{ox} คือ Mass fraction ของ ออกซิเจน, ϕ_{pr} คือ Mass fraction ของ ผลิตภัณฑ์ของการเผาไหม้ ซึ่งประกอบด้วย ไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ และ S คือ ปริมาณ Stoichiometric ของก๊าซ volatile

ทางเดินของอนุภาคถ่านหินในห้องเผาไหม้ถูกจำลองโดยใช้วิธี Lagrangian อนุภาคถ่านหินถูกปล่อยที่ทางเข้า โดยกำหนดตำแหน่งแน่นอน การกระจายขนาดของถ่านหินเหล่านั้นถูกแบ่งเป็นช่วง ๆ โดยแต่ละช่วงจะแทนด้วยขนาดเฉลี่ยของช่วงนั้น ๆ

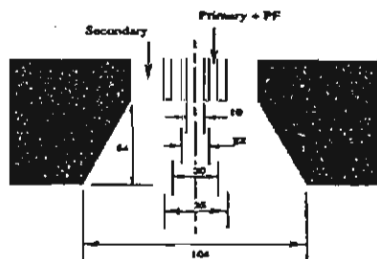
การถ่ายเทของมวล, โมเมนตัมและ พลังงานจากอนุภาคสู่ก๊าซหาค่าได้โดยใช้เทคนิคของเซลล์[10] การกระจายของอนุภาคเกิดขึ้นเนื่องจากความปั่นป่วนถูกสมมุติโดย[8]และใช้สมการอธิบายการถ่ายเทความร้อนจากการแผ่รังสีโดย[5,15] การถ่ายเทความร้อนเกิดจากการแผ่รังสีรวมกับสมการการถ่ายเทพลังงานโดยเทอมของ Source หรือ Sink

3. การจำลองการเผาไหม้ของเตาที่ใช้ถ่านหินผง

3.1 ลักษณะห้องเผาไหม้

จาก[1] เตาเผาของ ICSTM มีลักษณะเป็นทรงกระบอกแนวตั้งและปลิวไฟชิดลงด้านล่าง มีเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.6 เมตร และความยาวรวม 3.0 เมตร เส้นผ่านศูนย์กลางของหัวเผา(d) 0.056 เมตร มีการสร้างคอนกรีตทนไฟที่บริเวณใกล้หัวเผาเพื่อป้องกันการสูญเสียความร้อน ข้อมูล

อุปกรณ์การทดลอง, คุณสมบัติของถ่านหินผง จาก[1] รูปที่ 1 เป็นโครงสร้างของหัวเผาที่ชื่อว่า Single Annular Orifice (SAO) ตารางที่ 1 เป็นเงื่อนไขต่าง ๆ ของห้องเผาไหม้โดยเตาเผาของ[1]



รูปที่ 1 โครงสร้างของหัวเผาในห้องเผาไหม้
ตารางที่ 1. เงื่อนไขห้องเผาไหม้ของเตาเผาที่(ICSTM)[12]

ห้องทดลองหัวเผา:	
อัตราการไหลของอากาศ, kg/s	2.777×10^{-1}
Swirl number	0.0
อุณหภูมิ, K	353
อัตราการป้อนถ่านหิน, kg/s	0.39×10^{-3}
ห้องหัวเผาแรก:	
อัตราการไหลของอากาศ, kg/s	8.833×10^{-3}
Swirl number	0.0
อุณหภูมิ, K	353
ห้องหัวเผาที่สอง:	
อัตราการไหลของอากาศ, kg/s	3.344×10^{-2}
Swirl number	1.03
อุณหภูมิ, K	573
อากาศส่วนเกิน, (%)	15
Proximate analysis:	
(%, มวล)	
คาร์บอน	35.8
Fixed carbon	53.7
ความชื้น	6.3
Ultimate analysis:	
(%, มวล)	
คาร์บอน	83.1
ไฮโดรเจน	4.35
ไนโตรเจน	1.29
ซัลเฟอร์	1.55
ออกซิเจน	9.71
Partical size distribution:	
(%, มวล)	
0-10 μm .	15.0
10-25 μm .	25.0
25-40 μm .	20.0
40-75 μm .	20.0
>75 μm .	20.0
ปริมาณความร้อน(MJ/kg)	29.29

3.2 ลักษณะของโปรแกรม

การเปลี่ยนแปลงทางกายภาพ, เคมี, คุณสมบัติเกี่ยวกับความร้อนถูกพิจารณาารวมกันภายในปริมาตร

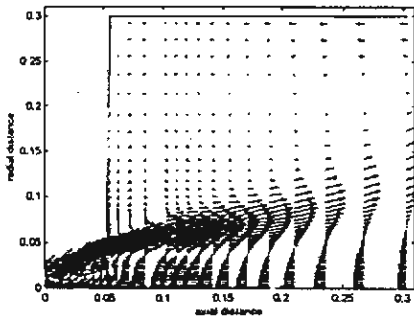
โดยกฎการอนุรักษ์มวล, โมเมนตัมและพลังงาน การเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติต่าง ๆ ของปริมาตรข้างเคียงสามารถหาได้โดยเทคนิคการประมาณค่า ของ Quadratic upstream interpolation for convection and kinematics Differencing scheme[9] และ Hybrid Differencing scheme[14] การแก้สมการที่เกี่ยวข้องด้วยการทำซ้ำจนกระทั่งเข้าหาคำตอบที่ถูกต้องโดยแบ่งปริมาตรให้ขนาดเล็กพอ เพื่อที่จะทำให้เกิดค่าผิดพลาดในการประมาณค่าน้อยจนถึงระดับที่ยอมรับได้[4]

4. ผลการคำนวณและวิเคราะห์ผล

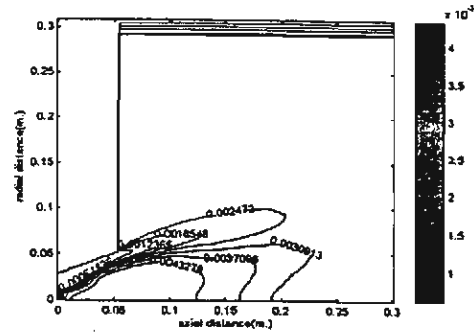
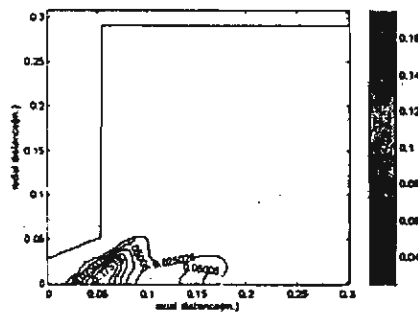
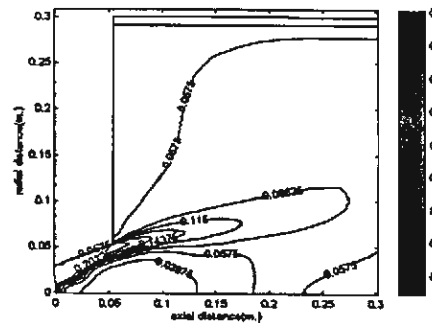
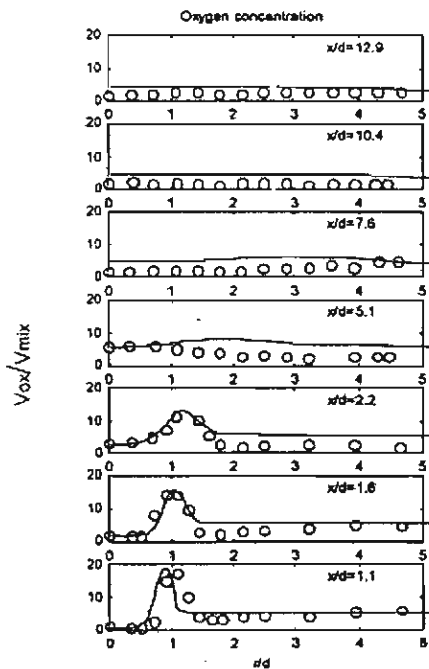
กำหนดในสารระเหยเมื่อเผาไหม้ได้รวมตัวกับออกซิเจนอย่างช้าๆอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่สัมพันธ์กันกับอัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหยที่รวมตัวกับออกซิเจนทั้งนี้ขึ้นอยู่กับอากาศพลศาสตร์และแบบจำลองของการเผาไหม้ที่ถูกต้อง จากการศึกษาอัตราการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ แสดงให้เห็นว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาอยู่ในระดับเดียวกันกับปฏิกิริยาการเผาไหม้[13] ในการเผาไหม้ของถ่านหินภายในห้องเผาไหม้ที่สารตั้งต้นไม่ได้ผสมกันมาก่อนนั้นเมื่ออุณหภูมิห้องเผาไหม้สูงกว่า 1000°C อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะสูงกว่าอัตราการผสมกันของสารตั้งต้นดังนั้นจึงทำปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วเมื่อผสมกัน การผสมกันแบบปั่นป่วนจึงมีอิทธิพลต่อปฏิกิริยาทั้งหมดปฏิกิริยาจะถูกควบคุมโดยอัตราการผสมของความปั่นป่วนซึ่งเป็นสมมุติฐานที่ใช้สำหรับเชื้อเพลิง และอากาศที่เข้ามาผสมกันในห้องเผาไหม้ (Non-premixed Combustion)ความสัมพันธ์พื้นฐานระหว่างอัตราการก่อตัวของซัลเฟอร์ไดออกไซด์กับอัตราการเผาไหม้ของสารระเหยคือสมการข้างล่างนี้

$$R_{\text{SO}_2} = x_s \cdot R_v \quad (16)$$

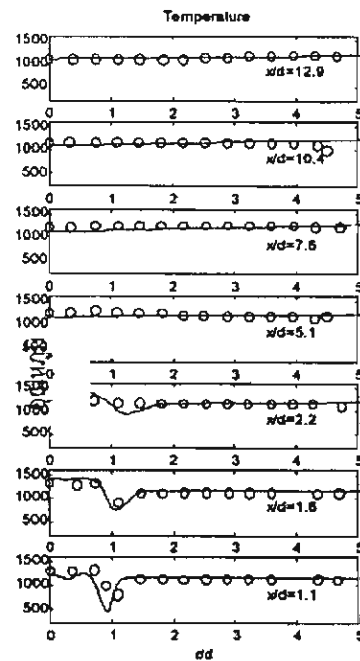
R_{SO_2} คือค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์, x_s คือ Mass fraction ของซัลเฟอร์ไดออกไซด์, R_v คืออัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหย ปริมาณกำหนดที่ป้อนเข้าห้องเผาไหม้เท่ากับ 9.621×10^{-6} kg/s ทางทฤษฎี SO_2 ที่ได้เท่ากับ 1.877×10^{-5} kg/s จากแบบจำลองปริมาณ SO_2 ที่ออกจากห้องเผาไหม้เท่ากับ 2.033×10^{-5} kg/s ค่าความผิดพลาดเท่ากับ 7.67%



รูปที่ 2 velocity vectors

รูปที่ 4 contour ของความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (kg_{so_2}/kg_{mix})รูปที่ 3 contour ของความเข้มข้นของสารระเหย Volatile ($kg_{volatile}/kg_{mix}$)รูปที่ 5 contour ของความเข้มข้นของก๊าซออกซิเจน (kg_{ox}/kg_{mix})

รูปที่ 6 เปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองของการกระจายตัวของ Oxygen Concentration

รูปที่ 7 เปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองการกระจายตัวของอุณหภูมิ ($^{\circ}C$)

การก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นผลมาจากความร้อนและ ปริมาณความเข้มข้นของออกซิเจน, ในขณะที่เดียวกันเมื่อเกิดการเผาไหม้กำมะถัน

รวมตัวกับออกซิเจนจะติดไฟได้ก๊าซ SO_2 พร้อมกับให้ความร้อนออกมา ดังนั้นจากรูปที่ 2 ถึง 7 สามารถอธิบายการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ได้เป็นอย่างดี จากรูปที่ 2 เราสามารถ

เห็น การไหลวนบริเวณทางออกของ burner สนามการไหลนี้กำหนดทางเดินของอนุภาคที่กำลังเข้ามาด้วยการกลับทิศทางของอนุภาคเหล่านั้นให้เข้าหาบริเวณที่กำลังเผาไหม้, ทำให้อนุภาคปลดปล่อยสารระเหย(devolatile) จากรูปที่ 3 อย่างสมบูรณ์ในบริเวณอุณหภูมิสูง จากรูปที่ 4 ออกซิเจนถูกใช้ในการเผาไหม้เกิดการผสมอย่างรุนแรงเกิดขึ้นระหว่างการไหลไปข้างหน้าของกระแสการไหลจากช่องทางเข้า (Secondary inlet) และกระแสการไหลย้อนกลับส่งผลให้เกิดการกระจายตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จากรูปที่ 5, และก๊าซอื่น ๆ ภายในห้องเผาไหม้ และได้อัตราการปลดปล่อยความร้อนสูง

รูปที่ 6 และ 7 แสดงกราฟการกระจายของความเข้มข้นของออกซิเจนและอุณหภูมิที่ได้จากการทดลองและค่าที่ได้จากการทำนายตามลำดับ, ที่ระยะทางตามแนวแกนที่วัดจากระนาบทางออกของ burner ที่แตกต่างกัน ค่าที่ได้จากการทดลองและค่าที่ได้จากการทำนายสอดคล้องกันเป็นอย่างดีโดยเฉพาะอย่างยิ่งในบริเวณใกล้ burner ซึ่งเกิดการเผาไหม้มากที่สุด ดังนั้นจึงมั่นใจได้ว่าอากาศพลศาสตร์และการเผาไหม้มีความถูกต้อง ข้อสมมุติฐานจากสมการที่ (1) บนพื้นฐานของการผสมแบบปั่นป่วนแบบจำลองนี้สามารถมั่นใจได้ระดับหนึ่งและจากการเปรียบเทียบค่าผิดพลาดจากการคำนวณกับทฤษฎีพบว่ามีเพียง 7.69%

5. สรุป

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้ได้นำไปใช้การจำลองการเผาไหม้ของถ่านหินผง และคุณสมบัติการถ่ายเทความร้อน ได้ผลเป็นที่น่าพอใจภายใต้ข้อสมมุติฐานข้างต้น อย่างไรก็ตามค่าที่ผิดพลาดเล็กน้อยระหว่างแบบจำลองกับการทดลองจริง สามารถสังเกตเห็นได้ สาเหตุใหญ่เนื่องมาจากอัตราการลดลงของโมเมนตัม เร็วเกินไปในทิศทางตามแนวแกน และผลเนื่องจาก Swirl ความไม่สอดคล้องนี้เกิดขึ้นในบริเวณที่ห่างจากการเผาไหม้ ซึ่งมีผลน้อยมากต่อการกระจายตัวของก๊าซต่าง ๆ ในบริเวณที่เกิดการเผาไหม้ ทำให้มีความมั่นใจมากขึ้นในการนำไปใช้และพัฒนาแบบจำลองนี้ต่อไป

6. กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบคุณ สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) ที่ได้ให้ทุนสนับสนุนในการทำงานวิจัยครั้งนี้

7. เอกสารอ้างอิง

- [1] T. Abbas, "In-flame Measurement of N-Pollutant and Burnout in a Pulverised-Coal-Fired Furnace", Ph.D. Thesis. University of London, (1993).
- [2] D.B. Anthony, and J.B. Howard, "Coal Devolatilization and Hydrogasification", AIChE Journal, Vol.22, p.625, (1976).
- [3] M.M. Baum, "Predicting the Combustion Behaviour of Coal Particles", Combustion Science and Technology, Vol.3, p.231, (1971).
- [4] J. Charoensuk, "The Application of Mathematical Model for Scaling Pulverized coal combustors", Ph.D Thesis, University of London, (1996).
- [5] J. Gibb, "Internal note", Central Electrical Generating Board, MRM 85, See Rizvi, (1985).
- [6] J.O. Hinze, "Turbulence", Mc. Graw-Hill, (1959, 1975).
- [7] C.L.V. Jayatilleke, "The Influence of Prandtl Number and Surface Roughness on the Resistance of the Laminar Sub-layer to Momentum and Heat Transfer", Progress in Heat and Mass Transfer, Vol. 1, Pergamon Press, (1969).
- [8] W.P. Jones, and B.E. Launder, "The prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence", International journal of heat and mass transfer, Vol. 15, p301, (1972).
- [9] B.P. Leonard, "A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation", Computer Methods in Applied Mechanics and engineering, Vol.19, p.59, (1979).
- [10] S.M.A. Rizvi, "Prediction of Flow Combustion and Heat Transfer in Pulverized Coal Flames", Ph.D. Thesis, University of London, (1985).
- [11] B. William, "Fossil Fuel Combustion", John Wiley & Sons, Inc. (1991).
- [12] T. Abbas, P. Costen and F.C. Lockwood, "The Influence of near Burner Region Aerodynamics on the formation and emission of Nitrogen-oxides in a Pulverized Coal-Fired Furnace", Combustion and flame, Vol.91, p.346, (1991).
- [13] A. Levy and E.L. Merryman, "The Microstructure of Hydrogen Sulphide Flames", combust and Flame, Vol.9, p.229-240, (1965).
- [14] S.V. Patankar, 'Numerical Heat Transfer and Fluid Flow', Hemisphere Publishing Corporation, (1980).

ประวัติผู้เขียน

นาย ปัญญา แดงวิไลลักษณ์ เกิดเมื่อวันที่ 5 เมษายน พ.ศ. 2517 ที่จังหวัดนครศรีธรรมราช สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรี คณะ วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขา วิศวกรรมเครื่องกล (เกียรตินิยม อันดับ 2) จาก มหาวิทยาลัยสยาม ปีการศึกษา 2540 ผลงานทางวิชาการที่ได้รับการตีพิมพ์ 1. “การประยุกต์วิธี Finite volume กับการจำลองการไหลในท่อขยายอย่างฉับพลัน” สัมมนาวิชาการวิศวกรรมเครื่องกลแห่งประเทศไทยครั้งที่ 12, ปีที่ 12, พฤศจิกายน 2541 2. “แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการเผาไหม้ของถ่านหินผง” วิศวกรรมลาดกระบัง, ปีที่ 16, ฉบับที่ 3, 2542 ประสพการณ์การทำงาน 2541-2543 ผู้ช่วยวิจัยโครงการ “แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการก่อตัวของก๊าซกำมะถัน” สนับสนุนทุนวิจัยโดย สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) อาชีพปัจจุบัน หัวหน้าฝ่ายออกแบบ ของ Combustion Group (CG) ของภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

**MATHEMATICAL MODEL FOR THE ADSORPTION OF
SULFUR DIOXIDE BY CALCIUM CARBONATE**

WIPOO SRISEUBSAI

**A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF
MASTER OF ENGINEERING IN MECHANICAL ENGINEERING
SCHOOL OF GRADUATE STUDIES
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG
2000
ISBN 974 - 622 - 916 - 8**

COPYRIGHT 2000

SCHOOL OF GRADUATE STUDIES

KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

Thesis Certification
School of Graduate Studies
King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang

Thesis Title MATHEMATICAL MODEL FOR THE ADSORPTION OF SULFUR DIOXIDE BY CALCIUM CARBONATE

Student Mr.Wipoo Sriseubsai

Student ID. 41062004

Degree Master of Engineering

Programme Engineering in Mechanical Engineering

Thesis Advisor Asst.Prof.Dr.Jaruwat Charoensuk

EXAMINERS		SIGNATURES
Asst.Prof.Dr.Anchaleeporn	Waritswat Lothongkum	
Assoc.Prof.Dr.Mongkol	Mongkolwongrojn	
Assoc.Prof.Dr.Bundit	Fungtammasan	
Asst.Prof.Dr.Pongjet	Promvonge	
Asst.Prof.Dr.Jaruwat	Charoensuk	

Date 11 July 2000 **Time** 12.00 a.m. - 13.00 p.m.

Place Room E12-404 Faculty of Engineering

(Assoc.Prof.Dr.Manas Sangworasil)

Dean

Date.....Month.....Year.....

หัวข้อวิทยานิพนธ์	แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยแคลเซียมคาร์บอเนต
นักศึกษา	นายวิภู ศรีสืบสาย
รหัสประจำตัว	41062004
ปริญญา	วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชา	สาขาวิศวกรรมเครื่องกล
พ.ศ.	2543
อาจารย์ผู้ควบคุมวิทยานิพนธ์	ผศ.ดร.จารุวัตร เจริญสุข

บทคัดย่อ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้เสนอการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในห้องเผาไหม้ด้วยผงแคลเซียมคาร์บอเนต ซึ่งประกอบไปด้วย 2 กระบวนการ คือการแตกตัวของแคลเซียมคาร์บอเนตเป็นแคลเซียมออกไซด์และการรวมตัวของแคลเซียมออกไซด์กับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ซึ่งเกิดปฏิกิริยาไม่พร้อมกัน แบบจำลองดังกล่าวถูกนำไปผสมผสานกับแบบจำลองการก่อตัวและการกระจายตัวของออกไซด์ของกำมะถัน ซึ่งเกิดจากการเผาไหม้ถ่านหินผงที่ได้พัฒนาแล้วโดยนายปัญญา แดงวิไลลักษณ์ โดยพิจารณาการถ่ายเทเอนทัลปี มวล โมเมนตัม และการเผาไหม้ถ่านหินผง ลักษณะของห้องเผาไหม้เป็นทรงกระบอกแนวตั้งและเปลวไฟชนิดลงด้านล่าง มีเส้นผ่านศูนย์กลางภายใน 0.6 เมตร และความยาวรวม 3.0 เมตร เส้นผ่านศูนย์กลางของหัวเผา 0.056 เมตร จากการศึกษาผลของตำแหน่งและขนาดอนุภาคของแคลเซียมคาร์บอเนตที่ปล่อย รวมไปถึงอุณหภูมิของผนังห้องเผาไหม้ต่อปริมาณการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ได้ข้อสรุปว่าอนุภาคของแคลเซียมคาร์บอเนตควรจะถูกฉีดเข้าไปในกระแสหมุนวนภายนอกของก๊าซเพื่อให้อนุภาคอยู่ในห้องเผาไหม้ได้นาน และอนุภาคควรจะต้องเดินทางผ่านช่วงอุณหภูมิในห้องเผาไหม้ที่สูง และพบว่าตำแหน่งที่ปล่อยอนุภาคและขนาดของอนุภาคมีผลต่อการดูดซับน้อย ข้อมูลดังกล่าวจะเป็นประโยชน์ในการศึกษาเพื่อลดปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในห้องเผาไหม้ต่อไป

Thesis Title	Mathematical Model for The Adsorption of Sulfur Dioxide by Calcium Carbonate
Student	Mr.Wipoo Sriseubsai
Student ID.	41062004
Degree	Master of Engineering
Programme	Mechanical Engineering
Year	2000
Thesis Advisor	Asst.Prof.Dr.Jarrewat Charoensuk

ABSTRACT

This thesis presents a study on mathematical modeling for sulfur dioxide adsorption by calcium carbonate, which consists of calcination and sulfation processes. Those processes are assumed insimultaneous reaction. The model is incorporated with the existing model involving enthalpy, mass, momentum transfer equations, the mathematical model of sulfur oxide formation and distribution in pulverized coal combustion that is developed by Daungviluilux P. The vertically down-fire combustion chamber has a cylindrical shape with 0.6 m. inside diameter, 0.3 m. in length and equipped with the 0.056 m. diameter burner. The results show the effects of inlet locations, particle size and wall temperature on the amount of sulfur dioxide adsorption. The residence time and temperature surrounding calcium carbonate particles are found to be the primary parameters for sulfur dioxide adsorption, whereas, the inlet locations and particle sizes of calcium carbonate have less effect. This study is an informative data for further study about the reduction of sulfur dioxide emissions from the pulverized coal combustion.

ACKNOWLEDGEMENTS

There are numerous individuals whose assistance was crucial to the successful completion of this thesis.

First of all, I would like to express my profoundly invaluable gratitude to my advisor, Asst.Prof.Dr. Jarruwat Charoensuk, for his continuously valuable guidance, helpful suggestions and consistent encouragement since the first day I was his advisee.

I am particularly grateful to Mr. Panya Daungviluilux and Ms. Sudarat Kwankaomeng for their recommendations to use the application program, MATLAB, and for assisting me on the right track in calculations. I wish to thank my fellow students who are members of Jarruwat's Laboratory for their encouragements.

Finally, I am greatly indebted to my parents for their unlimited patience, consistent supports and encouragements.

Wipoo Sriseubsai

CONTENTS

	Page
Thai abstract.....	I
English abstract.....	II
Acknowledgements.....	III
Contents	IV
List of tables.....	VI
List of figures.....	VII
Nomenclatures	XI
CHAPTER 1 INTRODUCTION	
1.1 Background of coal utilization in Thailand.....	1
1.2 Purpose and scope of the thesis.....	2
1.3 Outlines of the remaining chapters	2
CHAPTER 2 LITERATURE REVIEW	
2.1 Introduction.....	3
2.2 General descriptions of flue gas desulfurization technologies.....	3
2.3 Important researches for establishing adsorption model.....	5
CHAPTER 3 MATHEMATICAL MODEL	
3.1 Introduction.....	9
3.2 The governing equations in polar co – ordinate forms for gas phase model	9
3.3 Numerical handling at boundaries	11
3.4 Mathematical modeling of gas – phase combustion	14
3.5 Particulate phase model.....	14
3.6 Thermal radiation model	21
3.7 Sulfur oxides formation model	22

CONTENTS (continued)

	Page
CHAPTER 4 ADSORPTION MODEL	
4.1 Introduction	23
4.2 Calcination model	23
4.3 Sulfation model	28
4.4 Integration of calcination and sulfation models into FAFNIR.....	40
CHAPTER 5 COMPUTATIONAL SIMULATION	
5.1 Introduction	43
5.2 Numerical set – up for coal combustion in furnace	43
5.3 The simulation of coal combustion (base case)	46
5.4 Computational simulation for adsorption	49
5.5 Modified boundary for coal combustion (base case)	67
5.6 Modified simulation for adsorption	70
5.7 Summary	81
CHAPTER 6 CONCLUSIONS AND DISCUSSIONS	
6.1 Summary of the preceding chapters	83
6.2 Conclusions	84
6.3 Remarks for further studies	84
REFERENCES	85
APPENDICES	88
AUTHOR BIOGRAPHY.....	101

LIST OF TABLES

Tables	Page
4.1 Summary of activation energy, reaction rates and frequency factors of dolomites, Borgwardt, 1970.....	30
4.2 Effect of particle sizes on reaction rate at the sulfate loading of 2×10^{-3} mol/g, 870 °C	32
4.3 Empirical values of reaction rate at 870 °C, sulfate loading of 1×10^{-3} mol/g of 150/170 – mesh particle size (0.0096 cm.).....	32
4.4 Reaction rate at zero sulfation and β for 1337, 1351, 1343 and 1360 stones.....	32
5.1 Characteristics of bituminous coal	45
5.2 Furnace operating conditions	45
5.3 Kinetic parameters for coal combustion model	46
5.4 Numerical set – up for desulfurization properties in case 1	50
5.5 Numerical set – up for desulfurization properties in case 2	50
5.6 Numerical set – up for desulfurization properties in case 3	51
5.7 Numerical set – up for desulfurization properties in case 4	51
5.8 Numerical set – up for desulfurization properties in case 5	70
5.9 Numerical set – up for desulfurization properties in case 6	71
5.10 Numerical set – up for desulfurization properties in case 7	71

LIST OF FIGURES

Figures	Page
2.1 Various flue gas desulfurization systems and processes, with characteristics descriptions.....	4
3.1 Dissipation of particle passing a cell.....	15
4.1 Overall concepts for adsorption	23
4.2 Schematic diagram of the calcination model	24
4.3 Model of sulfation process on porous CaO particle.....	28
4.4 Graphical representation of r_0 and β	33
4.5 Sorption of sulfur dioxide for different particle sizes of dolomite 1351, Borgwardt, 1970	33
4.6 Graphical representation of r_0 and β with η_0^* modification.....	35
4.7 Effect of zero – sulfation diffusion resistance on sorption of sulfur oxides against experimental data, dolomite 1351, $D_p = 0.0096$ cm.	36
4.8 Effect of zero – sulfation diffusion resistance on sorption of sulfur oxides against experimental data, dolomite 1351, $D_p = 0.025$ cm.	37
4.9 Comparison between mathematical simulation at $\eta_0^* = 0.35$ and measurement for dolomite 1351, $D_p = 0.025$ cm	37
4.10 Comparison between mathematical simulation at $\eta_0^* = 0.09$ and measurement for dolomite 1351, $D_p = 0.13$ cm	38
4.11 Effect of zero – sulfation diffusion resistance on sorption of sulfur oxides against experimental data, dolomite 1351, $D_p = 0.13$ cm	38
4.12 Effect of β on sorption of sulfur oxides against experimental data, dolomite 1351, $D_p = 0.0096$ cm	39
4.13 Comparison between mathematical simulation and the measurement for dolomite 1351	40
4.14 Flowchart for CaCO_3 particle tracking	41
5.1 Schematic diagram of the top segment of the ICSTM furnace.....	44
5.2 Schematic diagram of the burner	44

LIST OF FIGURES (continued)

Figures	Page
5.3 Distribution of temperature (K) (a) entire furnace (b) in the near burner zone	47
5.4 Coal particle trajectories (a) entire furnace (b) in the near burner zone	48
5.5 Concentration of sulfur oxides (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$) near the burner zone	49
5.6 Section of the burner and additional $CaCO_3$ inlets	52
5.7 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 1)....	54
5.8 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.025 cm. (case 2).....	54
5.9 $CaCO_3$ particle trajectories in case 1 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	55
5.10 $CaCO_3$ particle trajectories in case 2 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	56
5.11 Distribution of temperature (K) in case 1 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	57
5.12 Distribution of temperature (K) in case 2 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	58
5.13 $CaCO_3$ particle trajectories in case 3 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	59
5.14 Distribution of temperature (K) in case 3 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	60
5.15 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 3)...	61
5.16 $CaCO_3$ particle trajectories in case 4 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	62
5.17 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 4)...	63
5.18 Distribution of temperature (K) in case 4 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	64
5.19 Concentration of sulfur oxides, case 1 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone	65
5.20 Concentration of sulfur oxides, case 2 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone	65

LIST OF FIGURES (continued)

Figures	Page
5.21 Concentration of sulfur oxides, case 3 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone.....	66
5.22 Concentration of sulfur oxides, case 4 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone.....	66
5.23 Distribution of modified temperature (K) (a) entire furnace (b) in the near burner zone.....	68
5.24 $CaCO_3$ particle trajectories in the near burner under modified wall temperature.....	69
5.25 Concentration of sulfur oxides (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$) in the near burner zone under modified wall temperature	69
5.26 $CaCO_3$ particle trajectories in case 5 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	72
5.27 $CaCO_3$ particle trajectories in case 6 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	73
5.28 $CaCO_3$ particle trajectories in case 7 (a) entire furnace (b) in the near burner zone	74
5.29 Distribution of temperature (K) in case 5 (a) entire furnace (b) in the near burner zone.....	75
5.30 Distribution of temperature (K) in case 6 (a) entire furnace (b) in the near burner zone.....	76
5.31 Distribution of temperature (K) in case 7 (a) entire furnace (b) in the near burner zone.....	77
5.32 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 5)...	78
5.33 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 6)...	78
5.34 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 7)...	79
5.35 Concentration of sulfur oxides, case 5 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone.....	79

LIST OF FIGURES (continued)

Figures	Page
5.36 Concentration of sulfur oxides, case 6 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone.....	80
5.37 Concentration of sulfur oxides, case 7 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone.....	80
A-1 Schematic diagram of the ICSTM furnace	90
A-2 Flowchart for FAFNIR and additional calcination and sulfation processes	91

NOMENCLATURES

Roman symbols

A	Frequency factor of CaCO_3 particle
A_p	Projected area of the particle
$ACOMB$	Model constant
$BCOMB$	Model constant
C_a	Constant of order unity
C_b	Constant of order unity
C_{1d}	Empirical constant
C_{2d}	Empirical constant
$C_{\varepsilon 1}$	Model constant
$C_{\varepsilon 2}$	Model constant
C_D	Drag coefficient
C_μ	Constant for the $k - \varepsilon$ turbulence model
c	Concentration of SO_2
c_p	Specific heat of gas at constant pressure
D	Diffusion coefficient
D_0	Value of binary diffusion
D_c	Diffusion coefficient for $\text{O}_2 - \text{N}_2$ mixture
D_K	Knudsen diffusion
D_{AB}	Molecular diffusion coefficient for CO_2
D_ϕ, D_{eff}	Laminar and Effective diffusion coefficients of scalar property
D_p	Diameter of CaCO_3 particle
d_p	Diameter of coal particle
E	Effective activation energy of char reaction
E_{dvol}	Activation energy for devolatilization
F	External force
F_d	Drag force

NOMENCLATURES (continued)

G	Generation of turbulent kinetic energy
H_C	char calorific value
h	Specific enthalpy
h_{tran}	Heat transfer coefficient
K	Turbulent kinetic energy
K_c	Chemical coefficient for char reaction model
K_d	Diffusion coefficient for char reaction model
K_e	Equivalent absorption coefficient
K_g	Gas absorption coefficient
K_t	Total rate coefficient for char reaction
K_0	Frequency factor for char reaction
K_p	Particle absorption coefficient
K'_p	Cumulative projected area of particle
k	Turbulent kinetic energy
k_A	Rate constant
k_D	Rate constant for decomposition of CaCO_3
k_f	Mass transfer coefficient
k_0	Pre – exponential factor
k_v	Rate constant for sulfation model
L_v	Latent heat of devolatilization
M	Molecular mass
M_c	Atomic mass carbon
m	Mass
m	Order of reaction
N_u	Nusselt number
n'	Amount of sulfate in solid particle
P	Pressure

NOMENCLATURES (continued)

P_i	Partial pressure at node I
P_e	Equilibrium dissociation pressure of CO ₂
P_b	Partial pressure in bulk gas of CO ₂
P_t	Total pressure
$\dot{Q}$	Heat transfer between particulate and gaseous phases
$\dot{q}_w$	Heat flux at across the wall
$\dot{q}_b$	Heat flux across the boundary layer
R_{cc}	Kinetic reaction rate of the coal char
R_{cox}	Reaction rate due to the diffusion of oxygen
R_d	Mean particle diameter
R_u	Universal gas constant
Re	Reynolds number
R_D	Rate of CaCO ₃ decomposition
R_{SO_2}	Rate of SO ₂ formation
R_m	Rate of mass efflux from particulate to the gaseous phase
R_v	Volumetric reaction rate of volatilizes
r	Radial co-ordinate
r_{sul}	Reaction rate of sulfation
r_w	Radiation reflectivity at the wall
S_{st}	Stoichiometric value of volatile gas
S	Source term of transport equation
S_{BET}	BET surface area
S_m	Mass contribution from particulate of gas phase
$S_{v,i}$	Momentum contribution from the particulate phase to the gas phase
T	Absolute temperature

NOMENCLATURES (continued)

T_R	Radiation temperature
$\bar{T}_w$	particle mean emission temperature
t	Time
U	Characteristic velocity, usually referred to the value at the burner inlet
$\Delta U_{p,g}$	Difference of particle velocity referred to that of the gas
u	Velocity components in axial direction
u_r	Friction velocity
u_{disp}	Particle dispersion velocities in axial direction
V	Cumulative volatile release
V	Characteristic volume of the system
V^*	Potential volatile content of coal
v	Velocity components in radial direction
v_{disp}	Particle dispersion velocities in radial direction
w	Velocity components in angular direction
w_p	Weight of solid particles
X	Molar fraction
x_s	Mass fraction of SO ₂
x_i	Mass fraction of particle size group I
y	Distance from the stationary wall
y^+	Dimensionless distance from the wall
Σ	Summation

Greek symbols

β	Empirical parameter
ε	Dissipation rate of turbulence kinetic energy
ε_p	Particle emissivity
Γ	Thermal conductivity

NOMENCLATURES (continued)

φ	Mechanism factor for char reaction
κ	Von Karman constant
μ	Absolute viscosity
μ_l	Laminar viscosity
μ_{ed}	Eddy viscosity
μ_{eff}	Effective viscosity
ρ	Density
η	Effectiveness factor
τ	Characteristic residence time
τ_w	Wall shear stress
ϕ	Scalar property
σ	Stefan – Boltzman constant
σ_h	Molecular Prandtl number
$\sigma_{h,t}$	Turbulent Prandtl number
σ_k	Effective Prandtl number
$\sigma_{\phi,t}$	Turbulent Schmidt or Prandtl number of scalar species

Overbars and superscripts

$-$	Unweighted time averaged mean value
$\sim$	Density – weight time averaged mean value
$'$	Fluctuating component in unweighted averaging
$''$	Fluctuating component in density – weight averaging
$+$	Normalized quantity near a wall in Couette flow analysis
n	Order of reaction rate coefficient for char reaction model
$*$	Parameter modification

NOMENCLATURES (continued)

Subscripts

<i>a</i>	Absorbing
<i>as</i>	Asymptotic
<i>convec</i>	Convection
<i>comb</i>	Combustion
<i>D</i>	Decomposition
<i>e</i>	Equilibrium
<i>eff</i>	Effective value
<i>g</i>	Gas phase; gas
<i>i, j, k</i>	Space co – ordinate
<i>l</i>	Laminar
<i>N</i>	Number of nodes or number of shells
<i>ox, o₂</i>	Oxygen
<i>p</i>	Particulate phase or particle
<i>pr</i>	Product
<i>rad</i>	Radiation
<i>tot</i>	total
<i>turb, t</i>	Turbulent
<i>vol</i>	Volumetric
<i>v</i>	Coriolis force
<i>wall</i>	Wall
<i>φ</i>	Quantity <i>φ</i>
0	Zero sulfation
<i>ref</i>	Reference

CHAPTER 1

INTRODUCTION

Contained in with this chapter is the background of coal utilization in Thailand and its consequence on air pollution. The objective of the research and the scope of the thesis will be discussed. The outlines of the remaining chapters, which summarize the information of the succeeding chapters, are given.

1.1 Background of coal utilization in Thailand

Fossil fuel has been long used as energy sources. Although today, the leading part of the energy sources used all over the world consists of fossil fuel such as coal and heavy oil. When any kind of the fossil fuel is converted into energy, it always generates nitrogen oxide (NO_x), dust and sulfur oxide (SO_x), all of which cause air pollution. Eiichi YUGETA [1] reports that the results of the three-year investigation technology in Thailand found that the activities of coal are:

- Coal utilization in the power industry, such as Mae Moh power station at Lampang province where sulfur dioxide (SO_2) pollution is caused by lignite combustion.
- Coal utilization in the cement industry the pulverized coal is applied to the cement-burning kiln in order to reduce the fuel cost. The environmental problem will not to be caused, if pulverized coal burning technology is used.
- Coal utilization in the non-power industries such as coal used as fuel for boilers in the paper and pulp industry, the chemical industry and the food industry. However, it appears that coal will be replaced with kerosene or LPG due to easy combustion control in the future.
- Coal utilization in residential and commercial sectors, the majority of this consists of firewood and charcoal. There are many investigations of wood fuel but they have stopped because of unresolved problem on cost, smoke, odor and other elements of quality.

The SO_2 pollution has been becoming big social issues. Thus, the establishment of mathematical model for SO_2 adsorption is developed in this.

1.2 Purpose and scope of the thesis

Sulfur dioxide adsorption consists of the calcination and sulfation processes. The purpose of this thesis is to develop the mathematical model for each process, calcination and sulfation model. The equations and experimental results, which are validated against these models, are based on the publications of Silcox [2] and Borgwardt [3]. This mathematical model includes with the mathematical model of sulfur oxide formation in pulverized coal combustion (FAFNIR) developed by Charoensuk J. [4] and Daungvilailux P. [5]. The effects of inlet locations of calcium oxide (CaO) particles and particle sizes are also discussed.

1.3 Outlines of the remaining chapters

This thesis consists of six chapters including this introduction. As mentioned earlier, the objective of this thesis concerns about the derivation of the mathematical model for SO₂ adsorption, the details of the derivation procedures are summarized in the remaining chapters as follows:

Chapter 2 describes in general the flue gas desulfurization technologies and extensive literatures for establishing of the mathematical model.

Chapter 3 describes the mathematical equations for coal combustion and sulfur oxide formation involving the governing equation for gas phase, the boundary equations, the devolatilization, the conservation of momentum, including the sulfur oxide formation model which are developed by Charoensuk J. [4] and Daungvilailux P. [5]

Chapter 4 presents the adsorption model which consists of calcination model and sulfation model. The equations and experimental results for establishment of the mathematical model including the validation study are shown in this chapter.

Chapter 5 displays the calculations of SO₂ adsorption with 7 case studies of different inlet locations of calcined CaO particles and their particle sizes.

Chapter 6 summarizes the consequence of the preceding chapters together with the discussions of the further study.

Subsequently, the flowchart for the calculation procedures and figure of ICSTM furnace are shown in the appendices.

CHAPTER 2

LITERATURE REVIEW

2.1 Introduction

The development of computer hardware leads to an establishment of numerical methods for the solutions of complex mathematical equations, such as those governing flow, combustion and heat transfer. One of its applications is the simulation of such processes in industrial combustors. The solution is obtained in conjunction with an experimental assessment to help engineers and researchers distinguishing the differences between theoretical assumptions and what actually happen during combustion, which helps them gaining a better understanding on such process. There have been extensive works on the model development in order to improve many aspects of its predictive quality. Nevertheless, calculation of a validated mathematical model is able to provide the likely results which would be expected from the experiment. So this chapter will present the general descriptions of flue gas desulfurization technologies and the important informations from the literatures which are significant for establishing the adsorption model.

2.2 General descriptions of flue gas desulfurization technologies

The first flue gas desulfurization system in the world was put into operation in 1930 in the Great Britain [6]. It was reported that this first equipment had failed to continue a long-term operation due to scale trouble (solid deposit) on the equipment.

After that, the flue gas desulfurization system was improved in Japan and the United States during 1970s to be manufactured as commercial system since then.

Today, various types of desulfurization systems are proposed so as to be suitable for individual plant conditions. In general, there are three classifications of desulfurization systems—wet type flue gas desulfurization, dry type flue gas desulfurization and semi-dry type flue gas desulfurization. Furthermore, each type of the system can be divided to different desulfurization methods by types of adsorbent used.

Fig.2.1 shows the desulfurization system classifications and their own methods and characteristics descriptions.

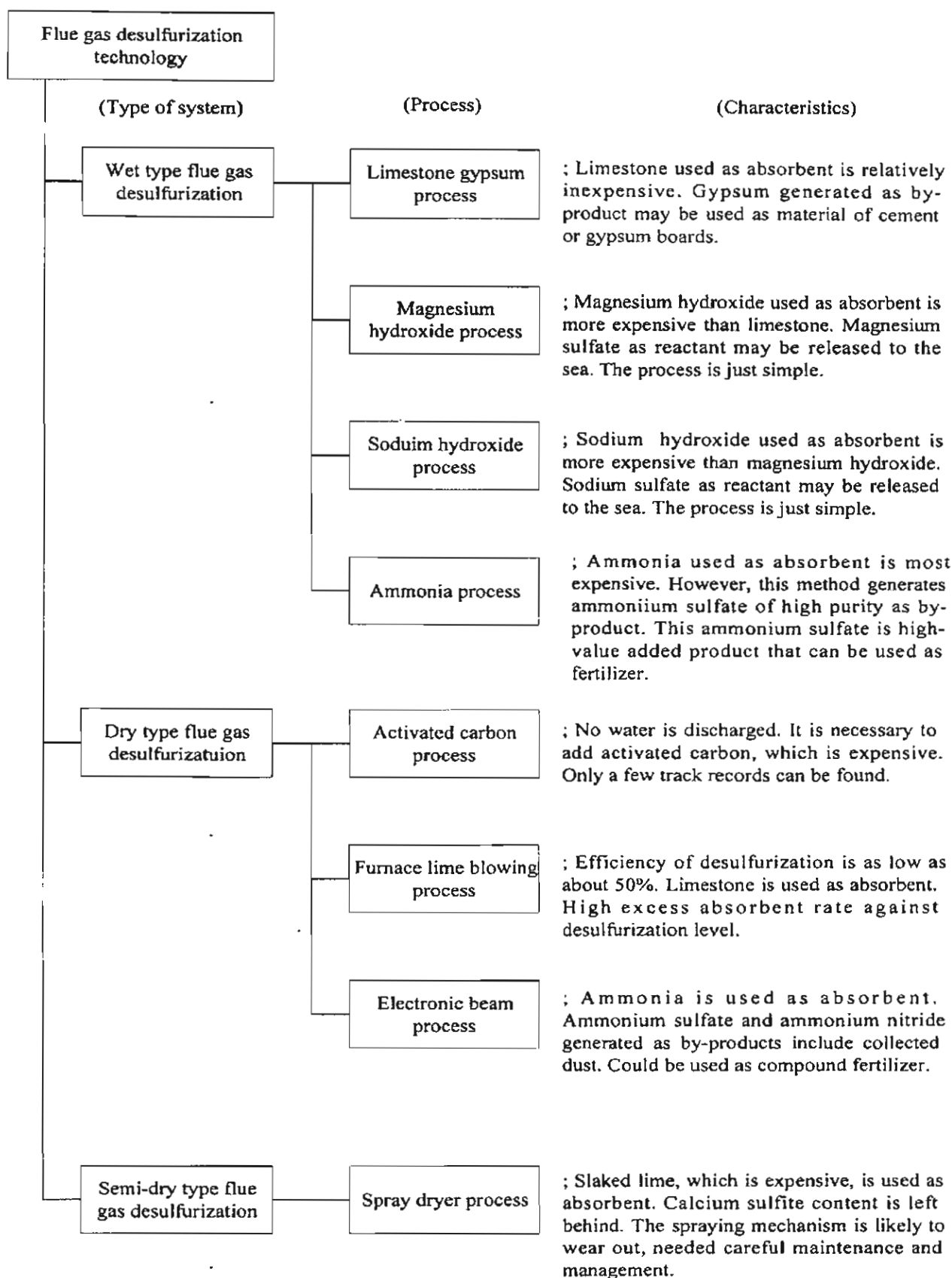


Fig.2.1 Various flue gas desulfurization systems and processes, with characteristic descriptions [6]

Most of the flue gas desulfurization systems currently used in Japan as well as overseas countries are wet type systems. Of those several wet type systems, particularly the one using limestone as adsorbent for recovering gypsum is the most popular type. In this study, however, the dry type is investigated for achieving the objective that is presented in chapter 1. Despite of low adsorption efficiency, the operating costs involved in dry type flue gas desulfurization is the lowest. It is therefore interesting to find out what can be done to improve its efficiency. Thus, the mathematical model of dry type flue gas desulfurization must be developed.

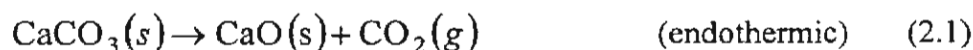
2.3 Important researches for establishing adsorption model

Coal is the cheapest and most abundant fossil fuel compared to gas and oil. It is regarded as the major energy resource of the future, at least for the first half of the new century. However, due to environmental impacts of coal combustion, it is necessary to find a clean and efficient way of extracting the energy from it. In recent years, mathematical simulation has played active roles in the development of coal combustion [7 – 13]. Recent work by Romo-Millares [11] has incorporated global mechanisms for NO formation and reduction [14] into the model for simulation of combustion heat transfer and NO emission of ICSTM furnace. However, both SO₂ formation and reduction mechanisms have not been incorporated into the combustion model. This study is, therefore, aimed at developing a simplified and reasonably accurate model, which simulates both the formation and reduction of sulfur oxides.

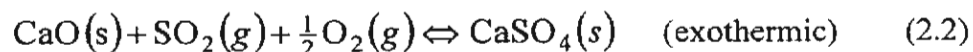
Kinetic studies of sulfur oxides formation reveal that the reaction rate is of the same order of that of combustion. In a non-premixed flame, which typically occurs in coal combustion, where the flame temperature is above 1000°C, kinetic rate is much higher than mixing rate of reactants. Thus, turbulent mixing dominates the overall reaction. Reduction of sulfur oxides, however, mostly takes place at relatively lower temperature and longer residence time. A number of desulfurization techniques have been established. One of them concerns treating of low-grade coal prior to feed into a combustion chamber by blending it with those of higher grade, or separation of pyrite by washing or gravitational method, etc. These techniques have proved successful in removing pyritic sulfur (FeS₂) but unable to remove those chemically bound with organic matters. Other alternative approaches are treatments during and after combustion. An intermediate treatment involves dry injection of sorbent particles into

a furnace where sulfur oxides are adsorbed under optimum reacting environment. Two types of sorbents are used, which are calcium carbonate, generally known as limestone (CaCO_3), and calcium hydroxide. Post-flame treatments, for example, semi-dry and wet scrubbing are achieved by spraying sulfur-oxide adsorbing solution into exhaust gases. This requires an appropriate device to collect the product of the reaction for disposal or for further use, leading to an increase in initial and operating costs. A semi-dry process also needs careful maintenance due to wearing of the spraying mechanism. Moreover, the cost of adsorbing agents is relatively high [6]. Of these desulfurization techniques, the dry injection of sorbent is the cheapest, but suffers from low adsorption efficiency. SO_2 reduction is reported to be as low as 50% [6] due to short available residence time in a pulverized combustion furnace. Thus, increasing the adsorption efficiency of calcined stone is one of the interesting topics in desulfurization.

Limestone rapidly undergoes the calcination process and produces porous calcined CaO particles and carbon dioxide as shown in the following equation [15].



The high heating rate due to immediate particle suspension in a hot, well-dispersed furnace causes a rapid decomposition of CaCO_3 , leading to formation of CaO whose specific area is reportedly as high as $90 \text{ m}^2/\text{g}$ [16]. The CaO further reacts with SO_2 and oxygen molecules producing CaSO_4 according to the following equation [15].



Although the CaCO_3 -derived calcine is less effective in capturing SO_2 than the $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -derived stones [17], the former is more widely used because of its ease of supply. One of the experimental studies, carried out in 1989 by Zarkanitis and Sotirchos [18], revealed that the particle sorptive capacity for SO_2 removal was closely linked to the pore size distribution and the intraparticle mass-transport resistance. They further concluded that the size distribution and the interconnectedness of the pores were important factors rather than the particle

porosity for adsorption capability of calcined particles. The conversion-versus-time curve was lowered with increasing particle sizes, decreasing calcination temperature and increasing sulfation temperature. This is explained in terms of an increase in diffusion limit due to external plugging. The studies were, however, carried out at the temperature between 750-850°C which was lower than that in a near-flame zone of typical pulverized coal combustors (above 1000°C).

The pore structure also changes while the sulfation reaction is taking place. Newton [19] reported that there were temperature dependent losses in the porosity of calcium based sorbents, due to CO_2 - activated sintering, during high temperature (900 - 1300 °C), short time SO_2 capture (< 1 s). In this process, occurring at temperature around 970°C, many small crystals grew into fewer larger ones, leading to a reduction in internal specific surface area and consequently a decrease in sulfation rate. This result was in good agreement with a study carried out earlier by Borgwardt and Bruce in 1986 [17], which reported a relationship between specific surface area and rate of CaSO_4 formation. Borgwardt [3] also reported an exponential decrease in sulfation rate with an increase in sulfation loading. Several semi-empirical models described this plugging process in terms of diffusion of SO_2 through the porous structure, which led to thicken in product layer in porous structure. [20 – 29] Simons [30] and Simons and Garman [31] found that external or mouth plugging occurred in large pores where reaction was controlled by diffusion. Uniform deposition, however, took place in small pores due to kinetically controlled reaction. Moreover, the SO_2 gas was adsorbed between the temperature range of 900°C and 1300°C, because the diffusion and kinetic rates limit the lower bound of reaction, where the upper one was limited by the reaction stability [19]. Maximum conversion was found to be between 1100°C and 1200°C. Among those investigators, Sotirchos and Yu [32] developed random pore structural models incorporated with an intraparticle and reaction model for simulation of gas-solid reaction. The simulation on sulfation of limestone with SO_2 had been carried out at a reaction temperature of 850 °C with a SO_2 concentration of 0.3% v/v. It is interesting to note here that the reaction temperature was lower than that recommended in an earlier literature that reaction would occur at the temperature between 900 to 1300°C. Nevertheless, the simulation result was in good agreement with an experimental investigation by Hartman and Coughlin [22 – 23]. Latest study of Mahuli et al. [33] combined

existing calcination, sintering and sulfation models based on a grain-subgrain concept with first-order calcination kinetics. Validation study carried out by the same researchers against the previous experimental results, i.e., calcination conversion and surface area loss, had been quite satisfactory.

CHAPTER 3

MATHEMATICAL MODEL

3.1 Introduction

This chapter presents a review of the mathematical equations governing combustion in the furnace. A computational code, FAFNIR, is used to numerically solve a number of mathematical equations in polar, two-dimensional co-ordinate domain using structured algorithms [4].

It also briefly describes the governing equations for gas phase model, numerical handling at boundaries, mathematical model of gas phase combustion, particle phase, thermal radiation and sulfur dioxide formation [5].

3.2 The governing equations in polar co – ordinate forms for gas phase model [4]

The FAFNIR code is utilized for calculation in an axi – symmetrical domain. A set of governing equations, polar co – ordinate, are presented as follows:

3.2.1 Continuity

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \tilde{v}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \tilde{u}) = \bar{S}_m \quad (3.1)$$

$\bar{S}_m$ is the source term created from the transport from particulate phase during combustion.

3.2.2 Momentum Conservation

Radial direction:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{v}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{v}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} \right) + \bar{S}_v + \bar{S}_{m,v} \quad (3.2)$$

where

$$\bar{S}_v = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} \right) + \frac{\bar{\rho} \tilde{w}^2}{r} - 2 \mu_{eff} \frac{\tilde{v}}{r^2} \quad (3.3)$$

and $\bar{S}_{m,v}$ is the momentum source term due to particulate phase in radial direction.

Axial direction:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{u}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{u}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right) + \bar{S}_u + \bar{S}_{m,u} \quad (3.4)$$

$$\text{where} \quad \bar{S}_u = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} \right) \quad (3.5)$$

and $\bar{S}_{m,u}$ is the momentum source term due to the particulate phase in the axial direction.

Tangential direction:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{w}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{w}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{w}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right) + \bar{S}_w + \bar{S}_{m,w} \quad (3.6)$$

$$\text{where} \quad \bar{S}_w = -\tilde{w} \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{v}}{r} + \frac{\mu_{eff}}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mu_{eff}}{\partial r} \right) \quad (3.7)$$

and $\bar{S}_{m,w}$ is the momentum source term due to the particulate phase in the angular direction.

3.2.3 Turbulent transport

Turbulent kinetic energy:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \tilde{v} k) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \tilde{u} k) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_K} \frac{\partial k}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_K} \frac{\partial k}{\partial z} \right) + G + \bar{\rho} \varepsilon \quad (3.8)$$

where

$$G = \mu_{eff} \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\tilde{v}}{r} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right)^2 + \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\tilde{w}}{r} \right) \right]^2 \right\} \quad (3.9)$$

Dissipation rate:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tilde{\rho} \tilde{v} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial z} (\tilde{\rho} \tilde{u} \varepsilon) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial k}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial k}{\partial z} \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} G + C_{\varepsilon 2} \tilde{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.10)$$

3.2.4 Scalar transport

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tilde{\rho} \tilde{v} \tilde{\phi}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{\phi}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{eff} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{eff} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial z} \right) + \bar{S}_\phi \quad (3.11)$$

$$D_{eff} = D_\phi + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{\phi,t}} \quad (3.12)$$

3.3 Numerical handling at boundaries [4]

There are two assumptions to be made in the calculation of the momentum conservation, turbulent kinetic energy and heat in the region closed to the wall boundary, i.e.,

- 1) The shear stress in the fluid is equal to the shear stress at the wall.
- 2) Convection and diffusion fluxes are considered to be small so that the production rate of turbulence energy may be equated to its dissipation rate.

The transport of energy is calculated using the effective Prandtl number.

A non-dimensional parameter y^+ is used to characterize the flow near the boundary and is defined by

$$y^+ = \frac{\bar{\rho} u_\tau y}{\mu_1} \quad (3.13)$$

where y is a distance from the stationary wall and u_τ is a friction velocity defined as

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (3.14)$$

where τ_w is the wall shear stress. The flow region is categorized into two zones:

- 1) $0 < y^+ < 11.63$: laminar sub-layer where the molecular diffusion dominates ($\mu_l \gg \mu_t$), and Newtonian flow is assumed.
- 2) $11.63 < y^+ < 300$: turbulent sub - layer where turbulent diffusion dominates ($\mu_t \gg \mu_l$).

3.3.1 Momentum conservation near the wall

The calculation of the contribution of the shear stress to the conservation of momentum closed to a stationary wall recognizes two regions:

- 1) Laminar sub - layer: The shear stress is the product of viscosity and the gradient of the velocity component parallel to the wall $\left(\tau = \mu_l \frac{d\tilde{u}}{dy} = \tau_w \right)$.
- 2) Turbulent sub - layer: the shear stress is given by $\tau = \mu_t \frac{d\tilde{u}}{dy} = \tau_w$, where the eddy viscosity is: $\mu_t = \bar{\rho} \kappa y u_\tau$ and κ is Von Karman constant. The derived form of shear stress is given by

$$\tau = \bar{\rho} k^{1/2} C_\mu^{1/4} \frac{\kappa \tilde{u}}{\ln(y^+)} \quad (3.15)$$

3.3.2 Turbulent kinetic energy and its dissipation near the wall

Neglecting the convection and diffusion fluxes in the equation of kinetic energy, the generation rate of turbulent kinetic energy is equal to its dissipation rate, so that:

$$-\bar{\rho} \tilde{u}'' \tilde{v}'' \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} = \bar{\rho} \varepsilon \quad (3.16)$$

Applying Boussinesq's hypothesis to the flow at the boundary, we have:

$$\tau_{turb} = -\overline{\rho u'v'} = \mu_t \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \quad (3.17)$$

By considering the balance of shear stress at the wall and the fluid layer, the kinetic energy and its dissipation rate at locations near the boundary are given by

$$K = C_\mu^{-1/2} \frac{\tau_w}{\rho} \quad (3.18)$$

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} K^{2/3}}{\kappa y} \quad (3.19)$$

3.3.3 The transport of energy

The assumption that the heat flux, $\dot{q}_b$, in the boundary layer is constant and equal to that across the wall gives

$$\dot{q}_b = \Gamma_{eff} \frac{dh}{dy} = \dot{q}_w, \Gamma_{eff} = \Gamma + \Gamma_t \quad (3.20)$$

where Γ_{eff} is the effective thermal conductivity.

1) In the laminar sub-layer ($0 < y^+ < 11.63$), $\dot{q}_w = \frac{\mu}{\sigma_h} \frac{dh}{dy}$ where σ_h is the molecular Prandtl number.

2) In the turbulent sub-layer ($11.63 < y^+ < 300$), $\dot{q}_w = \frac{\mu_t}{\sigma_{h,t}} \frac{d\tilde{h}}{dy}$ where $\sigma_{h,t}$ is the turbulent Prandtl number. The heat flux may be written as:

$$\dot{q}_w = \frac{\overline{\rho} u_\tau (\tilde{h} + h_w)}{\sigma_{\phi,t} \left[u^+ + P \left(\frac{\sigma_\phi}{\sigma_{\phi,t}} \right) \right]} \quad (3.21)$$

where

$$P\left(\frac{\sigma_{\phi}}{\sigma_{\phi,t}}\right) = 9.29 \left[\frac{\sigma_{\phi}^{3/4}}{\sigma_{\phi,t}} + 1 \right] \quad (3.22)$$

3.4 Mathematical model of gas – phase combustion [4]

The model is a function of the concentration of oxygen, fuel and combustion products. The reaction rate can be specified as:

$$R_{vol} = ACOM \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\tilde{\phi}_{fuel}, \frac{\tilde{\phi}_{ox}}{S_{st}}, BCOM \frac{\tilde{\phi}_{pr}}{1 + S_{st}} \right) \quad \dots\dots(3.23)$$

where R_{vol} is the volumetric reaction rate of volatilizes, $ACOM$ and $BCOM$ are model constants, ϕ_{fuel} , ϕ_{ox} and ϕ_{pr} are, respectively, the time averaged mass fractions of volatilizes, oxygen and combustion products and S_{st} is the stoichiometric value of volatile gas.

3.5 Particulate phase model [4]

The Lagrangian approach was adopted to describe the particulate phase of the flow. It is assumed that the particles were spherical and of constant initial density. Their distribution was defined by finite number of particle size ranges, each represented by its average size. There is a finite number of locations where the particles enter the computational domain. Particles are released at each location with the same velocity and temperature as that of the surrounding gas. The conservation of mass, momentum and energy between two phases are solved for each inlet location and each particle size group in a Lagrangian framework for discrete time steps. The following sub – section contains more details of the approach.

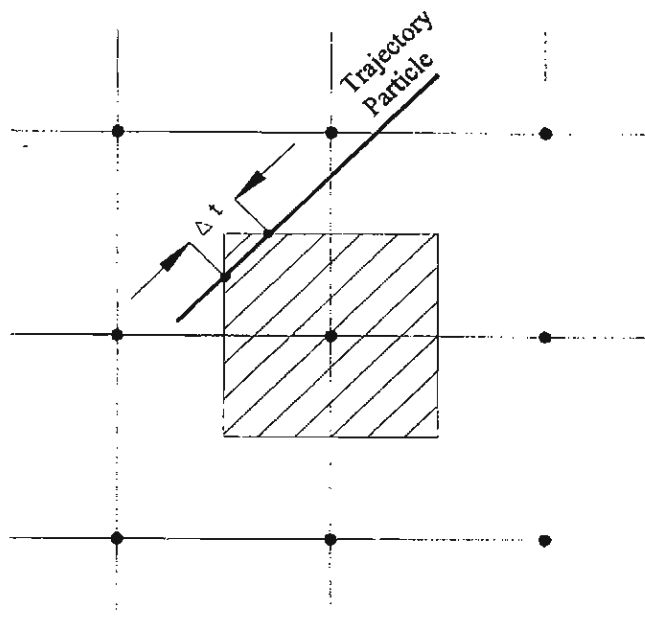


Figure 3.1 Dissipation of particle passing a cell

3.5.1 Conservation of mass

Mass transfer from the particulate phase to the gas phase may be expressed by

$$\frac{dm_p}{dt} = -R_m \quad (3.24)$$

where R_m is the volumetric rate of mass efflux from the particulate phase to the gaseous phase by devolatilization or char combustion. The negative value indicates the mass loss in respect to the particulate phase.

3.5.1.1 The devolatilization model

The single reaction model devolatilization as a simplified Arrhenius function coupled with a group of empirical parameters. The model may be expressed by

$$R_m = \frac{dV}{dt} = k_A (V^* - V) \quad (3.25)$$

V is the cumulative amount of volatiles release, and V^* is the original or total amount of volatiles in the coal. The rate constant k_A may be expressed in Arrhenius form below:

$$k_A = k_0 \exp\left(-\frac{E_{dvol}}{R_u T}\right) \quad (3.26)$$

R_u is the universal gas constant and T is the absolute temperature. k_0 and E_{dvol} are the pre-exponential factor and the activation energy for devolatilization, respectively.

3.5.1.2 The char combustion model

The model assumes that the primary reaction takes place near the surface of the particle to produce carbon monoxide. This product is assumed to oxidize completely to carbon dioxide within the boundary layer surrounding the coal particles. The overall rate of char combustion is controlled by two competitive rate limiting processes, namely the kinetic reaction of coal char and diffusion rate of the oxygen to the particle surface.

Char reaction due to chemical kinetics

The kinetic reaction rate between coal char and oxygen may be written as:

$$R_{cc} = K_c \{(P_{O_2})_o\}^n \quad (3.27)$$

where

$$K_c = K_0 \exp\left(-\frac{E}{R_u T}\right) \quad (3.28)$$

P_{O_2} is the partial pressure of oxygen at the particle surface and K_c is the chemical reaction rate coefficient of order n . K_0 is the frequency factor for char reaction and E is the effective activation energy of char reaction.

Char reaction due to the diffusion of oxygen

$$R_{cox} = K_d \left\{ (P_{O_2})_{\infty} - (P_{O_2})_0 \right\} \quad (3.29)$$

where

$$K_d = \frac{D_c M_c \varphi}{\left\{ \frac{R_d}{2} \left(\frac{T_p + T_g}{2} \right) \right\}} \quad (3.30)$$

and

$$D_c = D_0 \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T_g}{T_0} \right)^{1.75} \quad (3.31)$$

$(P_{O_2})_{\infty}$ is the partial pressure of oxygen in the surrounding gas and at the particle surface, M_c is the atomic mass of carbon, φ is the mechanism factor of char reaction, defined as 1.0 for carbon monoxide formation, R_d is the mean particle diameter, T_p and T_g are, respectively, the absolute temperature of the particle and the gas. D_0 , P_0 and T_0 are the values of the binary diffusion, pressure and temperature taken as $3.13 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$ and 1500 K , respectively.

The overall rate coefficient for char combustion

The overall reaction rate is controlled by the diffusion rate of oxygen and it may be given as:

$$K_t = \frac{1}{\left\{ \left(\frac{1}{K_c} \right) + \left(\frac{1}{K_d} \right) \right\}} \quad (3.32)$$

The burning rate for a particle of diameter d may be expressed is:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = K_t \pi d_p^2 P X_{O_2} \quad (3.33)$$

where P is the gas pressure. X_{o_2} is the molar fraction of oxygen in the surrounding gas.

3.5.2 Conservation of momentum

3.5.2.1 Mean motion of particle

The momentum balance of particle motion may be expressed as

$$\frac{dm_p \tilde{u}_i}{dt} = \sum \bar{F}_i \quad (3.34)$$

The right hand side of the equation is the result of external forces acting on the particle (the pressure gradient, Coriolis effect, Magnus effect, gravity and the drag force created by the velocity difference between the particle and the turbulent flow). In pulverized coal combustion, it is assumed, however, that the forces due to the pressure gradient, gravity and the Magnus effect are negligible. Therefore, the drag force may be given by the following expression:

$$F_d = C_D \rho \frac{A_p}{2} (\tilde{U}_g - \tilde{U}_p) |\tilde{U}_g - \tilde{U}_p| \quad (3.35)$$

where

$$C_D = \left(1 + 0.15 \text{Re}_p^{0.687}\right) \frac{\text{Re}_p}{24} \quad (3.36)$$

$\tilde{U}_g$ and $\tilde{U}_p$ are, respectively, the time – averaged velocities of gas and coal particle, A_p is the projected area of the particle, ρ is the local gas density, C_D is the drag coefficient and Re_p is the Reynolds number referred to the particle, defined as:

$$\text{Re}_p = \frac{\rho |\tilde{U}_g - \tilde{U}_p| d_p}{\mu} \quad (3.37)$$

where μ is the absolute viscosity of the gas and d_p is the diameter of particle. The equation for momentum balance may be written in three components of polar co-ordinate system as follows:

$$\text{Axial direction:} \quad \frac{d\tilde{u}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{u}_p - \tilde{u}_g) \quad (3.38)$$

$$\text{Radial direction:} \quad \frac{d\tilde{v}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{v}_p - \tilde{v}_g) + \frac{\tilde{w}_p^2}{r_p} \quad (3.39)$$

$$\text{Tangential direction:} \quad \frac{d\tilde{w}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{w}_p - \tilde{w}_g) + \frac{\tilde{v}_p \tilde{w}_p}{r_p} \quad (3.40)$$

where $\alpha = \frac{18\mu C_D \text{Re}_p}{24\rho_p d_p^2}$ and r_p is the distance from the axis symmetry.

3.5.2.2 Particle dispersion due to turbulence

The dispersion velocity of the particle is assumed to be related to the fluctuations of the gas velocity by the expression:

$$u_{disp.} = c_{1d} \left(\overline{u'^2} \right)^{1/2} \quad (3.41)$$

$$v_{disp.} = c_{2d} \left(\overline{v'^2} \right)^{1/2} \quad (3.42)$$

where the fluctuation in velocity can be written as:

$$\overline{u'^2} = -c_a 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} k \quad (3.43)$$

$$\overline{v'^2} = -c_b 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{2}{3} k \quad (3.44)$$

where C_a and C_b are constants also specified as unity. The dispersion velocity can be expressed in term of the mean velocity gradient and kinetic energy as:

$$u_{disp.} = c_1 \left(-c_a 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} k \right)^{1/2} \quad (3.45)$$

$$v_{disp.} = c_2 \left(-c_b 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{2}{3} k \right)^{1/2} \quad (3.46)$$

Thus we have:

$$\frac{d\tilde{u}_p}{dt} = -\alpha \left(\tilde{u}_p \pm u_{disp.} - \tilde{u}_g \right) \quad (3.47)$$

$$\frac{d\tilde{v}_p}{dt} = -\alpha \left(\tilde{v}_p \pm v_{disp.} - \tilde{v}_g \right) + \frac{\tilde{w}^2}{r_p} \quad (3.48)$$

$$\frac{d\tilde{w}_p}{dt} = -\alpha \left(\tilde{w}_p - \tilde{w}_g \right) + \frac{\tilde{v}_p \tilde{w}_p}{r_p} \quad (3.49)$$

3.5.3 Conservation of energy

The change of thermal energy within the particle is the sum of the heat transfer to the particle and the heat generation by char combustion, the heat removed with the mass loss during char combustion and the heat of evaporation during the devolatilization process. The thermodynamic balance equation becomes:

$$\frac{d(m_p c_p T_p)}{dt} = m_p \dot{Q}_t - c_p T_p \left(-\frac{dm_p}{dt} \right) - L_v \frac{dm_p}{dt} \quad (3.50)$$

Where

$$\dot{Q}_{tot} = \dot{Q}_{conv.} + \dot{Q}_{rad.} + \dot{Q}_{comb.} \quad (3.51)$$

L_v - latent heat of devolatilization

c_p - specific heat of gas at constant pressure

T_p - absolute temperature of particle

The individual components of heat are evaluated as given by the following expressions.

$$\dot{Q}_{convec.} = \frac{\pi d_p^2 h_{tran} (T_g - T_p)}{m_p} \quad (3.52)$$

$$\dot{Q}_{rad} = \pi \sigma \varepsilon_p \frac{d_p^2}{m_p} (T_R^4 - T_p^4) \quad (3.53)$$

$$\dot{Q}_{comb.} = \frac{\eta H_C}{m_p} \left(-\frac{dm_p}{dt} \right) \quad (3.54)$$

Where,

- d_p - the diameter of particle
- m_p - mass of particle
- h_{tran} - the heat transfer coefficient
- Nu - the Nusselt number
- H_C - char calorific value
- η - the ratio of heat absorbed by the particle to heat released
- σ - Stefan – Boltzman constant
- ε_p - particle emissivity
- T_i - temperature of $i = g(\text{gas}), p(\text{particle})$ and R (radiation)

3.6 Thermal radiation model

For the evaluation of the radiation temperature, “Non – equilibrium diffusional Radiation model” is used along with “Truncated moment expansion simplification technique” [34]. The model is given by,

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{3K_e} \nabla T_R^4 \right) = (K_g + \bar{\varepsilon}_p K'_p) T_R^4 - K_g T_g^4 - \bar{\varepsilon}_p K'_p \bar{T}_p^4 \quad (3.55)$$

with the boundary condition (assuming that the enclosing wall is a Grey Lambert surface and is opaque to radiation (transitivity = 0), hence $\varepsilon_w + r_w = 1$)

$$-\frac{1}{3K_e} \frac{\partial T_R^4}{\partial n} = \frac{1}{2} \frac{\{(1 - \bar{r}_w)T_R^4 - \bar{\varepsilon}_w \bar{T}_w^4\}}{(1 + \bar{r}_w)} \quad (3.56)$$

where,

- K_g - gas absorption coefficient
- K_p - particle absorption coefficient
- ε_p - particle emissivity, assuming the particles as opaque spheres
- K_e - equivalent absorption coefficient
- $\bar{\varepsilon}_w$ - wall emissivity
- $\bar{r}_w$ - radiation reflectivity at the wall
- $\bar{T}_w$ - particle mean emission temperature

3.7 Sulfur oxides formation model

This model is investigated by Panya [5] who summarized that typical coals comprise a substantial amount of carbon and hydrogen and small amounts of oxygen, nitrogen, sulfur and solid matters constitute ash. Pulverized coal, when it enters the hot environment of combustion zone, releases the volatile comprising carbon dioxide, water, combustible hydrocarbons, nitrogen and sulfur species. The oxidation of volatile sulfur is assumed that only the SO_2 is occurred. The relationship between the rate of SO_2 formation and volatile combustion can be written as:

$$R_{\text{SO}_2} = x_s \cdot R_{\text{vol}} \quad (3.57)$$

where R_{SO_2} is the rate of SO_2 formation, x_s is the mass fraction of SO_2 and R_{vol} is the volumetric reaction rate of volatilizes.

CHAPTER 4

ADSORPTION MODEL

4.1 Introduction

Adsorption is the process by which material accumulates at the interface between two phases. These phases can be any of the following combinations: liquid – liquid, gas – liquid and gas – solid. The adsorbing phase is called the adsorbent, and any substance being adsorbed is termed as an adsorbate.

Adsorption onto solid adsorbents has great environmental significance, since it can effectively remove pollutants from both aqueous and gaseous streams due to the high degree of purification that can be achieved.

This chapter presents the reaction between $\text{SO}_2(\text{g})$ and limestone or dolomitic limestone ($\text{CaCO}_3(\text{s})$) that is assumed to occur in two steps. The first step is the calcination, i.e. carbon dioxide is emitted from the carbonate. The second step is the sulfation (pore model) that is a heterogeneous reaction between SO_2 and CaO . The overall concept shows in Fig.4.1.

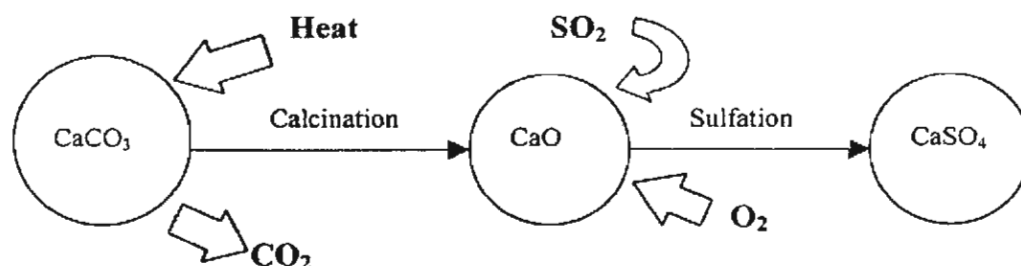


Fig.4.1 Overall concepts for adsorption

4.2 Calcination model [2]

The following steps are included in the model: decomposition of CaCO_3 at the $\text{CaO} - \text{CaCO}_3$ interface, diffusion of CO_2 through the CaO to the particle surface, diffusion of CO_2 from the particle surface to the bulk gas and loss of continuous surface area for all calcined material. The overall concept for the model is shown in Fig.4.2. The particle is assumed to be isothermal. As suggested by Fig.4.2, a CO_2 concentration gradient exists across the CaO layers. The calcination process is

allowed to occur in steps leading to a layered CaO zone. Each layer is homogeneous, and the physical properties within a given layer are constant. Physical properties are allowed to vary from layer to layer with the most recently formed layer of CaO possessing the highest surface area. The rate of surface area loss is a function of temperature, surface area and CO₂ concentration.

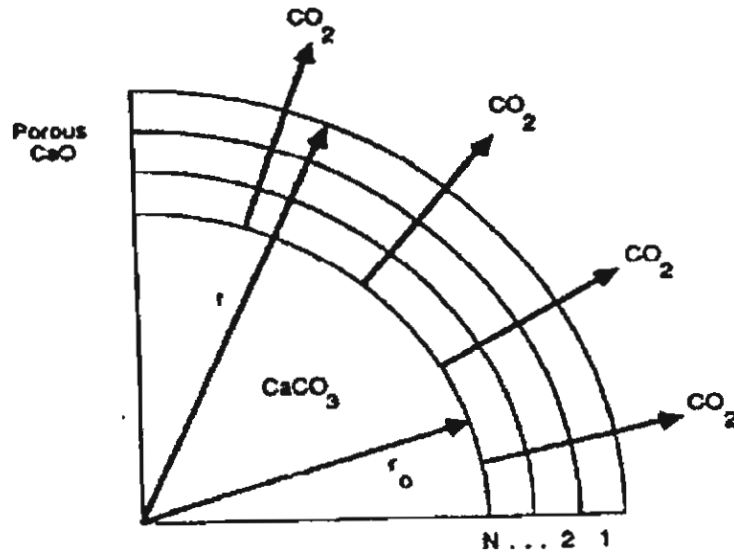


Fig.4.2 Schematic diagram of the calcination model [2]

The equations governing the movement of the calcination front are:

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{M}{\rho} R_D \quad (4.1)$$

and at $t = 0$, $r = r_0$

where

$$R_D = k_D (P_e - P_N) \quad (4.2)$$

$$k_D = 0.00122 \exp(-4026/T) \quad (4.3)$$

$$P_e = \exp(17.74 - 0.00108T + 0.332 \ln T - 22020/T) \quad (4.4)$$

and r is the radius (m) of the shrinking core of CaCO_3 , t is time (s), M is the molecular weight of CaCO_3 (kg), ρ is the density (kg m^{-3}), R_D is the rate of decomposition ($\text{kmol m}^{-2} \text{s}^{-1}$), r_0 is the initial particle radius, which is assumed constant, k_D is a rate constant for decomposition of CaCO_3 ($\text{kmol m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{atm}^{-1}$), P_e is the equilibrium dissociation pressure of CO_2 (atm), P is the CO_2 partial pressure at the $\text{CaO} - \text{CaCO}_3$ interface, and T is the absolute temperature (K). The diffusion coefficient, which controls transport mechanism for CO_2 in porous lime, is estimated as:

$$D = (D_K^{-1} + D_{AB}^{-1})^{-1} \quad (\text{m}^2 \text{s}^{-1}) \quad (4.5)$$

where

$$D_K = 0.00881 T^{1/2} S_{BET}^{-1} \quad (\text{m}^2 \text{s}^{-1}) \quad (4.6)$$

and

$$D_{AB} = 0.000139 (T/273)^{1.75} P_{tot}^{-1} \quad (\text{m}^2 \text{s}^{-1}) \quad (4.7)$$

Finally, the effective diffusivity for the porous material is estimated by

$$D_e = D \varepsilon^2 \quad (4.8)$$

where $\varepsilon = 0.5$, that is the porosity of the calcined particles. D is the diffusion coefficient for the pore, D_K is Knudsen diffusion coefficient, D_{AB} is the molecular diffusion coefficient for CO_2 in the air, T is absolute temperature (K), S_{BET} is the BET surface area ($\text{m}^2 \text{kg}^{-1}$), and P_{tot} is the total pressure (atm).

The BET surface area, S_{BET} , can be described by the equation

$$\frac{dS_{BET}}{dt} = -k(S_{BET} - S_{as})^2 \quad (4.9)$$

where t is time (s), S_{as} , $5 \text{ m}^2/\text{g}$, is the asymptotic surface area and k ($\text{km}^{-2} \text{ s}^{-1}$) is the rate constant may be written as:

$$k = 286 \exp\left(\frac{-14500 - 3280P^{-0.111}}{T}\right) \quad (4.10)$$

The differential equation governing the diffusion of CO_2 through the porous lime is

$$\frac{\partial^2 P}{\partial r^2} + \left(\frac{2}{r} + \frac{1}{D_e} \frac{\partial D_e}{\partial r}\right) \frac{\partial P}{\partial r} = \frac{1}{D_e} \frac{\partial P}{\partial t} \quad (4.11)$$

Two boundary conditions are:

at $r = r_0$

$$-D_e \frac{\partial P}{\partial r} = k_f (P - P_b) \quad (4.12)$$

at $r = r$

$$-\frac{D_e}{R_u T} \frac{\partial P}{\partial r} = k_D (P_e - P) \quad (4.13)$$

where r (m) is the radial position within the calcined layer, k_f (m s^{-1}) is the mass – transfer coefficient for sphere may be written as :

$$k_f = \frac{D_A}{D_p} \left(2.0 + 4.9 D_p^{1/2}\right) \times 10^{-2} \quad (4.14)$$

where D_p (cm) is the diameter of calcined particle and D_A is $2.16 \times 10^{-5} T^{3/2}$ ($\text{cm}^2 \text{ s}^{-1}$), P_b is the CO_2 partial pressure in the bulk gas, and R_u is the gas constant. Applying the pseudo – steady – state approximation for gas – solid reactions and each shell of calcined particle is assumed to be homogeneous, D_e constant. Equation 4.11 can be simplified to

$$\frac{d^2 P}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dP}{dr} = 0 \quad (4.15)$$

This equation applies to each shell of calcined particles. The shells or nodes are numbered as illustrated in Fig.4.2. There is a CO_2 generation term at the $\text{CaCO}_3 - \text{CaO}$ interface (Equation 4.13) and a convective boundary condition at the outer surface (Equation 4.12) the solutions to Equation 4.12, 4.13 and 4.15 are:

for node 1

$$P_1 = P_b + \frac{r_N^2 k_D R_u T}{r_1^2 k_f} (P_e - P_N) \quad (4.16)$$

for node 2 through N-1

$$P_i = P_{i-1} + \frac{FR_u T}{4\pi(D_e)_{i-1}} \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{r_{i-1}} \right) \quad (4.17)$$

where

$$F = 4\pi r_N^2 k_D (P_e - P_N) \quad (4.18)$$

for node N

$$P_N = \frac{P_e + BP_b}{1 + B} \quad (4.19)$$

where

$$B = \frac{A_1 U_1}{4\pi r_N^2 k_D} \quad (4.20)$$

$$A_1 = \frac{4\pi r_1^2}{R_u T} \quad (4.21)$$

$$\frac{1}{U_1} = r_1^2 \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{(D_e)_j} \left(\frac{1}{r_{j+1}} - \frac{1}{r_j} \right) + \frac{1}{k_f} \quad (4.22)$$

The number of nodes increases by one with each step in time. The layers of CaO are allowed to sinter at each time step, which lead to change in their transport properties. The rate of sintering is also a function of CO₂ partial pressure.

From the above equations, the Gauss – Seidel method and the improvement of convergence using relaxation are used to predict the pressure for each shell. This type of modification known as underrelaxation, $0 \leq \omega \leq 1$, and shown as follows [35]:

$$P_i^{new} = P_i^{old} + \omega \Delta P_i^{new} \quad (4.23)$$

As the first step of calculation, the pressures for each shell are initialized as total pressure of gas phase. Eventually, the calcination rate is predicted by replacing the P_N in Equation 4.2 with a convergent pressure at node N . This rate is a parameter for calculation the sulfation process.

4.3 Sulfation model

The chemical reaction between calcined limestone and sulfur dioxide is

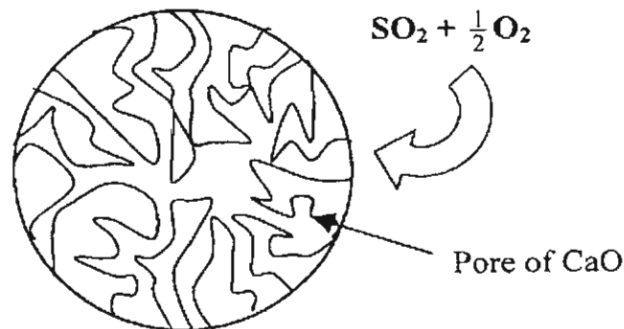
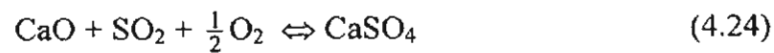


Fig.4.3 Model of sulfation process on porous CaO particle

Due to Borgwardt [3], the reaction rate is defined as

$$r = \frac{1}{w_p} \frac{dn'}{dt} = \frac{\eta}{\rho} k_v c^m \quad (4.25)$$

The rate is in mole per unit gram of calcined particle per second. w_p is the weight of solid particles, n' is the amount of sulfate in solid particle in mole. c and m are concentration of SO_2 and order of reaction respectively. k_v is a rate constant which is a function of temperature in the Arrhenius

$$k_v = Ae^{-E/RT} \quad (4.26)$$

Experimental values of k_v are summarized in Table 4.1, along with those of E and A . ρ is the density and η is an effectiveness factor indicating a decrease in adsorption rate due to sulfate loading. This parameter is related to sulfate loading,

$\frac{n'}{w_p}$ by the following equation:

$$\ln \eta \frac{Ac^m}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w_p} + \ln r_0 \quad (4.27)$$

β is an empirical parameter obtained by fitting the experimental data. r_0 is the reaction rate at zero sulfation, defined as

$$r_0 = \eta_0 \frac{A_0 c^m}{\rho_0} e^{-E/RT} \quad (4.28)$$

Table 4.1. Summary of activation energy, reaction rates and frequency factors of dolomites, Borgwardt, 1970 [3]

Dolomites	Activation energy, E, cal/mol	Reaction rate constant, k_v , s^{-1}	Frequency factor, A, s^{-1}
1337	10,000	4.8×10^3	2.4×10^5
1351	18,100	7.2×10^3	9.0×10^6
1343	14,200	4.0×10^3	1.1×10^6
1360	8,100	2.3×10^3	5.5×10^4

From the Equations 4.27 and 4.28, the frequency factor may be expressed as

$$A = \frac{\eta_0}{\eta} \frac{\rho}{\rho_0} A_0 e^{-\beta \frac{n'}{w_p}} \quad (4.29)$$

A_0 from Equation 4.28 is substituted into Equation 4.29. Combining with Equations 4.25 and 4.26, it yields the following relationship:

$$r = \frac{\eta}{\rho} \frac{\rho}{\rho_0} r_0 \frac{\rho_0 e^{E/RT}}{\eta_0 c^m} \frac{\eta_0}{\eta} e^{-\beta \frac{n'}{w_p}} e^{-E/RT} c^m \quad (4.30)$$

thus,

$$r = r_0 e^{-\beta \frac{n'}{w_p}} \quad (4.31)$$

As will be shown below, a simple relationship between r, r_0, β and $\frac{n'}{w_p}$ can

be derived from the above Equation (4.31) showing that the reaction rate is a function of only a few parameters which is not the case observed from Borgwardt's experiment [3]. The data at 1×10^{-3} mol/g sulfate loading of the same investigator shows a linear correlation between $\log(r)$ and $1/T$ (K^{-1}), thus the reaction rate should be modified to account for this temperature effect as:

$$r = r_0 e^{-\beta \frac{n'}{w_p}} e^{\frac{-E}{RT} + c_0} \quad (4.32)$$

where

$$c_0 = \frac{E}{RT_{ref}} \quad (4.33)$$

where T_{ref} is the reference temperature which is 1143.15 K (870°C). The above relationship reduces to Equation 4.31 at reference temperature. Moreover, the rate also increases with increasing SO_2 . Thus, an additional term is proposed as follows:

$$r = r_0 e^{-\beta \frac{n'}{w_p}} e^{(-E/RT) + (E/R_{tref})} \frac{c^m}{c_{ref}^m} \quad (4.34)$$

where c_{ref} is the SO_2 concentration which is 2.9×10^{-8} mol/cc (wet basis). The value r_0 for each type of dolomite is obtained by linear interpolation, knowing the reaction rate at 1×10^{-3} sulfation and the correlation of $\log(r)$ with linear $\frac{n'}{w_p}$:

$$\ln r_0 = \ln r_{1 \times 10^{-3}} - \beta (1 \times 10^{-3}) \quad (4.35)$$

β may be obtained by the following expression, knowing the reaction rates at 1×10^{-3} and 2×10^{-3} from the experiment [3] which are summarized in Tables 4.2 and 4.3

$$\beta = \frac{\ln r_{2 \times 10^{-3}} - \ln r_{1 \times 10^{-3}}}{2 \times 10^{-3} - 1 \times 10^{-3}} \quad (4.36)$$

Table 4.2. Effect of particle sizes on reaction rate at the sulfate loading of 2×10^{-3} mol/g, 870°C [3]

Dolomites	Reaction rate (mol/g s) $\times 10^5$		
	D_p 0.0096 cm.	D_p 0.025 cm.	D_p 0.13 cm.
1337	4.2	3.2	1.4
1351	3.2	2.1	1.3
1343	2.1	1.4	0.7
1360	2.5	1.8	1.1

Table 4.3. Empirical values of reaction rate at 870°C , sulfate loading of 1×10^{-3} mol/g of 150/170-mesh particle size (0.0096 cm) [3]

Dolomites	Reaction rate (mol/g s) $\times 10^5$
1337	6.4
1351	5.9
1343	3.6
1360	3.1

The above relationships for the case of dolomite 1337, for instance, may be graphically presented in Fig.4.4. The values of r_0 and β for other types of particles may be obtained in a similar manner, which are summarized in Table 4.4.

Table 4.4. Reaction rate at zero sulfation and β for dolomites 1337, 1351, 1343 and 1360 [3]

Dolomites	$\ln r_0$	β		
		D_p 0.0096 cm.	D_p 0.025 cm.	D_p 0.13 cm.
1337	-9.24	-420	-550	-970
1351	-8.97	-690	-900	-1140
1343	-9.69	-540	-740	-1090
1360	-10.16	-220	-385	-630

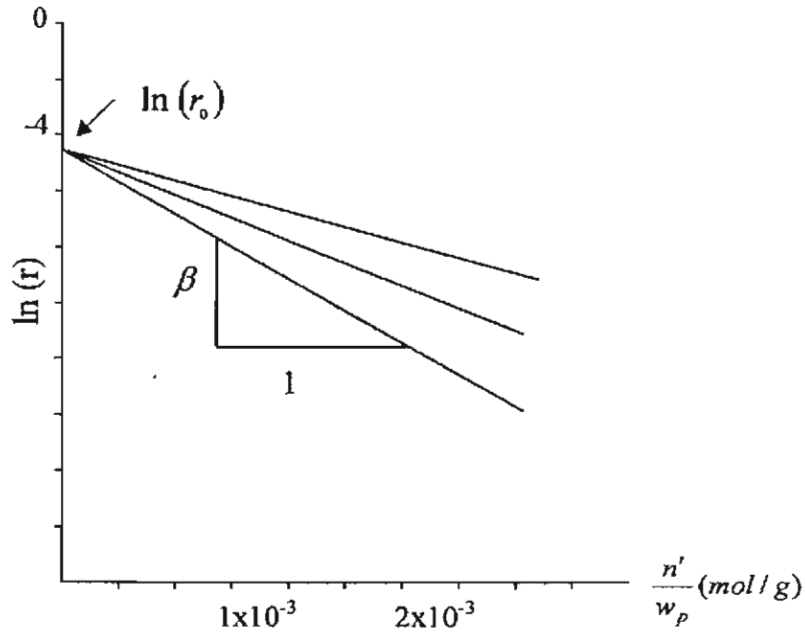


Fig.4.4 Graphical representation of r_0 and β

Apparently from Equation 4.34, the reaction rate is independent of an effectiveness factor. The experimental results, however, suggest that the amount of SO_2 adsorbed per 30 mg of small particles is greater than that of the larger ones, as clearly observed at the beginning of the reaction. This is due to pore diffusion resistance at zero sulfation, which becomes more significant for the larger particle sizes, see Fig.4.5.

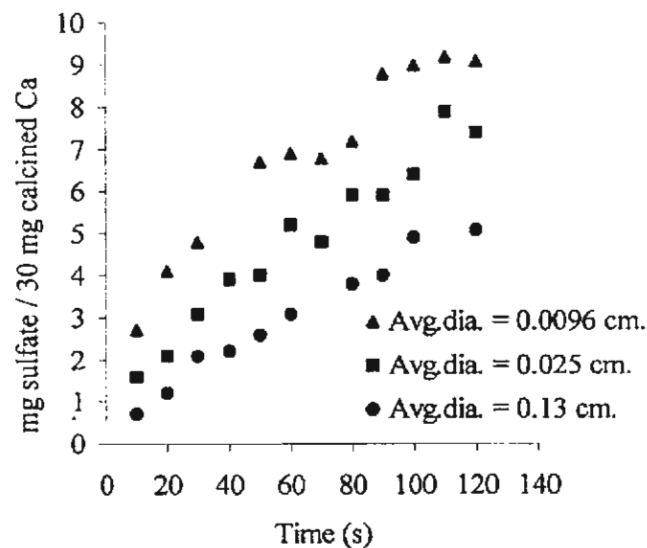


Fig.4.5 Sorption of sulfur dioxide for different particle sizes of dolomite 1351, Borgwardt, 1970 [3]

Equation 4.26 can be written as

$$\ln \eta_0^* \eta A \frac{c^m}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w_p} + \ln r_0 \quad (4.37)$$

yielding

$$\ln \eta_0^* + \ln \eta A \frac{c^m}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w_p} + \ln r_0 \quad (4.38)$$

or

$$\ln \eta A \frac{c^m}{w} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w_p} + \ln \left(\frac{r_0}{\eta_0^*} \right) \quad (4.39)$$

All terms, except the last one in the right-hand side of the equation is in the same form as those of Equation 4.27. Thus, a linear relationship between $\ln(r)$ and $1/T$ is maintained. The value η_0^* represents the diffusion resistance at zero sulfation, which differs from η . This latter parameter represents the effectiveness of reaction throughout the reaction period. The former is constant for a particular size of particle whereas the latter decreases with increasing sulfate loading. Therefore, a more general equation for β would be

$$\beta = \frac{\ln r_{2 \times 10^{-3}} - \ln \left(\frac{r_0}{\eta_0^*} \right)_{0.0}}{2 \times 10^{-3}} \quad (4.40)$$

This parameter reflects the overall kinetic rate of reaction (4.24) without intraparticle effects. The value is thus unique for each type of dolomite. The empirical values in logarithmic form are previously given in Table 4.4. The graphical representation of β is given in Fig.4.6.

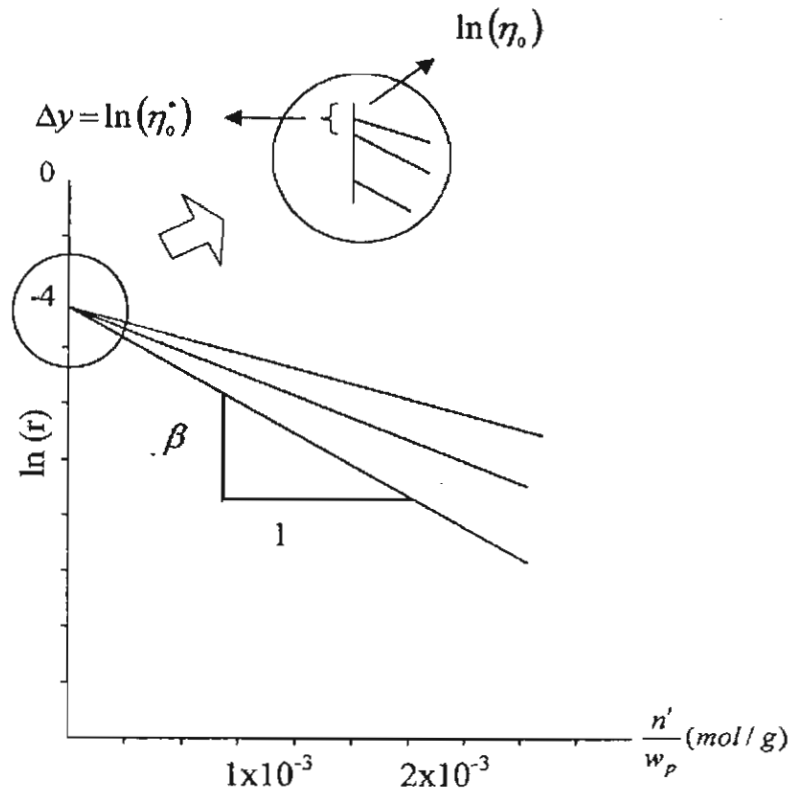


Fig.4.6 Graphical representation of r_0 and β with η_0^* modification

4.3.1 Validation

Fig.4.7 shows the effect of diffusion resistance on sorption of sulfur oxides with η_0^* varying from 1 (no resistance at zero sulfation) to 0.4 for different types of dolomites. Experimental data are compared with the simulation results obtained from Equation 4.34 with the activation energy from Table 4.1, r_0 from Table 4.4 and β from Equation 4.40. It is important to note here that the values of β given in Table 4.4 are determined from Equation 4.36 assuming that the reaction rate at zero sulfation is unique for certain type of dolomite regardless of the effect of particle size variation. Thus, those values only represent the relationship of $\ln(r)$ and the sulfate loading, $\frac{n'}{w_p}$ at the absence of initial diffusion resistance, η_0^* . Generally, the simulation underpredicts the experimental data. A change in diffusion resistance generally affects the shape of sulfate accumulation with time. A decrease in reaction

rate at zero sulfation leads to a decrease in the amount of sulfate adsorbed, which is most notable at the early stage of reaction. At sulfate loading of 2×10^{-3} the reaction rate equals the value given in Table 4.2. This is a break-even point of the reaction rate where the values are the same for all η_0^* . As the reaction rate decreases linearly with increasing sulfate loading, a decrease in reaction rate, for the case of $\eta_0^* < 1$, is less than that of $\eta_0^* = 1$. This leads to higher reaction rate at sulfate loading greater than 2×10^{-3} . The sulfate accumulation for the case of $\eta_0^* < 1$ is, therefore, greater than that for the case of $\eta_0^* = 1$ after a certain period of time.

Fig.4.8 suggests a similar trend of evolution with change in η_0^* . The reaction rate is generally lower than that for $D_p = 0.0096$ cm., due to lower β . At $t = 0$ s, for $\eta_0^* = 1$, both cases have the same reaction rate. As for t greater than 0 s, the reaction rate of the 0.025-cm particles becomes less than that of the 0.0096-cm one, and the gap becomes greater as the time increases. Its effect on the accumulative amount of sulfate with time, thus, follows this trend. It appears, however, that the simulated result for $\eta_0^* = 0.35$ yields the best fit to the measurement, see Fig.4.9. The measured data clearly shows that there is a significant diffusion resistance at zero sulfation.

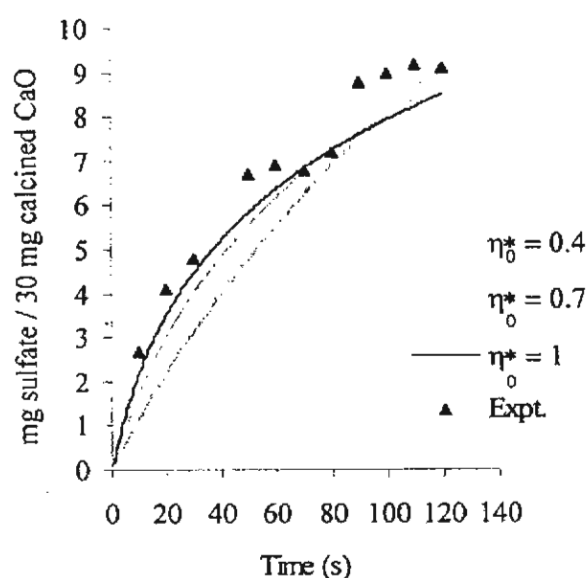


Fig.4.7 Effect of zero-sulfation diffusion resistance on sorption of sulfur oxides against experimental data, dolomite 1351, $D_p = 0.0096$ cm.

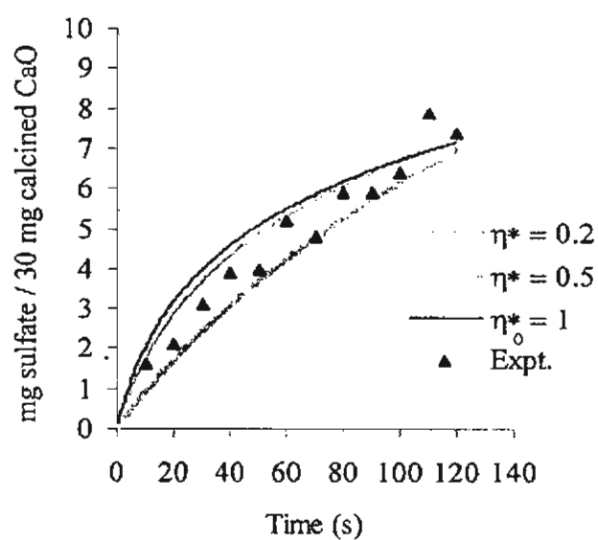


Fig.4.8 Effect of zero-sulfation diffusion resistance on sorption of sulfur oxides against experimental data, dolomite 1351, $D_p = 0.025$ cm.

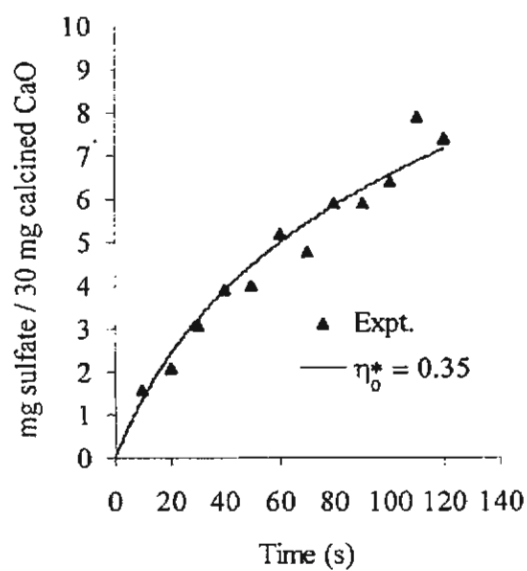


Fig.4.9 Comparison between mathematical simulation at $\eta_0^* = 0.35$ and measurement for dolomite 1351, $D_p = 0.025$ cm.

As for the adsorption of 0.13-cm particle size, the value of $\eta_0^* = 0.09$ yields the best fit to the measured data, see Fig.4.10.

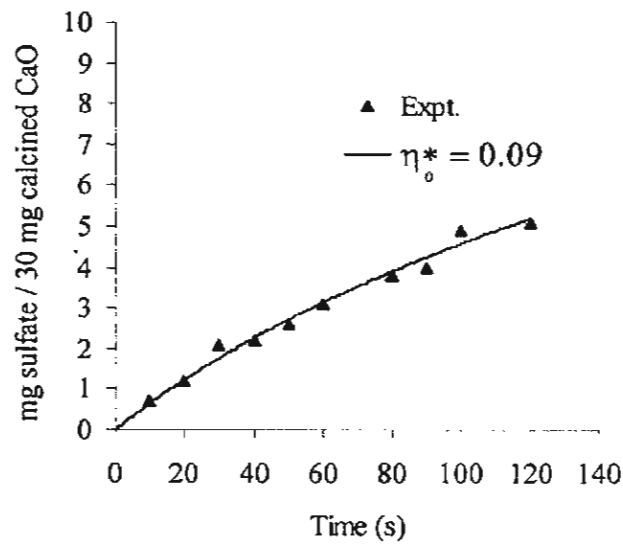


Fig.4.10 Comparison between mathematical simulation at $\eta_0^* = 0.09$ and the measurement for dolomite 1351, $D_p = 0.13$ cm.

At $\eta_0^* = 0.05$, the accumulation level increases almost linearly with time, suggesting that the reaction rate is very much less influenced by the sulfate loading, see Fig.4.11.

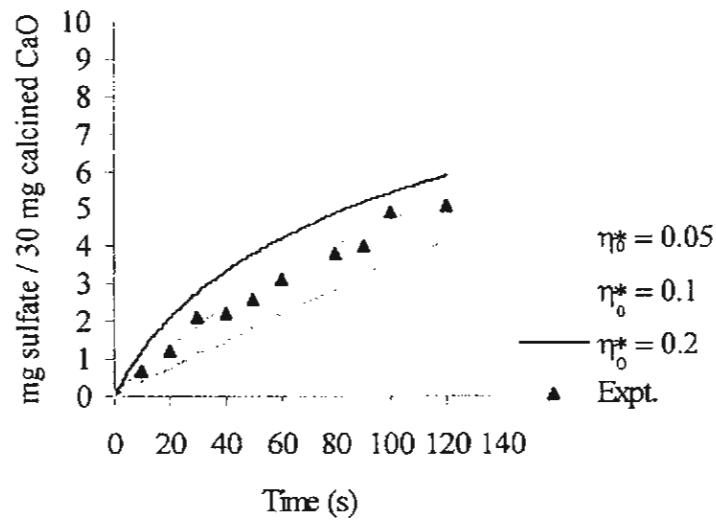


Fig.4.11 Effect of zero-sulfation diffusion resistance on sorption of sulfur oxides against experimental data, dolomite 1351, $D_p = 0.13$ cm.

The effect of β on SO_2 adsorption may be illustrated in Fig.4.12. At a constant value, $\eta_0^* = 1$, a decrease in magnitude of β leads to an increase in the reaction rate. The parameter β indicates that the rate of $\ln(r)$ decreases with sulfate loading, thus the greater the magnitude of β the lesser the rate of reaction.

Fig.4.12 shows an increase in accumulative sulfate loading against the same corresponding time when decreasing the magnitude of β to 90% and 85% of its original (β), respectively. The profile of sulfate loading, which is compared between mathematical simulation and the measurement for dolomite 1351, has already been given in Fig.4.13. For different types of dolomites, the mathematical model for SO_2 adsorption may be obtained in a similar manner. However, the chemical and physical structures of dolomite are different from one dolomite to another, thus specific η_0^* and β values should be identified for different types of particles.

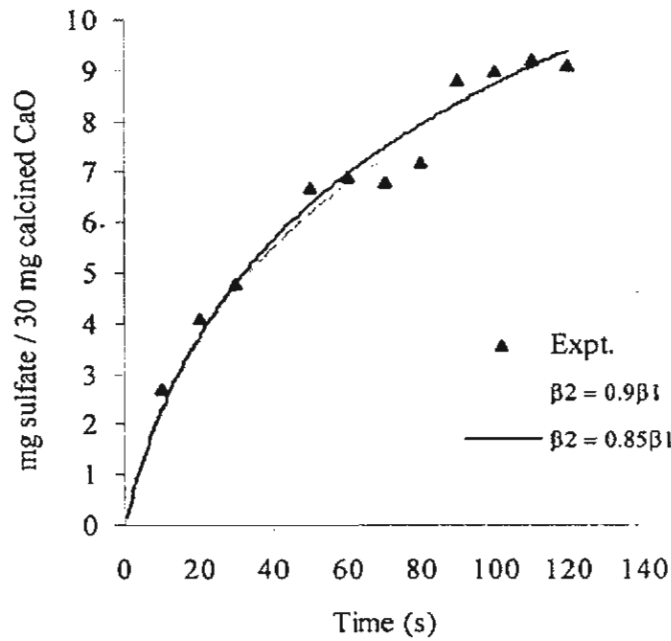


Fig.4.12 Effect of β on sorption of sulfur oxides against experimental data, dolomite 1351, $D_p = 0.0096$ cm.

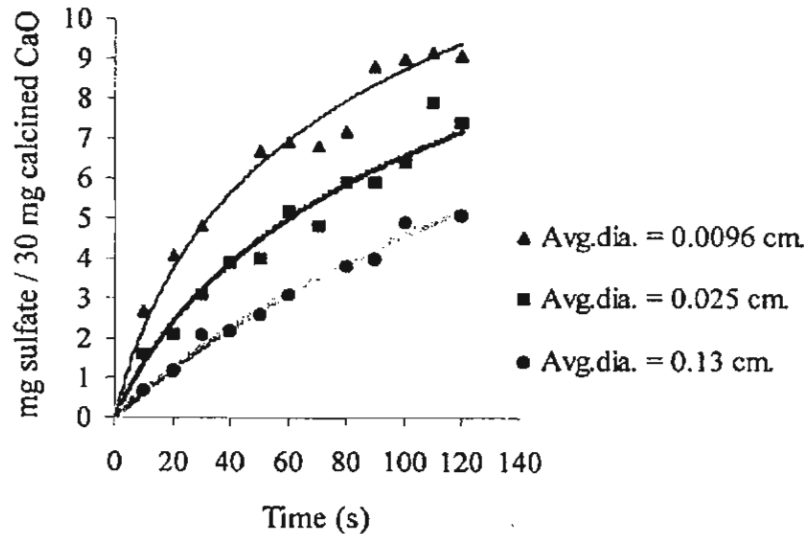


Fig.4.13 Comparison between mathematical simulation and the measurement for dolomite 1351

4.4 Integration of calcination and sulfation models into FAFNIR

The calcination and sulfation models are integrated in FAFNIR by inserting sub-program for each model. The assumptions for these models are insimultaneous. CaCO_3 particles were injected into the furnace by the conditions of inlet locations and particle sizes. Sub-program, PARTIC, that determines the track of coal particle [4], is modified for prediction of CaCO_3 particle path. Algorithm of this sub-program shows in Fig.4.14. The assumptions of particles are:

1. No collision and interaction particles
2. Gray system is assumed for radiation
3. Constant diameter is assumed but the density decreases with time
4. Dispersion of particles in mean turbulent flow is achieved by injecting the particle from different locations within the injection domain / port, incorporated with turbulent dispersion velocity model (Section 3.5).
5. Mass, momentum and heat sources contribute to gas phase via particle-source-in cell technique [4] as mentioned in Section 3.5. Since the mean particle trajectories are different from one iteration to another. With underrelaxation techniques [4] the above source terms are dispersed within the turbulent gaseous stream.

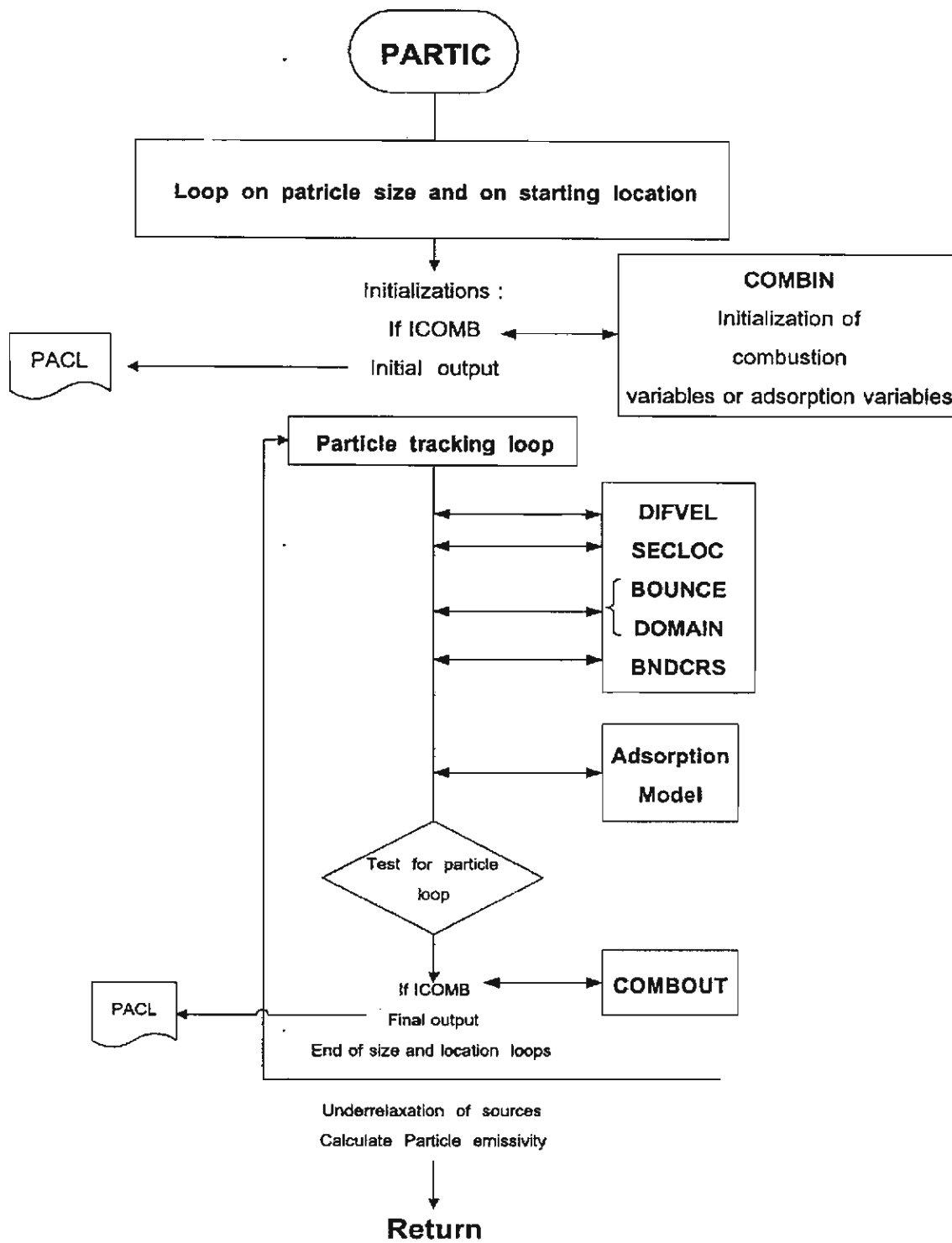


Fig.4.14 Flowchart for CaCO_3 particle tracking

- DIFVEL, this subroutine calculates the local gas velocity and diffusion velocity.
- SECLOC, this subroutine returns the new sector in which particle is giving its new position.

- BOUNCE, this subroutine calculates the position and the velocity of particle after it bounces a boundary.
- BNDCRS, this subroutine determines the boundaries of the sector where a particle crosses the grid during each time step.
- Adsorption model consists of two models for calcination and sulfation processes.

CHAPTER 5

COMPUTATIONAL SIMULATION

5.1 Introduction.

This chapter consists of the results and discussions in 9 cases. Those cases discussed in section 5.3 – 5.6 are a study of the effects of inlet locations, particle sizes and wall temperature on the amount of SO₂ adsorption. The mathematical model is included in FAFNIR while the schematic diagram of the furnace and numerical set – up are illustrated in the following section.

5.2 Numerical set - up for coal combustion in furnace

The detailed numerical set-up has been previously described by Charoensuk J. [4] and Daungvilailux P. [5]. The summary of them are as follows:

1. The furnace is a cylindrical symmetry. It has a diameter of 0.6 m. and a total length of 0.3 m. Fig.5.1 shows the schematic diagram of the top segment of the ICSTM furnace, which is used for simulation and the overview of furnace shown in Fig.A-1 (in appendix A). Dimensions of burner are illustrated in Fig.5.2.
2. The characteristics of bituminous coal given in Table 5.1. The furnace operating conditions are summarized in Table 5.2 with the recommended coal kinetic parameters in Table 5.3.
3. Uniform profiles of temperature and velocities at every component of inlets are assumed. The wall is considered adiabatic from the burner exit plane up to 1.5 meters along the axial distance.
4. In region where the gradient of the velocity is large and suddenly changed in shape of the boundary occurs (e.g., at corner, or at the burner inlet), the cell should be small.

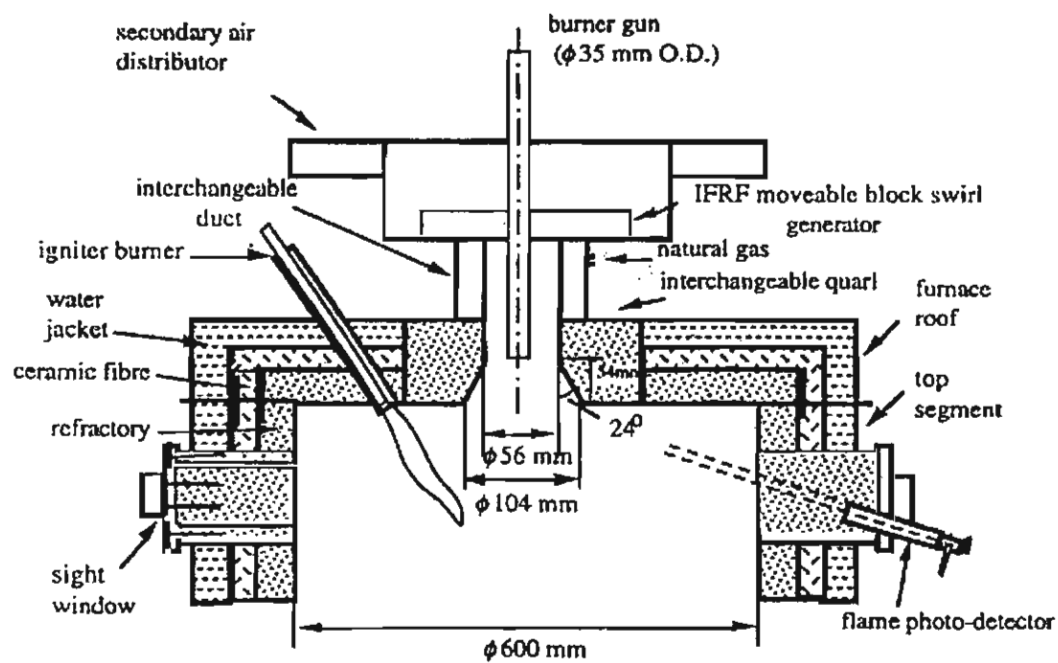


Fig.5.1 Schematic diagram of the top segment of the ICSTM furnace

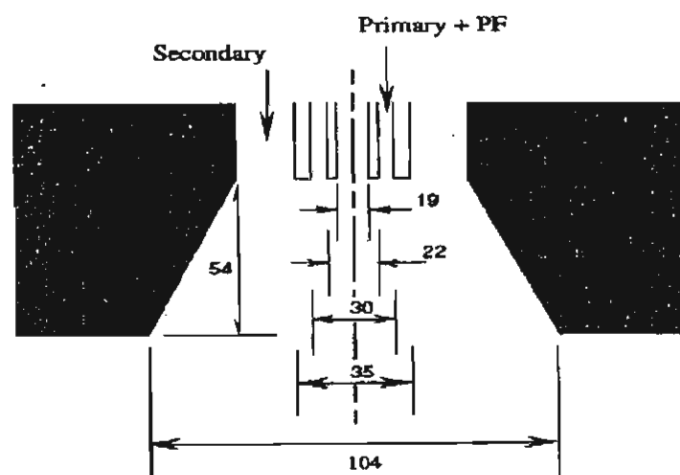


Fig.5.2 Schematic diagram of the burner

Table 5.1 Characteristics of bituminous coal [36]

<u>Proximate analysis:</u>	(wt %)
Volatiles	35.8
Fixed carbon	53.7
Moisture	6.3
<u>Ultimate analysis:</u>	(wt %)
Carbon	72.60
Hydrogen	5.05
Nitrogen	15.31
Sulfur	1.29
Oxygen	1.55
<u>Particle size distribution (μm)</u>	(wt %)
0-10	15.0
10-25	25.0
25-40	20.0
40-75	20.0
>75	20.0
Gross calorific value, MJ/kg	29.29

Table 5.2 Furnace operating conditions

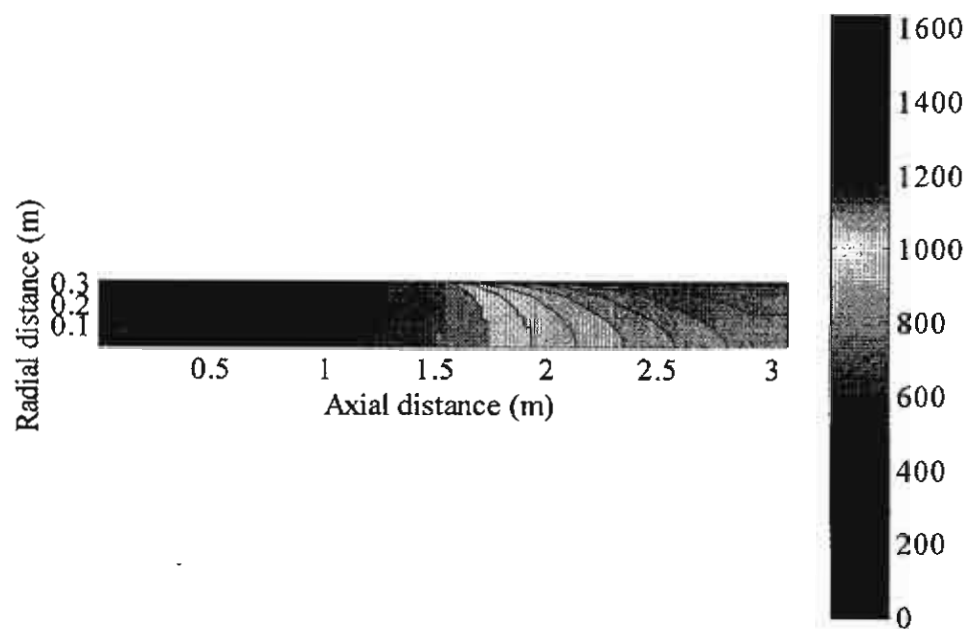
<u>Central pipe:</u> Air flow rate, kg/s	4.777×10^{-4}
Swirl number	0.0
Temperature, K	353
Coal feed rate, kg/s	0.39×10^{-2}
<u>Primary:</u> Air flow rate, kg/s	8.833×10^{-3}
Swirl number	0.0
Temperature, K	353
<u>Secondary:</u> Air flow rate, kg/s	3.344×10^{-2}
Swirl number	1.03
Temperature, K	573
Excess air (%)	15

Table 5.3 Kinetic parameters for coal combustion model

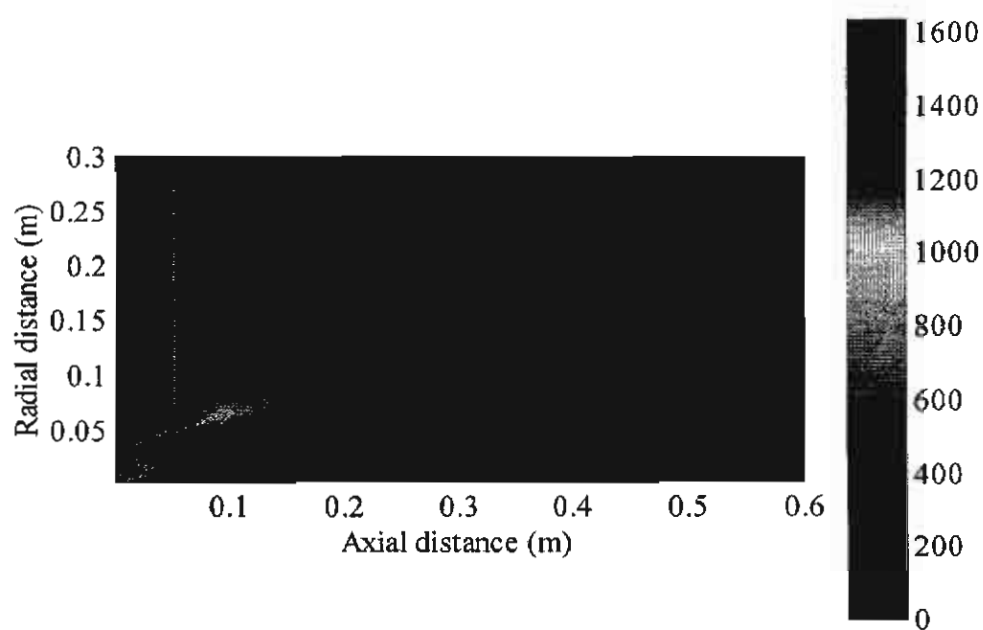
Kinetic parameters	E (J/kmol)	k_0, K_0
Devolatilization	7.4×10^7	$8.36 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$
Char reaction	1.02×10^8	$0.86 \text{ kg s N m}^{-4}$

5.3 The simulation of coal combustion (base case)

The simulation of flow, heat transfer and coal combustion are performed as well as formation of sulfur oxides. A contour plot of the temperature distribution in Fig.5.3 describes the role of recirculation on the mechanism of flame stabilization. The heat generated by volatile combustion is transported into the internal recirculation zone and stored in a torroidal vortex closed to the center of the jet, near the burner exit. Fig.5.4 shows the consequential coal particle trajectories. The reverse flow of coal particles is evident at the distance between 0.05 – 0.18 m from the burner exit. The sooner particle is entrained with the local gas velocity, the shorter particle penetrates into the internal recirculation zone. From Fig.5.5, high SO_2 concentration is observed at the distance between 0.03 – 0.18 m from the burner exit.

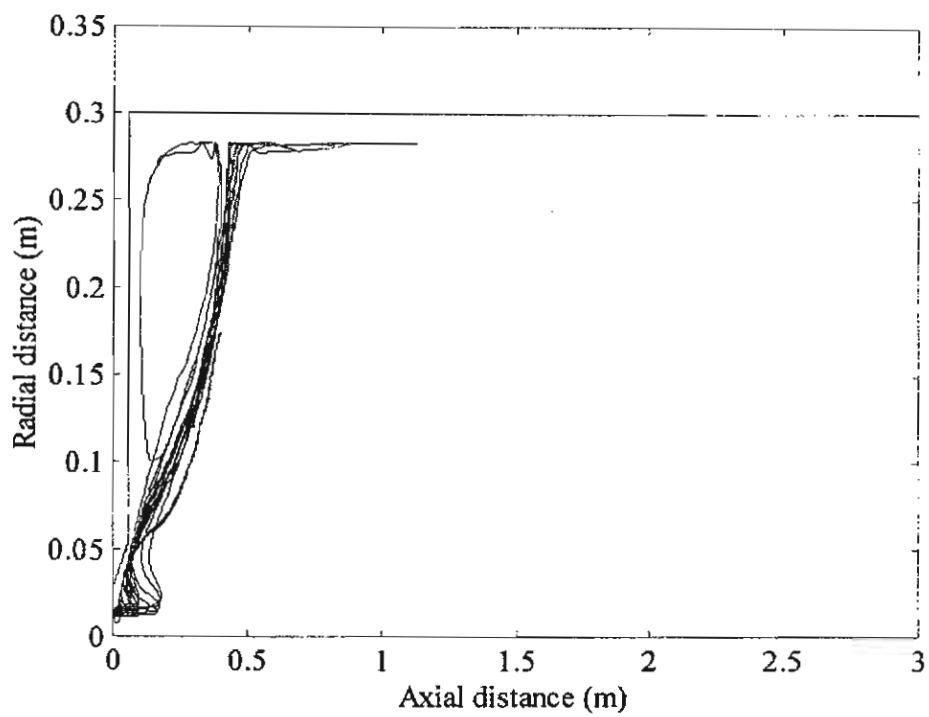


(a)

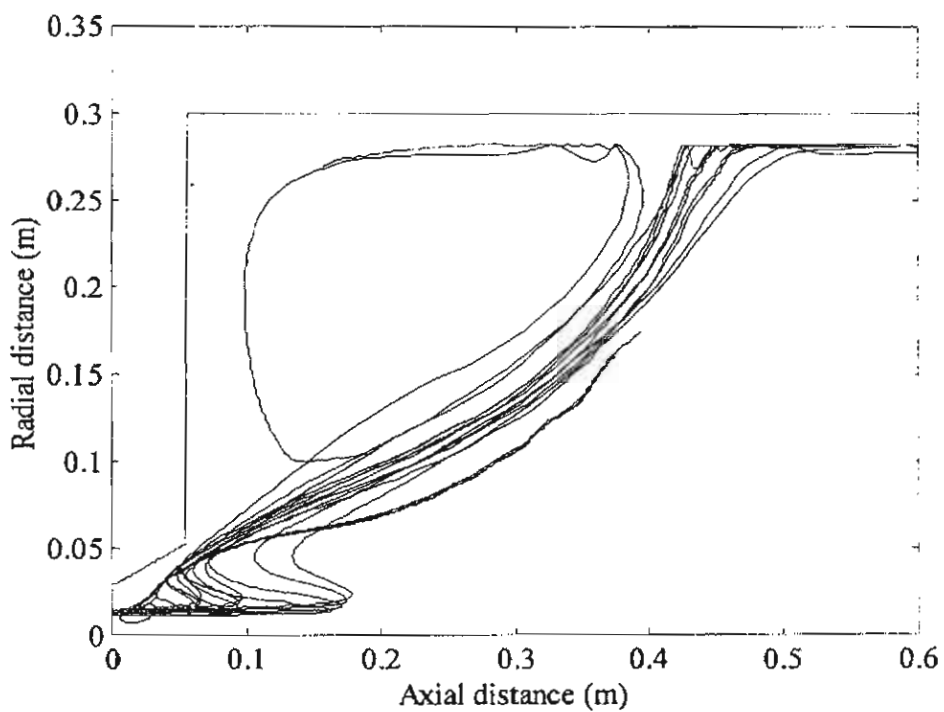


(b)

Fig.5.3 Distribution of temperature (K) (a) entire furnace (b) in the near burner zone



(a)



(b)

Fig.5.4 Coal particle trajectories (a) entire furnace (b) in the near burner zone

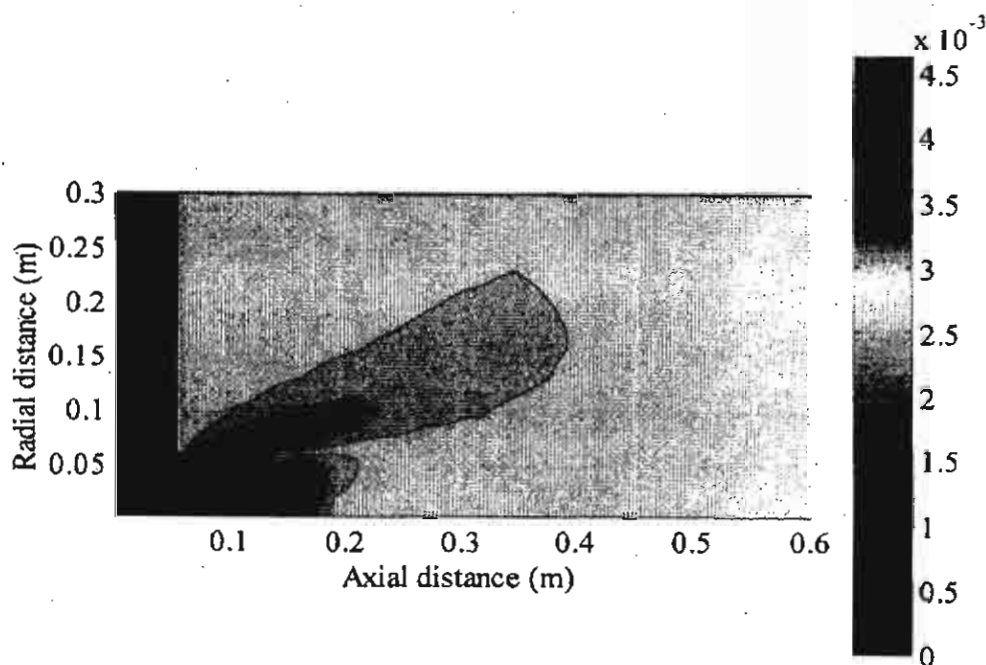


Fig.5.5 Concentration of sulfur oxides (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$) near the burner zone

5.4 Computational simulation for adsorption

From the evidence given in Section 4.2 and 4.3, calcination and sulfation processes are insimultaneous and the conversion is 90% before the sulfation process occurs. Four cases are carried out to achieve the objective of this study. Two cases, as will be discussed in Section 5.4.1 are case 1 and 2 for a study on the effect of particle sizes. Case 1 and 3 will be discussed in Section 5.4.2 for a study on the effect of starting location at side wall with different of 0.056 and 0.201 m from the furnace axis. Case 1 and 4 will be discussed in Section 5.4.3 for a study on the effect of inlet location at side wall and top wall. The numerical set - up are shown in Tables 5.4 – 5.7. Result of these cases will be discussed as follows. Fig.5.6 illustrates the schematic diagram of the burner and additional $CaCO_3$ inlet that consists of side wall and top wall inlets.

Table 5.4 Numerical set – up for desulfurization properties in case 1

Density of CaCO_3	kg/m^3	2710
Density of CaO	kg/m^3	1590
Particle size	m	96×10^{-4}
Particle temperature	K	1143
Top wall temperature	K	Insulation
Inlet location		Side wall
Axial distance	m	0.054
Radial distance	m	0.056
Flow rate	m^3/s	0.006
Velocity	m/s	5.3818

Table 5.5 Numerical set – up for desulfurization properties in case 2

Density of CaCO_3	kg/m^3	2710
Density of CaO	kg/m^3	1590
Particle size	m	25×10^{-3}
Particle temperature	K	1143
Top wall temperature	K	Insulation
Inlet location		Side wall
Axial distance	m	0.054
Radial distance	m	0.056
Flow rate	m^3/s	0.006
Velocity	m/s	5.3818

Table 5.6 Numerical set – up for desulfurization properties in case 3

Density of CaCO_3	kg/m^3	2710
Density of CaO	kg/m^3	1590
Particle size	m	96×10^{-4}
Particle temperature	K	1143
Top wall temperature	K	Insulation
Inlet location		Side wall
Axial distance	m	0.054
Radial distance	m	0.201
Flow rate	m^3/s	0.006
Velocity	m/s	5.3818

Table 5.7 Numerical set -- up for desulfurization properties in case 4

Density of CaCO_3	kg/m^3	2710
Density of CaO	kg/m^3	1590
Particle size	m	96×10^{-4}
Particle temperature	K	1143
Top wall temperature	K	Insulation
Inlet location		Top wall
Axial distance	m	0.099
Radial distance	m	0.292
Flow rate	m^3/s	0.005
Velocity	m/s	-3.3818

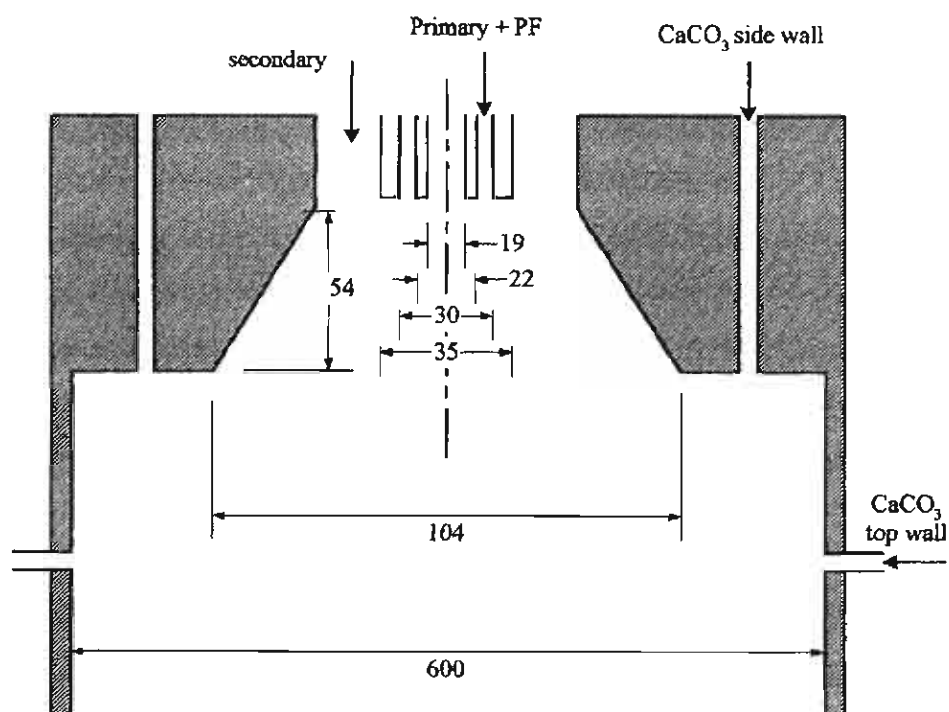


Fig.5.6 Section of the burner and additional CaCO_3 inlets

5.4.1 Effect of particle sizes on the amount of SO_2 adsorption (case 1 and case 2)

The particle trajectories and the amount of SO_2 adsorption of small (0.0096 cm.) and large (0.025 cm.) CaCO_3 particles are compared. In both cases, the particles were injected from side wall at 0.056 m. from the furnace axis. In Fig.5.7, the calcination process of particle size 0.0096 cm. is faster than that of particle 0.025 cm., (see Fig.5.8) because of the size of particles is smaller. After that, the sorption of sulfur oxides for the smaller diameter, 0.0096 cm., is more than that of 0.025-cm particles, see Figs.5.7 and 5.8. Figs.5.9 and 5.10 illustrate the trajectories of particle sizes of 0.0096 cm. and 0.025 cm., respectively. In the near burner zone (< 0.5 m. from the exit plane), the particles caught up with the gas velocity, which was the same as coal particles, see Fig.5.4. The particles moved into the location near the top wall at which the axial location was about 0.45 m. and moved to the low temperature zone, see Figs.5.11 and 5.12. This result is a decrease in the rate of sorption as illustrated in Figs.5.7 and 5.8. When the residence time is higher than 1.5 s., the slopes of the graphs decrease.

5.4.2 Effect of inlet location at side wall with different of 0.056 and 0.201 m on the amount of SO₂ adsorption (case 1 and case 3)

Fig.5.13a and b illustrate trajectories of 0.0096-cm particles which were injected into the furnace at side wall and 0.2 m. from the furnace axis. Particles were entrained by the flow of the external recirculation and moved to the top wall at the axial location of 0.45 m. After leaving the top wall, particles moved into the low temperature zone and exited the furnace, see Fig.5.13 and 5.14. Therefore, the kinetic rate of sorption (between 0 – 0.2 s.) is higher than the case of which the particles were injected at 0.056 m. from the furnace symmetry axis, see Fig.5.7 and 5.15. This is due to the longer residence time of moving particles in high temperature zone, see Figs.5.13 and 5.14.

5.4.3 Effect of inlet location at side wall and top wall (case 1 and case 4)

In case 4, the 0.0096-cm particles were injected at the top wall of the furnace located axially at 0.1 m. from the coal inlet, see Fig.5.16. The particle moved down to the center of the furnace. After that, it moved to the top wall again due to the gas flow at 0.45 m., therefore the kinetic rate of sorption between 0 – 2 s., in Fig.5.17 and 5.7, is higher than that of case 1 because the particles moved through the higher temperature zone in external recirculation zone (ERZ), see Fig.5.16 and 5.18. Finally, the particles move through the low temperature zone, and exited the furnace at the outlet. Then, the low kinetic rate of sorption is seen in Fig.5.17

Moreover, concentration of SO₂ from the cases 1, 2, 3 and 4 can be illustrated in Figs.5.19, 5.20, 5.21 and 5.22.

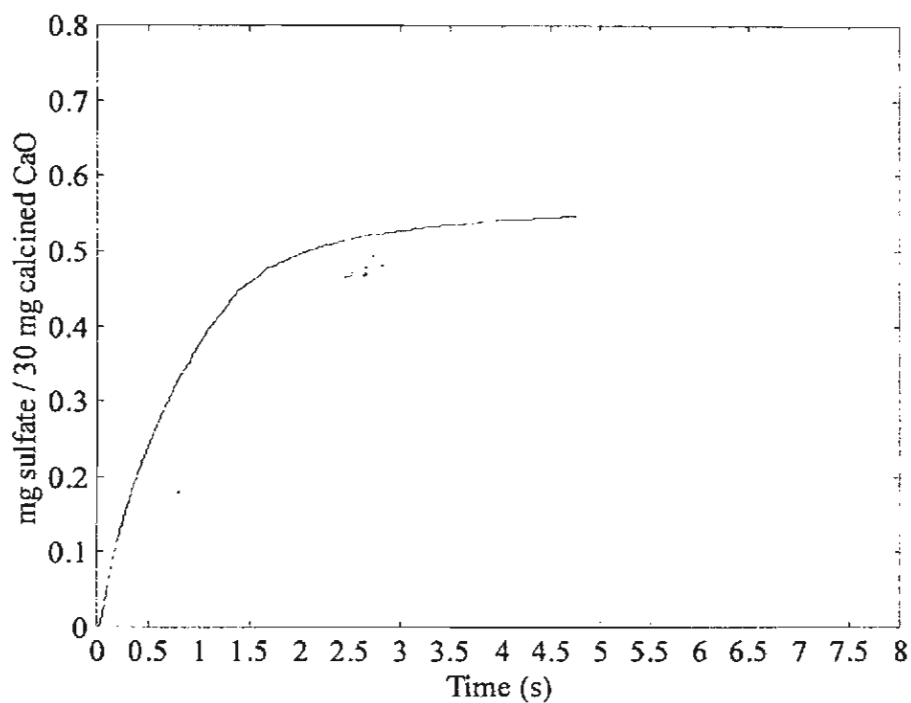


Fig.5.7 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 1)

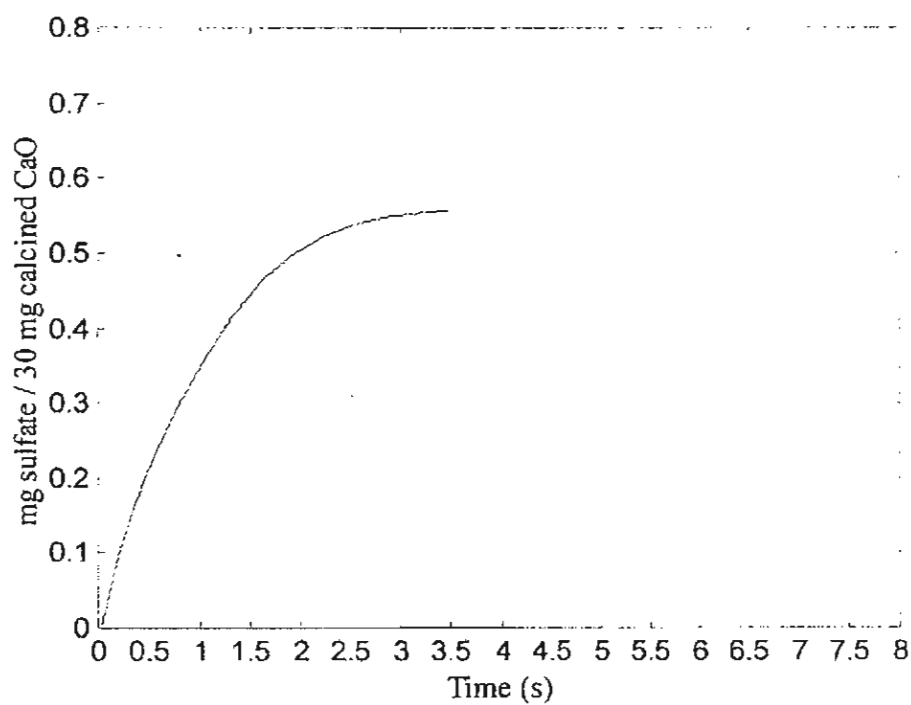
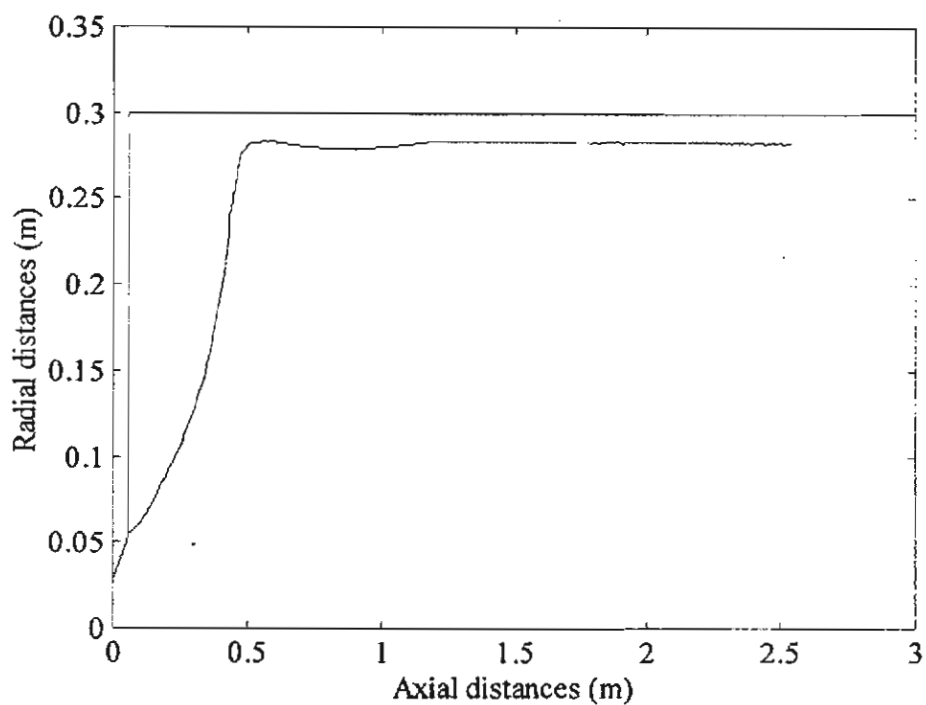
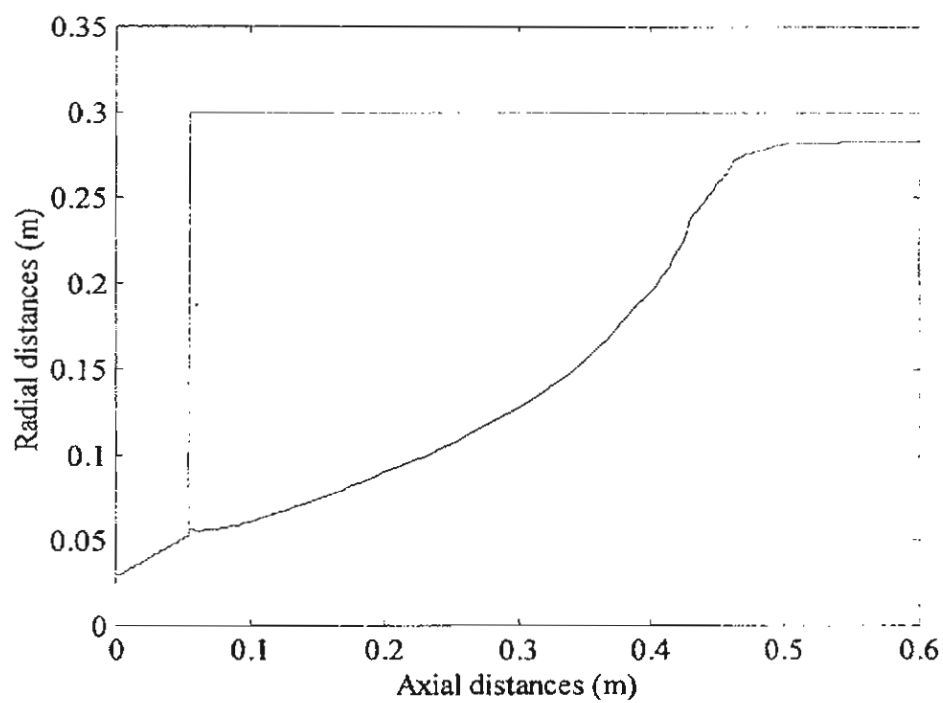


Fig.5.8 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.025 cm. (case 2)



(a)



(b)

Fig.5.9 CaCO_3 particle trajectories in case 1 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

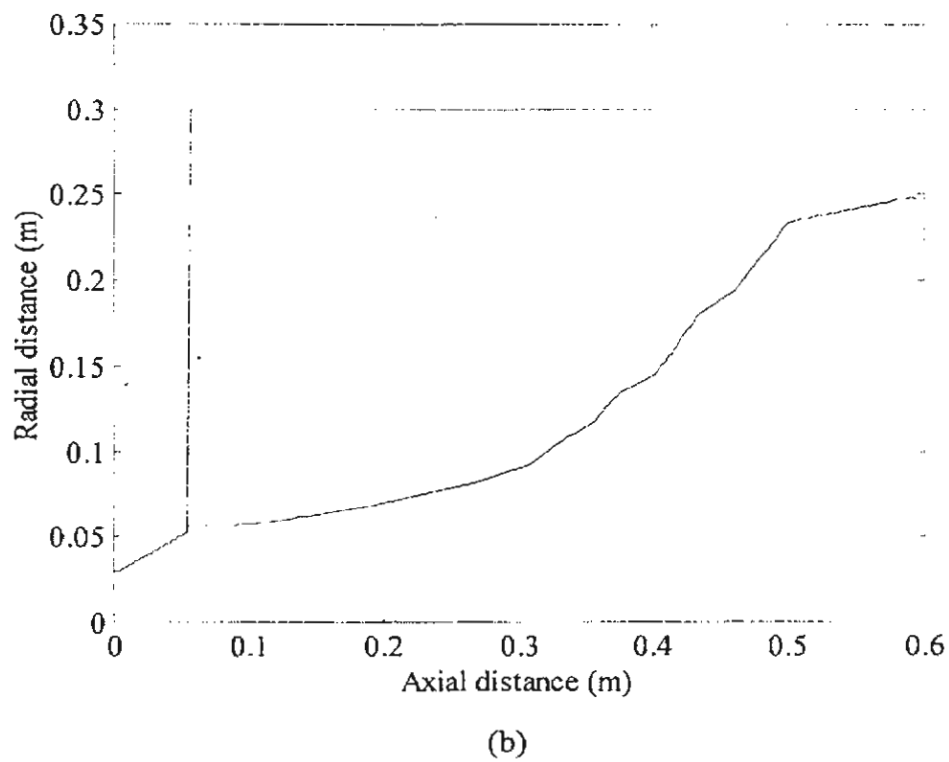
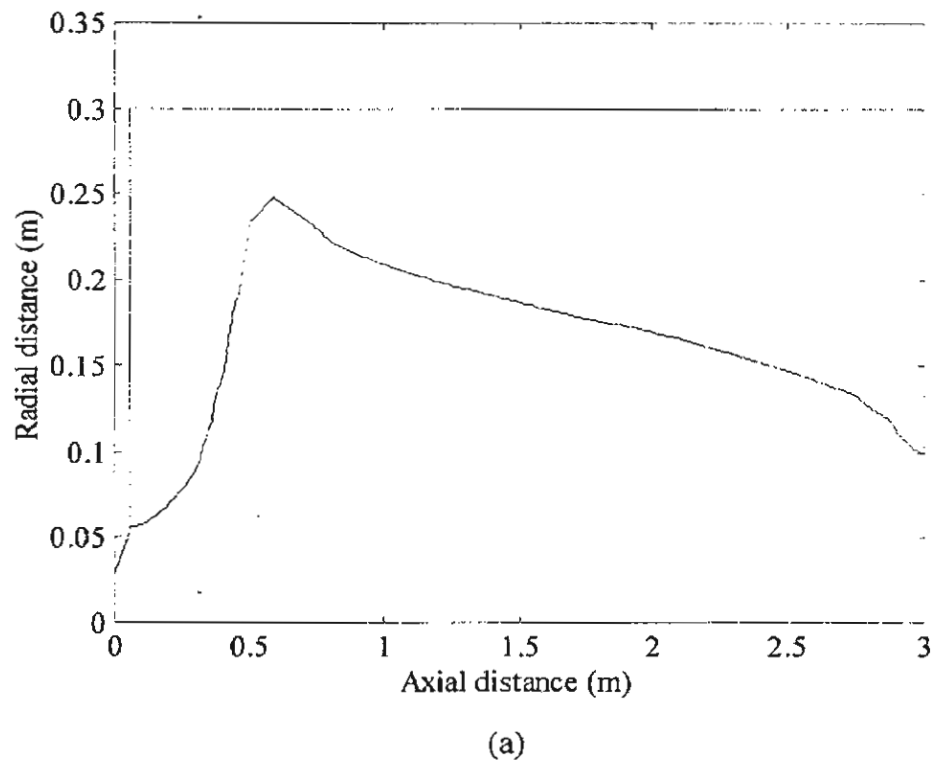
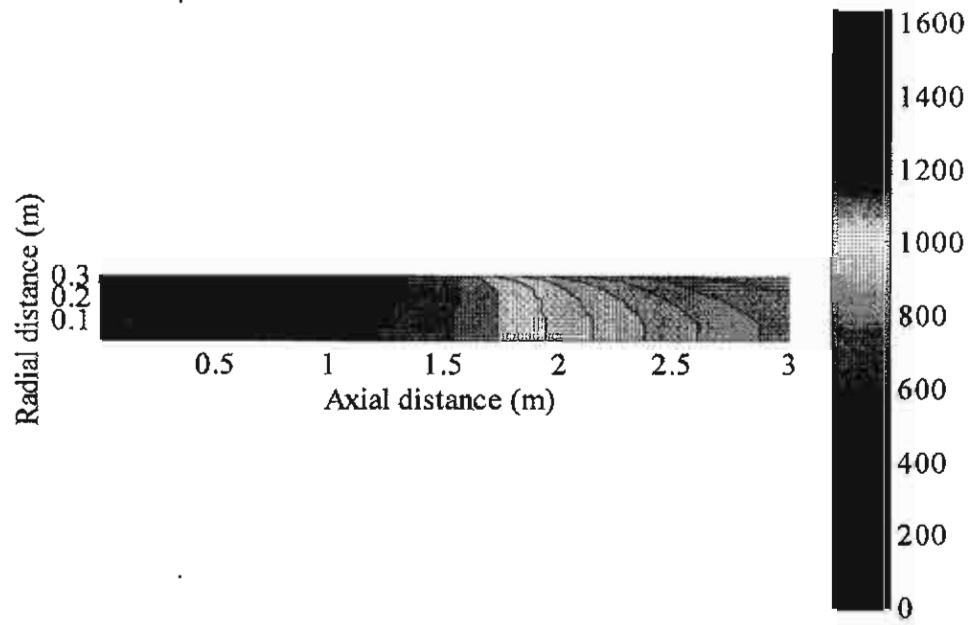
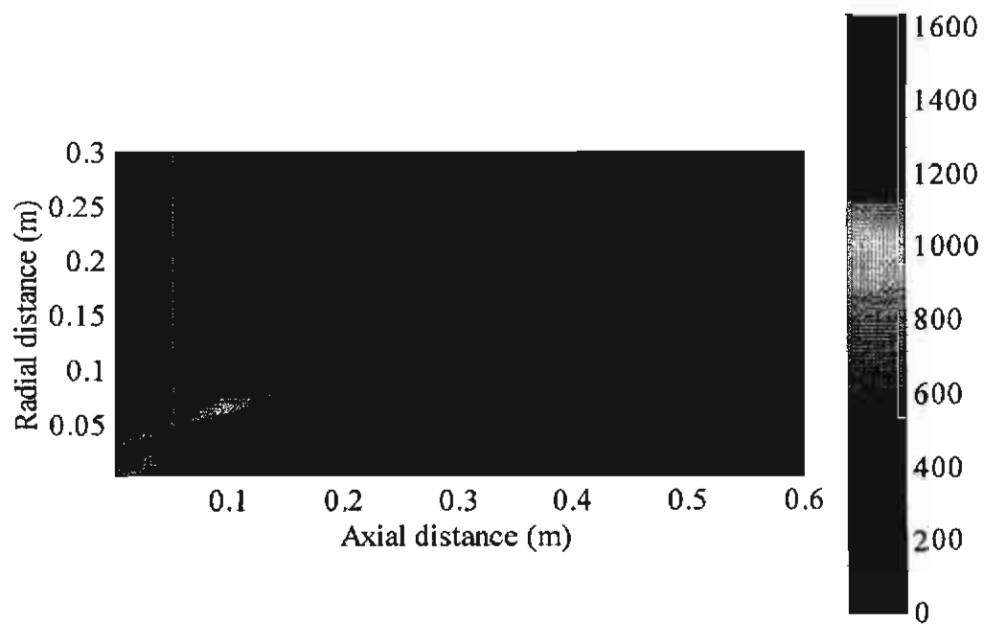


Fig.5.10 CaCO_3 particle trajectories in case 2 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

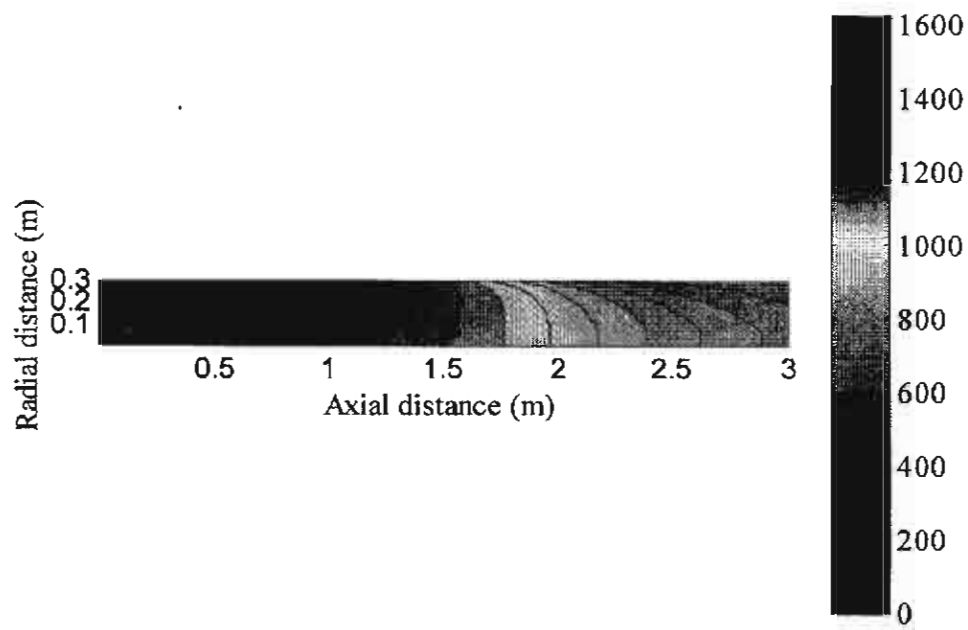


(a)

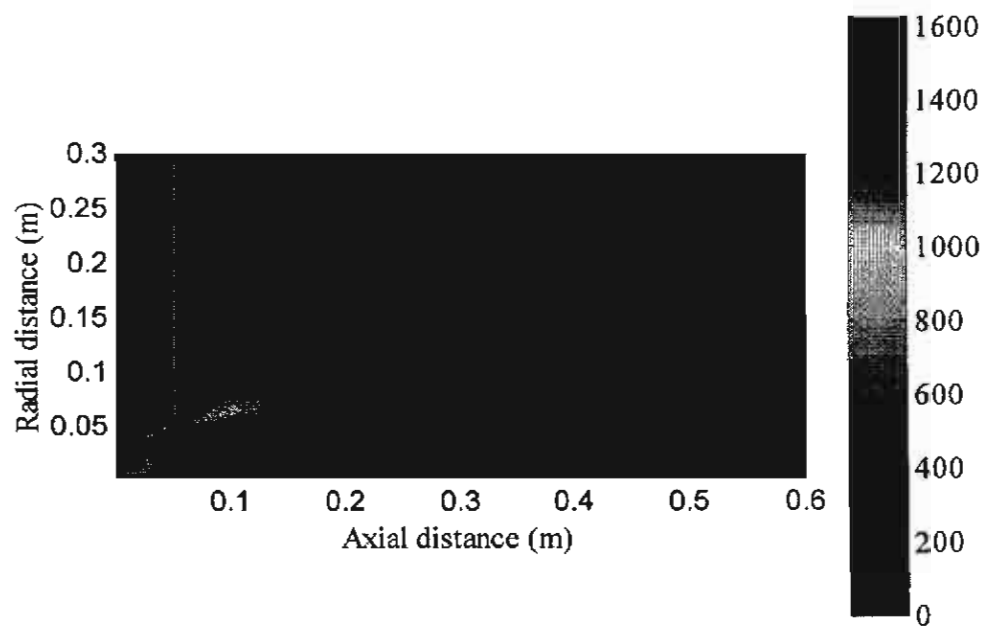


(b)

Fig.5.11 Distribution of temperature (K) in case 1 (a) entire furnace (b) in the near burner zone



(a)



(b)

Fig.5.12 Distribution of temperature (K) in case 2 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

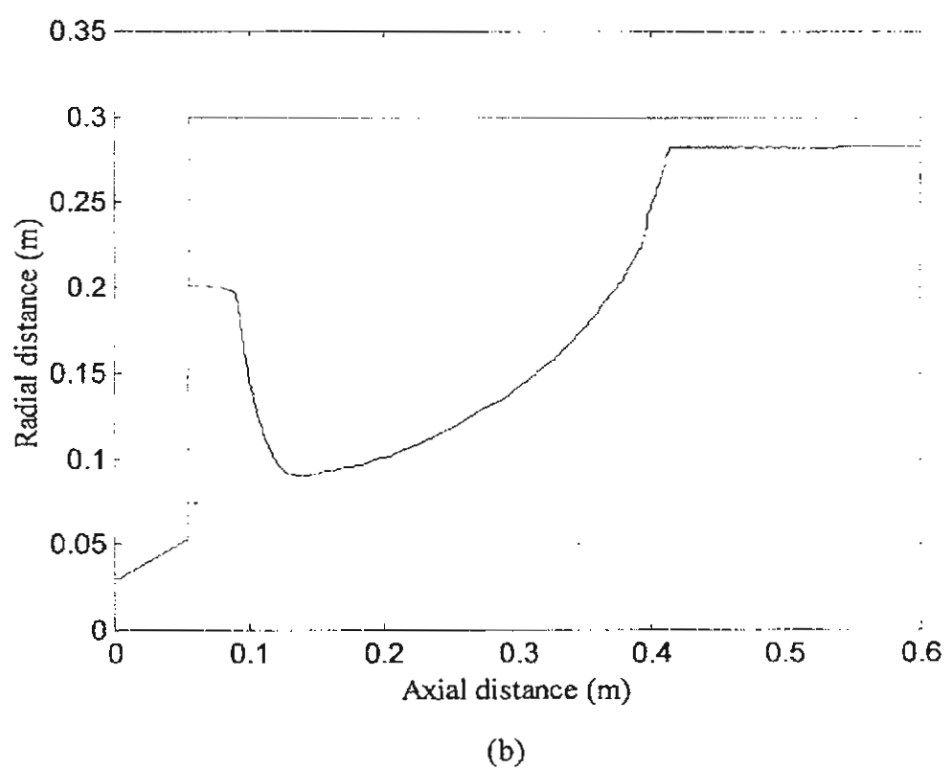
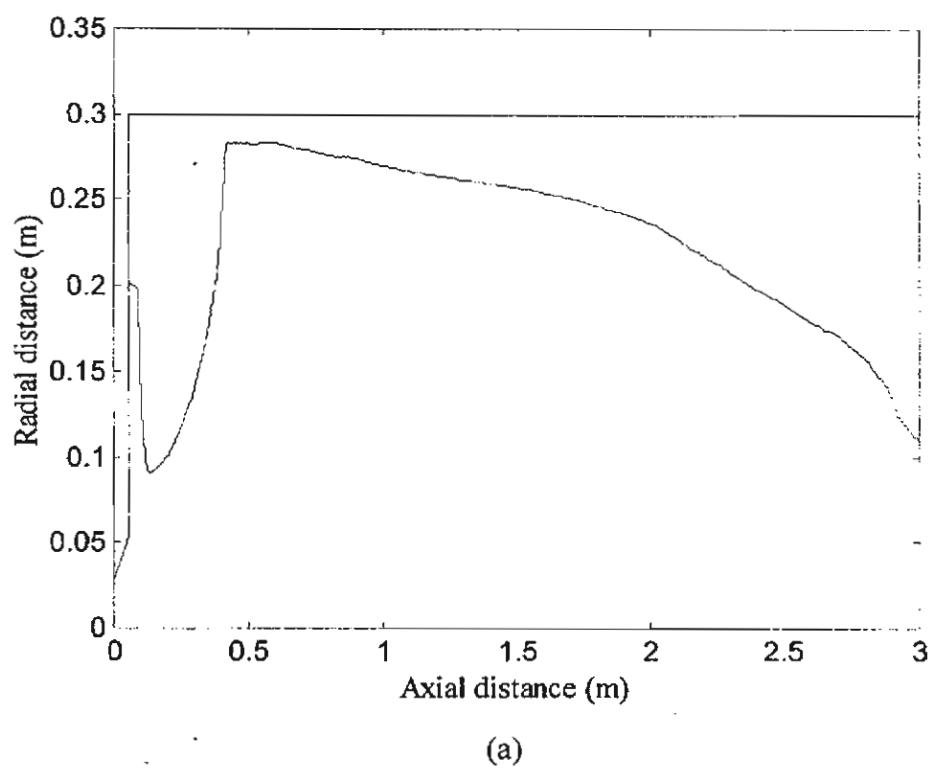
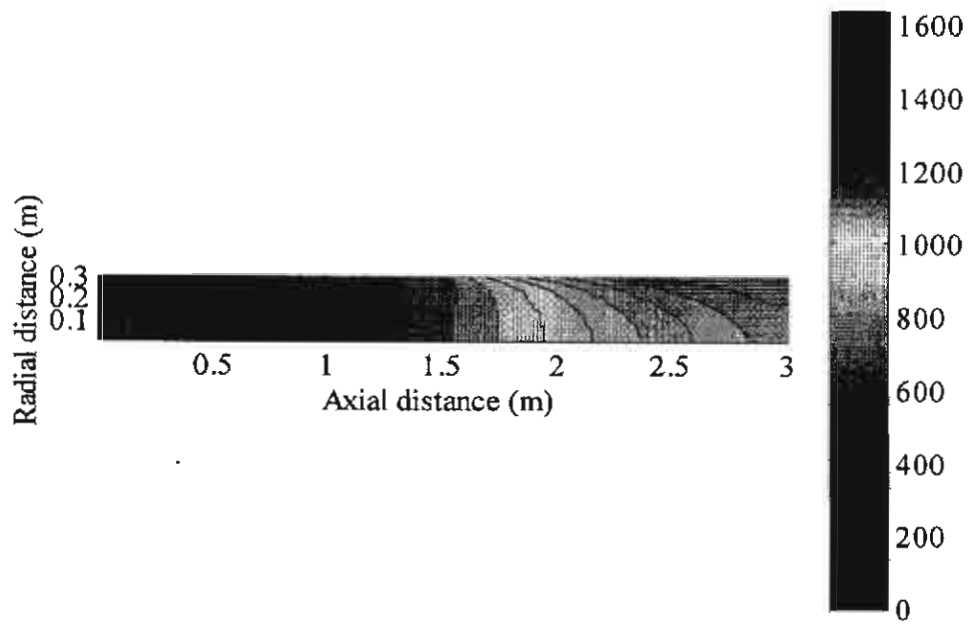
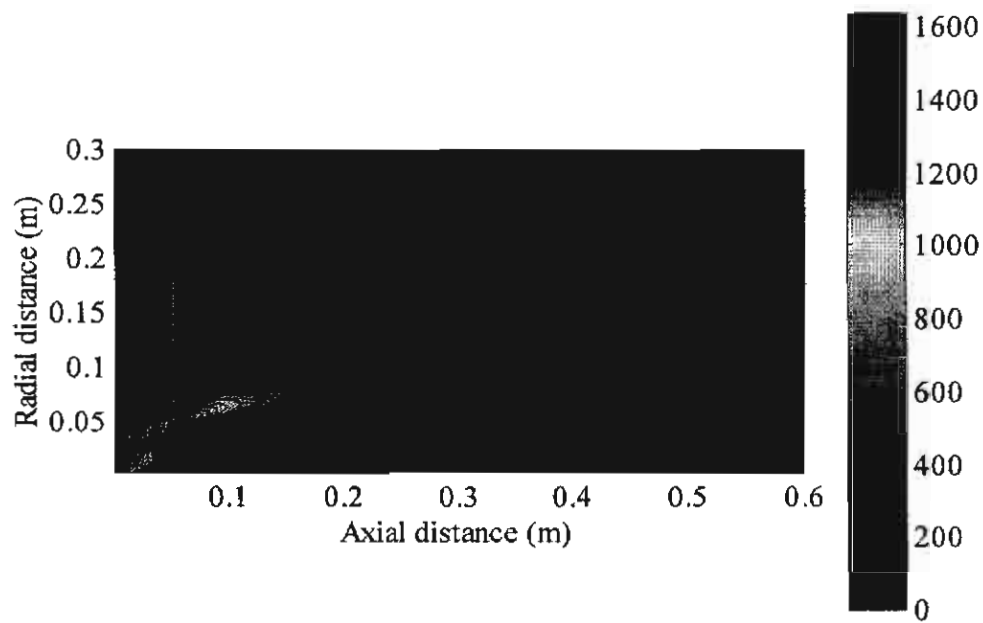


Fig.5.13 CaCO_3 particle trajectories in case 3 (a) entire furnace (b) in the near burner zone



(a)



(b)

Fig.5.14 Distribution of temperature (K) in case 3 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

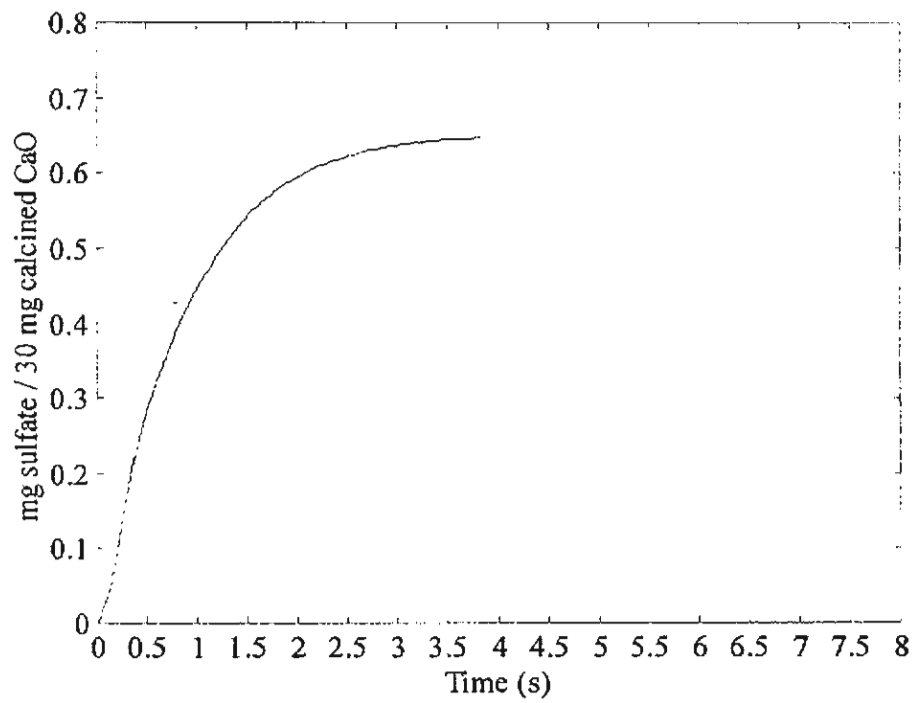
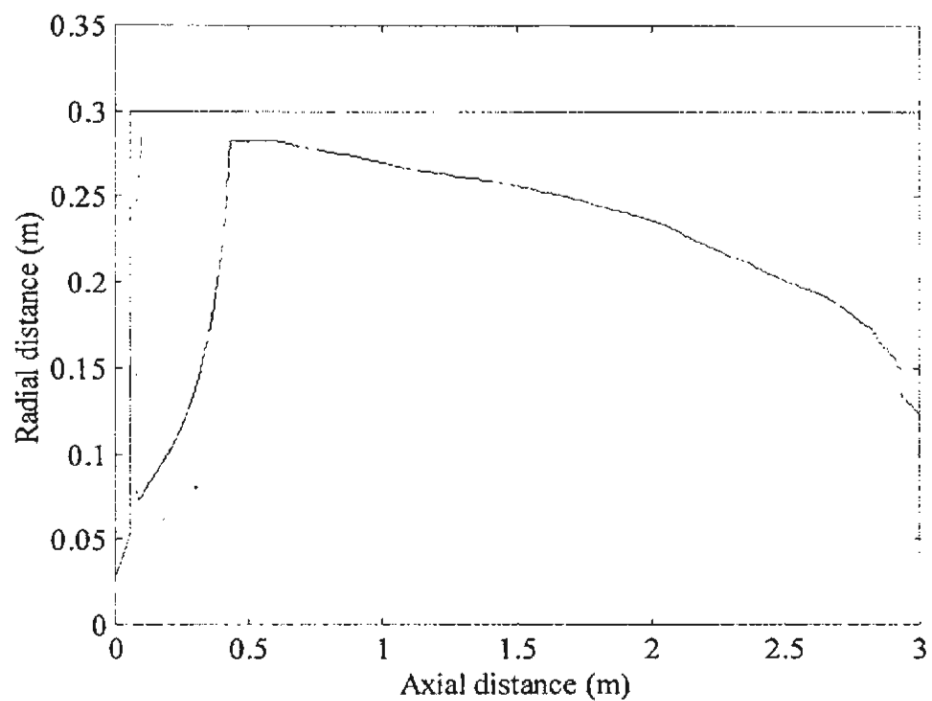
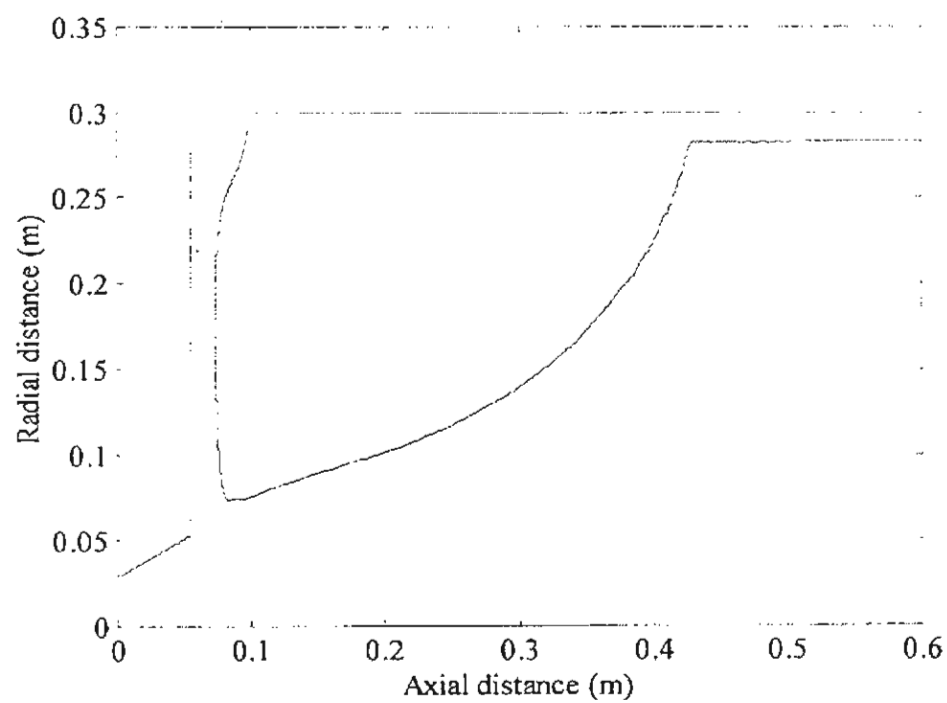


Fig.5.15 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 3)



(a)



(b)

Fig.5.16 CaCO_3 particle trajectories in case 4 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

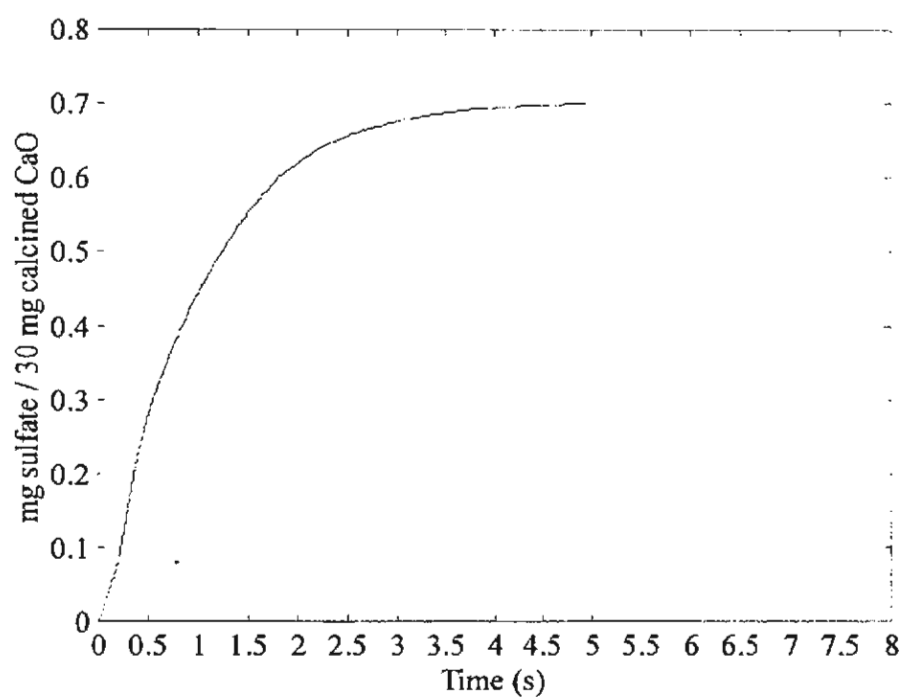
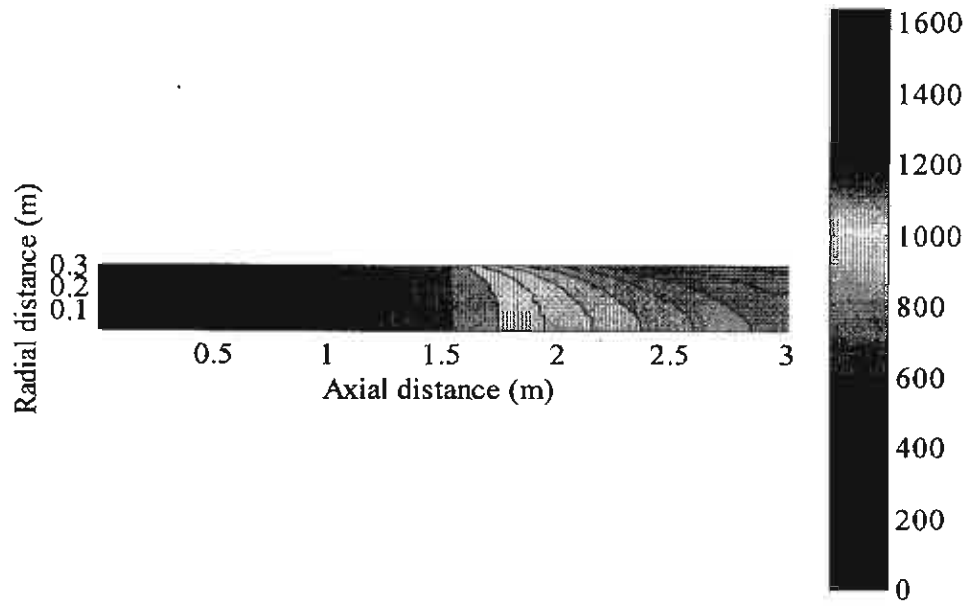
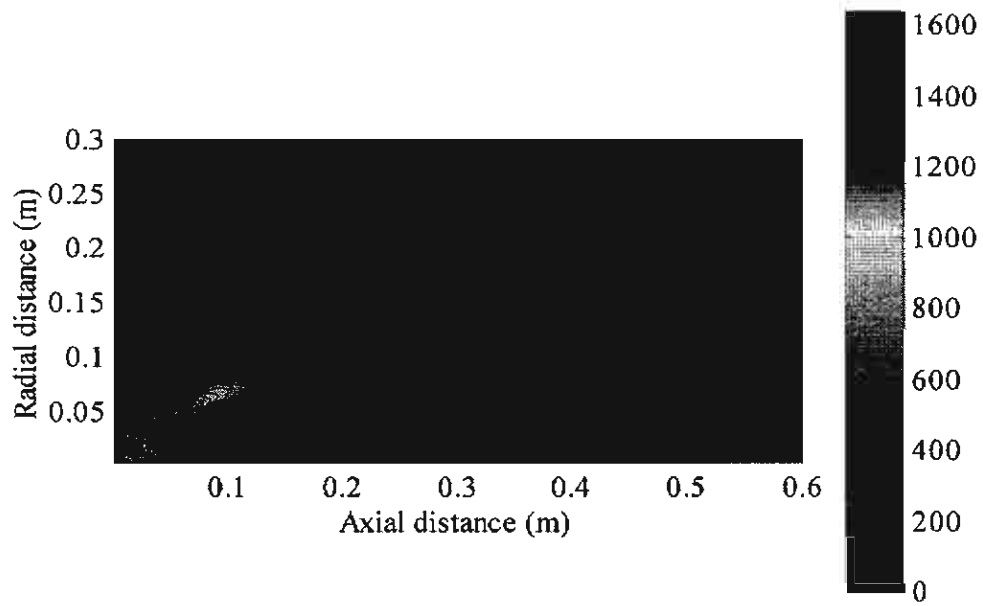


Fig.5.17 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 4)



(a)



(b)

Fig.5.18 Distribution of temperature (K) in case 4 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

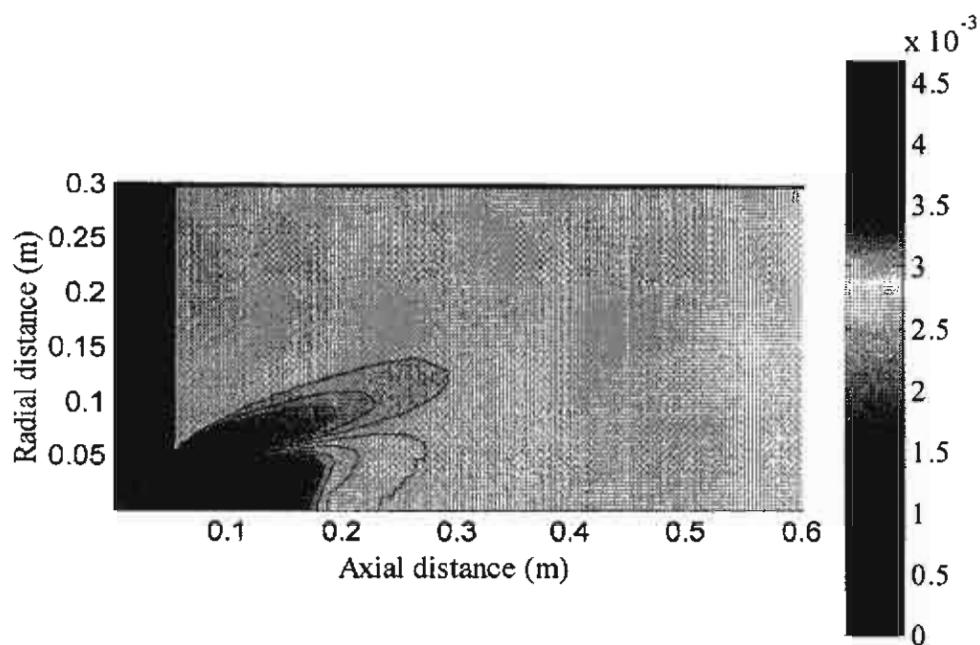


Fig.5.19 Concentration of sulfur oxides, case 1 (in $\% m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone

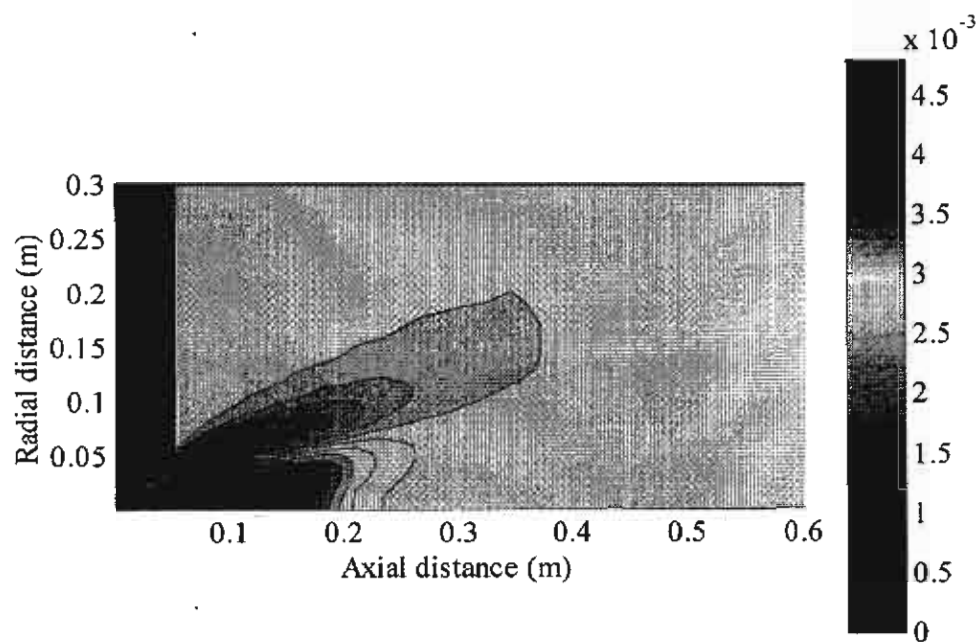


Fig.5.20 Concentration of sulfur oxides, case 2 (in $\% m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone

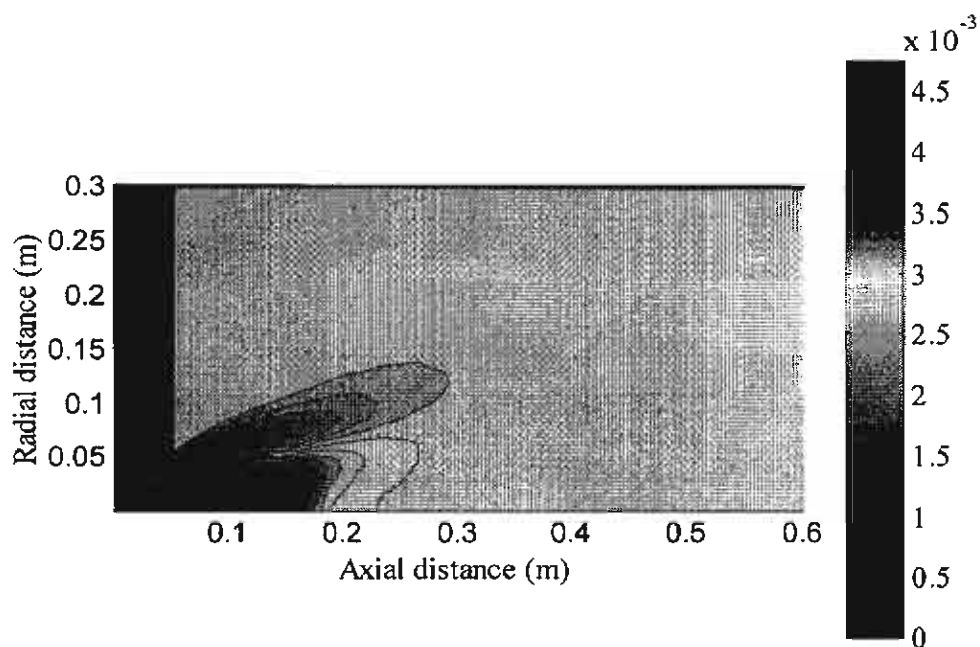


Fig.5.21 Concentration of sulfur oxides, case 3 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone

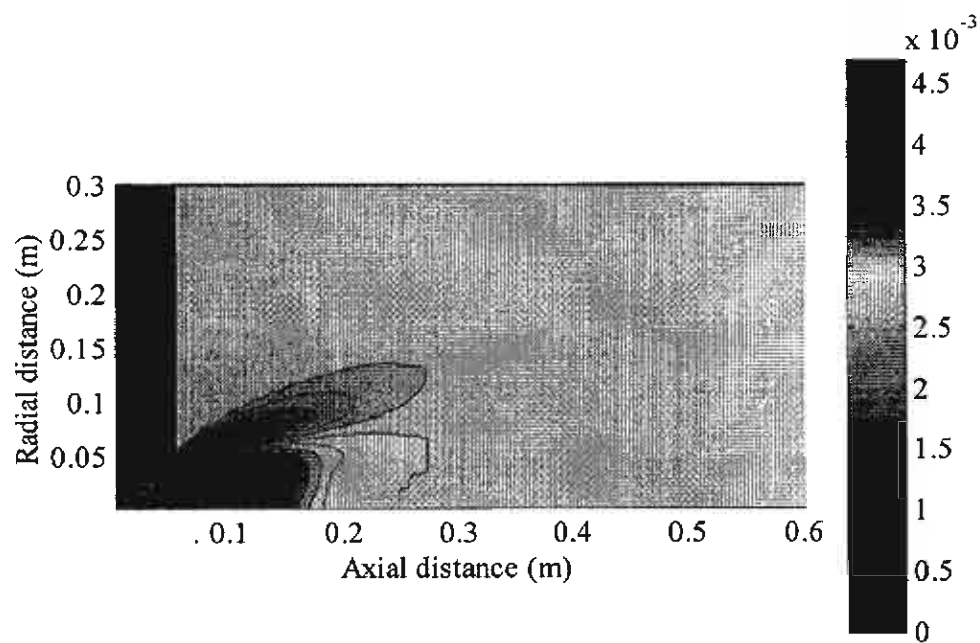
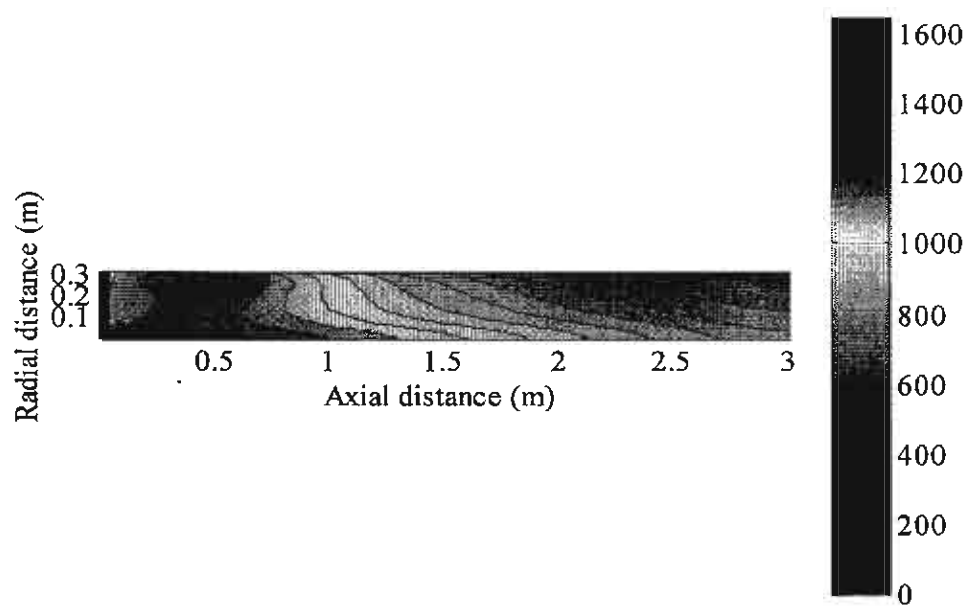


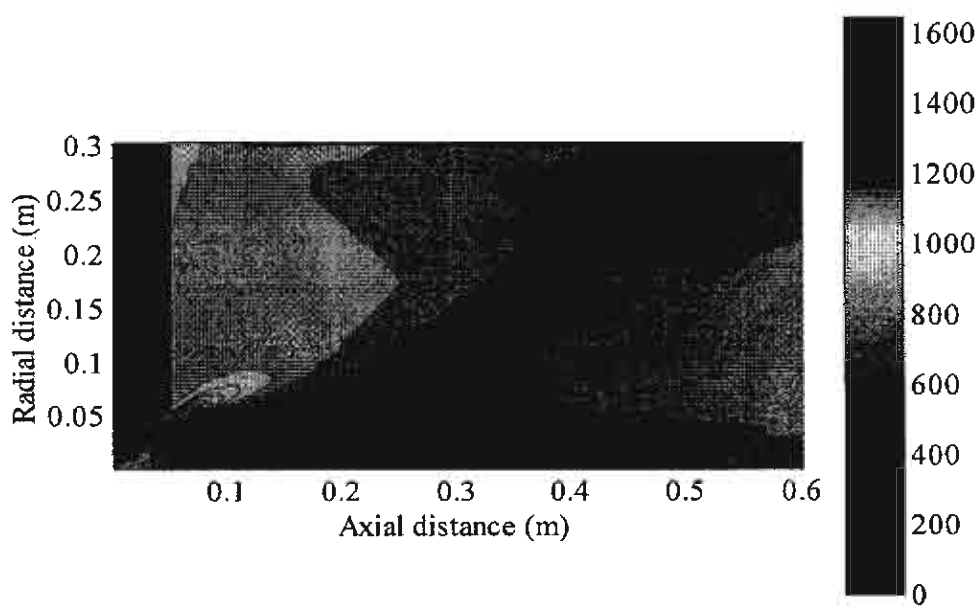
Fig.5.22 Concentration of sulfur oxides, case 4 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone

5.5 Modified boundary for coal combustion (base case)

The simulated results displayed in the series of above figures show that the inlet locations and particle sizes have relationships with the SO_2 adsorption. The high reaction rate of SO_2 adsorption occurs when the CaCO_3 particles move in a high temperature zone and within a long residence time. The sizes of particles have less effect on SO_2 adsorption when compared to effect of the temperature distribution. In section 5.4, the furnace wall was insulated thus the distribution of temperature near the burner was high. The following section will discuss on the results under the conditions which the wall temperature was reduced in order to keep the temperature distribution in the near burner region at about 1000 K. The reason for that is due to the suggestions given by the previous researchers for the maximum allowable adsorption temperature that should not be greater than 1300 K [19]. To achieve such requirement, the temperature of 500 K was applied at the top wall. Fig.5.23 shows a contour plot of the temperature distribution in the furnace under such conditions. Coal particle trajectories are illustrated in Fig.5.24 and sulfur oxide concentration in Fig.5.25. CaCO_3 particles are not yet injected into the furnace. The result serves as a base case for the comparison in the next section.



(a)



(b)

Fig.5.23 Distribution of modified temperature (K) (a) entire furnace (b) in the near burner zone

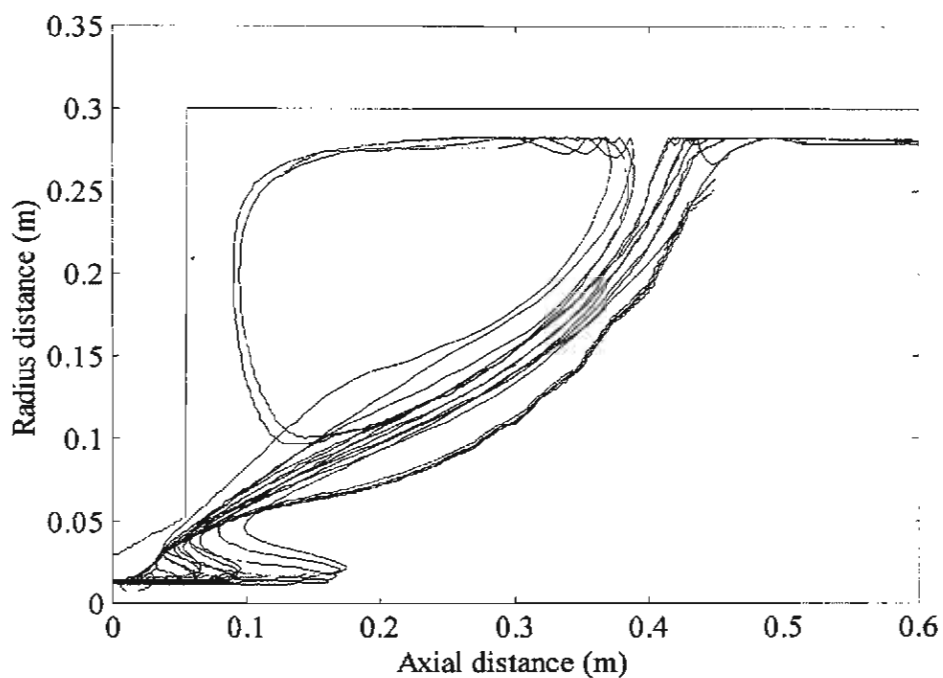


Fig.5.24 CaCO_3 particle trajectories in the near burner under modified wall temperature

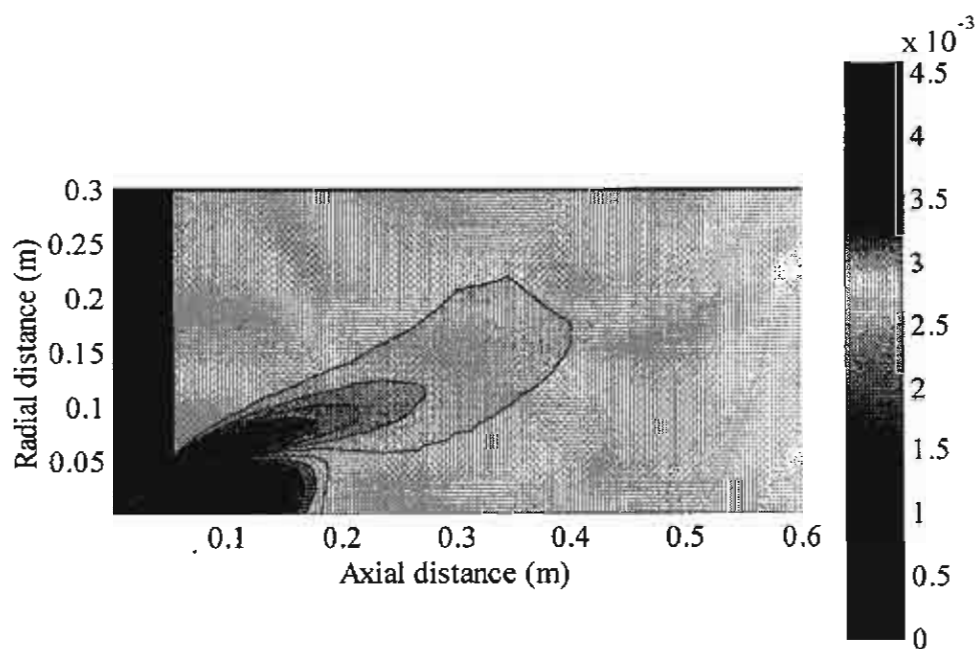


Fig.5.25 Concentration of sulfur oxides (in % $m_{\text{SO}_2} / m_{\text{mixture}}$) in the near burner zone under modified wall temperature

5.6 Modified simulation for adsorption

Cases 5,6 and 7 will be discussed in this section for a study on the effect of wall temperature on SO₂ adsorption. The operating conditions are given from Table 5.8 to 5.10. The wall temperature profile near the burner was kept constant at 500 K. The diameter of CaCO₃ is 0.0096 cm. In case 5, the particles were injected from side wall, whereas in cases 6 and 7 the particles were injected from top wall but different in inlet locations. The results of these cases are discussed as follow:

Fig.5.26 shows a 0.0096 cm. particle trajectory of case 5. It is found that the particles generally have a longer residence time in the external recirculation zone than that of the case performed under insulated wall, given in Fig.5.13. This effect leads to an increase in time for SO₂ adsorption (see Figs.5.32 and 5.15). However, lower rate of sorption occurs because the particle moves in the lower temperature zone, see Figs.5.29 and 5.14.

Figs.5.27 and 5.28 show the particle trajectories, Figs.5.30 and 5.31 show temperature distributions of cases 6 and 7, respectively. Figs.5.32, 5.33 and 5.34 show the sorption of SO₂ of cases 5, 6 and 7, respectively. Both cases have low sorption levels in common with case 5 due to comparatively low temperature levels throughout the furnace. Moreover, concentration of SO₂ from the cases 5, 6 and 7 can be illustrated in Figs.5.35, 5.36 and 5.37.

Table 5.8 Numerical set – up for desulfurization properties in case 5

Density of CaCO ₃	kg/m ³	2710
Density of CaO	kg/m ³	1590
Particle size	m	96x10 ⁻⁴
Particle temperature	K	1143
Top wall temperature	K	500
Inlet location		Side wall
Axial distance	m	0.054
Radial distance	m	0.201
Flow rate	m ³ /s	0.006
Velocity	m/s	5.3818

Table 5.9 Numerical set – up for desulfurization properties in case 6

Density of CaCO_3	kg/m^3	2710
Density of CaO	kg/m^3	1590
Particle size	m	96×10^{-4}
Particle temperature	K	1143
Top wall temperature	K	500
Inlet location		Top wall
Axial distance	m	0.099
Radial distance	m	0.292
Flow rate	m^3/s	0.005
Velocity	m/s	-3.3818

Table 5.10 Numerical set – up for desulfurization properties in case 7

Density of CaCO_3	kg/m^3	2710
Density of CaO	kg/m^3	1590
Particle size	m	96×10^{-4}
Particle temperature	K	1143
Top wall temperature	K	500
Inlet location		Top wall
Axial distance	m	0.304
Radial distance	m	0.292
Flow rate	m^3/s	0.005
Velocity	m/s	-3.3818

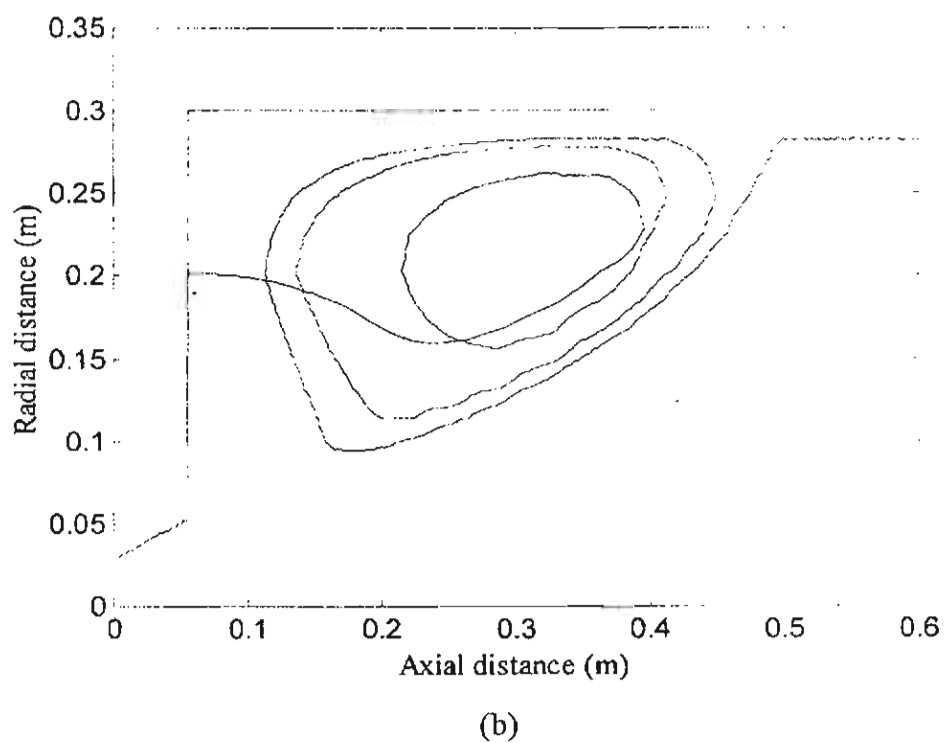
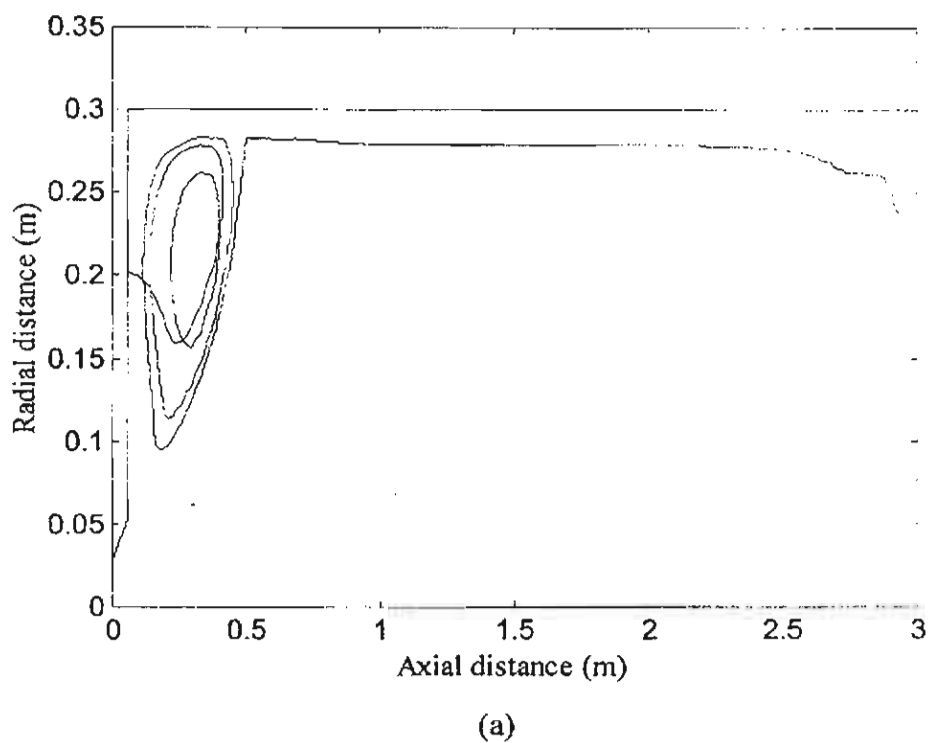
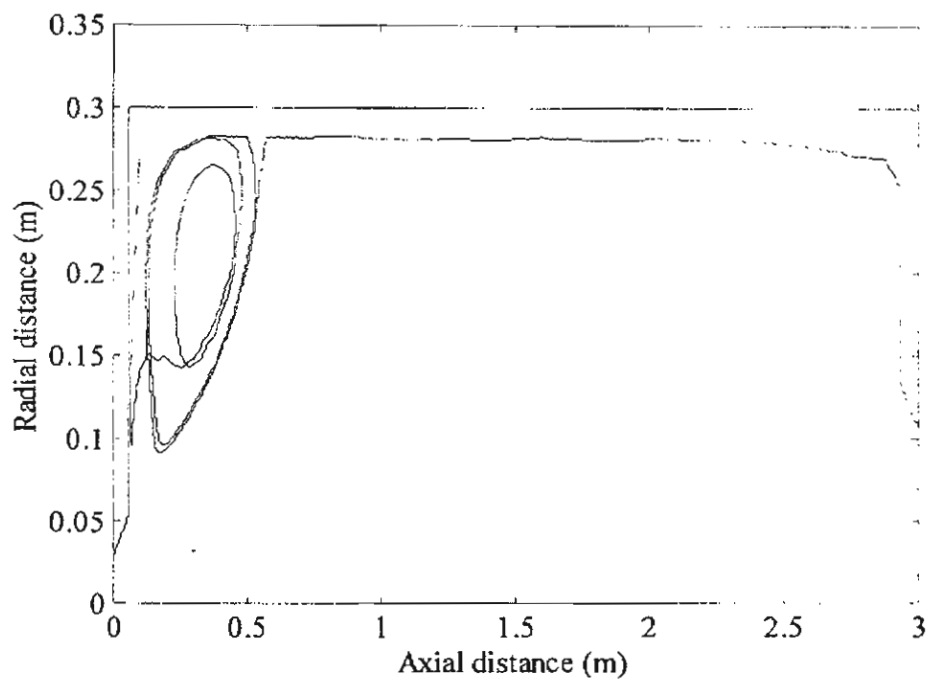
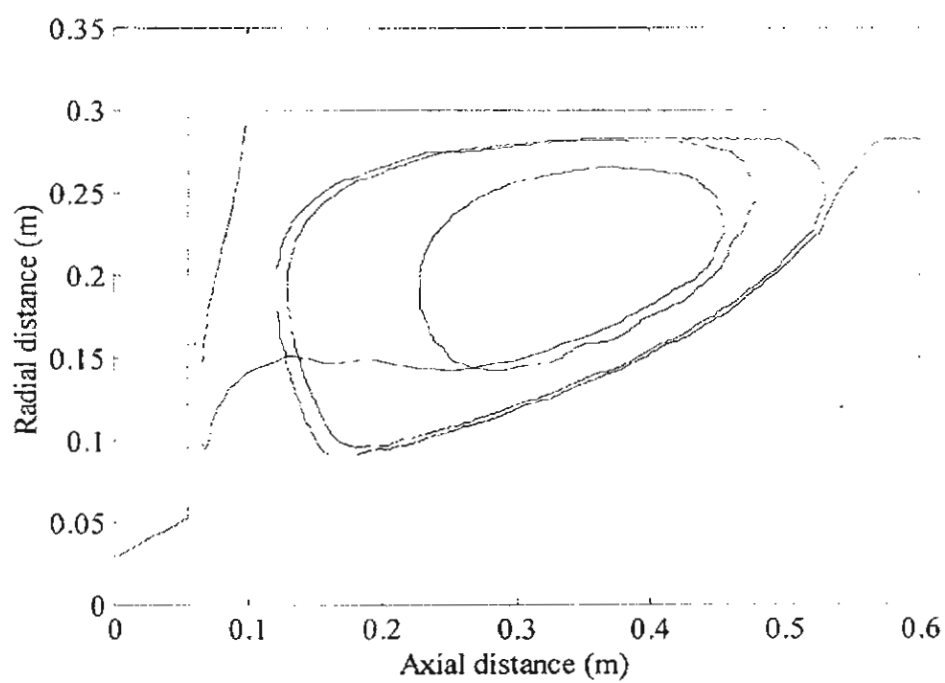


Fig.5.26 CaCO_3 particle trajectories in case 5 (a) entire furnace (b) in the near burner zone



(a)



(b)

Fig.5.27 CaCO_3 particle trajectories in case 6 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

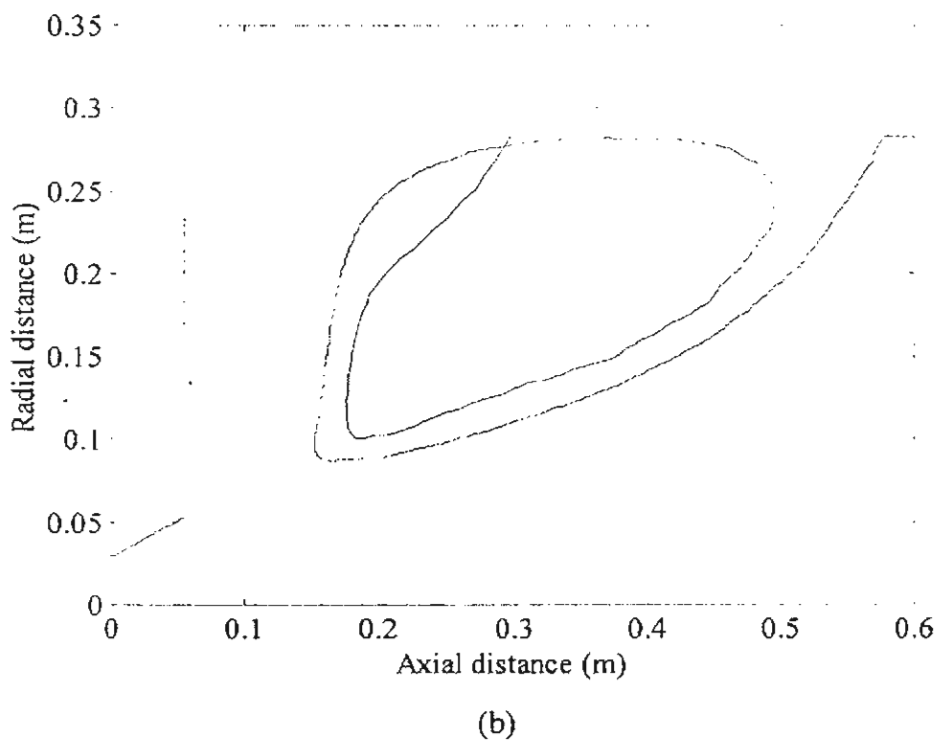
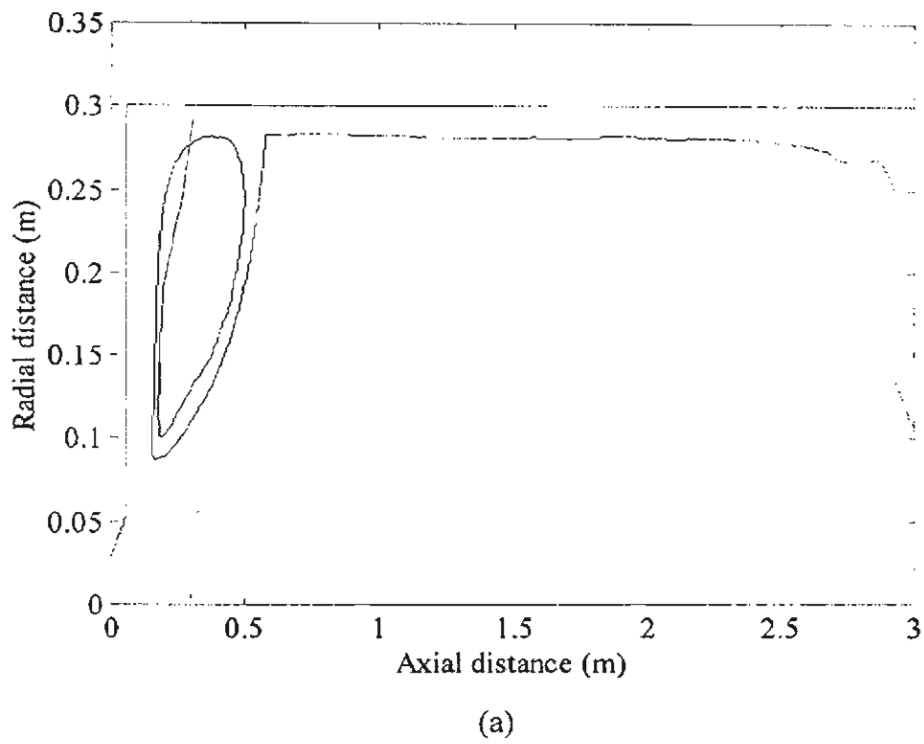
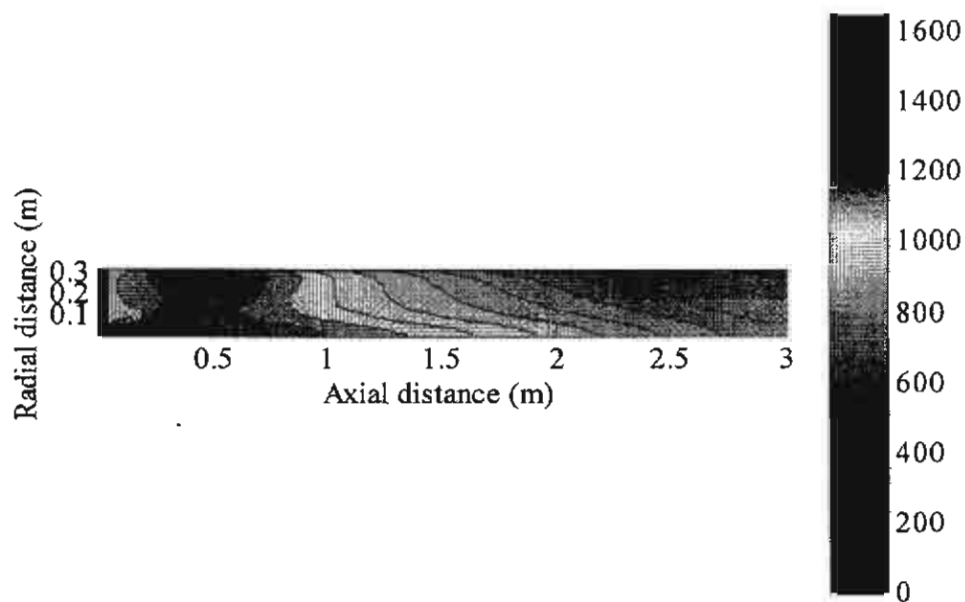
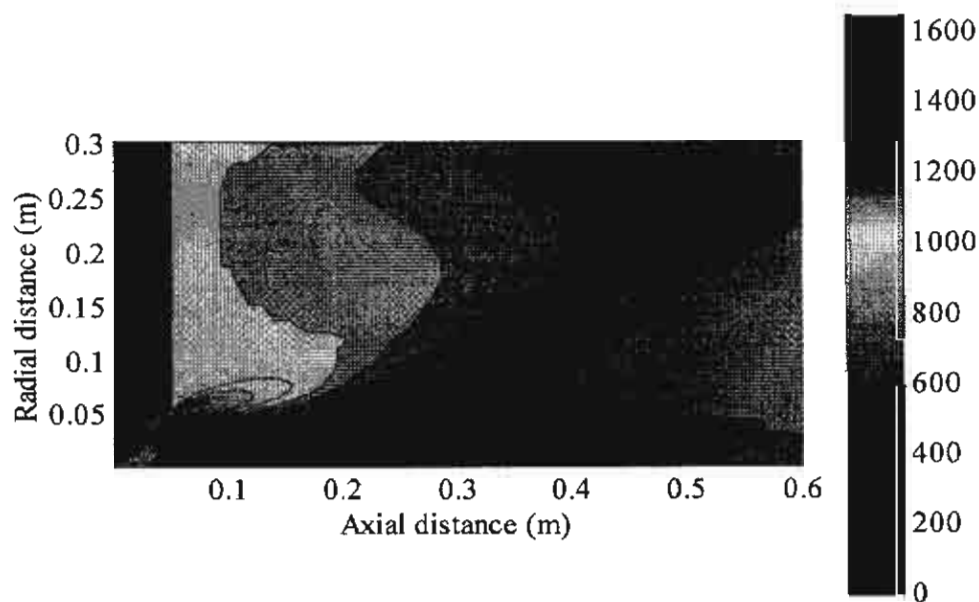


Fig.5.28 CaCO_3 particle trajectories in case 7 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

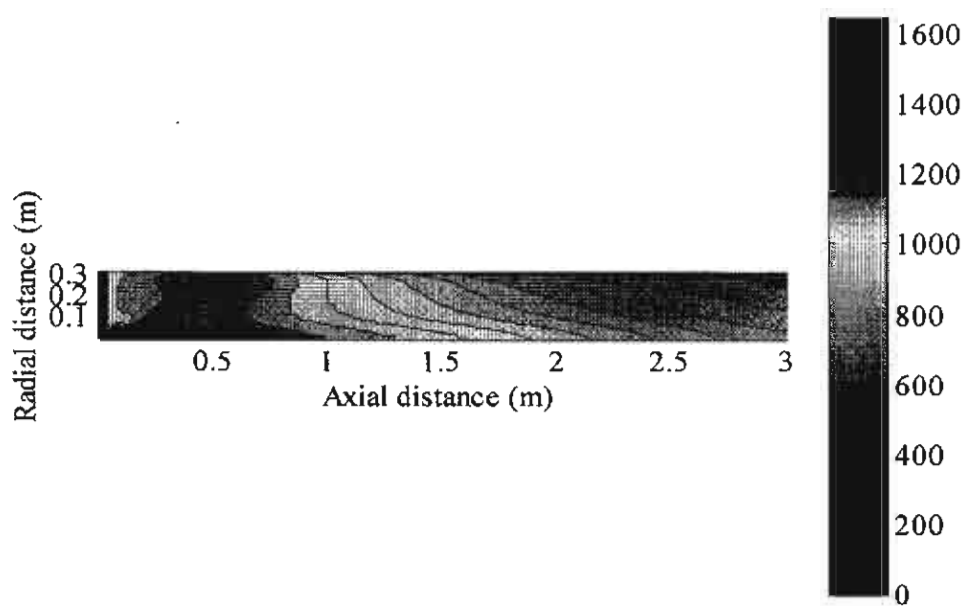


(a)

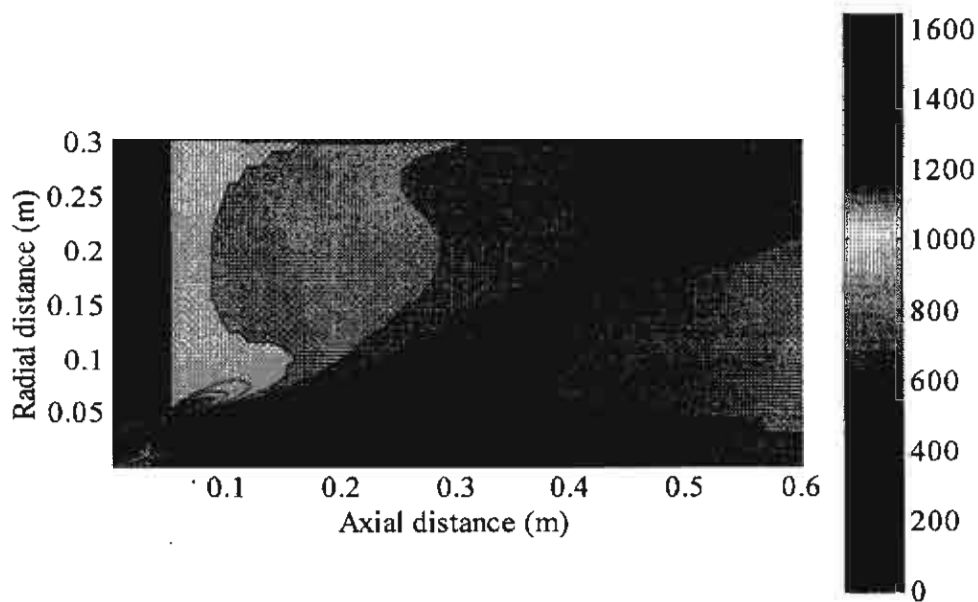


(b)

Fig.5.29 Distribution of temperature (K) in case 5 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

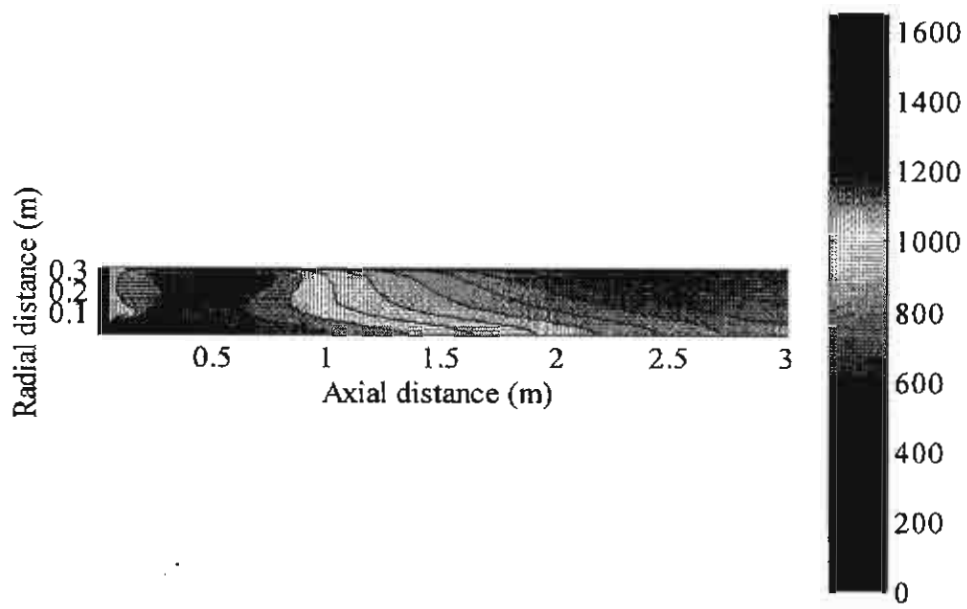


(a)

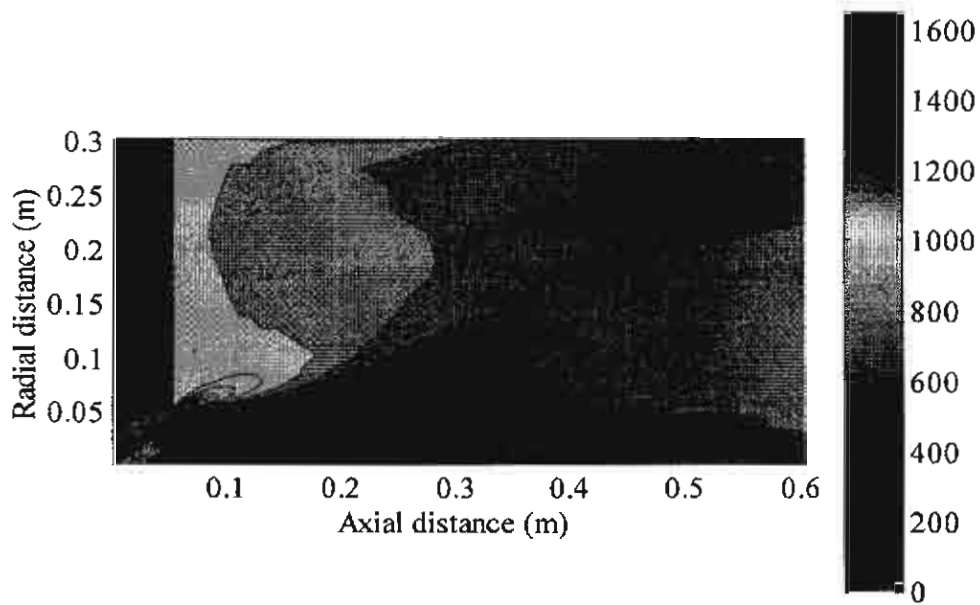


(b)

Fig.5.30 Distribution of temperature (K) in case 6 (a) entire furnace (b) in the near burner zone



(a)



(b)

Fig.5.31 Distribution of temperature (K) in case 7 (a) entire furnace (b) in the near burner zone

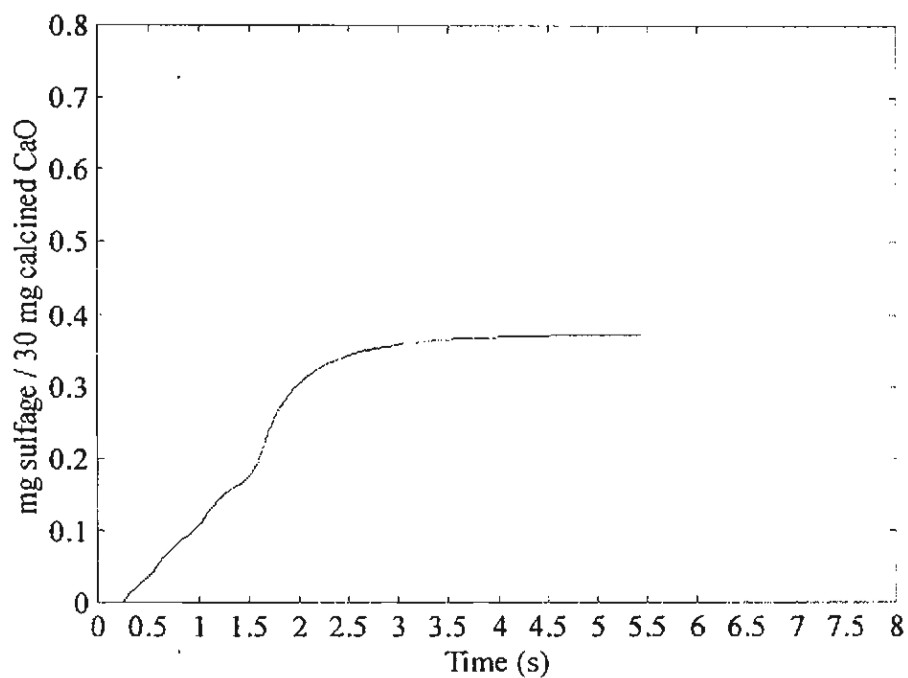


Fig.5.32 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 5)

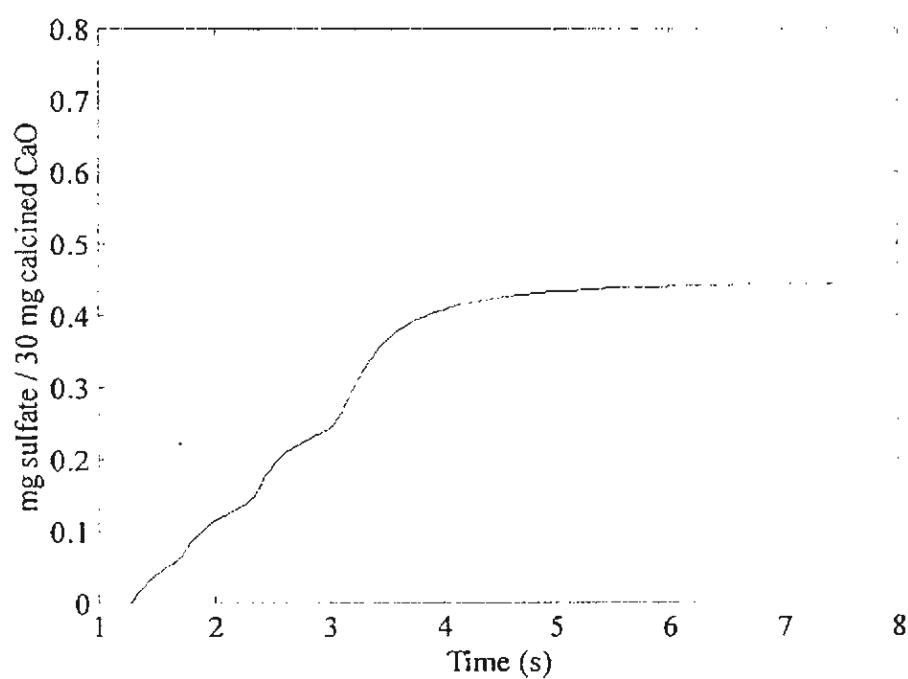


Fig.5.33 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 6)

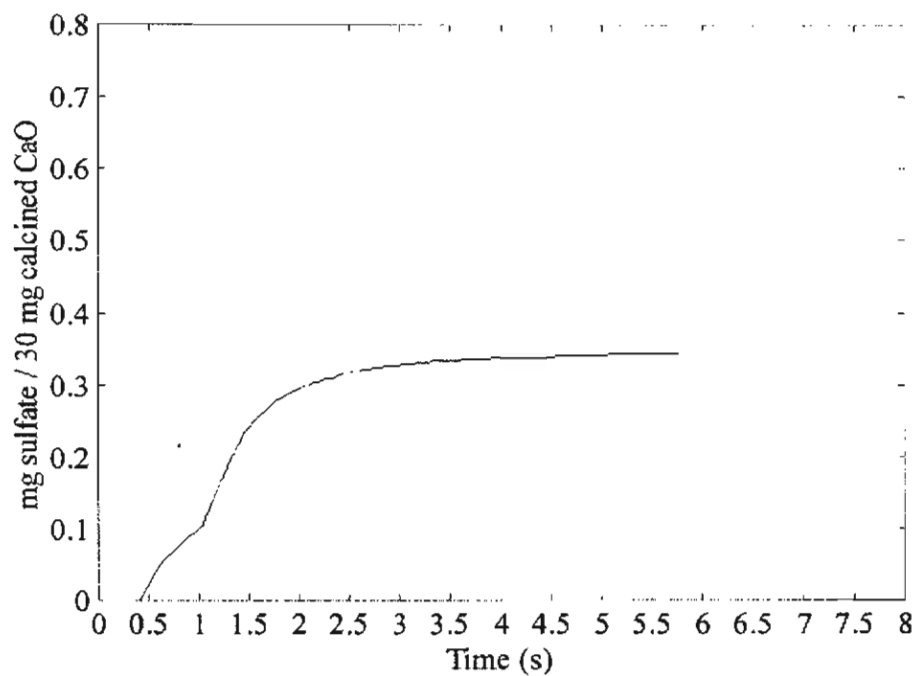


Fig.5.34 Sorption of sulfur dioxide for dolomite 1351 diameter of 0.0096 cm. (case 7)

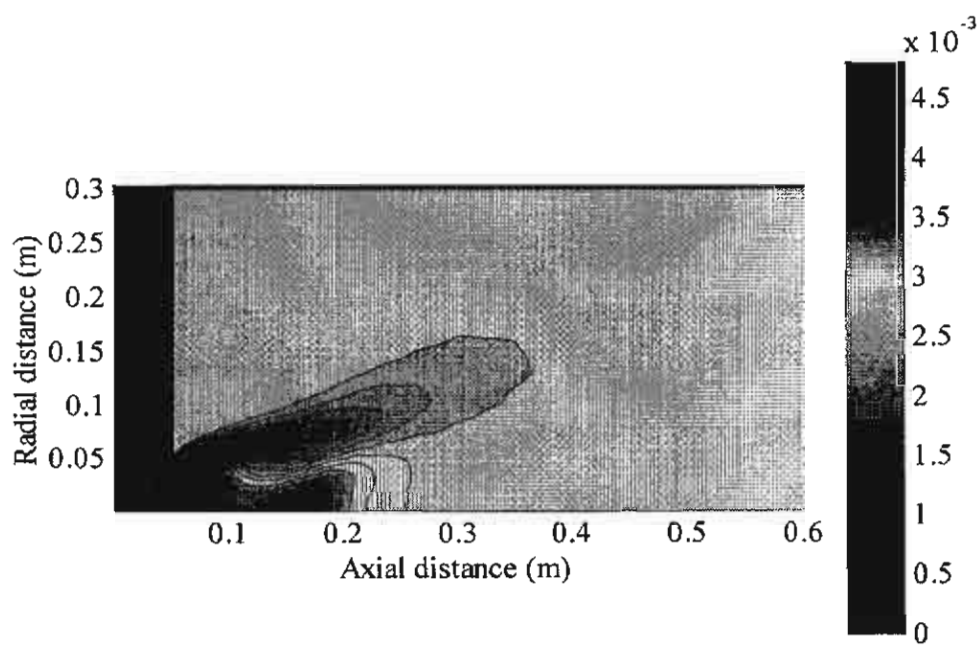


Fig.5.35 Concentration of sulfur oxides, case 5 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone

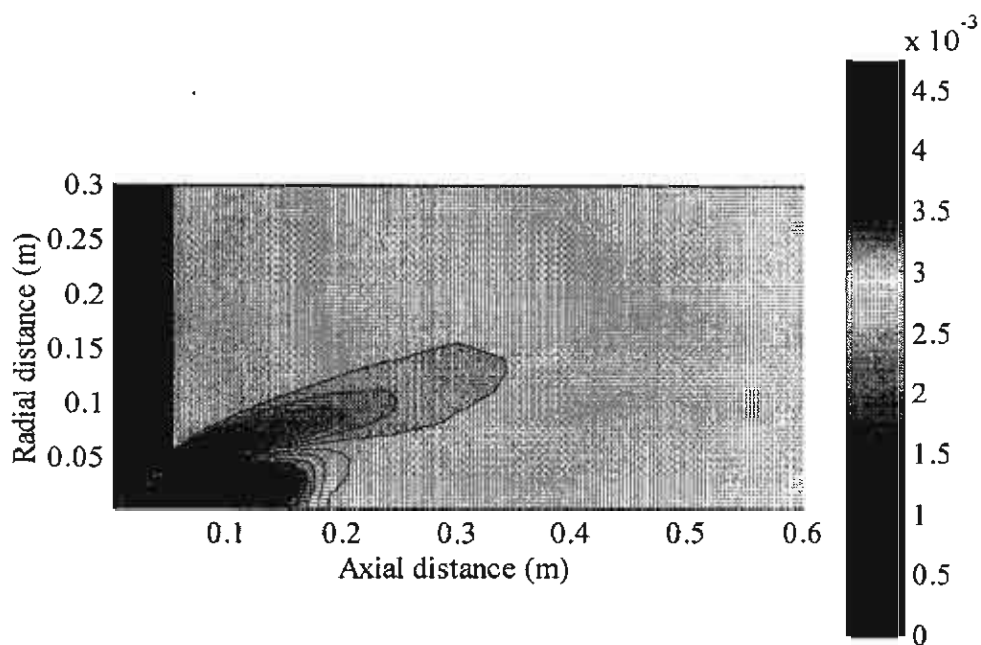


Fig.5.36 Concentration of sulfur oxides, case 6 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone

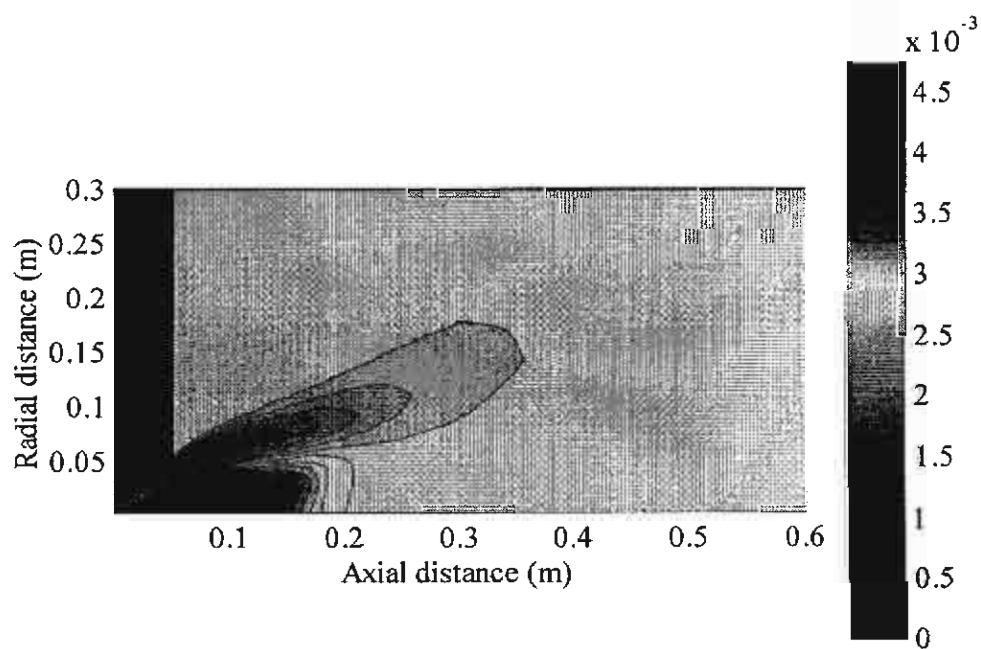


Fig.5.37 Concentration of sulfur oxides, case 7 (in % $m_{SO_2} / m_{mixture}$), in the near burner zone

5.7 Summary

There are 9 case studies performed in this thesis including two base cases. Parametric studies have been carried out involving changing in inlet locations, particle sizes and decreasing in wall temperatures. The results may be concluded as follows:

1. Calcination process rapidly takes place when the particles move through the high temperature zone. The calcination time is not observable in the case of insulated wall where gas temperature is high. In the case under temperature-controlled boundary condition, however, it occupies a time span of 0.5 and up to 1.3 seconds under of gas temperature about 1000 K.
2. The kinetic of sorption is high when the small particles move through the high temperature zone. This is related to the rate constant, which proportionally varies with temperature. However, this mathematical model does not render the effect of chemical instability of SO₂ sorption at temperature above 1300 °C [19], the sorption rate under such condition is therefore higher than the value observed at lower temperature. To overcome unrealistic representation of this model the gas temperature in the furnace is kept under 1300 °C.
3. Apart from the sorption rate, the particle residence time also play an important role on the total amount of SO₂ adsorption. However, the particles no longer adsorb SO₂ after a certain period due to insufficiently low temperature in the far burner region, despite the particles are yet to saturate. The maximum residence time of 8 seconds is observed in case 6 where the particles are injected from top wall, and the accumulative amount is 0.45 mg/mg particles, whereas this figure could be as high as 9 mg/mg particles within 120 second in a bench-top experiment [3].
4. Generally, from Figs. 5.19 – 5.22 and 5.35 – 5.37, less emissions are observed when introducing calcium carbonate particles, but this improvement is insignificant. Moreover, the effects of inlet locations and particle sizes on emission level are also negligible. From these results and the statement given in the above paragraph, reduction of SO₂ emissions rather has strong relationships with the particle residence time and temperature. Changing in inlet locations and particle sizes do not significantly alter such primary factors. It can be concluded that the configuration for pulverized coal combustor and furnace used in this study

yields the unfavorable environment for in-situ dry-type desulfurization. More study on furnace configuration in order to lengthen the residence time is required in order to improve the adsorption efficiency.

5. The effect of decreasing temperature at top wall has caused a decrease in gas density in the internal recirculation zone. Such change causes the significant effect in momentum transfer between the gaseous phase and the CaCO_3 particles. As the temperature decreases, CaCO_3 particles seem to have better penetration into the central part of the external recirculation zone, resulting in longer residence time therein. However, due to lower temperature, lower adsorption rate is observed. Such effect has already been discussed above.

CHAPTER 6

CONCLUSIONS AND DISCUSSIONS

Synopses of this thesis and discussions of the further studies are included in this chapter.

6.1 Summary of the preceding chapters

Chapter 1 describes coal utilization in Thailand and objective of this thesis which is an establishment of mathematical model for simulation of SO_2 adsorption by CaCO_3 particles. This model consists of calcination and sulfation processes, which generally included with mathematical model for sulfur oxide formation. A number of terms have been added into the original model to render the effects of temperature, concentration of sulfur dioxide in the surrounding gas, particle sizes and trajectories of particles.

Chapter 2 reviews the desulfurization technologies and the suggestion of previous researchers for establishment of mathematical model, especially Silcox [2] and Borgwardt, [3] which are the main contributors for model of calcination and sulfation processes, respectively.

Chapter 3, the numerical formulations for the simulation of flow aerodynamics, combustion and heat transfer in pulverized fuel combustion systems in the model and those describing the formation of SO_2 are presented.

Chapter 4 the calcination and sulfation models are validated in this chapter. Parametric studies based on the modified equations show that good agreement with the experimental data can be achieved via the adjustments of two empirical parameters for the sulfation model.

Chapter 5 contains the results and discussions for the SO_2 adsorption. The residence time and temperature surrounding CaCO_3 particles are the primary parameters for adsorption, whereas, the inlet locations and particle sizes of CaCO_3 have less effect.

6.2 Conclusions

The objective of this thesis has been achieved. The adsorption model comprising of calcination and sulfation models for pulverized coal combustion has been established. The results of this model presented in chapter 5 are sensible. The primary parameters for adsorption are residence time and temperature surrounding of CaCO_3 particles. This study is an informative data for further study about the reduction of sulfur dioxide emissions from the pulverized coal combustion.

6.3 Remarks for further studies

In order to confirm the precision and accuracy of the study, the furnace for CaCO_3 injection should be constructed and experiments should be carried out. Moreover, further study should be concentrated on extending the residence time of the particles in the external recirculation zone.

REFERENCES

- [1] Eiichi Y. "Research Survey on Efficient and Environmentally Friendly Coal Utilization Systems in Thailand." Clean Coal Technology Seminar in Thailand. Feb 1999. pp. 1-12.
- [2] Geoffrey D. Silcox. "Mathematical Model for the Flash Calcination of Dispersed CaCO_3 and Ca(OH)_2 Particles." Ind. Eng. Chem. Res, vol. 28, 1999. pp.155-160
- [3] Borgwardt, R.H., "Kinetics of the Reaction of SO_2 with Calcined Limestone." AIChE J, vol. 4, no. 1, Jan. 1970. pp. 59-64.
- [4] Charoensuk J. "The Application of Mathematical Model for Scaling Pulverised Coal Combustors." Ph.D.Thesis of University of London and the Diploma of Membership of the Imperial College. 1996.
- [5] Daungvilailux P. "Mathematical Model of Sulfur Oxide Formation in Pulversed Coal Combustion." Mater of Engineering in Mechanical Engineering School of Graduate Studies King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang. 2000.
- [6] Tetsuo K. "Flue Gas Desulfurization Technology." Clean Coal Technology Seminar in Thailand. Feb 1999. pp. 26-36.
- [7] Magnussen B.F. and Hjertager B.H. "On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion." Sixteenth Symposium (Int.) on Combustion. The Combustion Institute. 1976. p. 719.
- [8] Salooja A.P. "Mathematical Modeling of and experimental Studies in Axi – Symmetrical Combustors." Ph.D.Thesis of University of London and the Diploma of Membership of the Imperial College. 1979.
- [9] Lockwood F.C., Rizvi S.M.A., Lee F.K. and Whalet K. "Coal Combustion Model Validation Using Cylindrical Furnace Data." Twentieth Symposium (Int.) on Combustion. The Combustion Institute. 1994. p. 513.
- [10] Sloan D.F., Smith P.F., and Smoot L.D. "Modeling of Swirl in Turbulent Flow System." Progress in Energy Combustion Science, vol. 12, 1986. p. 163.
- [11] Romo – Millares C.A. "Mathematical Modeling of Fuel NO Emissions from PF Burners." Ph.D.Thesis of University of London and the Diploma of Membership of the Imperial College. 1992.

- [12] Lockwood F.C. and Jones W.P. "The Mathematical Modeling of Combustion Chambers." Furnaces and Fires: Prediction of NO emissions from a staged burner. Outline of Lecture notes. Post Experience Course Lectures. Department of Mechanical Engineering. ICSTM. London. 1993.
- [13] Shen B. "The Application of Second – Moment Turbulence Closures to 2D Pulverised –Coal Flames." Ph.D.Thesis of University of London and the Diploma of Membership of the Imperial College. 1994.
- [14] De Soete F.F. Fundamentals of NO Formation and Destruction (Gas phase). Course on combustion of solid fuels. IFRF, Noordwijkerhout, The Netherlands, 1988.
- [15] Alvfors, P. and Svedberg, G. "Modeling of the Sulphation of calcined Limestone and Dolomite – A Gas – Solid Reaction with Structural Changes in the Presence of Inert Solids" Chem. Engng. Sci, vol. 43, no. 5. pp. 1183-1193.
- [16] Borgwardt, R.H. "Calcination Kinetics and Surface Area of Dispersed Limestone Particles." AIChE J, vol. 31, no. 1, Jan. 1985. pp. 103-111.
- [17] Borgwardt, R.H., and Bruce, K.R. "Effect of Specific Surface Area on the Reactivity of CaO with SO₂." AIChE J, vol. 32, no. 2, Feb. 1986. pp. 239-246.
- [18] Zarkanitis, S., and Sotirchos, S. V. "Pore Structure and Particle Size Effects on Limestone Capacity for SO₂ Removal." AIChE J, vol. 35, no, 5, May 1989. pp. 821-830.
- [19] Newton, G. H., Chen, S. L., and Kramlich, J.C. "Role of Porosity Loss in Limiting SO₂ Capture by Calcium Based Sorbents." AIChE J, vol. 35, no. 6, Jun. 1989. pp. 988-994.
- [20] Georgakis, C., C.W. Chang, and J. Szekely. "A Changing GrainSize Model for Gas – Solid Reactions." Chem. Eng. Sci, vol. 34, 1979. p. 1072.
- [21] Lee, D.C., and C. Georgakis. "A Single – Particle Size Model for Sulfur Retention in Fluidized Bed Coal Combustors." AIChE J, vol. 27, 1981. p. 472.
- [22] Hartman, M., and R. W. Coughlin. "Reaction of Sulfur Dioxide with Limestone and the Influence of Pore Structure." Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev, vol. 13, 1974. p. 248.
- [23] Hartman, M., and R. W. Coughlin. "Reaction of Sulfur Dioxide with Limestone and the Grain Model." AIChE J, vol. 22, 1976. p. 490.

- [24] Hartman, M., and R. W. Coughlin. "Influence of Porosity of Calcium Carbonates on Their Reactivity with Sulfur Dioxide." *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*, vol. 17, 1978. p. 411.
- [25] Bhatia, S.K., and D.D. Perlmutter. "The Effect of Pore Structure on Fluid – Solid Reactions. I : Application to the SO_2 – lime Reaction." *AIChE J.*, vol. 27, 1981a. p. 226.
- [26] Christman, P.G., and T. F. Edgar. "Distributed Pore – Size Model for Sulfation of Limestone." *AIChE J.*, vol. 29, 1983. p. 388.
- [27] Bardakci, T. "Diffusional Study of the Reaction of Sulfur Dioxide with Reactive Porous Matrices." *Thermochimica Acta*, vol. 76, 1985. p.287.
- [28] Marsh, D.W., and D. L. Ulrichson. "Rate and Diffusional Study of the Reaction of Calcium Oxide with Sulfur Dioxide." *AIChE Ann. Meet.*, Los Angeles, 1982.
- [29] Ramachandran, P.A., and J. M. Smith. "A Single – Pore Model for Gas – Solid Monocatalytic Reactions." *AIChE J.*, vol. 23, 1977. p. 353.
- [30] Simons, G. A. "The Pore Tree Structure of Pore Char." 19th Int. Symp. Combustion, Combustion Institute, 1982.
- [31] Simons, G.a., and Garman, A.R. "Small Pore Closure and the Deactivation of the Limestone Sulfation Reaction." *AIChE J.*, vol. 32, no. 9, Sept. 1986. pp. 1491-1499.
- [32] Sotirchos, S. V., and H. C. Yu. "Mathematical Modeling of Gas – Solid Reactions with Solid Product." *Chem. Eng. Sci.*, vol. 40, no. 11, 1985. pp. 2039-2052.
- [33] Suhas K. Mahuli, Rajeev Agnihotri, Raja Jadhav, Shriniwas Chauk and L. S. Fan. "Combined Calcination, Sintering and Sulfation Model for CaCO_3 – SO_2 Reaction." *AIChE J.*, vol. 45, no. 2, Feb. 1999. pp. 367-382.
- [34] Rizvi S.M.A.. "Prediction of flow, Combustion and Heat Transfer in Pulverised Coal Flames." Ph.D.Thesis of University of London and the Diploma of Membership of the Imperial College. 1985.
- [35] Steven C. and Raymond P. Canale. **Numerical Methods for Engineers.** 2nd Ed. Singapore : McGraw-Hill. 1989.
- [36] Abbas T. "In – frame Measurement of N – Pollutant and Burnout in a Pulverised – Coal – Fired Furnace." Ph.D.Thesis of University of London and the Diploma of Membership of the Imperial College. 1993.

APPENDICES

Appendix A

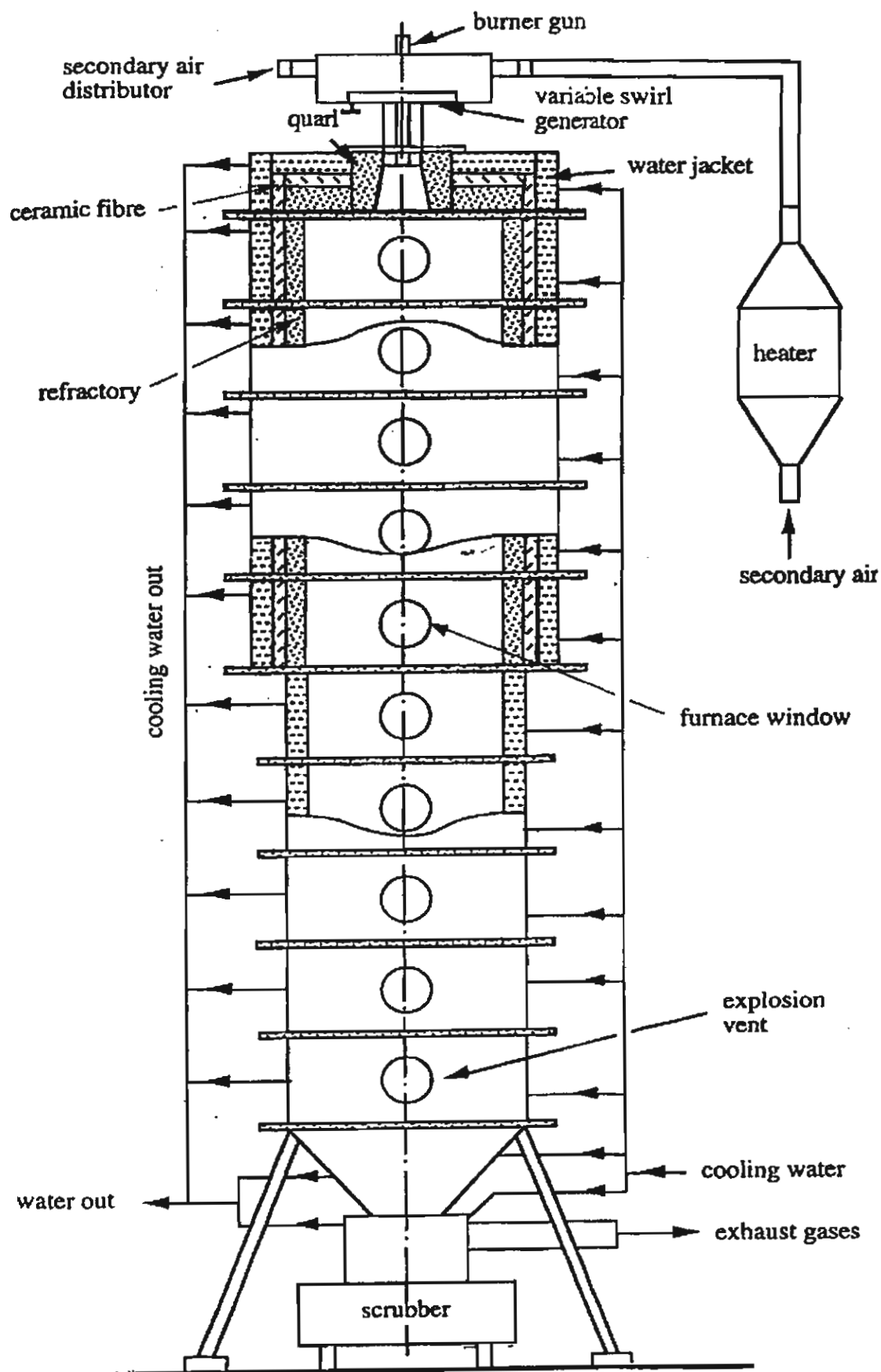


Fig.A-1 Schematic diagram of the ICSTM furnace

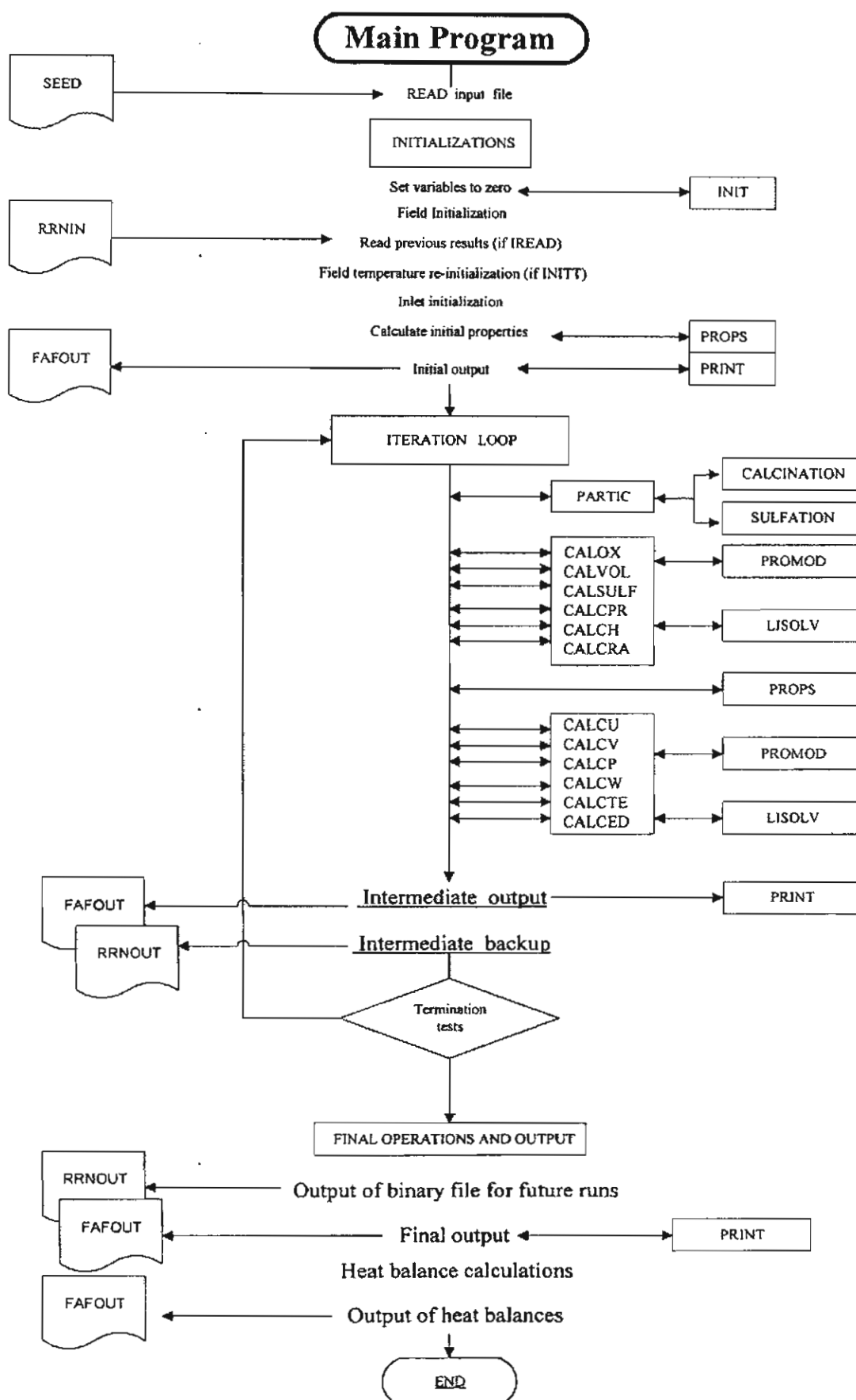


Fig.A-2 Flowchart for FAFNIR and additional calcination and sulfation processes

Appendix B

Publication

สัมมนาวิชาการวิศวกรรมเครื่องกลแห่งประเทศไทยครั้งที่ 13
2-3 ธันวาคม 2542 โรงแรม รอยัลคลิฟปีชีร์สอร์ท พัทยาใต้ ชลบุรี

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยแคลเซียมออกไซด์

Mathematical Model for Sulfur Dioxide (SO_2) Absorption by Calcine (CaO) Particle

จารุวัตร เจริญสุข, วิชา ศรีสืบสาย

ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ถ.ฉลองกรุง เขตลาดกระบัง กรุงเทพฯ 10520

โทร 66(2)326-9987, โทรสาร 66(2)326-9053, E-Mail: kswipoo@kmitl.ac.th

บทคัดย่อ

บทความนี้เป็นรายงานการศึกษาและกล่าวถึงแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับปฏิกิริยาดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของแคลเซียมออกไซด์ (CaO) ซึ่งเกิดจากการแตกตัวของแคลเซียมคาร์บอเนต ผลการลดปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สร้างขึ้นจะถูกแสดงเปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง ทั้งยังแสดงถึงผลของการเปลี่ยนแปลงขนาดแคลเซียมออกไซด์ (CaO) ต่อการดูดซับปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์สำหรับเทคนิคที่ใช้แก้ปัญหาจะใช้วิธีวิเคราะห์เชิงตัวเลขแบบออยเลอร์โดยเปรียบเทียบการอัตราการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์กับเวลา

Abstract

This paper concerns about a formulation of the semi-empirical mathematical model for sulfur dioxide (SO_2) absorption by Calcine (CaO) particle, dissociated from Calcium Carbonate. Euler's method is utilized for the time-domain solution of the absorption level. The model is able to predict the effect of particle size on SO_2 absorption level. Eventually, the numerical results are in good agreement with the experimental data

1. บทนำ

การพัฒนาทางด้านคอมพิวเตอร์นำไปสู่การสร้างวิธีการหาคำตอบของสมการคณิตศาสตร์ที่ซับซ้อนด้วยวิธีวิเคราะห์เชิงตัวเลข เช่น การหาคำตอบของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการไหล การเผาไหม้ และการถ่ายเทความร้อน ซึ่งมีประโยชน์อย่างยิ่งสำหรับกระบวนการในการศึกษาห้องเผาไหม้อุตสาหกรรม คำตอบที่ถูกคำนวณมาจะได้ถูกเปรียบเทียบกับผลการทดลองเพื่อเป็นข้อมูลสำหรับวิศวกรหรือนักวิจัยเห็นประเด็นความแตกต่างระหว่างข้อสมมติทางทฤษฎี และสิ่งที่เกิดขึ้นจริงในการเผาไหม้ ซึ่งจะช่วยให้สามารถเข้าใจกระบวนการต่าง ๆ ที่เกิดขึ้นได้ดียิ่งขึ้น อย่างไรก็ตามแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ยังต้องมีการปรับปรุงเพื่อให้มีประสิทธิภาพที่ดียิ่งขึ้นไป เพื่อให้การคำนวณด้วย

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์มีความถูกต้องมากยิ่งขึ้นเมื่อเทียบกับผลที่ได้จากการทดลอง

ด้านหินเป็นเชื้อเพลิงที่เกิดจากการทับถมของซากพืชซากสัตว์และมีความถูกต้องเมื่อเทียบกับก๊าซธรรมชาติและน้ำมัน ด้านหินถูกใช้เป็นต้นกำเนิดพลังงานเรื่อยมาตั้งแต่อดีตจนถึงปัจจุบัน แต่มันก็มีผลกระทบโดยตรงต่อสิ่งแวดล้อม เช่น ก่อให้เกิดมลพิษทางอากาศ ในหลายปีที่ผ่านมาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ถูกนำมาใช้เพื่อพัฒนาระบบการเผาไหม้ด้านหิน (Magnussen et al., 1976; Salooja, 1979; Lockwood et al., 1984; Sloan et al., 1986; Romo - Millares, 1992; Lockwood et al., 1993; and Shen., 1994) และเมื่อไม่นานมานี้ผลงานของ Millares (Millares., 1992) ได้รวมกลไกการเกิดและสลายตัวของไนโตรเจนออกไซด์ (De Soete, 1988) เข้าไปในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ การถ่ายเทความร้อนรวมถึงการปล่อยก๊าซไนโตรเจนออกไซด์จากการเผาไหม้ ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นผลผลิตอีกชนิดหนึ่งจากการเผาไหม้ด้านหิน ซึ่งทำให้เกิดการหมกรอนของเตาเผา ถึงแม้จะได้มีการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของปฏิกิริยาดูดซับซัลเฟอร์ไดออกไซด์โดยอนุภาคหินปูนขึ้นมาในอดีต แต่แบบจำลองก็มีความซับซ้อนและมีข้อจำกัดสูงไม่สามารถนำเข้ามารวมกับแบบจำลองของการเผาไหม้ได้ (Solirchos and Yu 1985) จึงอาจเป็นเหตุผลว่า ก่อนหน้านี้ไม่มีผลงานที่รวมเอากลไกการเกิดและการสลายตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เข้าไว้ในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ดังนั้นในการศึกษานี้จึงมีจุดประสงค์ที่จะพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ง่ายแต่มีความแม่นยำในระดับที่ยอมรับได้เพื่อแสดงการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

จากการศึกษาถึงอัตราการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (A. Levy and E.L. merryman., 1965) แสดงให้เห็นว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาอยู่ในระดับเดียวกันกับปฏิกิริยาการเผาไหม้ ในการเผาไหม้ของด้านหินในห้องเผาไหม้ที่สารตั้งต้นไม่ได้ผสมกันมาก่อนนั้น เมื่ออุณหภูมิห้องเผาไหม้สูงกว่า 1000°C อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะสูงกว่าอัตราการผสมกัน

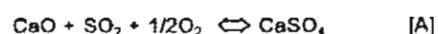
ของสารตั้งต้นทำให้สารตั้งต้นทำปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วเมื่อผสมกัน ดังนั้นการผสมกันแบบปั่นป่วนจึงมีอิทธิพลต่อปฏิกิริยาทั้งหมด อย่างไรก็ตามปฏิกิริยาการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์โดยมากจะเกิดขึ้นในช่วงอุณหภูมิที่ต่ำและเวลานานกว่าหลังการเผาไหม้ มีอยู่หลายวิธีที่จะลดปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ เช่นวิธีการกำจัดถ่านหินที่มีคุณภาพต่ำออกไปก่อนที่จะใส่เข้าไปในหีบเผาไหม้ การผสมด้วยถ่านหินที่มีคุณภาพสูง หรือการแยกองค์ประกอบของถ่านหินด้วยวิธีการล้างหรือวิธีแรงดึงดูดของโลก เป็นต้น มีการทดลองและประสบผลสำเร็จในการกำจัดเหล็กซัลไฟด์ (FeS_2) (W.D. Holstead and E. Raask, 1969) แต่ยังไม่สามารถกำจัดพันธะทางเคมีที่เป็นองค์ประกอบของถ่านหินได้ ยังมีวิธีการที่สามารถลดปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ได้ในระหว่างหรือหลังการเผาไหม้ เช่นการฉีดตัวดูดซับเข้าไปในเตาเผาในตำแหน่งที่ดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ได้ดีที่สุด ตัวดูดซับดังกล่าวที่รู้จักกันดี 2 ชนิดคือ แคลเซียมคาร์บอเนตหรือหินปูน (CaCO_3) และแคลเซียมไฮดรอกไซด์ ซึ่งจะมีวิธีการฉีดด้วยกัน 2 วิธีคือแบบแห้งและเปียกเพื่อให้ดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่ก๊าซไอเสีย ซึ่งการเลือกใช้วิธีทั้ง 2 นี้ก็ขึ้นอยู่กับความต้องการหรืออุปกรณ์ที่ใช้ตามความเหมาะสมและงบประมาณ ในกระบวนการกำจัดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์แบบแห้งจะมีราคาถูกที่สุดแต่การดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จะต่ำโดยสามารถลดปริมาณซัลเฟอร์ได้เพียง 50 % (Tetsuo KAWAMURA, 1999) เนื่องจากเวลาที่อยู่ในเตาเผาสั้น ฉะนั้นการเพิ่มประสิทธิภาพการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จึงเป็นหัวข้อที่น่าสนใจในการท้าววิจัยเพื่อการพัฒนา

แคลเซียมคาร์บอเนตหรือหินปูน (CaCO_3) เมื่อใส่เข้าไปในที่อุณหภูมิสูงจะแตกตัวเป็นอนุภาคของแคลเซียมออกไซด์ที่มีรูพรุน (CaO) และปลดปล่อยก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์อย่างรวดเร็ว จากนั้นจะจับตัวกับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์และโมเลกุลของออกซิเจนกลายเป็นแคลเซียมซัลเฟต (CaSO_4) อัตราความร้อนที่สูงจากเตาเผาจะทำให้เกิดแคลเซียมออกไซด์ซึ่งมีพื้นที่จำเพาะสูงถึง 90 ตารางเมตรต่อกรัม (Borgwardt, R.H., 1985) ในการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของแคลเซียมคาร์บอเนตเมื่อเปลี่ยนเป็นแคลเซียมออกไซด์แม้ว่าจะมีประสิทธิภาพต่ำกว่าการดูดซับของแคลเซียมไฮดรอกไซด์ (Ca(OH)_2) (Bruce et al., 1989) แต่ก็ยังใช้กันอย่างกว้างขวางเนื่องจากง่ายต่อการใช้งาน การศึกษาด้วยวิธีการทดลองอันหนึ่งของ Zarkanitis, S. และ Sotirchos S.V. ให้เห็นว่าอนุภาคจะมีช่องว่างสำหรับดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์และสิ่งนี้จะสัมพันธ์กับการกระจายตัวของขนาดรูพรุนของอนุภาคและความสามารถในการส่งถ่ายมวลภายในอนุภาค ซึ่งสรุปไว้ว่าการกระจายตัวของขนาดและรูพรุนซึ่งคิดต่อซึ่งกันและกันเป็นปัจจัยสำคัญในการดูดซับแคลเซียม มากกว่าปัจจัยในแง่ความพรุนของอนุภาค ผลของการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ต่อเวลาจะลดลงเมื่อขนาดของอนุภาคใหญ่ขึ้นในขณะที่อุณหภูมิการเกิดแคลเซียมออกไซด์สูงขึ้นและอุณหภูมิการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์สูงขึ้น โดยสามารถอธิบายได้ในรูปของการแพร่ที่ถูกจำกัดด้วยการดูดซับของรูพรุนที่ผิวด้านนอก การศึกษานี้ยังแสดงให้เห็นว่าอุณหภูมิในช่วง 750 – 850 °C ซึ่งจะเป็นช่วงที่ดีที่สุดของการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ซึ่งอุณหภูมิจะต่ำกว่าบริเวณที่มีการเผาไหม้ (1000 °C)

โครงสร้างของรูพรุนนั้นจะเปลี่ยนไปเมื่อเกิดปฏิกิริยากับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ Newton et al., 1989 กล่าวไว้ว่าอุณหภูมิเป็นตัวแปรที่ก่อให้เกิดการลดลงของความพรุนของแคลเซียมออกไซด์เนื่องจากคาร์บอนไดออกไซด์ทำให้เกิดผลึกในช่วงอุณหภูมิสูงประมาณ 900 – 1300 °C ในช่วงเวลาอันสั้น (< 1 วินาที) ระหว่างดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ในกระบวนการนี้ (ประมาณ 970 °C) ผลึกเล็ก ๆ จำนวนมากในอนุภาคแคลเซียมออกไซด์จะรวมตัวกันเป็นผลึกที่มีขนาดใหญ่ขึ้นซึ่งจะมีจำนวนลดลง ซึ่งมีผลต่อการลดลงของพื้นที่ผิวจำเพาะและการลดลงของอัตราการดูดซับ ผลดังกล่าวเป็นไปในแนวทางเดียวกันกับผลของ Borgwardt และ Bruce ในปี 1986 ซึ่งได้แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่ผิวจำเพาะและอัตราการเกิดแคลเซียมซัลเฟต (CaSO_4) ในปี 1970 Borgwardt แสดงให้เห็นถึงการลดลงของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์และการเพิ่มขึ้นของการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ซึ่งสัมพันธ์กันแบบเอ็กโปเนนเชียล ในแบบจำลองเชิงการทดลองส่วนมากจะบรรยายถึงกระบวนการดูดซับของรูพรุนที่ผิวด้านนอกเนื่องจากการแพร่ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ผ่านรูของแคลเซียมออกไซด์ (Georgakis et al., 1979; Lee and Goergakis, 1981; Hartman and Couglin, 1974, 1976, 1978; Bhatia and Perlmutter, 1981; Christman and Edgar, 1983; Bardakci, 1984; Marsh and Ulrichson, 1982 and Ramachandran and Smith, 1977.) หลังจากนั้น Simons, 1982; Simons and Garman, 1986 พบว่าการเกิดการดูดซับที่รูพรุนของอนุภาคจะลดปริมาณการแพร่ซึ่งทำให้เกิดปฏิกิริยาได้น้อยลง ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จะถูกดูดซับได้ดีระหว่างช่วงอุณหภูมิ 900 °C ถึง 1300 °C เนื่องมาจากการแพร่และจลนพลศาสตร์เคมีของพันธะเคมีเกิดขึ้นน้อยที่อุณหภูมิต่ำกว่า 900 °C ในขณะที่จะเกิดความไม่เสถียรของการเกิดปฏิกิริยาขึ้นที่อุณหภูมิสูงกว่า 1300 °C (Cole et al., 1987; Newton, 1987) การศึกษาของ Sotirchos and Yu 1985 ได้พัฒนาแบบจำลองโครงสร้างของรูพรุนแบบสุ่มรวมเข้ากับแบบจำลองการเกิดปฏิกิริยาเพื่อจะจำลองการเกิดปฏิกิริยาของของแข็งและก๊าซ ซึ่งได้จำลองการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่มีความเข้มข้น 0.3 % โดยปริมาตรด้วยแคลเซียมที่อุณหภูมิ 850 °C และได้นำผลมาเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Cole et al., 1987; Newton, 1987 เป็นที่น่าสังเกตว่าอุณหภูมิที่ใช้จะต่ำกว่าอุณหภูมิที่ได้มีการแนะนำไว้ในบทความของ Cole et al., 1987; Newton, 1987 ได้มีการเปรียบเทียบผลที่ได้จากการคำนวณกับผลที่ได้จากการทดลองไว้ในรายงานนั้นเช่นกัน

2.แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

ปฏิกิริยาเคมีระหว่างแคลเซียมออกไซด์และซัลเฟอร์ไดออกไซด์ แสดงได้ดังสมการสมดุลเคมีดังนี้



โดยที่อัตราการเกิดปฏิกิริยา (r) (Borgwardt, R.H., 1970) คือ

$$r = \frac{1}{w} \frac{dn'}{dt} = \frac{\eta}{\rho} k_p c^m \quad [1]$$

ในหน่วยของกรัมโมลต่อกรัมของแคลเซียมออกไซด์ต่อวินาที และ w คือน้ำหนักของอนุภาค C และ m เป็นลำดับความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์และลำดับของปฏิกิริยา ตามลำดับ k_p เป็นอัตราคงที่ ซึ่งเป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ อธิบายด้วยสมการของ Arrhenius

$$k_p = Ae^{-E/RT} \quad [2]$$

ตารางที่ 1 ค่าพลังงานกระตุ้น, อัตราการเกิดปฏิกิริยาและ frequency factor ของหิน dolomite, Borgwardt, R.H., 1970.

Stone	Activation energy, E, cal./g. mole	Reaction rate constant, K_p , sec. ⁻¹	Frequency factor, A, sec. ⁻¹
1337	10,000	4.8×10^{-3}	2.4×10^5
1351	18,100	7.2×10^{-3}	9.0×10^8
1343	14,200	4.0×10^{-3}	1.1×10^8
1360	8,100	2.3×10^{-3}	5.5×10^4

η เป็นตัวแปรที่ชี้ให้เห็นถึงการลดลงของอัตราการดูดซับเนื่องจากก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ โดยตัวแปรนี้สัมพันธ์กับ $\frac{n'}{w}$ ตามสมการ

$$\ln \eta \frac{Ac^m}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w} + \ln r_0 \quad [3]$$

β เป็นตัวแปรที่ได้จากการทดลอง n' เป็นอนุภาคของซัลไฟด์ในหน่วยกรัมโมล r_0 เป็นการเกิดปฏิกิริยาในสภาวะเริ่มต้น (ไม่มีซัลเฟต) ดังสมการ

$$r_0 = \eta_0 \frac{A_0 c^m}{\rho_0} e^{-E/RT} \quad [4]$$

จากสมการ 3 และ 4 จะได้

$$A = \frac{\eta_0}{\eta} \frac{\rho}{\rho_0} A_0 e^{-\beta \frac{n'}{w}} \quad [5]$$

จากสมการที่ 2, 4 และ 5 จะได้

$$r = \frac{\eta}{\rho} \frac{\rho}{\rho_0} r_0 \frac{\rho_0 e^{E/RT}}{\eta_0 c^m} \frac{\eta_0}{\eta} e^{-\beta \frac{n'}{w}} e^{-E/RT} c^m \quad [6]$$

$$\text{ดังนั้น } r = r_0 e^{-\beta \frac{n'}{w}} \quad [7]$$

สมการที่ 7 แสดงให้เห็นว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเป็นฟังก์ชันตัวแปรไม่กี่ตัวซึ่งไม่สัมพันธ์กับการสังเกตจากการทดลอง จากข้อมูลเมื่อมีปริมาณซัลเฟต 1×10^{-3} กรัมโมลต่อกรัม ผู้ศึกษาได้แสดงให้เห็นถึงความสัมพันธ์แบบเชิงเส้นตรงระหว่าง $\ln(r)$ และส่วนกลับของอุณหภูมิ $1/T$ (K^{-1}) ดังนั้นสมการที่ 7 จะถูกเปลี่ยนเป็น

$$r = r_0 e^{-\beta \frac{n'}{w}} e^{\frac{-E}{RT} + c_0} \quad [8]$$

$$c_0 = \frac{E}{RT_{ref}} \quad [9]$$

โดยที่ T_{ref} เป็นอุณหภูมิอ้างอิงที่ 1143 K (870 °C) สมการข้างต้นจะเหมือนกับสมการที่ 7 เมื่ออุณหภูมิเท่ากับอุณหภูมิอ้างอิง นอกจากนั้นการเพิ่มขึ้นของอัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นอยู่กับเพิ่มขึ้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ซึ่งจะได้

$$r = r_0 e^{-\beta \frac{n'}{w}} e^{(-E/RT) - (E/R_{ref})} \frac{C^m}{C_{ref}^m} \quad [10]$$

เมื่อ C_{ref} เป็นความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ 2.9×10^{-3} กรัมโมลต่อกรัมของหิน dolomite ค่า r_0 ของแคลเซียมออกไซด์แต่ละชนิดได้มาจากการประมาณค่าแบบเชิงเส้นตรงของการเกิดปฏิกิริยาที่มีความเข้มข้นของซัลเฟต 1×10^{-3} กรัมโมลต่อกรัม เป็นไปตามสมการ

$$\ln r_0 = \ln r_{1 \times 10^{-3}} - \beta (1 \times 10^{-3}) \quad [11]$$

β ได้มาจากการที่กล่าวไว้ข้างต้นซึ่งรู้อัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ 1×10^{-3} และ 2×10^{-3} ซึ่งได้จากการทดลอง (Borgwardt, 1970) โดยแสดงไว้ดังตารางที่ 2 และ 3

$$\beta = \frac{\ln r_{2 \times 10^{-3}} - \ln r_{1 \times 10^{-3}}}{2 \times 10^{-3} - 1 \times 10^{-3}} \quad [12]$$

ตารางที่ 2 ผลของอนุภาคกับอัตราการเกิดปฏิกิริยาสภาวะ sulfate loading ที่ 2×10^{-3} g mole/g, 870 °C.

Stones	Reaction rate (g mole/g sec) $\times 10^5$		
	D_p 0.0096 cm.	D_p 0.025 cm.	D_p 0.13 cm.
1337	4.2	3.2	1.4
1351	3.2	2.1	1.3
1343	2.1	1.4	0.7
1360	2.5	1.8	1.1

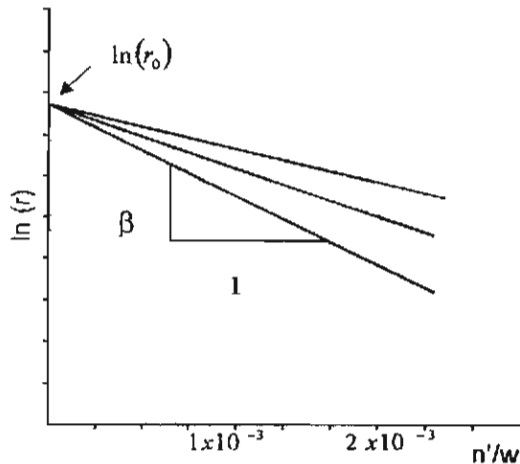
ตารางที่ 3 ค่าที่ได้จากการทดลองของอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่อุณหภูมิ 870 °C สภาวะ sulfate loading ที่ 1×10^{-3} g mole/g ของอนุภาคขนาด 0.0096 ซม. (150/170-mesh particle size).

Stones	Reaction rate (g mole/g sec) $\times 10^5$
1337	6.4
1351	5.9
1343	3.6
1360	3.1

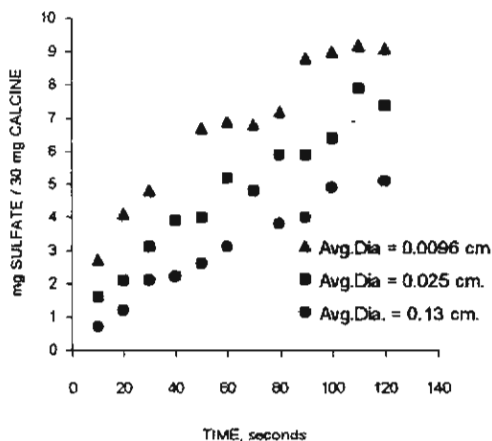
จากความสัมพันธ์ข้างต้นตัวอย่างของกราฟสำหรับอนุภาคของแคลเซียมออกไซด์ 1337 แสดงไว้ดังรูปที่ 1 ค่าของ r_0 และ β ของอนุภาคแคลเซียมออกไซด์แต่ละชนิดได้มาในทางตรงกัน โดยสรุปรวมไว้ในตารางที่ 4

ตารางที่ 4 อัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ภาวะไม่มีซัลเฟต (Zero sulfation)

Type	$\ln r_0$	β		
		0.0096cm.	0.025cm.	0.13cm.
1337	-9.24	-420	-550	-970
1351	-8.97	-690	-900	-1140
1343	-9.69	-540	-740	-1090
1360	-10.16	-220	-385	-630



รูปที่ 1 ความสัมพันธ์ของ sulfation load กับอัตราการเกิดปฏิกิริยา , รวมทั้งการหาค่า r_0 และ β



รูปที่ 2 การดูดซับของซัลเฟตไดออกไซด์ที่ขนาดของอนุภาคชนิด 1351 ต่าง ๆ กัน, Borgwardt, R.H., 1970.

ผลจากการทดลองดังรูปที่ 2 พบว่าการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ต่อหน่วยมวลของอนุภาคที่มีขนาดเล็กกว่าจะดูดซับได้ดีกว่าอนุภาคที่มีขนาดใหญ่ซึ่งสังเกตได้อย่างชัดเจนในตอนเริ่มของการเกิดปฏิกิริยา ซึ่งเกิดขึ้นเนื่องจาก รูปทรงของอนุภาคตอนเริ่มต้นมีมากกว่าอนุภาคที่มีขนาดใหญ่

สมการที่ 3 สามารถเขียนได้เป็น

$$\ln \eta_0^* \eta A \frac{c''}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w} + \ln r_0 \quad [13]$$

หรือ

$$\ln \eta_0^* + \ln \eta A \frac{c''}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w} + \ln r_0 \quad [14]$$

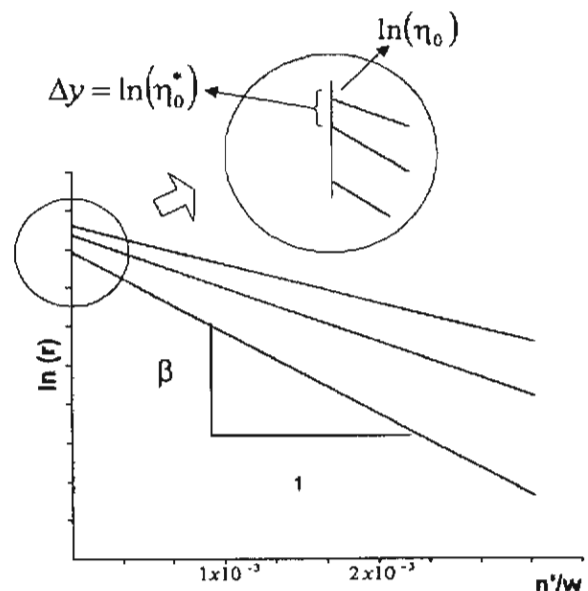
หรือ

$$\ln \eta A \frac{c''}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w} + \ln \left(\frac{r_0}{\eta_0^*} \right) \quad [15]$$

ทุกเทอมยกเว้นสมการที่ 15 ทางด้านขวามือจะเหมือนกันสมการที่ 3 ดังนั้นสมการเชิงเส้นตรงระหว่าง $\ln(r)$ และ $1/T$ ยังคงอยู่ ค่าของ η_0^* แสดงถึงการแพร่ที่ภาวะเริ่มต้นซึ่งต่างจาก η ซึ่งแสดงถึงประสิทธิภาพของอัตราการเกิดปฏิกิริยาลดลงช่วงเวลา ค่า η_0^* นี้จะคงที่สำหรับอนุภาคแต่ละชนิดแต่ η จะลดลงเรื่อยๆ เนื่องจากการเกิดซัลเฟตในอนุภาค สำหรับสมการในรูปทั่วไปของ β อาจเขียนได้ดังนี้

$$\beta = \frac{\ln r_{2 \times 10^{-3}} - \ln \left(\frac{r_0}{\eta_0^*} \right)_{0.0}}{2 \times 10^{-3}} \quad [16]$$

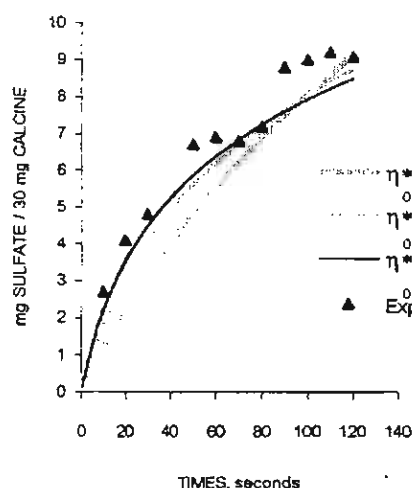
r_0 เป็นอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่สภาวะเริ่มต้น ตัวแปรนี้จะสะท้อนให้เห็นถึงอัตราการเกิดปฏิกิริยาโดยรวม $[A]$ โดยปราศจากผลของการแพร่และการดูดซับภายในอนุภาค ซึ่งได้ให้ไว้ในตารางที่ 4 ในรูปลอกาลิเทียม และกราฟแสดงค่า β ดังรูปที่ 3



รูปที่ 3 ผลของ η_0^* ต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ Sulfation loading ต่าง ๆ

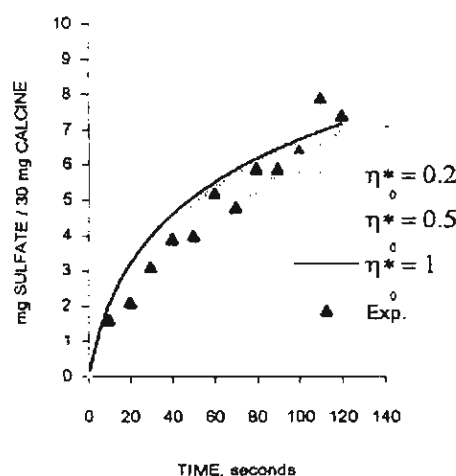
รูปที่ 4 แสดงผลของการแพร่ในช่วงการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยการเปลี่ยนค่า η_0^* จาก 1 (ตอนภาวะเริ่มต้น) ลดลงถึง 0.1

สำหรับแก๊สไฮโดรเจนต่าง ๆ กัน ข้อมูลที่ได้จากการทดลองถูกนำมาเปรียบเทียบกับผลการคำนวณ จากสมการที่ 10 ด้วยผลงานการกระตุ้นจากตารางที่ 1 r_0 และ β จากตารางที่ 4



รูปที่ 4 ผลของความต้านทานการแพร่ที่ภาวะไม่มีซิลเฟอรัของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.0096$ cm. เปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง

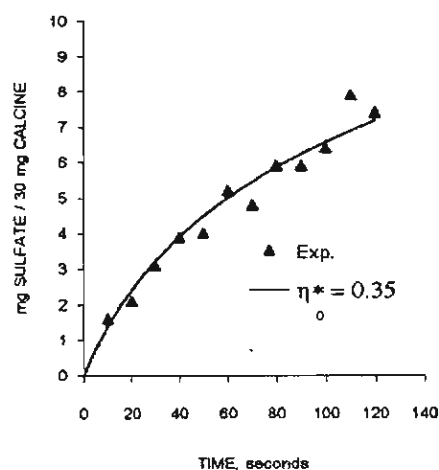
จากสมการที่ 16 พึงสังเกตว่าค่าของ β ถูกแสดงในตารางที่ 4 นั้นหาได้จากสมการที่ 12 ภายใต้สมมติฐานที่ว่าในภาวะเริ่มต้นปฏิกิริยา r_0 ไม่เปลี่ยนแปลงในอนุภาคชนิดเดียวกันที่มีขนาดต่างกัน ดังนั้น ค่าเหล่านี้จะถูกแสดงเฉพาะความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(r)$ และ ปริมาณซิลเฟต g/w ในกรณีที่ไม่ได้ผลจากการแพร่ ($\eta_0^* = 1$) ในภาวะเริ่มต้น



รูปที่ 5 ผลของความต้านทานการแพร่ที่ภาวะไม่มีซิลเฟอรัของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.025$ cm เปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง

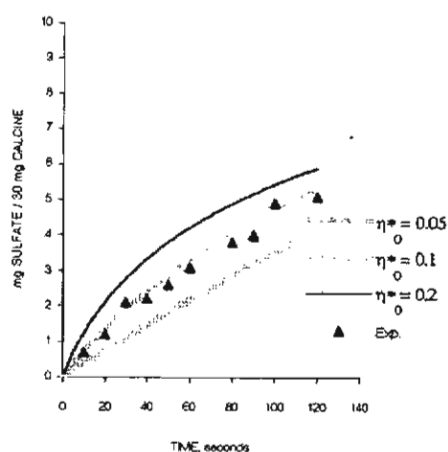
โดยทั่วไปจะสังเกตเห็นว่าผลที่ได้จะต่ำกว่าข้อมูลที่ได้จากการทดลอง การเปลี่ยนความต้านทานในการแพร่มีผลต่อการดูดซับ การลดลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่สภาวะแรก ๆ ของการเกิดปฏิกิริยาในสภาวะที่มีซิลเฟต 2×10^{-3} กรัมต่อ 1 กรัมของน้ำหนัอนุภาค อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะเท่ากับค่าที่แสดงไว้ในตารางที่ 2 ในขณะที่พจน์ที่เป็นลอคกัลที่มของอัตราการเกิดปฏิกิริยาลดลงแบบเชิงเส้นต่อการเพิ่มขึ้นของซิลเฟตจึงทำให้อัตราการลดลงนี้สำหรับกรณี $\eta_0^* < 1$ จะน้อยกว่าในกรณีที่ $\eta_0^* = 1$ เป็นผลให้เกิดปฏิกิริยาที่สูงกว่าเมื่อมีซิลเฟตมากกว่า 2×10^{-3} กรัมต่อ 1 กรัมของน้ำหนัอนุภาค การเพิ่มขึ้นของซิลเฟตในกรณี $\eta_0^* < 1$ จะมากกว่าในกรณี $\eta_0^* = 1$ หลังระยะเวลาหนึ่ง

ในรูปที่ 5 แสดงถึงสิ่งที่เกิดขึ้นในลักษณะเดียวกันในการเปลี่ยน η_0^* อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะน้อยเมื่ออนุภาคมีขนาดเล็ก ($dp = 0.0096$ เซนติเมตร) เนื่องจากขนาดของ β มีค่าน้อย ที่เวลา 0 วินาที และ $\eta_0^* = 1$ นั้น ทั้ง 2 กรณีมีอัตราการเกิดปฏิกิริยาเท่ากันหากแล้วสำหรับเวลาที่มากกว่า 0 วินาที อัตราการเกิดปฏิกิริยาสำหรับอนุภาคขนาด 0.25 เซนติเมตร จะน้อยกว่าอนุภาคขนาด 0.0096 เซนติเมตร และความแตกต่างจะเห็นได้ชัดขึ้นเมื่อเวลาเพิ่มขึ้น เนื่องมาจากการเพิ่มขึ้นของซิลเฟตดังนั้นเมื่อใช้ค่า $\eta_0^* = 0.35$ จะเป็นค่าที่ดีที่สุด ดังรูปที่ 6

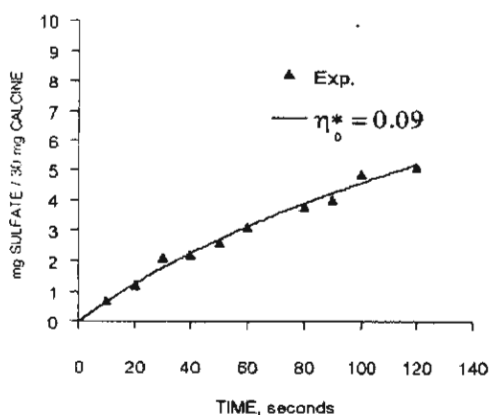


รูปที่ 6 เปรียบเทียบระหว่างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เมื่อใช้ $\eta_0^* = 0.35$ กับผลที่ได้จากการทดลองของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.025$ cm

ในขณะที่การดูดซับด้วยอนุภาคขนาด 0.13 เซนติเมตร ค่า η_0^* ที่ 0.09 เป็นค่าที่ดีที่สุด ที่ η_0^* มีค่าเป็น 0.05 จะเพิ่มความเป็นเส้นตรงเทียบกับเวลาที่ผ่านไป ซึ่งแสดงให้เห็นว่าอิทธิพลของ $\frac{n'}{w}$ มีน้อยมากที่สภาวะดังกล่าว



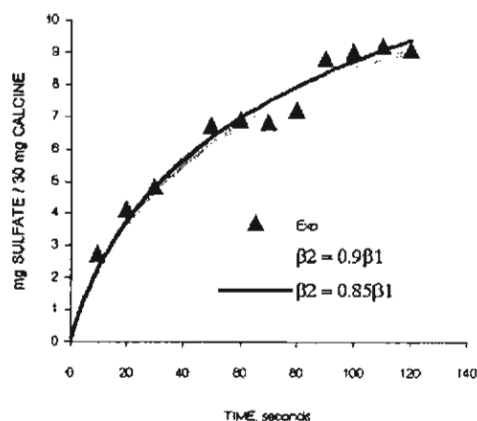
รูปที่ 7 ผลของความต้านทานการแพร่ที่ภาวะไม่มีซิลเฟอร์ของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.13$ cm เปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง



รูปที่ 8 เปรียบเทียบระหว่างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เมื่อใช้ $\eta_0^* = 0.09$ กับผลที่ได้จากการทดลองของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.13$ cm เมื่อใช้ β ต่าง ๆ กัน

สำหรับรูปที่ 7 แสดงให้เห็นถึงความแตกต่างของ η_0^* เช่นเดียวกับรูปที่ 5 แต่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.13 cm. และรูปที่ 8 เป็นค่าที่เหมาะสมของ η_0^* สำหรับอนุภาคชนิด 1351 ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.13 cm. ผลของ β ต่อการดูดซับซิลเฟอร์ไดออกไซด์แสดงได้ดังรูปที่ 9 ที่ค่าคงที่ของ $\eta_0^* = 1$ การลดลงของขนาดของ β จะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น ค่า β ที่มากขึ้นจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาลดลง สำหรับอนุภาคแต่ละชนิด แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซิลเฟอร์ไดออกไซด์ ที่มีความสัมพันธ์ระหว่างการเพิ่มขึ้นของซิลเฟอร์ไดออกไซด์ตลอดช่วงเวลาและ η_0^* รวมถึง β จะหาได้จากข้างต้น อย่างไรก็ตามปฏิกิริยาเคมีและโครงสร้างของอนุภาค

เป็นสิ่งที่แตกต่างกัน ดังนั้น η_0^* และ β ควรถูกกำหนดขึ้นสำหรับอนุภาคแต่ละชนิด



รูปที่ 9 ผลของ β ต่อการดูดซับก๊าซซิลเฟอร์ไดออกไซด์เปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการทดลอง ของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.0096$ cm

3. บทสรุป

งานวิจัยที่นำมารายงานในบทความนี้เป็นส่วนหนึ่งของการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ซึ่งยังต้องทำการพัฒนาอีกต่อไปเพื่อให้สามารถครอบคลุมช่วงของการทำปฏิกิริยาในห้องเผาไหม้อุตสาหกรรม ในขั้นนี้พอจะสรุปได้ว่า แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ได้ถูกพัฒนาขึ้นให้ผลการจำลองเป็นที่น่าสนใจสำหรับขนาดและชนิดของหินปูนที่มีผลการทดลองจากรายงานในอดีต โดยตัวแปรที่ทำการปรับแต่ง 2 ตัวคือ η_0^* และ β ซึ่งไม่ยุ่งยากในการนำไปรวมกับแบบจำลองหลักทางด้านการเผาไหม้

4. รายการสัญลักษณ์

- A = frequency factor, $\text{sec}^{-1}(\text{g.moles/cc.})^{m-1}$
- A_0 = frequency factor ในสภาวะไม่มีการทำปฏิกิริยา, $\text{sec}^{-1}(\text{g.moles/cc.})^{m-1}$
- C = ความเข้มข้นของก๊าซซิลเฟอร์ไดออกไซด์, g.moles/cc.
- C_{sw} = ความเข้มข้นของก๊าซซิลเฟอร์ไดออกไซด์ 2.9×10^{-8} g.moles/cc.
- Dp = เส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค, cm.
- E = พลังงานการกระตุ้น, cal./g.mole
- k_v = ค่าคงที่ของอัตราการเกิดปฏิกิริยาต่อหน่วยปริมาตรของของแข็ง, $\text{sec}^{-1}(\text{g.moles/cc.})^{m-1}$
- m = ลำดับความเข้มข้นของก๊าซซิลเฟอร์ไดออกไซด์
- n' = ซิลเฟอร์ใน SO_3 g.mole
- r = อัตราการเกิด SO_3 , g.moles/(g.sec)
- r_0 = อัตราการเกิด SO_3 ที่สภาวะไม่มีซิลเฟอร์, g.moles/(g.sec)
- V = ปริมาตร, cc.

w = น้ำหนัก, g.

T = อุณหภูมิ, K

T_{ref} = อุณหภูมิอ้างอิงที่ 1143K (870°C)

t = เวลา, sec

β = สัมประสิทธิ์ที่ได้จากกราฟและแสดงในตารางที่ 4

η = อัตราส่วนของอัตราการเกิดปฏิกิริยา

ρ = ความหนาแน่น, g/cc.

5. เอกสารอ้างอิง

A. Levy and E. L. Merryman. (1965). The Microstructure of Hydrogen Sulphide Flames. Combust. Flame. Vol. 9 p.229-240.

Bardakci, T. (1985). Diffusional Study of the Reaction of Sulfur Dioxide with Reactive Porous Matrices. Thermochemica Acta. Vol. 76. p. 287.

Bhatia, S.K., and D.D. perlmutter. (1981a). The Effect of Pore Structure on Fluid – Solid Reactions. I : Application to the SO₂ – lime Reaction. AIChE J. Vol. 27. p. 226.

Bhatia, S.K., and D.D. perlmutter. (1981b). A Random – Pore Model for Fluid – Solid Reactions. II : Diffusion and Transport Effects. AIChE J. Vol. 27. p. 274.

Borgwardt, R.H. (1970). Kinetics of the Reaction of SO₂ with Calcined Limestone. AIChE J. Vol. 4. p. 59.

Borgwardt, R.H., and Bruce, K.R. (1986). Effect of Specific Surface Area on the Reactivity of CaO with SO₂. AIChE J. Vol.32. p. 239.

Christman, P.G., and T. F. Edgar. (1983). Distributed Pore – Size Model for Sulfation of Limestone. AIChE J. Vol. 29. p. 388.

De Soete F.F. (1988). Fundamentals of NO Formation and Destruction (Gas phase). Course on combustion of solid fuels. IFRF, Noordwijkerhout. The Netherlands.

Georgakis, C., c.W. Chang, and J. Szekely. (1979). A Changing GrainSize Model for Gas – Solid Reactions. Chem. Eng. Sci. Vol. 34. p. 1072.

Hartman, M., and R. W. Coughlin. (1974). Reaction of Sulfur Dioxide with Limestone and the Influence of Pore Structure. Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Develop. Vol. 13. p. 248.

Hartman, M., and R. W. Coughlin. (1976). Reaction of Sulfur Dioxide with Limestone and the Grain Model. AIChE J. Vol. 22. p. 490.

Hartman, M., and R. W. Coughlin. (1978). Influence of Porosity of Calcium Carbonates on Their Reactivity with Sulfur Dioxide. Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev. Vol. 17. p. 411.

Lee, D.C., and C. Georgakis. (1981). A Single – Particle Size Model for Sulfur Retention in Fluidized Bed Coal Combustors. AIChE J. Vol.27. p. 472.

Lockwood F.C. and Jones W.P. (1993). The Mathematical Modelling of Combustion Chambers Furnaces and Fires: Prediction of NO emissions from a staged burner. Outline of Lecture notes. Vol.3. October 1993. Post Experience Course Lectures. Dept. of Mech. Eng., ICSTM, London.

Lockwood F.C., Rizvi S.M.A., Lee F.K. and Whalet K. (1994). Coal Combustion Model Validation Using Cylindrical Furnace Data. Twentieth Symposium (Int.) on Combustion. The Combustion Institute. p.513.

Magnussen B.F. and Hjertager B.H. (1976). On Mathematical Midelling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. Sixteenth Symposium (Int.) on Combustion. The Combustion Institute. p.719

Marsh, D.W., and D. L. Ulrichson. (1982). Rate and Diffusional Study of the Reaction of Calcium Oxide with Sulfur Dioxide. AIChE Ann. Meet., Los Angeles.

Newton, G. H., Chen, S. L., and Kramlich, J.C. (1989). Role of Porosity Loss in Limiting SO₂ Capture by Calcium Based Sorbents. AIChE J. Vol. 35. p.988.

Ramachandran, P.A., and J. M. Smith. (1977). A Single – Pore Model for Gas – Solid Monocatalytic Reactions. AIChE J. Vol. 23. p. 353.

Romo – Millares C.A. (1992). Mathematical Modelling of Fuel NO Emissions from PF Burners. Ph.D. Thesis. University of Lodon.

Salooja A.P. (1979). Mathematical Modelling of and experimental Studies in Axi – Symmetrical Combustors. Ph.D. Thesis. University of London.

Shan B. (1994). The Application of Second – Moment Turbulence Closures to 2D Pulverised –Coal Flames. Ph.D. Thesis. University of London.

Simons, G. A. (1982). The Pore Tree Structure of Pore Char. 19th Int. Symp. Combustion, Combustion Institute.

Simons, G.a., and Garman, A.R. (1986). Small Pore Closure and the Deactivation of the Limestone Sulfation Reaction. AIChE J. Vol. 32. p. 1491.

Sloan D.F., Smith P.F., and Smoot L.D. (1986). Modelling of Swirl in Turbulent Flow System. Progress in Energy Combustion Science. Vol.12. p.163.

Sotirchos, S. V., and H. C. Yu. (1985). Mathematical Modelling of Gas – Solid Reactions with Solid Product. Chem. Eng. Sci. Vol. 40. p. 2039.

Tetsuo KAWAMURA, (1999). Flue Gas Desulfurization Technology. Clean Coal Technology Seminar in Thailand. p. 26.

W.H. Holstead and E. Raask. (1969). The Behavior of Sulphur and Chlorine Compounds in Pulverized Coal – Fired Boilers, J. Inst. Fuel. Vol. 42 p. 344.

Zarkanitis, S., and Sotichos, S. V. (1989). Pore Structure and Particle Size Effects on Limestone Capacity for SO₂ Removal. AIChE J. Vol. 35. p. 821.

AUTHOR BIOGRAPHY

Author: Wipoo Sriseubsai

Date of Birth: February 7, 1976

Bachelor Degree: B.Eng. (Mechanical Engineering)

Institution: Faculty of Engineering

King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang

Year of Graduation: 2000

Under Graduate Research:

Development of Finite Volume Method with Fluid Flow in Circular Pipe,
1997.

Under Graduate Publication:

Charoensuk J. and Sriseubsai W. "Solution for Laminar Flow in Circular Pipe
by Finite Volume Method." National Mechanical Engineering Conference
12th. Dec.1998. pp. 159-165.

Graduate Research:

Mathematical Model for The Adsorption of Sulfur Dioxide by Calcium
Carbonate, 2000.

Graduate Publication:

Charoensuk J. and Sriseubsai W. "Mathematical Model for Sulfur Dioxide
(SO₂) Absorption by Calcine (CaO) Particle." National Mechanical
Engineering Conference 13th. Nov.1999. pp. 1-8.

Occupation: Lecturer

Department of Industrial Engineering, Faculty of Engineering

King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang

เอกสารที่ได้ตีพิมพ์

Charoensuk J. Dimension analysis of flow, combustion and heat transfer in industrial combustors. National Mechanical Engineering Conference 12th. Dec.1998.

Charoensuk J, Daungviluilux P. Application of Finite Volume for Simulation of flow in pipe with Sudden Expansion. National Mechanical Engineering Conference 12th. Dec.1998.

Charoensuk J. and Sriseubsai W. Solution for Laminar Flow in Circular Pipe by Finite Volume Method. National Mechanical Engineering Conference 12th. Dec.1998. pp. 159-165.

จารุวัตร เจริญสุข, ปัญญา แดงวิไลลักษณ์. แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการเผาไหม้ของถ่านหินผง. วิศวกรรมลาดกระบัง. ปีที่ 16. ฉบับที่ 3. 2542

Charoensuk J. and Sriseubsai W. "Mathematical Model for Sulfur Dioxide (SO_2) Absorption by Calcine (CaO) Particle." National Mechanical Engineering Conference 13th. Nov.1999. pp. 1-8.

จารุวัตร เจริญสุข, นิตินัย ปัญญาสุขกุล. การใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการหาตำแหน่งที่เหมาะสมของการพ่นแคลเซียมคาร์บอเนตเพื่อดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในห้องเผาไหม้ถ่านหินผง. วิศวกรรมลาดกระบัง. 2543

จารุวัตร เจริญสุข, สนธยา มิเถียง. การศึกษาผลกระทบของขนาดต่อเส้นทางเดินของอนุภาคแคลเซียมคาร์บอเนตในห้องเผาไหม้ถ่านหินผง. วิศวกรรมลาดกระบัง. 2543

Dimensional analysis of flow, combustion and heat transfer in industrial combustors

Jarrewat Charoensuk

Lecturer

Department of Mechanical
Engineering

King Mongkut Institute of
Technology Lardkrabang,

Charlong Krung road,
Lardkrabang District, Bangkok
10520

Dimensionless parameters, derived from governing equations of flow, combustion, mass and heat transfer encountered in industrial combustion process, are investigated. This paper identifies the process causing dissimilarity in performance of combustion system between the laboratory scale and their industrial ones, and suggests the scaling criteria to maintain the important aspects of combustion between the system of different scales.

From the analysis of turbulence and convection terms, the flow configuration of similar burner geometry is insensitive to the system scales. Discrete phase interaction and combustion, however, relate with the geometry scale in different manners from that of the flow, causing dissimilarity in overall combustion performance. The change in heat transfer characteristic is also observable. The radiation heat absorption of the gas is a function of combustion chamber volume, whereas its transfer rate is a function of the wall. The energy emitted from flame through radiation is virtually trapped by the gas molecules inside the combustion chamber and this effect increases with geometry scale.

1. Introduction

Research on new burner designs and modifications to existing burners are usually carried out in laboratory-scale model which are significantly smaller than in industrial prototype. The merit of laboratory model is that the data obtained from a well designed, small-scale combustor are always more accurate and reliable than those from industrial furnace, which are generally not equipped for detailed measurements. The small laboratory-scale plant can also be constructed economically and with a smaller factor of safety. Thus the costs of construction and development are small and so are the operating costs required for a large number of tests necessary during the development program. There are, however, difficulties in interpreting the information from the laboratory scale burner in terms of the performance of the full-scale system. This is due to the difference in the scale relation of the process involved in combustion, which require different scaling criteria to maintain similarity between them at different values of scale. Research and development on the scaling of combustion system has been directed to find the way in which the important aspects of performance of the system can be maintained while ensuring ease of scaling (i.e. Brown, 1959, Salvi and Payne, 1981, Smart et al., 1990&1992). The important aspects of combustion especially to stationary burners (Truelove and Holcombe, 1990) are,

- 1). Flame stability, such as the stability limits and turndown ranges of total throughput.
- 2). Transient performance, i.e. ignitability and responses to a change in operating conditions,

3). Combustion efficiency and emission

4). Heat loading, heat transfer characteristics and distribution of temperature.

2. Scaling the combustion system

Damköhler, 1936 has proposed a non-dimensional group to be maintained constant in the scaling of chemical reactors

$$Re = \frac{\text{inertia force}}{\text{viscous force}} \quad (1)$$

$$D_I = \frac{\text{composition change by chemical reaction}}{\text{composition change by convection}} \quad (2)$$

$$D_{II} = \frac{\text{composition change by chemical reaction}}{\text{composition change by diffusion}} \quad (3)$$

$$D_{III} = \frac{\text{heat release by chemical reaction}}{\text{heat loss by conduction}} \quad (4)$$

$$D_{IV} = \frac{\text{heat release by chemical reaction}}{\text{heat loss by convection}} \quad (5)$$

Salvi and Payne, 1981, later found additional parameter for systems in which radiation contributes significantly to the heat transfer. This is the case usually found in applications of industrial combustion.

$$D_V = \frac{\text{heat release by chemical reaction}}{\text{heat loss by convection}} \quad (6)$$

There are extensive research works on scaling after Damköhler and the change in combustion system performance has been reported, i.e. Probert and Stewart, 1955, Smart, 1992, Al-Fawaz et al., 1994 and Brown, 1959.

The study presented in this paper is aimed at identifying a group of parameters characterizing the important aspect of combustion, obtained by mean of dimensional analysis of their mathematical models. It is an alternative approach in determining the effect of scaling on combustion, further the understanding on scaling effect and provides a background leading to a recommended criterion for scaling up the combustion system.

3. Dimensional analysis of governing equation: the momentum

The relation of physical processes to scale may be obtained from the governing equation i.e. the dimensional form for the steady state equation for the well-known conservation of momentum may be written as:

$$\left[\frac{\rho U^2}{L} \right] = \left[\frac{\Delta P}{L} \right] + \left[\frac{\mu_{eff} U}{L^2} \right] + \left[\dot{m}_p U \right] + [f] \quad (7)$$

The term on the left represents the momentum per unit volume of flow and the terms on the right represent, respectively, the contribution from pressure gradient, turbulent viscosity, mass transfer rate into control volume and the net external force per unit volume, including the interaction of particles etc. The dimensionless group derived from the above equation is given below

$$1 \equiv \left[\frac{\Delta P}{\rho U^2} \right] + \left[\frac{\mu_{eff}}{\rho U L} \right] + \left[\frac{\dot{m}_p L}{\rho U} \right] + \left[\frac{f L}{\rho U^2} \right] \quad (8)$$

Where the physical meanings and analyses of the above term are given in the following sections.

3.1. Pressure coefficient, $\left[\frac{\Delta P}{\rho U^2} \right]$

Pressure coefficient term represents the ratio between hydrostatic pressure force acting on the fluid element to the inertia force of the moving fluid element in the same direction, defined as Euler number. This term is the important factor in flow aerodynamic of industrial configuration due to the large pressure gradient induced by high swirling flow, which is used to stabilize the combustion. Since this term does not relate directly to the characteristic scaling length, L , the pressure coefficient is independent of the scale of flow geometry.

However, the pressure difference is related to the dynamics of the gas flow through the equation of continuity and state. Thus, the absolute temperature as well as the mass transfer rate from discrete phases (i.e. oil droplets and coal particles) have a significant effect on the change in value of this coefficient and should be maintained constant in systems of different scale.

3.2. Effective Reynolds number, $\left[\frac{\mu_{eff}}{\rho U L} \right]$

Effective Reynolds number is the ratio between the rate of transfer of momentum due to the effective turbulent viscosity and that due to convection. It is necessary to note here that this term should not be confused with the Reynolds number, since this latter term refers to the effective viscosity which is a function of kinetic energy of turbulence and its dissipation rather than a physical property of the fluid itself. It is, nevertheless, convenient to define this group as an 'effective Reynolds number' since it identifies flow characteristics related to those in the definition of the Reynolds number. In highly turbulent flows, the effective viscosity can be taken as the eddy viscosity and the effective Reynolds number is given by

$$\left[\frac{\mu_{eff}}{\rho U L} \right] \approx \left[\frac{\mu_{ed}}{\rho U L} \right] \quad (9)$$

The turbulent kinetic energy, k , relates to the second order of the fluctuation velocity, u'' ,

$$k \propto u''^2 \quad (10)$$

Furthermore, as the order of fluctuation velocity varies in proportion to that of the mean characteristic velocity, U (Tennekes and Lumley, 1972), thus we have:

$$[k] \propto [U^2] \quad (11)$$

In the k - ϵ model of turbulence (Jones and Launder, 1972), the dissipation rate of turbulence may be expressed in terms of kinetic energy of the mean flow and the local turbulent mixing length scale (Harlow and Nakayama, 1968). The characteristic value of dissipation rate may be represented in terms of k and l , where l is the characteristic mixing length scale. Fully developed turbulence has a wide range of eddy sizes. As the largest eddies are of a size comparable with the size of the furnace in which the flow occurs (Davies, 1972), the characteristic of the integral mixing length is thus proportional to the characteristic linear dimension of the burner, L . The turbulence energy dissipation rate may therefore be given as, (Harlow and Nakayama, 1968)

$$\epsilon \propto \frac{k^{1.5}}{l} \quad (12)$$

Hence,
$$[\epsilon] \propto \left[\frac{U^3}{L} \right] \quad (13)$$

to react. It should also be noted here that the time scale of mixing, ϵ/k is of the same order as that for transport by convection. This suggests that, for the scaling of the systems in which operated under similar chemical compositions, the ratio of the rate of production or consumption to the rate of transfer by the bulk motion of the fluid is kept constant, which implies that the mass and energy release characteristics of different scales are preserved.

4.3. Coefficient of discrete phase transfer, $\left[\frac{S_{p,\phi} L}{\rho U \phi} \right]$

Coefficient of discrete phase transfer is the ratio of the exchange rate between the discrete phase per unit volume to the dilution or accumulation due to the bulk motion of fluid. The coefficient of the source term relating to the exchange between the discrete phase is more difficult to evaluate.

The effect of solid-gas exchange is however investigated in this paper and similar procedure may be carried out for that due to liquid-gas exchange. For combustion of coal this coefficient may be considered in two parts: the discrete transfer of volatiles during devolatilisation and that of products and energy due to char combustion.

4.3.1. Devolatilisation

For the model given in Anthony and Howard, 1976, the source term coefficient of mass due to devolatilisation may be written as

$$\left[\frac{S_{p,\phi_{vol}} L}{\rho U \phi_{vol}} \right] = \left[\left(K_0 \exp \left(\frac{-E}{RT} \right) \left(1 - \frac{V}{V^*} \right) \right) \frac{m_c \tau_c}{L^3} \frac{L}{\rho U \phi_{vol}} \right] \quad (31)$$

The term inside the parenthesis, $\left(\right)$ represents the volatile release rate in terms of the fraction of the total volatile content. m_c is the mass flow rate of coal, τ_c is a residence time of the particle in the gas phase. As the volatile content is in a constant ratio to the mass of the coal, the product of volatile release rate, mass flow rate of coal and residence time represent the mass release rate of volatile. The specific source term $S_{p,\phi_{vol}}$ is thus represented as a fraction of the characteristic volume of the system, L^3 .

Since devolatilisation is a function of temperature and the remaining volatile content in coal, the energy balance of the particle and its trajectory are crucial factors determining the devolatilisation rate. It is, therefore, suggested that the level of temperatures between two systems should be similar as well as the distribution of radiation intensity so that the particle in the

system will experience similar temperature histories. The above term may be re-written, where γ_{vol} is the rate of devolatilisation, as

$$\left[\frac{S_{p,\phi_{vol}} L}{\rho U \phi_{vol}} \right] = \left[\frac{\gamma_{vol} m_c \tau_c}{\rho U \phi_{vol} L^2} \right] \quad (32)$$

The nominator, $(\gamma_{vol} m_c \tau_c)$, represents the mass release due to devolatilisation and the denominator, $(\rho U \phi_{vol} L^2)$, represents the transport of volatile due to the bulk of the flow. It is evident here that this ratio concerns the mass flow rate of coal, the particle residence time of the coal particle in the gas phase, the fuel : air ratio represented by the variable ϕ_{vol} , in addition to the characteristic velocity and length scale of the gas flow in the system. Appropriate criteria are required here to adjust the product of the coal flow rate and residence time so that the release rate remains as a constant ratio with the transfer rate of volatile in the gas stream.

4.3.2. Char combustion

The mass and energy transfer rates due to the heterogeneous reaction, Field et al., 1967, may be written in dimensional form given by,

$$\left[S_{p,\phi} \right] = \left[\left(K_1 d_p^2 P X_{O_2} \right) \psi_{\phi} \frac{m_c \tau_c}{L^3} \right] \quad (33)$$

where ψ_{ϕ} is the constant representing the fraction of the specified species (i.e. products and energy) to the effective mass release. The quantities d_p , P and X_{O_2} are, respectively, the particle diameter, gas pressure and mole fraction of oxygen. K_1 is the effective reaction rate of char determined by the kinetic of char reaction and diffusion of oxygen at the present of particle. Therefore, similarities in energy balance and distribution of oxygen are important to the similarity of the reaction rate of char. The source term coefficient relating to char combustion is given by,

$$\left[\frac{S_{p,\phi} L}{\rho U L} \right] = \left[\frac{\left(K_1 d_p^2 P X_{O_2} \right) \psi_{\phi} m_c \tau_c}{\rho U \phi L^2} \right] \quad (34)$$

A similar form of expression to that of devolatilisation is obtained here. The variable ϕ represents the mass fraction of the product due to char reaction in the gas phase (carbon dioxide and enthalpy). The characteristic of mass and energy releases from char are, as with devolatilisation, related to the thermo-chemical history and trajectory of the particles and the fuel : air ratio of the system.

The above expressions (equations 32 and 34) suggest that although the coefficients relating to the discrete phase transfer are independent of scale, they are influenced by several factors and are

From the definition of the eddy viscosity given in the turbulent model, the characteristic eddy viscosity can be represented in terms of the mean velocity and characteristic length scale of the flow as;

$$[\mu_{ed}] = [\rho UL] \quad (14)$$

Thus, the effective Reynolds number for a fully developed turbulent flow is:

$$\left[\frac{\mu_{ed}}{\rho UL} \right] \quad (15)$$

This suggests that in highly turbulent flows, the ratio between convection and diffusion terms is independent of the scaling length, velocity and the type of fluid. This can be verified by isothermal scaling studies in flow geometry similar to furnaces with flow aerodynamics characterized only by the pressure coefficient and the effective Reynolds number.

3.3. Source term coefficient,

$$\left[\frac{\dot{m}_p L}{\rho U} \right] \text{ and } \left[\frac{fL}{\rho U^2} \right]$$

The former term, mass source term coefficient, is the ratio of the rate of momentum transfer due to mass efflux from other discrete phase (i.e. solid phase) to the inertia force. In pulverised coal combustion, the effect of the momentum exchange due to the mass efflux from the coal particle is regarded as negligible compared with that associated with gas convection mass flux, but the release of mass into the gas phase affects the continuity equation and may consequently alter the flow aerodynamics.

The later, force source term coefficient refers to the ratio of all external forces including drag centrifugal and Coriolis forces and wall shear stress to that of inertia. The relationships of those forces with scale may be discussed below.

3.3.1. Drag force

The momentum exchange due to particle motion in the conservation of gas momentum is mainly due to the drag force and, since the scale of the force acting on the particle is equal to that reacting on the fluid element, it may be evaluated using the following equation. (Wallis, 1969)

$$F_d = C_d \rho (A_p/2)(U_g - U_p) |U_g - U_p| \quad (16)$$

Where:

$$C_d = (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) Re/24 \quad (17)$$

U_g and U_p are, respectively, the time-average velocities of gas and coal particle, A_p is the area of cross-section of the particle, ρ , is the local gas density, C_d is the drag coefficient and Re_p is the Reynolds number referred to the particle, defined as:

$$Re_p = \frac{\rho |U_g - U_p| d_p}{\mu} \quad (18)$$

Where μ is the kinematics viscosity of the gas and d_p is the diameter of particle. In dimensionless form, the ratio of the force created due to particle motion to that due to the inertia effect may be expressed as,

$$\begin{aligned} \left[\frac{P_{d,g} L}{\rho U^2} \right] &\equiv \left[\left(F_d \frac{m_c}{M_{c, \text{single}}} \frac{\tau}{L^3} \right) \frac{L}{\rho U^2} \right] \\ &\equiv \left[\frac{C_d \rho_p d_p^2 (\Delta U_{p,g})^2 m_c \tau_c}{\rho U^2 L^2} \right] \end{aligned} \quad (19)$$

where $P_{d,g}$ is the transmitted momentum due to the drag force by the particles to the gas phase element, represented as a fraction of characteristic volume L^3 . m_c and $M_{c, \text{single}}$ are the mass flow rate of coal or oil and the mass of a single coal particle or oil droplet, respectively. τ_c is the residence time of the particle or droplet in the gas phase. $\Delta U_{p,g}$ is the velocity of particle relative to the gas. Due to the several variables involved, it is impossible to maintain this coefficient constant through any practical scaling criterion. The effect of momentum exchange due to the particle or droplet movement relative to the bulk movement of fluid on the flow aerodynamics of pulverized coal and oil combustors is, however, regarded as negligible. Nevertheless, this effect can be assessed by cold flow experiments with and without particles.

3.3.2. Centrifugal and Coriolis forces

If the systems are geometrically similar, the ratio of centrifugal force, f_c to the inertia force may be given as

$$\left[\frac{f_c L}{\rho U^2} \right] \equiv \left[\frac{\rho L U^1}{\rho U^2 L} \right] \equiv \left[\frac{U_\theta}{U} \right] \quad (20)$$

and the ratio of the Coriolis force, f_v to inertia force as

$$\left[\frac{f_v L}{\rho U^2} \right] \equiv \left[\frac{\rho L U_r U_\theta}{\rho U^2 L} \right] \equiv \left[\frac{U_r U_\theta}{U^2} \right] \quad (21)$$

Thus, one of the requirements necessary to maintain similarity of flow aerodynamics is that the ratio between the characteristic of tangential and axial velocity components should be maintained the same. This can be achieved by maintaining the same inlet swirl number at corresponding locations in the model and the prototype. Also the ratio between the radial and the mean velocity components at corresponding locations needs to be the same.

unlikely to be maintained constant with scale. Similarities in heat transfer characteristics and chemical distribution, as well as particle trajectories, are all important to the similarity of mass and energy exchange during the process of coal combustion.

4.3.3. Coefficient of source term due to radiation

Absorption of gas phase: For the energy transport equation of the gas phase, the source term from radiation heat transfer is considered in addition of the heat transfer by convection, conduction and generation from combustion. The source term coefficient due to radiative heat transfer may be evaluated from the expression below:

$$\left[\frac{S_{p,h}}{\rho U h} \right] \equiv \left[\frac{\sigma K_g (T_R^4 - T_g^4) L}{\rho U h} \right] \quad (35)$$

The gas absorption coefficient, K_g , is related to the composition of gas mixture. The radiation temperature, T_R , is a function of radiation intensity which is related to the characteristic of the sink, source and the media in the combustion. Assuming thermal similarity is achieved, the amount of radiative energy absorbed by the gas per unit volume is maintained. The rate of heat transfer per unit volume due to the bulk of the fluid flow should be maintained here in order to maintain this ratio constant.

Heat loss at a boundary: Radiation heat transfer at a wall is dominant and is regarded as the characteristic of heat loss in a PF combustion system. In systems of similar geometry (similar view factor), the scale of heat flux due to radiation at the wall is a function of the radiation temperature and the temperature of the wall.

$$[\dot{q}_b] \equiv [\sigma \varepsilon (T_R^4 - T_w^4)] \quad (36)$$

Thus, the source term due to radiation in the energy transport equation may be expressed in dimensional form as

$$[S_{rad,wall}] \equiv \left[\dot{q}_b \frac{A}{V} \right] \equiv \left[\frac{\sigma \varepsilon (T_R^4 - T_w^4)}{L} \right] \quad (37)$$

where A and V are, respectively, the surface area of the wall and the volume of the gas. The source term coefficient due to radiation heat loss at the wall may be expressed as

$$\left[\frac{S_{rad,wall} L}{\rho U \phi_h} \right] \equiv \left[\frac{\sigma \varepsilon (T_R^4 - T_w^4)}{L} \right] \quad (38)$$

The expression above represents the ratio of energy flux at the wall to that crossing the sectional area of the furnace. Maintaining this ratio constant will result in a similar percentage of heat extraction. If this requirement is satisfied throughout the domain of consideration, the distribution of temperature will be

kept similar. This requirement may be achieved in practice by modifying the arrangement of cooling system of the boundary.

5. Summary

A dimensional analysis of the governing equations was carried out in this paper. It provides an alternative approach in understanding the effect of scaling in industrial combustion systems and also identifies the parameters, which are important for maintaining similarity among combustion systems of different scales, as given in table 1. Suggestions provided here can be used to justify the predictive quality of the mathematical model and to assess the scale-up results. The credit for the study on scaling effects by means of mathematical simulation relies on a realistic representation of the results predicted by the model and its reliability over the change of scale. There is a need to compare the predictions with some reliable measurements of smaller scale combustion system from which the burner geometry is then conceptually scaled up to the size of industrial combustor.

6. References

1. Brown A.M. (1959). "Pressure-Jet Oil Burners for Boiler Use". *Journal of the Institute of Fuel*, Vol.32. p.409.
2. Salvi G. and Payne R. (1981). "Investigation into the Scaling of Combustion Systems". IFRF Doc. No. F31/a/52.
3. Smart J. P., Roberts P. A., and De Soete G. G. (1990). "The Formation of Nitrous Oxide in Large-Scale Pulverised Coal Flames". *Journal of the Institute of Energy*. Vol.63. p.131.
4. Smart J.P. (1992). "On the Effect of Burner Scale and Coal Quality on Low NO_x Burner Performance". Ph.D. Thesis. University of London.
5. Damköhler G. (1936). "Eлектроchem". Vol.42. p.846. Reprinted 1940 Vol. 46. p.601. (English Translation, N.A.C.A., Tech. Memor. 1112, 1947).
6. Truelove J.S. and Holcombe D. (1990). "Measurement and Modelling of Coal Flame Stability in a Pilot-Scale Combustor". *Twenty-Third Symposium (Int.) on Combustion*. The Combustion Institute. p.963.
7. Stewart D.G. (1955). "Scaling of Gas Turbine Combustion Systems". *Selected Combustion Problems*. Vol II. Butterworths. p.384.
8. Al-fawaz A.D., Dearden L.M., Hedley J.T., Missaghi M., Pourkashanian M., Williams A and Yap L.T. (1994). "NO_x Formation in Geometrically Scaled Gas-Fired Industrial Burners". *Twenty-Fifth Symposium (Int.) on Combustion*. The Combustion Institute. p.1027.
9. Tennekes H. and Lumley J.L. (1972). "A First Course in Turbulence". The MIT Press., Cambridge (Massachusetts), London.
10. Jones W.P. and Launder B.E. (1972). "The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence". *International Journal of Heat and Mass Transfer*. Vol.15. p.301.
11. Davis J.T. (1972). "Turbulence Phenomena". An Introduction to the Eddy Transport of Momentum, Mass and Heat, Particularly at Interfaces. Academic press. New York.
12. Harlow F.H. and Nakayama P.I. (1968). "Transport of Turbulence Energy Decay Rate". Los Alamos Scientific Laboratory, University of California, Report No. LA-3854.
13. Wallis G.B. (1969). "One-Dimensional Two-Phase Flow". Mc Graw Hill., New York.

14. Magnussen B.F. and Hjertager B.H. (1976). "On Mathematical Modelling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion". *Sixteenth Symposium (Int.) on Combustion*. The Combustion Institute. p.719.

15. Anthony D.B. and Howard J.B. (1976). "Coal Devolatilization and Hydro-gasification". *AIChE Journal*. Vol.22. p.625.

16. Field M.A., Gill D.W., Morgan B.B. and Hawksley P.G.W. (1967). "Combustion of Pulverised Coal". BCURA, Leatherhead, Surrey, England. Publisher: Cheney & Sons Ltd., Banbury, England.

Table 1 Non-dimensional terms for industrial combustion systems.

Dimensionless parameter	Similarity requirements	Remarks
$\left[\frac{\Delta P}{\rho U^2} \right]$	-Systems operated at the same temperature level. -Mass transfer from other phases is negligible, or if it is significant, should be in constant ratio to that transported by convection.	-Diminished in isothermal flow -Significant in flow with high pressure gradient.
$\left[\frac{\mu_{eff}}{\rho UL} \right]$	-Similar boundary conditions i.e. geometry.	-Independent of scale in highly turbulent flow.
$\left[\frac{\dot{m}_p L}{\rho U} \right]$	-Mass transfer from other phase is negligible, or if it is significant, should be in constant ratio to that transported by convection.	-Negligible in combustion condition.
$\left[\frac{fL}{\rho U^2} \right]$	-Momentum transfer due to drag force is in constant ratio with that due to convection. -The ratio between the tangential and axial velocity components to be maintained the same.	-Negligible in combustion condition. -This parameter relates to the inlet conditions, i.e. momentum ratio, swirl number.
$\left[\frac{\mu_{eff}}{\delta_{eff,\phi} \rho UL} \right]$	-Similar flow configuration	-Independent of scale in highly turbulent flow.
$\left[\frac{R_{v,\phi} L}{\rho U \phi} \right]$	-Similar chemical composition and the reaction rate is solely controlled by turbulent mixing.	-Independent of scale in highly turbulent flow.
$\left[\frac{S_{p,\phi} L}{\rho U \phi} \right]$	-<u>Volatile release</u>: similar particle trajectories, temperature histories and the heat balance characteristics. -<u>Char combustion</u>: similar chemical composition, e.g. fuel:air ratio, concentration of oxygen at inlets; similar particle trajectories.	-Highly restrictive, difficult to be achieved in pulverized coal combustion condition.
	-<u>Radiation</u>: the rate of radiation heat transfer per unit volume to be maintained constant with scale. -<u>Boundary heat loss</u>: the ratio of heat flux at the wall to that crossing the sectional area of the furnace is preserved with scale	-Important in industrial furnace since the effect of radiation is significant.

จารุวัตร เจริญสุข

อาจารย์

ปัญญา แดงวิไลลักษณ์

นักศึกษาปริญญาโท

ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล

คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้า

คุณทหารลาดกระบัง กรุงเทพฯ ๙

10520

การประยุกต์วิธี Finite Volume กับการจำลอง การไหลในท่อขยายอย่างฉับพลัน

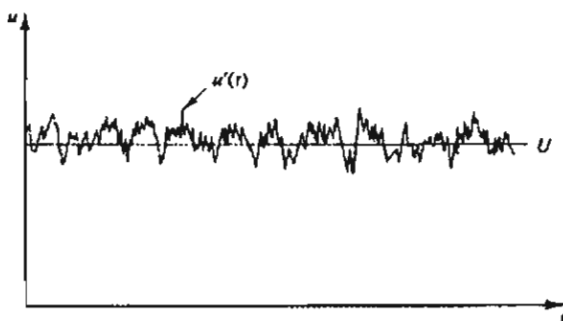
Application of Finite Volume for Simulation of flow in pipe with Sudden Expansion

ในบทความนี้เป็นการศึกษาปัญหาของของไหลภายในท่อ ซึ่งการขยายขนาดท่ออย่างฉับพลันและเป็นการไหลแบบปั่นป่วน (Turbulence) สมการ Reynolds ถูกเขียนอยู่ในรูปของปริมาณเฉลี่ยของความเร็ว, ความหนาแน่น ฯลฯ โดยเทอมที่เป็นผลของ Turbulent จะอยู่ในรูปของความหนืดประสิทธิผล (effective viscosity) แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ใช้อธิบายพฤติกรรมของ Turbulence ในงานวิจัยนี้คือ $k-\epsilon$ model วิธีหาคำตอบสมการเหล่านั้นเป็นวิธีการหาผลเฉลยโดยประมาณ เรียกว่า วิธี Finite Volume โดยพิจารณาของไหลให้เป็นปริมาตรเล็ก ๆ แล้วสร้างสมการของมวลและโมเมนตัมภายในปริมาตรเล็ก ๆ นั้น โดยวิเคราะห์ของไหลเป็นแบบอัดตัวได้ คืออากาศ อยู่ในสภาวะคงตัวและเป็น 2 มิติ เพื่อนำผลที่ได้มาเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่ได้จริง (Yoon, 1982)

This paper concerns a problem of Turbulence flow through a sudden expansion vessel. The governing Reynolds transport equation are given in terms of mean velocities and Pressure, where the effect of turbulence is represented in the form of effective viscosity. The two-equation model, namely $k-\epsilon$, is incorporated in order to describe Turbulence. These equations are discretised within a number of finite volumes and solved iteratively until a stable solution is reached. The solution is under steady 2 dimensional compressible condition, which is validated against existing experimental result. (Yoon, 1982)

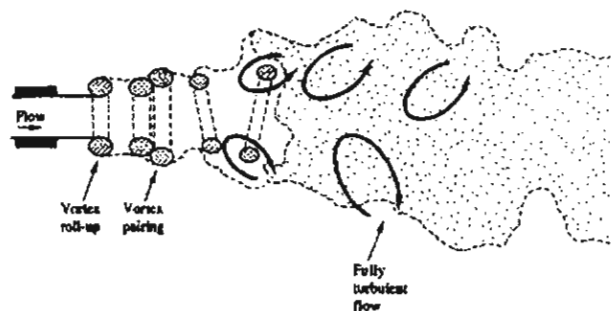
1. บทนำ

ในการศึกษาคุณสมบัติต่าง ๆ ของของไหล สามารถพิจารณาช่วงการไหลออกเป็น 2 ช่วงคือไหลแบบราบเรียบ (laminar) และการไหลแบบปั่นป่วน (turbulence) ในการไหลแบบปั่นป่วนนั้นการเคลื่อนของอนุภาคของของไหลจะยุ่งเหยิงและมีความไม่แน่นอนทั้งความเร็วและความดันเปลี่ยนแปลงตลอดเวลา ซึ่งการไหลส่วนใหญ่ทางวิศวกรรมจะเป็นการไหลในช่วงปั่นป่วน มีค่าของความเร็วที่วัดได้แสดงดังรูป 1



รูปที่ 1 ความเร็วของของไหลที่วัดได้ในการไหลแบบปั่นป่วน

ในรูปที่ 1 ความเร็วของไหลสามารถแบ่งออกเป็นค่าที่คงที่ซึ่งเป็นค่าเฉลี่ย $\bar{u}$ หรือ $\bar{u}$ และส่วนที่แกว่งไปมา คือ $u'(t)$ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของ $u(t) = \bar{u} + u'(t)$ ดังนั้นค่าคุณสมบัติของการไหลแบบปั่นป่วนจะประกอบด้วยค่าเฉลี่ยของคุณสมบัติการไหล ($\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}, \bar{p}$ etc.) และค่าของคุณสมบัติที่มีการแกว่งไปมาคือ (u', v', w', p' etc.)



รูป 2 การเปลี่ยนแปลงจาก Laminar เป็น Turbulence ในการไหลแบบ Jet

จากรูปที่ 2 ของไหลที่ออกจากหัว Jet ช่วงแรกจะเป็นการไหลแบบราบเรียบ ที่มีการหมุนของมวลที่เรียบร้อย ต่อมามีการขยายตัวก่อให้เกิดรูปร่างของมวลมีขนาดใหญ่และแรงขึ้น ระยะทางต่อมาจะเกิดการ

ยุ่งเหยิงเพราะว่าลมวนมีการเปลี่ยนแปลงและผิดรูปอย่างมาก การไหลจะกระจัดกระจายก่อให้เกิดกระแสการไหลมีขนาดเล็กจำนวนมาก และเปลี่ยนรูปร่างเร็วไปสู่การไหลแบบปั่นป่วน อย่างสมบูรณ์

2. การไหลแบบ ปั่นป่วน

ในปัจจุบันนี้คอมพิวเตอร์ได้มีบทบาทมากขึ้น ในการหาค่าของสมการที่ซับซ้อน บทความนี้เราได้ใช้คอมพิวเตอร์มาช่วยในการแก้ปัญหาทางไดนามิกของของไหลที่เป็นการไหลในรูปทรงแบบง่าย ๆ แต่เป็นการไหลแบบปั่นป่วนตามแนวแกน ซึ่งทำให้สามารถพิจารณาปัญหาเป็นแบบ 2 มิติ ในทิศทางแนวแกน Z และทิศทางแนวรัศมี r การคำนวณต้องแก้ปัญหาโดยใช้สมการ Navier-Stokes ของการไหลแบบปั่นป่วน เราพิจารณาสมการความต่อเนื่องและสมการ Navier-Stokes สำหรับการไหลอัดตัวไม่ได้ที่มีค่าความหนืดคงที่

สมการที่ใช้ในการคำนวณถูกเขียนอยู่ในพิกัดทรงกระบอกโดยพิจารณาที่แบบสมมาตร

สมการความต่อเนื่อง:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial [r \bar{\rho} \bar{v}]}{\partial r} + \frac{\partial [\bar{\rho} \bar{u}]}{\partial z} = 0 \quad 2.1$$

สมการโมเมนตัม:

ทิศทางแนวรัศมี $\bar{r}$;

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial [r \bar{\rho} \bar{v} \bar{v}]}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial [r \bar{\rho} \bar{u} \bar{v}]}{\partial z} = \\ \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) \right] \\ - \frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + S_v \end{aligned} \quad 2.2$$

เมื่อ,

$$\begin{aligned} S_v = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \\ \frac{\bar{\rho} \bar{v}^2}{r} - 2 \mu_{eff} \frac{\bar{v}}{r^2} - \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{2}{3} \bar{\rho} k \right) \end{aligned}$$

ทิศทางแนวแกน $\bar{z}$;

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial [r \bar{\rho} \bar{v} \bar{u}]}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial [r \bar{\rho} \bar{u} \bar{u}]}{\partial z} = \\ \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) \right] \\ - \frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + S_u \end{aligned} \quad 2.3$$

เมื่อ,

$$\begin{aligned} S_u = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{2}{3} \bar{\rho} k \right) \end{aligned}$$

ทิศทางแนว $\bar{\theta}$

$$\begin{aligned} \bar{\theta}; \frac{1}{r} \frac{\partial [r \bar{\rho} \bar{v} \bar{w}]}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial [r \bar{\rho} \bar{u} \bar{w}]}{\partial z} = \\ \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{w}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) \right] \\ - S_w \end{aligned} \quad 2.4$$

เมื่อ,

$$\begin{aligned} S_w = -\bar{w} \left[\frac{\bar{\rho} \bar{v}}{r} + \frac{\mu_{eff}}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mu_{eff}}{\partial r} \right] = \\ - \frac{\bar{\rho} \bar{v} \bar{w}}{r} - \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu_{eff} \frac{\bar{w}}{r} \right] \end{aligned}$$

2.2 แบบจำลองการไหลแบบปั่นป่วนในท่อกลม

สมการคณิตศาสตร์ซึ่งเป็นแบบจำลองการไหลแบบปั่นป่วนที่ใช้ในการศึกษาครั้งนี้คือ Two-equation K- ϵ model โดยพิจารณาเป็นความสัมพันธ์แบบเชิงเส้นระหว่างความเค้นเฉื่อยที่เกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเร็วเฉลี่ยต่อระยะทาง และค่าเฉลี่ยของความเค้น Reynolds stresses

$$\tau_{ij} = -\bar{\rho} \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left[\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right] - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{i,j} \quad 2.5$$

μ_t = ความหนืดปั่นป่วน

$\delta_{i,j}$ = เมตริกเอกลักษณะ

- โดยที่ $\mu_t = \frac{c_\mu \bar{\rho} k^2}{\epsilon}$

- เมื่อ $k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i}$ เป็นพลังงานจลน์ของ Turbulent ; ϵ คืออัตรา

การหายไปของพลังงานจลน์ Turbulent และ C_μ คือค่าคงที่

ใช้สูตร Reynolds Transport สมการการเคลื่อนย้าย k ได้โดย (Rodi, 1980)

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r \bar{\rho} \bar{v} k] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} [r \bar{\rho} \bar{u} k] = \\ \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial z} \right) \right] + G - \bar{\rho} \epsilon \end{aligned} \quad 2.6$$

ทำนองเดียวกันสมการการเคลื่อนย้ายของอัตราสูญหายของพลังงานปั่นป่วน [Nakayama, 1988]

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r \bar{\rho} \bar{v} \epsilon] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} [r \bar{\rho} \bar{u} \epsilon] = \\ \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \right) \right] + \\ c_1 \frac{\epsilon}{k} G - c_2 \frac{\bar{\rho} \epsilon^2}{k} \end{aligned} \quad 2.7$$

เมื่อ μ_{eff} = สัมประสิทธิ์ความหนืด ซึ่งเป็นผลรวมของความหนืดเชิง

โมเลกุลของไหลและความหนืดปั่นป่วน, $\mu_{eff} = \mu + \mu_t$

$\sigma_k = 1.00$, สัมประสิทธิ์ Prandtl number

G = อัตราการก่อให้เกิดพลังงานจลน์ของ Turbulence

$$G = -\rho \overline{u_i u_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \bar{u}_i$$

$$= \mu_t \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right] + \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\bar{w}}{r} \right) \right]^2 + \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right)^2 \right] - \frac{2}{3} \mu_t \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{v}) + \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right]^2 \right\}$$

- $C_1 = 1.44$, $C_2 = 1.92$, เป็นค่าคงที่ของแบบจำลอง

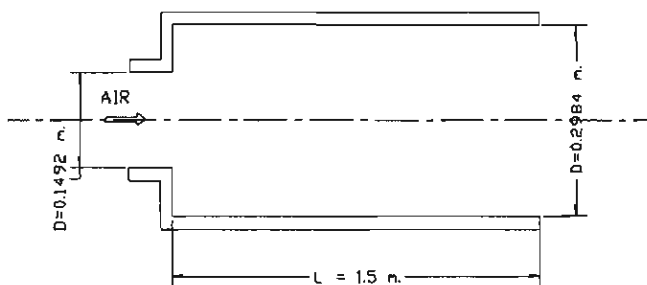
- $\sigma_\epsilon = 1.3$, สัมประสิทธิ์ Prandtl number

2.3 โครงสร้างของโปรแกรม

โปรแกรม FAFNIR ที่ใช้ในการคำนวณค่าความเร็วความดัน ฯลฯ ของการไหลแบบปั่นป่วน โดยใช้สมการ ความต่อเนื่อง, โมเมนตัม, การถ่ายเทพลังงานของ Turbulence และ อัตรา $\bar{p}$, $\bar{u}$, $\bar{v}$, $\bar{w}$, k , ϵ แต่ความดันไม่มีสมการที่เกี่ยวข้องจะรวมกับความเร็วในสมการโมเมนตัมโดยนำวิธี PISO algorithm (Pressure Implicit Split Operator) (Issa, 1986) แก่สมการโดยใช้วิธี Quick scheme (Leonard, 1979) แก่สมการโมเมนตัม เพื่อหาค่า $\bar{p}$, $\bar{u}$, $\bar{v}$, $\bar{w}$ แล้วใช้วิธี Hybrid Differencing Scheme (Spalding, 1972) แก่สมการการเคลื่อนย้ายเพื่อหาค่า k , ϵ โดยจะใช้วิธี TOMA (The tri-diagonal matrix algorithm) (Thomas, 1949) ในการแก้สมการเพื่อให้ได้คำตอบของระบบสมการ

2.4 ผลการเปรียบเทียบผลการทดลองของ Yoon กับ $k-\epsilon$ model

ในการทดสอบความแม่นยำในการคำนวณของแบบจำลองเราได้ใช้ข้อมูลของ (Yoon, 1982.) ในกรณีที่ไม่มีการเผาไหม้ ซึ่งมีรายละเอียดดังรูปที่ 3

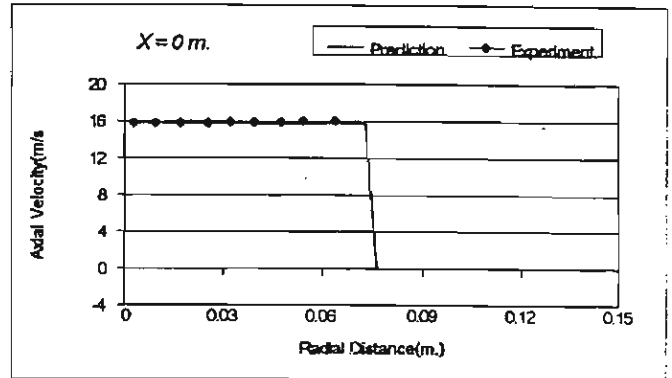


รูปที่ 3 ห้องเผาไหม้ของ Yoon (1982)

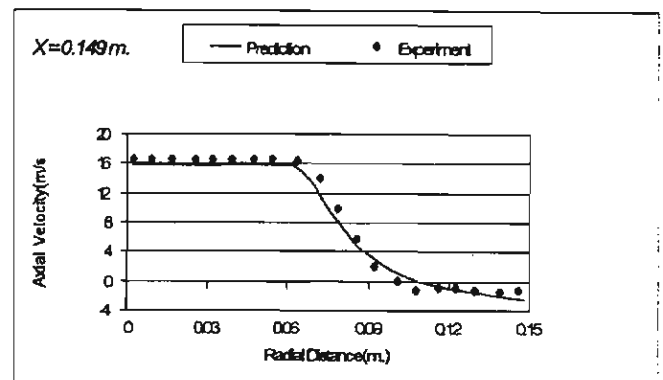
ลักษณะ ห้องเผาไหม้

ความยาวห้องเผาไหม้(m.)	1.5
เส้นผ่านศูนย์กลางห้องเผาไหม้(m.)	0.2984
เส้นผ่านศูนย์กลางทางเข้า(m.)	0.1492
คุณสมบัติทางเข้าของของไหล	อากาศ

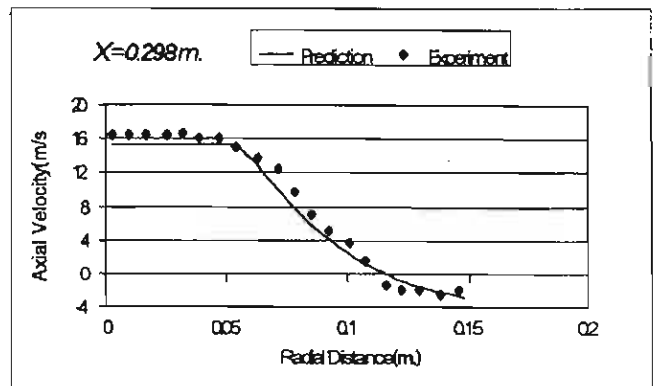
อุณหภูมิของอากาศ(k)	293.15
ความดันของอากาศ(Pa)	100125.0
ความหนาแน่นของอากาศ(kg m ⁻³)	1.19
สภาวะของของไหลทางเข้า	
อัตราการไหลของมวล(kg sec ⁻¹)	0.306
ความเร็วเฉลี่ย(m sec ⁻¹)	15.7
ค่าการเป็น turbulence(m sec ⁻¹)	0.625



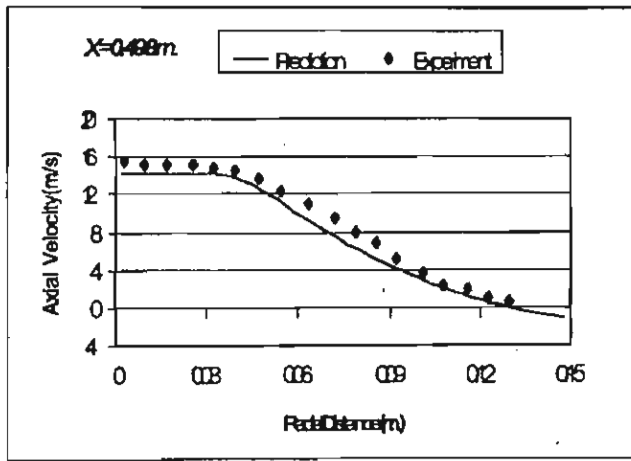
รูปที่ 4 ผลเปรียบเทียบระหว่าง $k-\epsilon$ กับผลการทดลองของ Yoon ที่ $X=0 \text{ m}$.



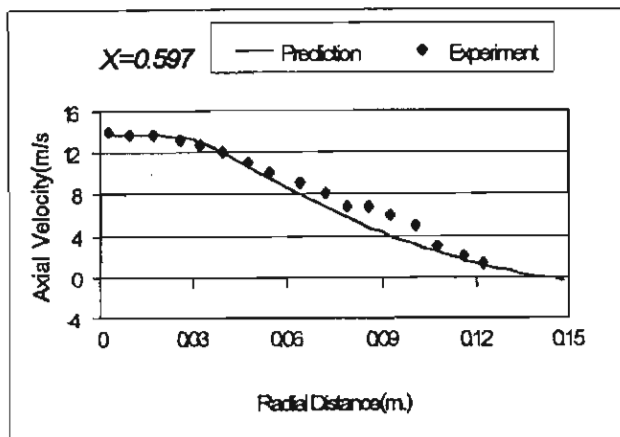
รูปที่ 5 ผลเปรียบเทียบระหว่าง $k-\epsilon$ กับผลการทดลองของ Yoon ที่ $X=0.149$



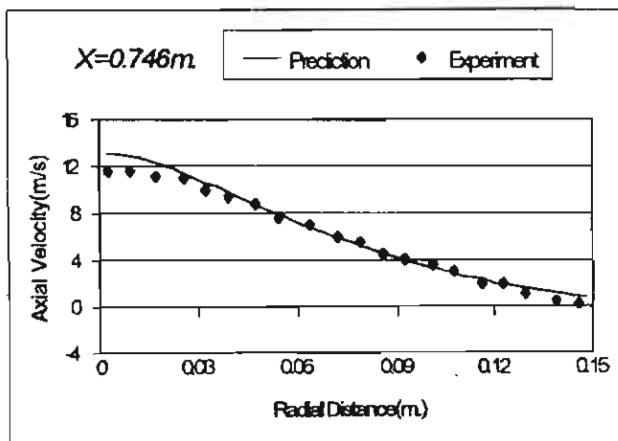
รูปที่ 6 ผลเปรียบเทียบระหว่าง $k-\epsilon$ กับผลการทดลองของ Yoon ที่ $X=0.298 \text{ m}$.



รูปที่ 7 ผลเปรียบเทียบระหว่าง $k-\epsilon$ กับผลการทดลองของ Yoon ที่ $X=0.498$ m.



รูปที่ 8 ผลเปรียบเทียบระหว่าง $k-\epsilon$ กับผลการทดลองของ Yoon ที่ $X=0.597$ m.



รูปที่ 9 ผลเปรียบเทียบระหว่าง $k-\epsilon$ กับผลการทดลองของ Yoon ที่ $X=0.746$ m.

3.1 วิเคราะห์ผลการคำนวณกับผลการทดลองของ (Yoon, 1982)

ความเร็วเฉลี่ยในแนวแกนที่ได้จากการทดลองของ (Yoon, 1982) ถูกนำมาเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการคำนวณโดยวิธี $k-\epsilon$

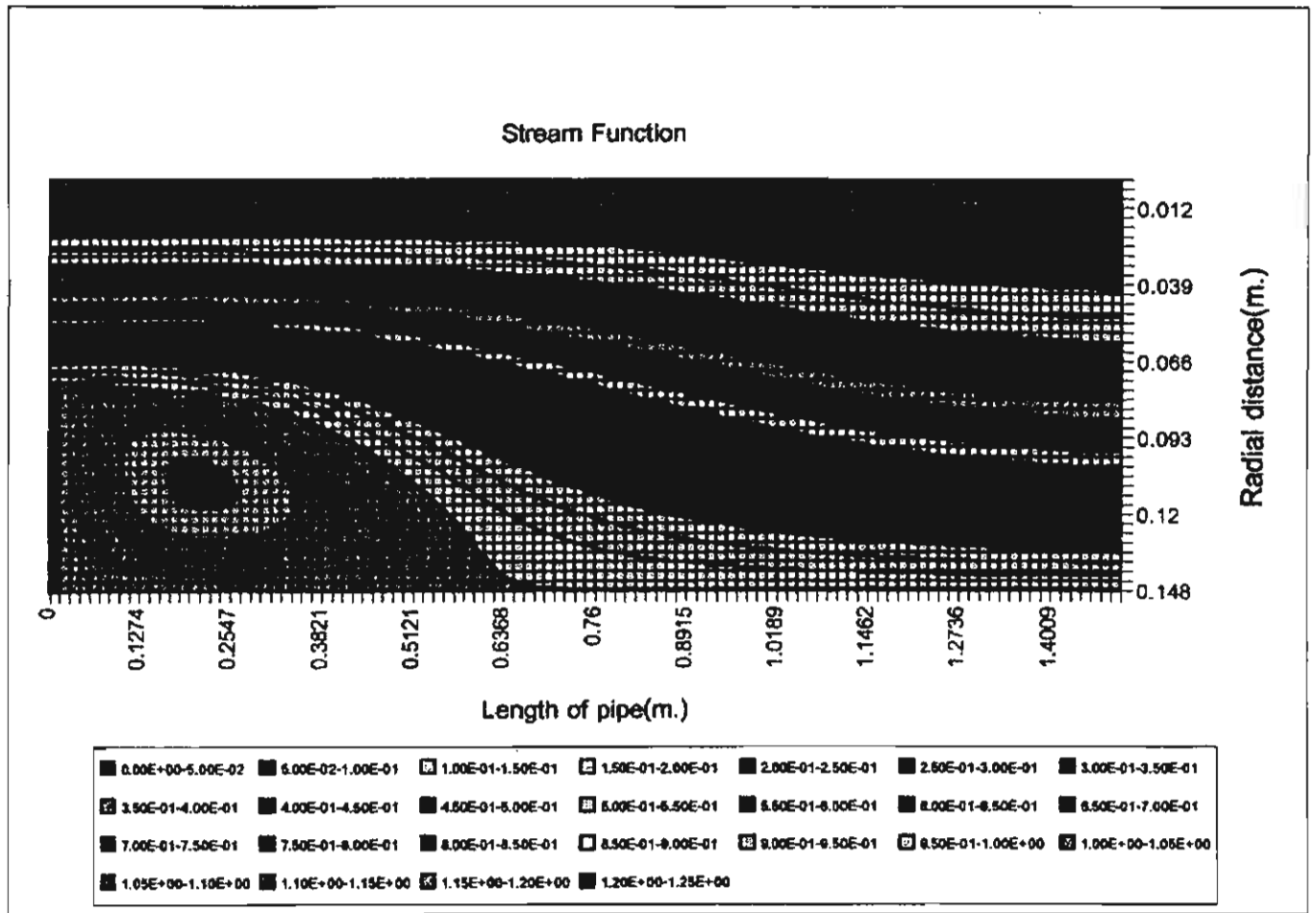
Model จะเห็นได้ว่าเส้นกราฟในรูปที่ 4 ถึง 9 มีค่าใกล้เคียงกัน ผลการคำนวณมีความคลาดเคลื่อนจากการทดลองอยู่บ้างในช่วงที่มีกระแสวนและจะใกล้เคียงมากยิ่งขึ้นเมื่อห่างจากกระแสวนออกไป การกระจายตัวของความเร็วในแนวแกนในทิศทาง r และ z ที่คำนวณได้จากแบบจำลองนี้สอดคล้องกับผลที่วัดได้เป็นอย่างดี ซึ่งเป็นข้อบ่งชี้ให้เห็นว่าค่าความหนืดประสิทธิผล นั้นสามารถใช้เป็นตัวแทนผลของ Turbulence ได้ เราสามารถสังเกตเห็นผลการคำนวณที่ต่ำกว่าผลการทดลองเล็กน้อยในตำแหน่ง $x = 0.149, 0.298$ และ 0.498 จากการวิเคราะห์ผลของ Yoon จะพบว่าเกิดความเร่งของอนุภาคของไหล ในช่วงดังกล่าวโดยความเร็วของของไหลอยู่ที่ 15.7 m/s ที่ทางเข้า หากแต่มีค่าเพิ่มขึ้นเล็กน้อยที่ $x = 0.149$ และ 0.298 จากนั้นจึงค่อย ๆ ลดลง การเพิ่มขึ้นของความเร็ว ณ บริเวณนี้อาจจะเกิดจากการขยายตัวของอากาศ เมื่อออกจากท่อที่มีความดันสูงกว่าอย่างใดก็ตามสิ่งที่สังเกตเห็นนี้ อาจเป็นความผิดพลาดของการวัดดังเช่นที่วิเคราะห์ไว้ใน (David et al. 1986)

3.2 สรุป

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของของไหลแบบปั่นป่วนที่นำมาศึกษาในครั้งนี้สามารถจำลองการกระจายของความเร็วได้เป็นที่น่าพอใจ โดยเปรียบเทียบกับค่าที่วัดได้จากการทดลอง ซึ่งเป็นการไหลอย่างง่าย ข้อสรุปที่ได้จากการทดสอบในครั้งนี้จะเป็นข้อมูลพื้นฐานสำหรับการศึกษาวิเคราะห์ผลการทำนายของแบบจำลองนี้ในปัญหาที่ซับซ้อนมากขึ้นต่อไป

REFERENCES:

1. Yoon, H.K. (1982). "Five-hole pitot probe time-mean velocity measurements in confined swirling flows". M.S. Thesis. Mechanical Engineering Department. Oklahoma State University. Stillwater. OK
2. Rodi, W. (1980). "Turbulence Models and Their Application in Hydraulics-A State of the Art Review", IAHR, Delft, The Netherlands.
3. Nakayama, Y. (1988). "Visualised flow", Pergamon Press. Oxford.
4. Leonard, B. P. (1979). "A Stable and Accurate Convective Modeling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation". *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, Vol. 19, pp. 59-98
5. Spalding, D. B. (1972). "A Novel Finite-difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivatives", *Int. J. Numer. Methods Eng.*, Vol. 4, p. 551.
6. Issa, R. I., Gosman, A. D. and Watkins, A. P. (1986). "The Computation of Compressible and Incompressible Recirculating Flows", *J. Comput. Phys.* Vol. 62, pp. 66-82.
7. Thomas, L. h. (1949). "Elliptic Problems in Linear Difference Equations over a Network", *Watson Sci. Comput. Lab. Report*, Columbia University, New York
8. David G. Sloan, Philip J. Smith and L. Douglas Smoot (1986). "Modeling of Swirl in Turbulent Flow System". *prog enerdy combust. Vol 12. pp 163-250*



รูปที่ 10 เส้นตามการของการไหลภายในท่อ

การแก้ปัญหากลไกไหลแบบราบเรียบในท่อกลม ด้วยวิธีไฟไนต์วอลุ่ม

จารุวัตร เจริญสุข

อาจารย์

วิภา ศรีสืบสาย

นักศึกษาปริญญาโท

ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล
คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้า
เจ้าคุณทหารลาดกระบัง
กรุงเทพ ฯ 10520

Solution for Laminar Flow in Circular Pipe By Finite Volume Method

บทความนี้จะศึกษาถึงสมการของการไหลในท่อกลม โดยนำวิธีวิเคราะห์เชิงตัวเลขมาประยุกต์ใช้กับสมการดังกล่าว เพื่อหาค่าของความเร็วที่จุดต่าง ๆ ซึ่งเรียกว่าวิธีไฟไนต์วอลุ่ม โดยมีข้อสมมุติ คือ เป็นการไหลคงตัวแบบหนืดที่อัดตัวไม่ได้และราบเรียบโดยที่ของไหลนั้นเป็นน้ำ ซึ่งจะไหลในท่อกลม 2 ลักษณะคือ ท่อกลมตรงและท่อกลมแบบขยายขนาดอย่างทันที

This paper concerns a study of the equation for fluid flow in the circular cylindrical and sudden expansion pipes. The numerical technique, referred to as the finite volume method is utilized for determining the solution. The solution comprises of the velocity in each nodes in the flow domain. The incompressible, steady, laminar and viscous fluid flows are assumed throughout the calculation.

1. บทนำ

ในบทความนี้จะเป็นการนำการวิเคราะห์เชิงตัวเลขที่เรียกว่าวิธีไฟไนต์วอลุ่มมาหาคำตอบของสมการคณิตศาสตร์ที่อธิบายการไหลของน้ำในท่อกลม โดยมีวัตถุประสงค์เพื่อพัฒนาความรู้ ความเข้าใจเกี่ยวกับวิธีวิเคราะห์เชิงตัวเลขวิธีนี้ให้เป็นที่รู้จักแพร่หลายมากขึ้นในประเทศไทย วิธีไฟไนต์วอลุ่มนี้เป็นวิธีหนึ่งซึ่งสามารถนำมาประยุกต์ใช้กับปัญหาทางด้านการไหลได้ แต่ยังไม่ค่อยรู้จักกันแพร่หลายนักเมื่อเทียบกับวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์และวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์

ในประเทศไทยได้มีผู้นำวิธีนี้มาช่วยในการแก้ปัญหาเกี่ยวกับการวิเคราะห์การไหลของก๊าซในห้องเผาไหม้เครื่องยนต์สันดาปภายในในรูปแบบของโปรแกรมสำเร็จ [1] ดังนั้นในการเริ่มต้นพัฒนาโปรแกรมขึ้นมาใช้เองนั้นได้นำวิธีนี้มาแก้ปัญหาเกี่ยวกับของไหลในท่อกลมและเป็นการไหลอย่างง่าย ๆ คือให้ของไหลนั้นเป็นน้ำซึ่งอัดตัวไม่ได้ โดยที่การไหลของน้ำจะเป็นแบบราบเรียบ ไม่ขึ้นกับเวลาและมีค่าความหนืดคงที่ ในขั้นต้นนี้จะทำการแก้ปัญหของสมการที่มีเงื่อนไขค่าขอบ 2 ลักษณะคือท่อกลมตรงที่ไม่มีการเปลี่ยนแปลงขนาดและท่อกลมตรงที่ขยายขนาดอย่างทันที

สำหรับการคำนวณจะพิจารณาท่อกลมออกเป็น 2 มิติ สมการที่ใช้ในการคำนวณคือสมการโมเมนตัมและสมการความต่อเนื่องเนื่องจากสมการทั้ง 2 มีพื้นฐานจากการพิจารณาของไหลเป็นปริมาตร ฉะนั้นของไหลในท่อจะถูกพิจารณาออกเป็นปริมาตรเล็ก ๆ ที่กำหนดค่าได้ เราจะเรียกว่ากริด หรือเซลล์ โดยที่ลักษณะการแบ่งจะเป็นแบบ Stagger Grid [2] และเนื่องจากการไหลมีความเร็วและความดันมาเกี่ยวข้องจึงใช้ขั้นตอน PISO [2] เพื่อหาค่าทั้งสอง ควบคู่กันและผลลัพธ์ที่ต้องการจะได้มาด้วยวิธีการทางเมตริกซ์ TDMA [2] ผลลัพธ์ที่

ได้ในที่นี้คือความเร็วของน้ำในทุก ๆ ตำแหน่งของกริด จะถูกนำไปแสดงด้วยกราฟ โดยที่แกนนอนเป็นระยะทางตามความยาวท่อ และแกนตั้งเป็นรัศมีท่อซึ่งจะแสดงให้เห็นว่า ความเร็วของน้ำที่ทางเข้าที่ไหลแบบ สม่าเสมอ ค่อย ๆ เปลี่ยนรูปร่างไปเป็นรูปพาราโบลา ซึ่งก็คือการไหลการไหลเต็มรูปแบบราบเรียบ (fully develop) และทำให้ทราบตำแหน่งของการไหลเต็มแบบราบเรียบ ส่วนในการไหลในท่อกลมที่มีการขยายขนาดอย่างทันทีนั้น นอกจากจะแสดงถึงการไหลที่ทางออกเป็นแบบการไหลเต็มแบบราบเรียบแล้วยังเห็นถึงการเกิดกระแสไหลวน เมื่อมีการขยายขนาดอย่างทันทีด้วย [3] และเพื่อตรวจสอบผลการคำนวณจะถูกนำไปเปรียบเทียบกับผลการคำนวณแบบแม่นยำด้วย [3]

2. สมการพื้นฐานและการประยุกต์สมการกับวิธีไฟไนต์วอลุ่ม

ในการหาคำตอบของการไหลของของไหลในท่อกลมจะใช้กฎทรงมวล (1ก) และสมการโมเมนตัม (1ข) ซึ่งจะอยู่ในรูปของฟังก์ชันทรงบอก สมการทั้งสอง นี้มีการพัฒนาจากสมการพื้นฐานในรูปของอินทิกรัลโดยพิจารณาของไหลในรูปของผลรวมของปริมาตรควบคุมเล็ก ๆ ที่เราสนใจ ในปัญหาการไหลในท่อกลมซึ่งมีความสมมาตรในแนวรัศมีจะไม่มีความแตกต่างของความเร็วและความดันในแนว θ จึงสมมุติให้

1. มีความสมมาตรในแนวรัศมี

2. ไม่เกิดแรงโน้มถ่วง

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho v)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho w)}{\partial \theta} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial z} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (1ก)$$

ทิศทางตามแนวรัศมี (r direction)

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial r}(\rho v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho w) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u) \right\} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \bar{S}_r$$

$$\text{โดยที่ } \bar{S}_r = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\rho w^2}{r} - 2\mu \frac{v}{r^2}$$

ทิศทางตามความยาวท่อ (z direction)

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial r}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho w) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u) \right\} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \bar{S}_z$$

(1ข)

$$\text{โดยที่ } \bar{S}_z = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

ทิศทางตามแนวเส้นรอบวง (θ direction)

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial r}(\rho w) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho w) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u) \right\} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \bar{S}_\theta$$

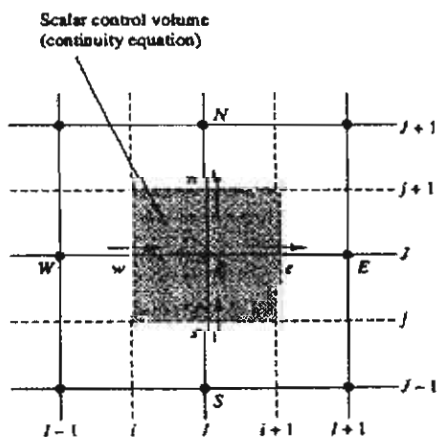
$$\text{โดยที่ } \bar{S}_\theta = -w \left(\frac{\rho v}{r} + \frac{\mu}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mu}{\partial r} \right)$$

จากสมการข้างต้นเป็นสิ่งที่เกิดขึ้นกับปริมาตรที่พิจารณา ถ้าเราให้ปริมาตรนั้นมีขอบเขตและเราจะทำการพิจารณาปริมาตรที่มีขอบเขตนั้น ในที่นี้จะพิจารณาถึงความเร็วและความดันที่เกิดขึ้น เราเรียกว่าวิธีไฟไนต์วอลุ่มโดยที่ขอบเขตที่เราพิจารณาเรียกว่า เซลล์ (Cell) สำหรับการแบ่งเซลล์จะใช้วิธีเรียกว่า Stagger Grid [2] โดยเมื่อแบ่งแล้วความเร็วที่คำนวณได้จะอยู่ที่ผิวของเซลล์ความดัน ดังรูปที่ 1 และ 2 ทั้งสี่ สมการข้างต้น จะพบว่า

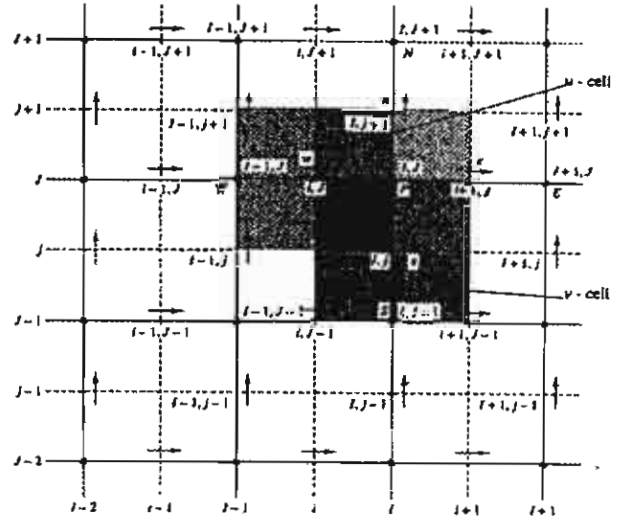
1. ในสมการโมเมนตัม ส่วน Convective term มีส่วนที่ไม่เป็นสมการเส้นตรง เช่น ρu^2

2. ทั้ง 4 สมการสัมพันธ์กันเพราะ ความเร็วเป็นส่วนประกอบของทั้ง 4 สมการ และมีส่วนของความดันที่ปรากฏอยู่ทั้งสองสมการของสมการโมเมนตัมแต่ไม่มีสมการที่เกี่ยวข้องกับความดันโดยตรง

จากปัญหาทั้งสอง เราสามารถที่จะแยกวิเคราะห์เพื่อทำการหาค่าความเร็ว และความดันโดยใช้วิธี TDMA และ PISO [2]



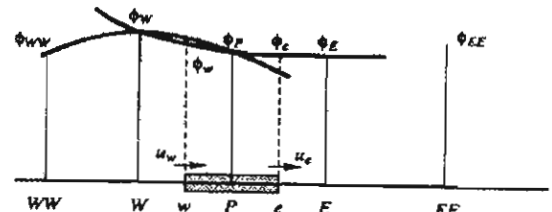
รูปที่ 1 เซลล์ของความดัน



รูปที่ 2 เซลล์ของความเร็วในทิศ z (u cell) และ r (v cell)

2.1 การประยุกต์กฎทรงมวลและสมการโมเมนตัม

จะใช้วิธีที่เรียกว่า QUICK scheme [2] ในการประมาณค่าของ ϕ ซึ่งเป็นปริมาณที่เราสนใจที่พื้นผิวขอบเขตของปริมาตรควบคุม ตัวอย่างเช่น ความเร็ว u, v, w ดังรูปที่ 3



รูปที่ 3 ตำแหน่งที่ใช้ในวิธี QUICK scheme 1 มิติ

สมการที่ใช้ในการประมาณค่า คือ

$$\phi_{face} = \frac{6}{8} \phi_{i-1} + \frac{3}{8} \phi_i - \frac{1}{8} \phi_{i-2} \quad (2)$$

$$\text{กรณีที่ } u_w > 0 \quad \phi_w = \frac{6}{8} \phi_W + \frac{3}{8} \phi_P - \frac{1}{8} \phi_{WW} \quad (3ก)$$

$$u_e > 0 \quad \phi_e = \frac{6}{8} \phi_P + \frac{3}{8} \phi_E - \frac{1}{8} \phi_w \quad (3ข)$$

เช่นกันกับ w และ v

$$w_f > 0 \quad \phi_f = \frac{6}{8} \phi_P + \frac{3}{8} \phi_F - \frac{1}{8} \phi_B \quad (3ค)$$

$$w_b > 0 \quad \phi_b = \frac{6}{8} \phi_B + \frac{3}{8} \phi_P - \frac{1}{8} \phi_{BB} \quad (3ง)$$

$$v_n > 0 \quad \phi_n = \frac{6}{8} \phi_P + \frac{3}{8} \phi_N - \frac{1}{8} \phi_S \quad (3จ)$$

$$v_s > 0 \quad \phi_s = \frac{6}{8} \phi_S + \frac{3}{8} \phi_P - \frac{1}{8} \phi_{SS} \quad (3ฉ)$$

จากสมการโมเมนตัมในพจน์ของ Convection และ Diffusion ใช้การประมาณค่าโดยวิธี QUICK scheme [2] แล้วรวมส่วนที่เป็นพจน์ของ Pressure gradient ด้วยการจัดกลุ่มสมการโมเมนตัมจะได้ผลดังนี้ สมการโมเมนตัมจะเขียนได้เป็น

ทิศทางตามแนวรัศมี (r direction)

$$a_{I,J,K} v_{I,J,K} = \sum a_{nb} v_{nb} + (p_{I,J-1,K} - p_{I,J,K}) A_{I,J,K} + b_{I,J,K}$$

ทิศทางตามความยาวท่อ (z direction)

$$a_{I,J,K} u_{I,J,K} = \sum a_{nb} u_{nb} + (p_{I-1,J,K} - p_{I,J,K}) A_{I,J} + b_{I,J,K}$$

ทิศทางตามแนวเส้นรอบวง (θ direction)

$$a_{I,J,K} w_{I,J,K} = \sum a_{nb} w_{nb} + \bar{S}_\theta \Delta V_\theta$$

2.2 ขั้นตอนการแก้ปัญหาด้วย PISO

ในการแก้ปัญหาคำนวณความเร็วและความดันควบคู่กันไปเราจะใช้ขั้นตอนที่เรียกว่า PISO [2] โดยมีขั้นตอนดังรูปที่ 4
ในขั้นตอนการคำนวณของ PISO นั้นในการคำนวณแต่ละครั้งจะเป็นการแก้ระบบสมการด้วยเมตริกซ์ ซึ่งจะใช้วิธีที่เรียกว่า TDMA [2] เพื่อให้ได้คำตอบของระบบสมการ โดยเมื่อได้สมการในแต่ละเซลล์ซึ่งจะเขียนอยู่ในรูป

$$\begin{aligned} \phi_1 &= C_1 \\ -\beta_2 \phi_1 + D_2 \phi_2 - \alpha_2 \phi_3 &= C_2 \\ -\beta_3 \phi_2 + D_3 \phi_3 - \alpha_3 \phi_4 &= C_3 \\ \vdots &\vdots \\ \phi_{n+1} &= C_{n+1} \end{aligned}$$

เราสามารถเขียนในรูปทั่วไปของสมการในแต่ละแถวได้ดังนี้

$$-\beta_j \phi_{j-1} + D_j \phi_j - \alpha_j \phi_{j+1} = C_j$$

สำหรับ ϕ_2 ถึง ϕ_n สามารถเขียนในรูปทั่วไปได้ดังนี้

$$\begin{aligned} \phi_2 &= \frac{\alpha_2}{D_2} \phi_4 + \frac{\beta_2}{D_2} \phi_1 + \frac{C_2}{D_2} \\ \phi_3 &= \frac{\alpha_3}{D_3} \phi_4 + \frac{\beta_3}{D_3} \phi_2 + \frac{C_3}{D_3} \\ \vdots &\vdots \\ \phi_n &= \frac{\alpha_n}{D_n} \phi_{n+1} + \frac{\beta_n}{D_n} \phi_{n-1} + \frac{C_n}{D_n} \end{aligned}$$

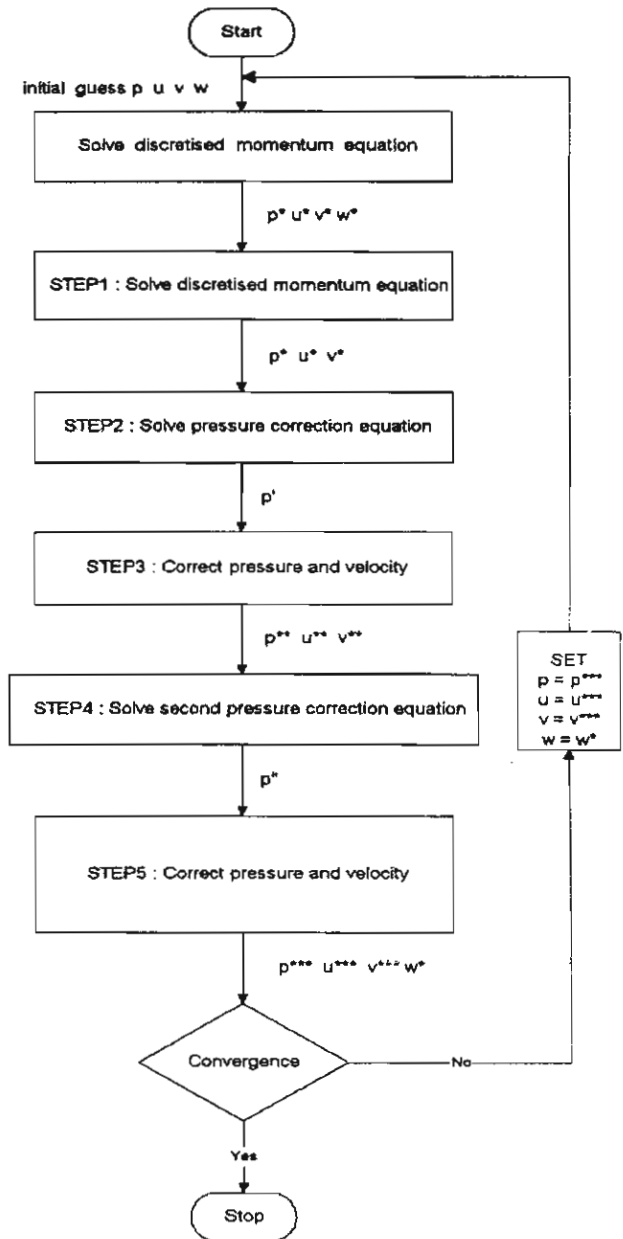
ในขั้นตอนการหาคำตอบเราจะใช้วิธีแทนค่ากลับยกตัวอย่างเช่น ในการหาค่าของ ϕ_3 เราจะใช้ค่าของ ϕ_2 มาแทนในสมการของ ϕ_3 จึงจะได้คำตอบตามต้องการ ซึ่งสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\phi_3 = A_3 \phi_4 + C'_3 \text{ โดย}$$

$$A_3 = \frac{\alpha_3}{D_3 - \beta_3 A_2} \text{ แล้ว } C'_3 = \frac{\beta_3 C'_2 + C_3}{D_3 - \beta_3 A_2}$$

เราสามารถเขียนในรูปทั่วไปดังนี้

$$\begin{aligned} \phi_j &= A_j \phi_{j+1} + C'_j \\ A_j &= \frac{\alpha_j}{D_j - \beta_j A_{j-1}} \\ C'_j &= \frac{\beta_j C'_{j-1} + C_j}{D_j - \beta_j A_{j-1}} \end{aligned}$$



รูปที่ 4 ขั้นตอนการคำนวณตามวิธี PISO

3. โปรแกรมคอมพิวเตอร์

โปรแกรมหลัก ทำหน้าที่ควบคุมการทำงานของโปรแกรม ตั้งแต่การรับค่า การคำนวณ และการแสดงผลของการคำนวณ ดังแสดงในรูปที่ 5 โปรแกรมย่อย (Subroutine) ประกอบไปด้วย

1 Subroutine DATIN ใช้ในการรับค่า ซึ่งเราสามารถกำหนดได้หรือเป็นผู้ป้อนข้อมูลเพื่อใช้ในการคำนวณ เช่นการกำหนดการใช้โปรแกรมย่อย ค่าความเร็วที่ทางเข้า ความหนาแน่นของน้ำ ขนาดท่อ ขนาดของเซลล์ที่จะใช้คำนวณ เป็นต้นซึ่งในที่นี้จะรับข้อมูลเป็นไฟล์ชื่อ SEED3

2 Subroutine DATOUT ใช้แสดงผลของการรับค่าต่าง ๆ ที่เข้ามาจากโปรแกรมย่อย DATIN เพื่อให้แน่ใจหรือสามารถได้ว่าข้อมูลที่ได้รับเข้ามานั้นถูกต้องหรือไม่ ซึ่งในที่นี้จะแสดงไว้ในรูปของไฟล์ชื่อ DATOUT

3. Subroutine INIT ใช้กำหนดค่าเริ่มต้นของตัวแปรก่อนที่จะใช้ในการคำนวณ

4. Subroutine PROPS ใช้คำนวณค่าความหนืดของของไหล

5. Subroutine CALCU ใช้ในการคำนวณความเร็ว ของของไหลในทิศตามความยาวท่อ (ทิศ Z) โดยมีขั้นตอนการคำนวณ

6. Subroutine CALCV ใช้ในการคำนวณความเร็ว ของของไหลในทิศตามรัศมีของท่อ (ทิศ R) โดยมีขั้นตอนการคำนวณ

7. Subroutine CALCW ใช้ในการคำนวณความเร็ว ของของไหลในทิศตามเส้นรอบวงของท่อ (ทิศ θ) โดยมีขั้นตอนการ

8. Subroutine CALCP ใช้เพื่อคำนวณความดันของของไหล ซึ่งขั้นตอน PISO [2] จะถูกนำมาใช้ใน subroutine นี้

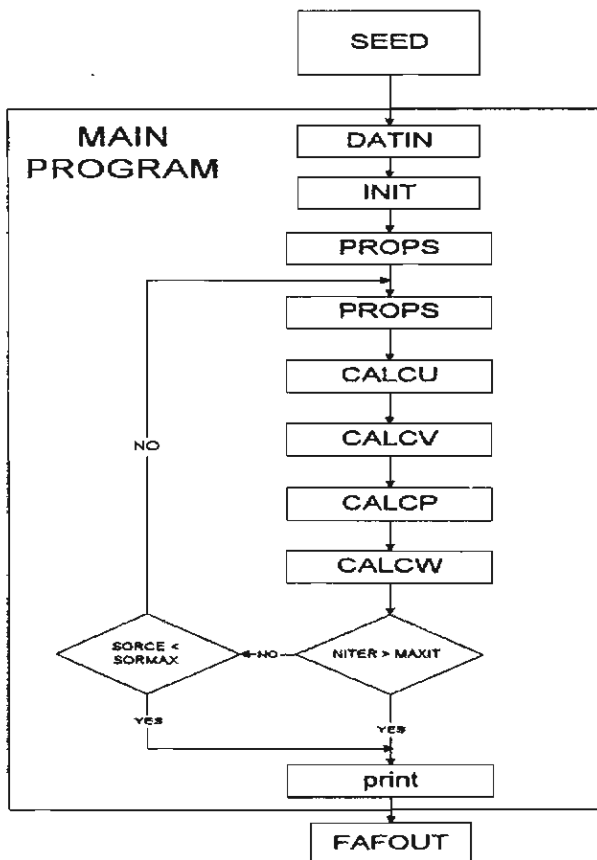
9. Subroutine SOURU ใช้ในการคำนวณตัวแปรที่เกี่ยวข้องกับ source term

10. Subroutine PROMQ ประกอบด้วย MODQU MODQV MODQW โดยจะทำการแก้ไขค่าของตัวแปรที่เกี่ยวข้องกับ source term เนื่องจากผลของผนัง

11 Subroutine PROMOD ประกอบด้วย MODU MODU1 MODV MODW MODP ใช้แก้ไขค่าของตัวแปรที่เกี่ยวข้องกับสัมประสิทธิ์ของสมการ เนื่องจากผลของ ผนังท่อ

12 Subroutine LISOLV ใช้คำนวณเพื่อแก้เมตริกซ์ TDMA

13 Subroutine PRINT ใช้แสดงค่าผลของการคำนวณในที่นี้จะแสดงผลในรูปแบบของไฟล์ (File) ชื่อ FAFOUT



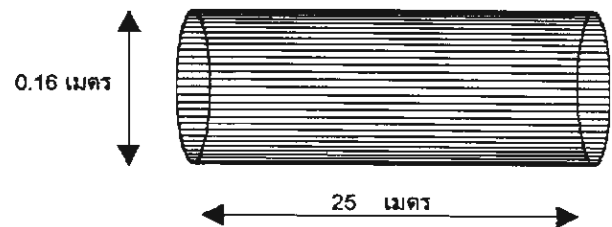
รูปที่ 5 ขั้นตอนการคำนวณ

4. ตัวอย่างผลการคำนวณ

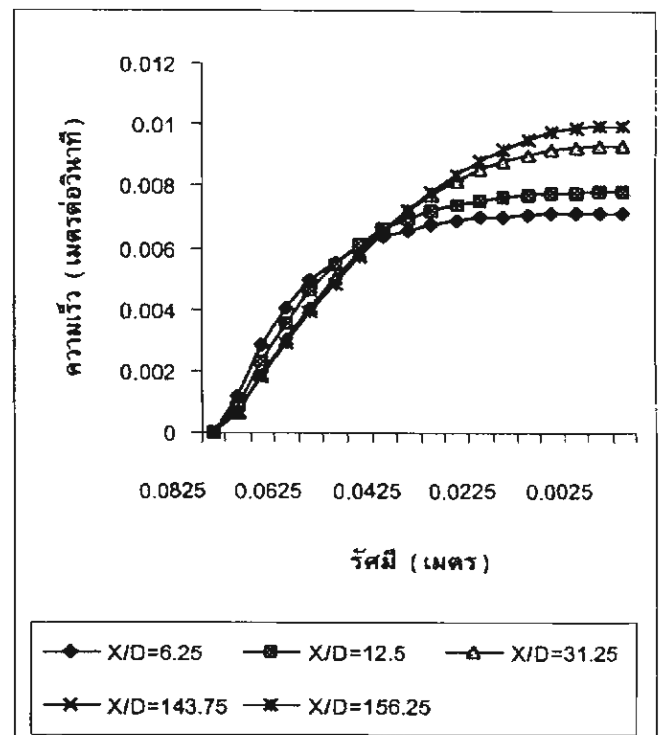
จากที่ได้กล่าวมาแล้วว่าในบทความนี้จะทำการคำนวณความเร็วของน้ำในท่อกลม 2 ลักษณะ คือ ท่อกลมตรงและท่อกลมตรงแบบขยายทันที โดยมีคุณสมบัติของน้ำคือ ความหนาแน่น 1000 kg/m^3 ค่าความหนืด $8 \times 10^{-4} \text{ Ns/m}^2$ ลักษณะของน้ำที่ไหลเข้าท่อเป็นแบบสม่ำเสมอ

4.1 ท่อกลมตรง

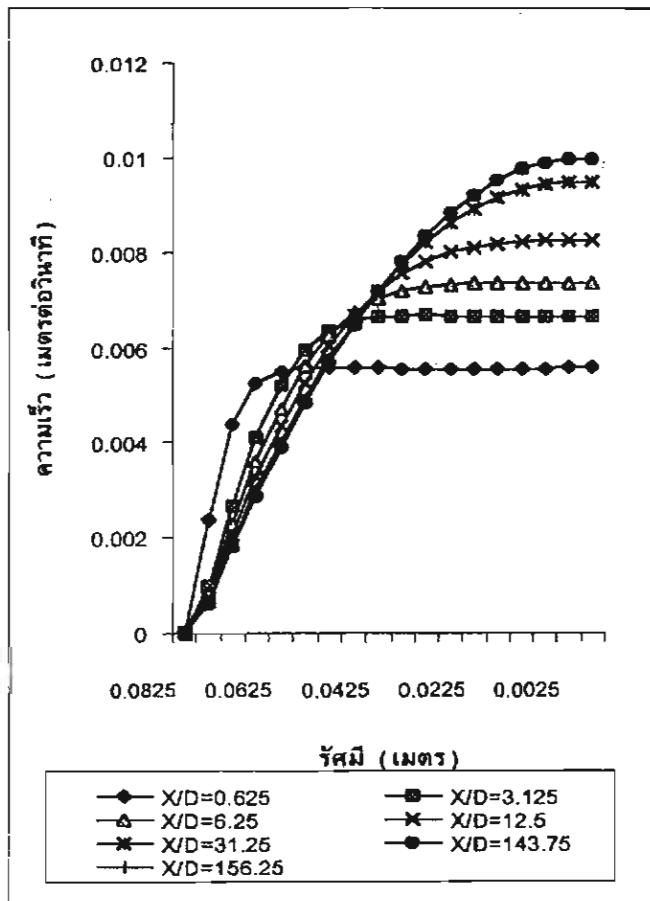
น้ำที่ไหลเข้าท่อมีความเร็ว 0.005 เมตรต่อวินาที เรโนลด์นัมเบอร์ $\left(\frac{\rho V D}{\mu} \right)$ มีค่า 1000 รัศมีท่อขนาด 0.08 เมตร ดังรูปที่ 6 จะทำการคำนวณ 2 ครั้ง โดยในครั้งแรกให้เซลล์มีขนาด 1 เมตร X 0.005 เมตร และครั้งที่ 2 ให้เซลล์มีขนาด 0.05 เมตร X 0.005 เมตร. ได้ผลการคำนวณความเร็วดังรูปที่ 7 และ 8 ตามลำดับ ซึ่งแสดงให้เห็นถึงความเร็วของน้ำที่ตำแหน่งต่าง ๆ ตามแนวความยาวของท่อเทียบกับเส้นผ่านศูนย์กลางของท่อ (X/D) โดยมีแกนตั้งเป็นแกนของความเร็วและแกนนอนเป็นแกนความยาวรัศมีของท่อ



รูปที่ 6 ลักษณะท่อกลมตรง



รูปที่ 7 ความเร็วที่หน้าตัดต่าง ๆ ของท่อกลมตรงครั้งที่ 1



รูปที่ 8 ความเร็วที่หน้าตัดต่าง ๆ ของท่อกลมตรงครั้งที่ 2

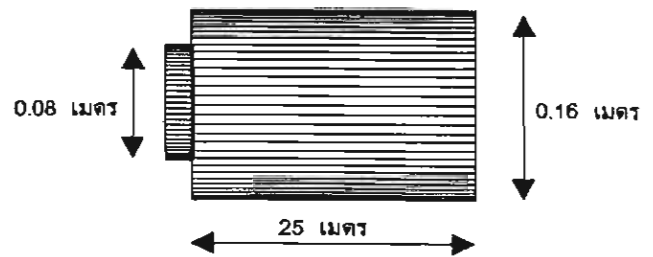
จากกราฟทั้งสอง ซึ่งจะแสดงให้เห็นถึงความสัมพันธ์ระหว่าง รัศมีของท่อ (เมตร) ในทิศแกนนอนกับความเร็ว (เมตรต่อวินาที) ในทิศแกนตั้งโดยที่แต่ละกราฟนั้นจะแสดงความเร็วที่หน้าตัดต่าง ๆ เทียบกับเส้นผ่านศูนย์กลางของท่อ พบว่าการไหลเต็มแบบราบเรียบจะเกิดขึ้นที่ตำแหน่ง (X/D) ประมาณ 143.75 ซึ่งถ้าเรานำไปเปรียบเทียบกับผลการคำนวณทางคณิตศาสตร์ [4] จะได้ (X/D) 138 ซึ่งถือว่าใกล้เคียงกัน ดังสมการที่ 4 และเหตุผลอันหนึ่งที่ทำให้ย่านตำแหน่งของการไหลเต็มแบบราบเรียบไม่ตรงกับผลการคำนวณทางคณิตศาสตร์นั้นเป็นผลจากการแบ่งเซลล์เพราะตำแหน่งที่ได้จากการคำนวณทางคณิตศาสตร์อยู่ระหว่างเซลล์ที่เราแบ่ง ดังนั้นถ้าต้องการความถูกต้องมากยิ่งขึ้นจะต้องแบ่งเซลล์ให้ละเอียดยิ่งขึ้น

$$X \approx 0.06 Re D \leq (0.06)(2300)D = 138D \quad (4)$$

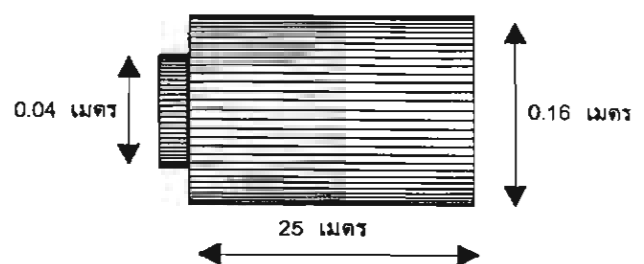
4.2 ท่อขยายขนาดอย่างทันที

จะทำการคำนวณ 3 ครั้ง สำหรับครั้งที่ 1 และ 2 จะมีคุณสมบัติของน้ำและขนาดเซลล์เหมือนกันกับการคำนวณในหัวข้อ 4.1 (ท่อกลมตรง) โดยเซลล์มีขนาด 1 เมตร X 0.005 เมตร และ 0.05 เมตร X 0.005 เมตร ตามลำดับ โดยจะแตกต่างกันที่ลักษณะท่อ ซึ่งจะมีรัศมีภายใน (d/2) ขนาด 0.04 เมตร และรัศมีภายนอก (D/2) ขนาด 0.08 เมตร และมีค่าเรโนลด์นัมเบอร์ $\left(\frac{\rho V d}{\mu}\right)$ เท่ากับ 500 ดังรูปที่ 9

ส่วนในครั้งที่ 3 นั้นจะเปลี่ยนความเร็วของน้ำไหลเข้าเป็น 0.004 เมตรต่อวินาที ซึ่งทำให้ค่าเรโนลด์นัมเบอร์ (Re) เปลี่ยนเป็น 200 ขนาดเซลล์มีขนาดเดียวกันกับการคำนวณครั้งที่ 2 รัศมีภายนอก 0.16 เมตรและรัศมีภายใน 0.02 เมตร ดังรูปที่ 10 ผลการคำนวณความเร็วที่ได้ดังรูปที่ 11-16 ตามลำดับ



รูปที่ 9 ขนาดท่อขยายขนาดอย่างทันทีที่มีรัศมีภายใน 0.04 เมตร



รูปที่ 10 ขนาดท่อขยายขนาดอย่างทันทีที่มีรัศมีภายใน 0.02 เมตร

เช่นเดียวกันกราฟรูปที่ 11, 13 และ 15 เป็นการแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง รัศมีท่อ (เมตร) ในทิศแกนนอนกับความเร็ว (เมตรต่อวินาที) ในทิศแกนตั้งโดยแสดงที่ความเร็วที่หน้าตัดต่าง ๆ เทียบกับขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางภายนอกของท่อ และสามารถประมาณการเกิดการไหลเต็มแบบราบเรียบสำหรับการไหลที่มีค่าเรโนลด์นัมเบอร์ 500 จากรูป 13 ได้ประมาณ (X/d) 62.5 และนอกจากนี้ยังได้แสดงเส้นสายธารในสนามการไหลที่เกิดขึ้นในท่อด้วยดังรูปที่ 12, 14 และ 16 ตามลำดับ มีแกนนอนเป็นรัศมี (เมตร) ของท่อ แกนตั้งเป็นความยาวของท่อเทียบกับเส้นผ่านศูนย์กลางท่อและในรูปที่ 13 และ 15 เนื่องจากการใช้เซลล์ขนาดเล็กจะสังเกตเห็นส่วนที่เกิดเป็นกระแสไหลวน (eddy) ที่เกิดจากท่อขยายขนาดอย่างทันทีด้วย

สำหรับในการคำนวณครั้งที่ 3 (Re 200) สามารถประมาณช่วงที่เกิดกระแสไหลวน l_r และตำแหน่งจุดศูนย์กลางกระแสไหลวน l_c จากรูปที่ 16 ซึ่งเมื่อเทียบการคำนวณทางคณิตศาสตร์ [3] จากสมการที่ 5 และ 6 ตามลำดับ โดยแสดงไว้ดังตารางที่ 1

	ผลการอ่านจากกราฟ (X/d)	ผลการคำนวณทางคณิตศาสตร์ (X/d)
l_r	26.25	33.24
l_c	6.0	9.69

ตารางที่ 1 เปรียบเทียบผลที่ได้จากกราฟกับผลการคำนวณ

$$\frac{L_r}{d} = \alpha Re \quad (5)$$

โดยที่ $\alpha = 0.0603(E-1) - 0.0147$ และ $E = \frac{D}{d}$

$$\frac{L_c}{d} = \beta Re \quad (6)$$

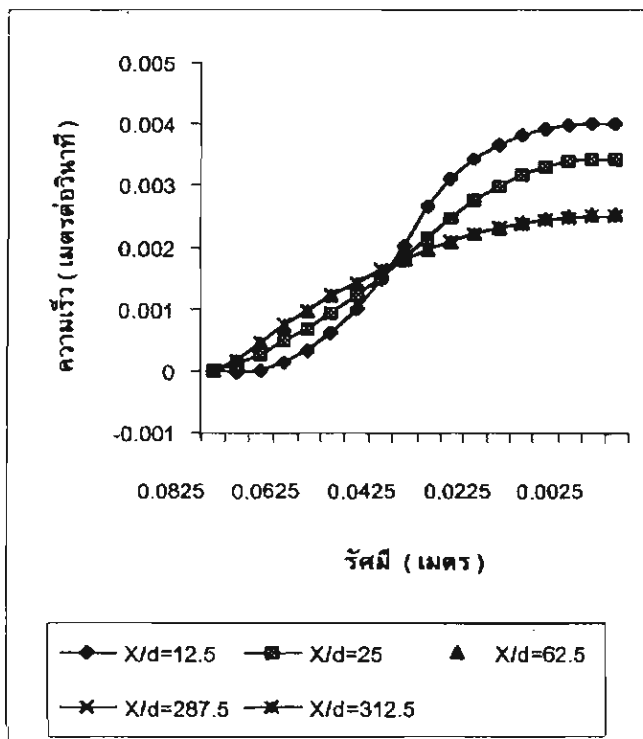
โดยที่ $\beta = a_1 \left[e^{a_2(E-1)^{a_3}} - 1 \right]$ $a_1 = 26$

$a_2 = 4 \times 10E-4$ $a_3 = 1.4$

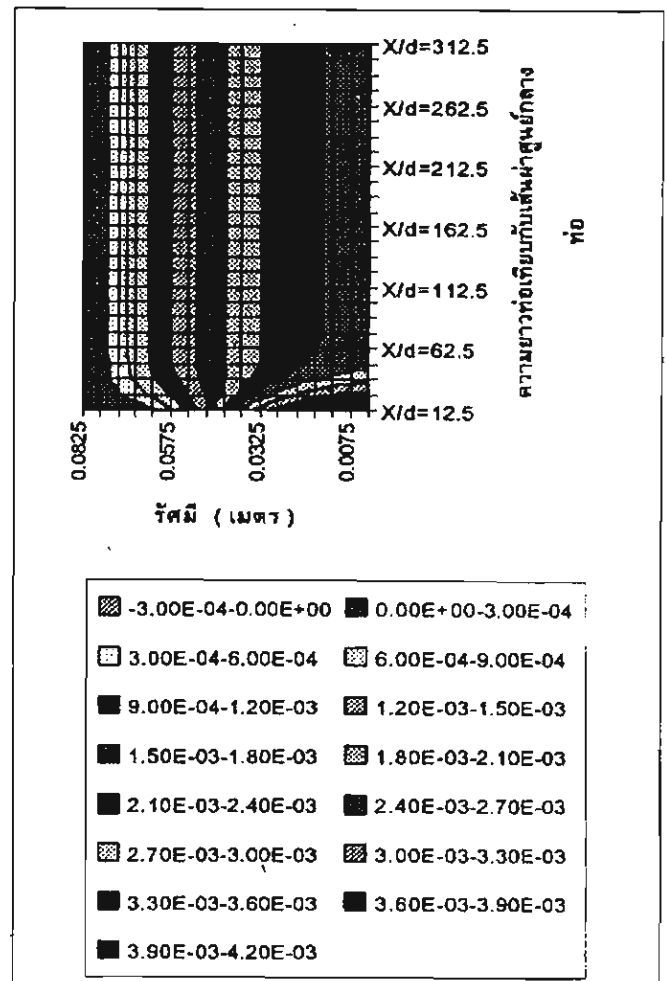
นอกจากนี้สามารถประมาณตำแหน่งที่เกิดเป็นการไหลเต็มแบบราบเรียบของการไหลที่เรโนลด์ส์มีเบอร์ 200 ได้ที่ (X/D) 50 จากกราฟรูปที่ 15 และจากกราฟรูปที่ 11 และ 13 ทำให้ทราบว่ากราฟที่แบ่งเซลล์ใหญ่หรือหยาบเกินไปจะทำให้บอกตำแหน่งของกระแสไหลวนได้ยาก ซึ่งเป็นเหตุผลเดียวกันกับการที่ค่าที่อ่านจากกราฟและการคำนวณไม่เท่ากัน

5. สรุปผลและข้อเสนอแนะ

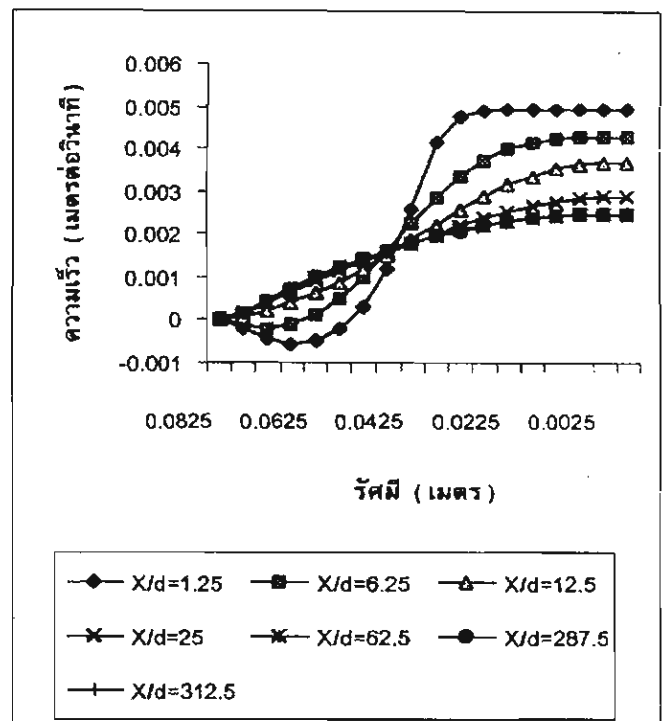
จากการใช้โปรแกรมนี้คำนวณความเร็วที่ปลายท่อจะเห็นว่ากราฟความเร็วที่ได้จะเป็นรูปครึ่งพาราโบลาซึ่งแสดงให้เห็นถึงการไหลแบบราบเรียบ (Laminar Flow) ซึ่งอยู่ในช่วงประมาณ 138 เท่าของเส้นผ่าศูนย์กลางท่อกลมตรง เป็นไปตามเอกสารอ้างอิง [4] และสำหรับท่อขยายทันทีผลการคำนวณช่วงกระแสไหลวนและจุดศูนย์กลางการไหลวนก็มีผลใกล้เคียงกับเอกสารอ้างอิง [3] ซึ่งทำให้พอจะสรุปได้ว่าโปรแกรมที่เขียนขึ้นมาสามารถนำมาใช้ในการคำนวณการไหลในท่อได้โดยค่าที่ได้มีค่าผิดพลาดไปเพียงเล็กน้อย



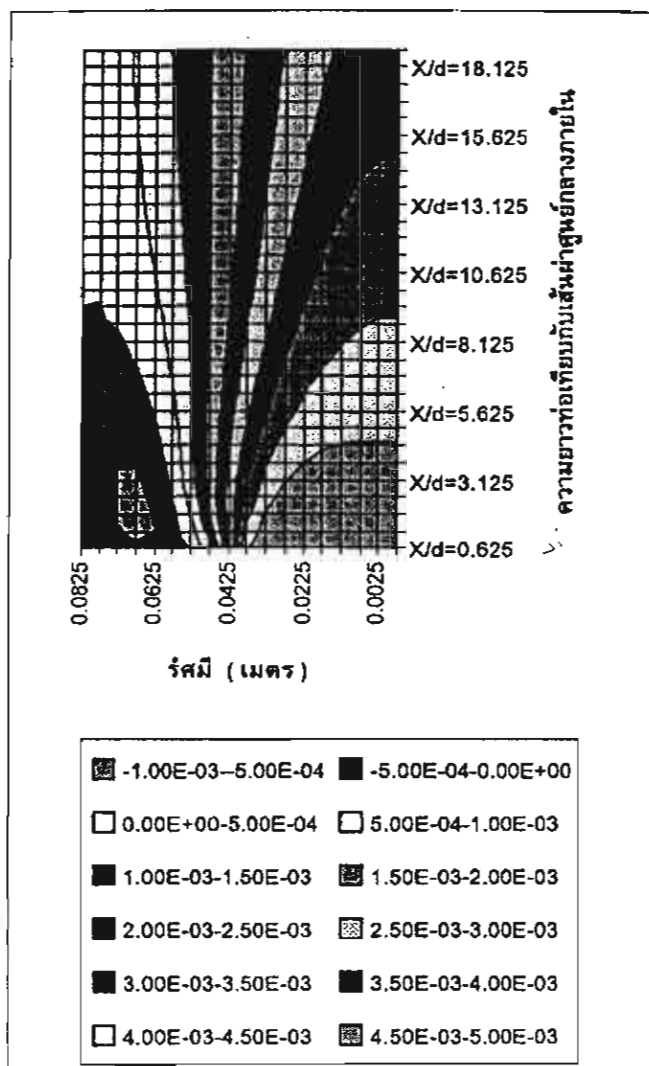
รูปที่ 11 ความเร็วที่หน้าตัดต่าง ๆ ของท่อขยายทันทีครั้งที่ 1



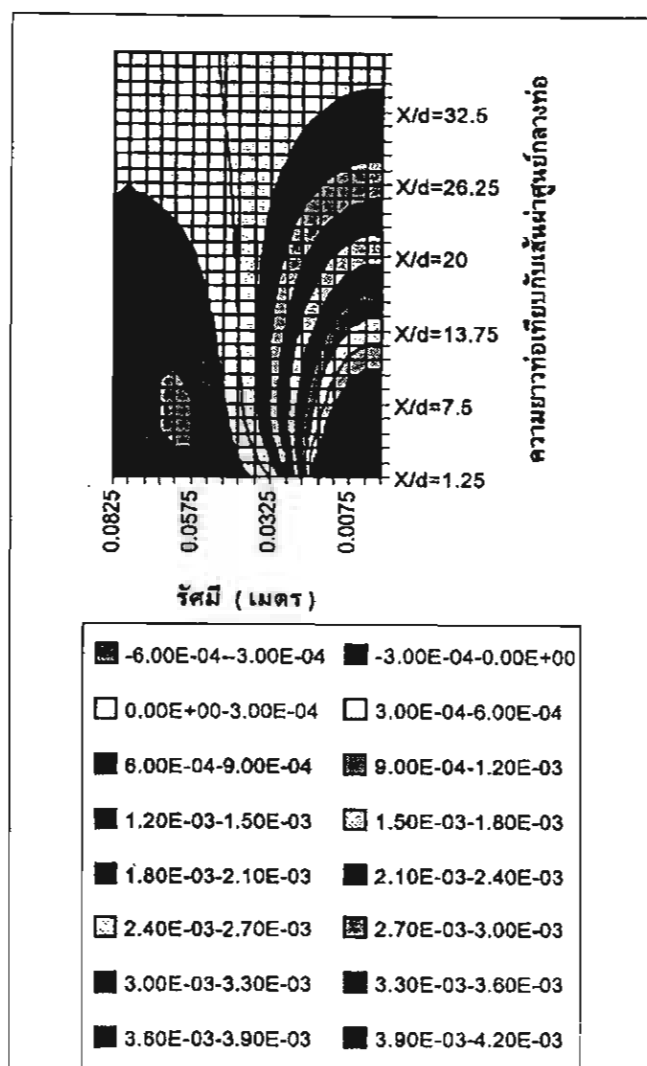
รูปที่ 12 เส้นสายธารในสนามการไหลของท่อขยายทันทีครั้งที่ 1



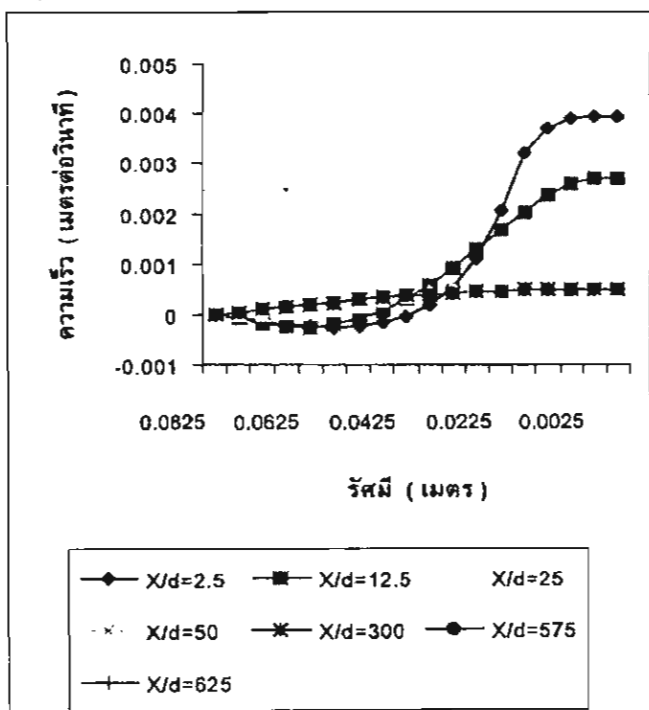
รูปที่ 13 ความเร็วที่ตำแหน่งต่าง ๆ ของท่อขยายทันทีครั้งที่ 2



รูปที่ 14 เส้นสายธารในสนามการไหลของท่อขยายทันทีครั้งที่ 2



รูปที่ 16 เส้นสายธารในสนามการไหลของท่อขยายทันทีครั้งที่ 3



รูปที่ 15 ความเร็วที่หน้าตัดต่าง ๆ ของท่อขยายทันทีครั้งที่ 3

6. เอกสารอ้างอิง

- [1] Chinda Charroenphonphanich, Makoto Otaka, Hisayuki Ennoji, Toshio Iijima.,1996, "In-Cylinder Fluid Motion and Mixing of a Dual Intake Valve Spark Ignition Engine," SAE Paper 920670
- [2] H.K. Versteeg and W. Malalasekera., 1995, *An Introduction To Computational Fluid Dynamics The Finite Volume Method* . Longman Scientific & Technical , Malasia.
- [3] D. Badekas and D. D Knight.,1992, "Eddy correlations for Laminar Axisymmetric Sudden Expansion Flows", *Journal of Fluids Engineering* , Vol 144 , pp. 119-121.
- [4] Robert W.Fox, Alan T. McDONALD.,1994, *Introduction to Fluid Mechanics*, Fourth Ed., John Wiley & Sons, Singapore.

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถัน จากการเผาไหม้ของถ่านหินผง

Mathematical Model of Sulfur Oxide Formation in Pulverized Coal Combustion

จารุวัตร เจริญสุข ปัญญา แดงวิไลลักษณ์

ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

บทคัดย่อ

บทความนี้ เสนอการศึกษาเรื่องการก่อตัวและปริมาณออกไซด์ของกำมะถัน ซึ่งเกิดจากการเผาไหม้ถ่านหินผง และสร้างแบบจำลอง โดยใช้วิธี Finite Volume โดยพิจารณาของไหลให้เป็นปริมาตรเล็กๆ และผสมผสานกับแบบจำลอง การสั่นคัปของถ่านหินผงที่ได้พัฒนาแล้ว (FAFNIR) โดย Imperial College of Science, technology and Medicine (ICSTM) ซึ่งพิจารณาสมการการถ่ายเทมวล โมเมนตัม พลังงานและการเผาไหม้ของถ่านหินผง การเผาไหม้ของแข็งและ ของเหลวในแบบจำลองนี้ได้ผสมกันทางกายภาพอย่างดีด้วยการคำนวณ ผลจากการจำลองเทียบกับผลการทดลองพบว่า เป็นที่น่าพอใจ

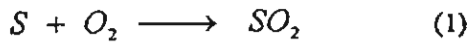
Abstract

A simplified mathematical model of Sulfur oxides formation has been proposed in this paper. The model is used in the simulation of pulverized coal combustion. A finite volume method is used, considering the problem within a small volume that interacts with others under the laws of momentum mass and heat conservation. The model is incorporated into FAFNIR which has already been developed at ICSTM. Reaction rate of Sulfur is assumed to be related to a decay rate of turbulent eddies in proportion to the reaction rate of volatile. The predicted oxygen mass fraction and temperature in the near burner zone are in good agreement with experimental data.

1. บทนำ

ถ่านหินเป็นเชื้อเพลิงชนิดหนึ่งที่ยังมีการนำมา ใช้อย่างแพร่หลายจนถึงปัจจุบัน เนื่องจากมีราคาถูกกว่า น้ำมันถ่านหินสามารถนำไปใช้ในอุตสาหกรรมอย่าง กว้างขวาง เช่น ใช้เป็นเชื้อเพลิงผลิตกระแสไฟฟ้า และ กิจกรรมอื่น ๆ การนำมาใช้ทดแทนพลังงานจากน้ำมันจึง มีปัญหาจากกำมะถัน ซึ่งก่อให้เกิดมลพิษ เป็นอันตราย ต่อสุขภาพและสิ่งแวดล้อม ถ่านหินเมื่อถูกทำให้ร้อนจะ ปลดปล่อยสารระเหย, โดยส่วนที่เหลือในรูปของแข็งคือ

คาร์บอนและขี้เถ้า สารระเหยจะเผาไหม้กับอากาศและก่อให้เกิดออกไซด์ของกำมะถัน และก๊าซอื่น ๆ แบบจำลองทาง คณิตศาสตร์นี้ได้สมมุติว่ากำมะถันในสารระเหยเมื่อเผาไหม้ ได้รวมตัวกับออกซิเจนด้วยอัตราการรวมตัวที่สัมพันธ์กับ อัตราการผสมกันของกระแสน้ำปั่นป่วน เนื่องจากอัตราทางจลน์ ศาสตร์ของปฏิกิริยาดังกล่าวสูงกว่าอัตราการผสมของ กระแส ปั่นป่วนนั่นเอง[1]และเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยสม การปฏิกิริยาตามสมการ(1)ทั้งหมด



สมมุติฐานดังกล่าวเป็นผลจากการสังเกตที่ว่าก๊าซ SO ซึ่งเกิดขึ้นในห้องเผาไหม้ มีสถานะไม่เสถียรและทำปฏิกิริยากับออกซิเจนอย่างรวดเร็ว ขณะที่ก๊าซ SO₂ นั้นถูกสร้างเพียงเล็กน้อย[11]

2. สมการพื้นฐานของปัญหา

กระบวนการที่เกิดขึ้นภายในห้องเผาไหม้อาจจะอธิบายได้ด้วยความสัมพันธ์ทางคณิตศาสตร์โดยประกอบไปด้วยกระบวนการต่าง ๆ เช่น กระบวนการทางกายภาพ เคมี และพลังงานที่ซับซ้อน จึงจำเป็นต้องเปรียบเทียบผลที่คำนวณได้กับค่าที่ได้จากการทดลอง สมการทางคณิตศาสตร์ที่ใช้อธิบายการไหลของของไหลภายในห้องเผาไหม้คือ Reynolds - averaged Equations โดยใช้อธิบายสมการอนุรักษ์มวล โมเมนตัมและพลังงานของปริมาตรควบคุม ซึ่งสามารถเขียนได้ดังนี้[4]

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = S_m \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij}) + S_u \quad (3)$$

ซึ่ง

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad \tau_{ij} = -\overline{\rho u'_i u'_j} \quad (4)$$

S_m และ S_u และ Sink หรือ Source terms ของมวลและโมเมนตัมภายในปริมาตรควบคุมเล็ก ๆ ตามลำดับ, $\bar{\tau}_{ij}$ คือค่าเฉลี่ยของ viscous stress tensor, u_i และ u_j คือ tensor ของความเร็วเฉลี่ย, ρ คือ ความหนาแน่น, μ คือ laminar viscosity, τ_{ij} คือ Reynolds stresses ซึ่งแทนการถ่ายเทโมเมนตัมเนื่องจากการกระจายของความปั่นป่วน ซึ่งเป็นตัวแปรที่สำคัญในการเผาไหม้ของถ่านหินผง สมการที่ใช้อธิบายพฤติกรรม ดังกล่าวในแบบจำลองนี้ คือ สมการ k และสมการ ϵ ซึ่งเป็นสมการอธิบายการถ่ายเทพลังงานจลน์ของ Turbulence (k) และอัตราการหายไปของพลังงานจลน์ของ Turbulence (ϵ) [8] ซึ่งอาจแทนในรูปสมการทางคณิตศาสตร์ได้ดังนี้

ไปของพลังงานจลน์ความปั่นป่วน(ϵ) [8] ซึ่งอาจแทนในรูปสมการทางคณิตศาสตร์ได้ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_e}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G - \epsilon \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \epsilon) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_e}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) \\ &+ \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1} G - C_{\epsilon 2} \rho \epsilon) \end{aligned} \quad (6)$$

ซึ่ง G แทนอัตราการสร้างพลังงานจลน์ของ Turbulent ส่วน, $\rho \epsilon$ คืออัตราการหายไปของพลังงานจลน์, G กำหนดโดย

$$G = \mu_e \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] \quad (7)$$

$$\text{และ} \quad \mu_e = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (8)$$

μ_e คือ ความหนืดปั่นป่วน, ตัวแปร C_μ , $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, σ_k และ σ_ϵ คือค่าคงที่ที่ได้จากการทดลองของสมการการถ่ายเทของพลังงานของความปั่นป่วน เงื่อนไขที่ขอบสำหรับพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนและอัตราการหายไปของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนจะแทนในสมการต่อไป โดยสมมุติว่าอัตราการก่อตัวของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วนจะเท่ากับอัตราการหายไปของมันที่บริเวณใกล้ผนัง

$$k = C_\mu^{1/2} \frac{\tau_w}{\rho} \quad \text{และ} \quad \epsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{\kappa y} \quad (9)$$

โดย κ คือค่าคงที่ Von Karman, y คือระยะห่างจากผนัง นอกจากการพิจารณาด้านอากาศพลศาสตร์แล้ว ยังพิจารณาการแพร่กระจายของอุณหภูมิและ Mass fraction ของ ออกซิเจน, คาร์บอนไดออกไซด์, ซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ฯลฯ แบบจำลองของคุณสมบัติเหล่านี้ถูกเขียนในรูปแบบสมการคณิตศาสตร์ได้ดังนี้

$$\frac{\partial(\rho u_i \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(D_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} - \overline{\rho u'_i \phi'}) \right] + S_\phi \quad (10)$$

S_s เป็นเทอม sink หรือ source ที่เกิดขึ้นในการเผาไหม้ ค่าด้านซ้ายมือของสมการเป็นผลจากการพาของคุณสมบัติที่พิจารณา(ϕ), เทอมแรกด้านขวามือเป็นผลของการแพร่ และเทอมที่สองในวงเล็บเป็น Turbulence flux ซึ่งถูกกำหนดในแบบจำลองเหมือนกับกรณีของสมการเคลื่อนย้ายของโมเมนตัม

$$-\overline{\rho u'_j \phi'} = \frac{\mu_e}{\sigma_{\phi,i}} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \quad (11)$$

μ_e คือค่า eddy viscosity ของการไหล, $\sigma_{\phi,i}$ คือค่า Schmidt หรือ Prandtl numbers ของคุณสมบัติที่พิจารณา แบบจำลองที่นำมาใช้ ได้มาจาก [6]และ[7] สำหรับการถ่ายเทโมเมนตัมและ ถ่ายเทความร้อนใกล้ผนัง ในแบบจำลองนี้ อัตราของสารระเหยที่ปล่อยออกมาถูกอธิบายในรูปของ Arrhenius function รวมกับกลุ่มของตัวแปรที่ได้จากการสังเกตจากการทดลอง เขียนสมการได้ดังนี้ [2]

$$\frac{DV}{Dt} = K(V^* - V) \quad (12)$$

ซึ่งค่า V^* คือจำนวนรวมทั้งหมดของสารระเหยในดำนหิน, V คือจำนวนเชิงสะสมของสารระเหยที่ปล่อยออกมาและ K คือค่าคงที่ กำหนดได้ดังนี้

$$K = k_0 \exp\left(-\frac{E_{vol}}{RT}\right) \quad (13)$$

K คือ ค่าสัมประสิทธิ์ของพลังงานจลน์ทางเคมี, k_0 คือค่าคงที่ของปฏิกิริยา ซึ่งแบบจำลองถูกเสนอโดย[3] ใช้อธิบายอัตราการเผาไหม้ของ Char อัตรานี้ควบคุมโดย 2 กระบวนการ คือปฏิกิริยาเนื่องจาก Kinetic rate ของ Char และการแพร่ของออกซิเจนที่พื้นผิวของอนุภาคดำนหิน

$$\frac{Dm}{Dt} = K_i \pi d^2 P X_{O_2} \quad (14)$$

K_i คือค่าสัมประสิทธิ์ของปฏิกิริยาของ Char, d คือเส้นผ่าศูนย์กลางของอนุภาค Char, P คือค่าความดันย่อยของออกซิเจนและ X_{O_2} คือค่า Mass fraction ของออกซิเจน ค่าอัตราปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นระหว่างสารระเหยกับออกซิเจน ถูกสมมุติให้มีความสัมพันธ์กับอัตราการเสื่อมสลายของ Turbulent eddies ซึ่งเปลี่ยนแปลงโดยตรงกับเวลา กับ large scale eddies โดยขึ้นอยู่กับค่า ϵ/k [14]

$$R_v = A p \frac{\epsilon}{k} \text{MIN}\left(\phi_{fuel}, \frac{\phi_{ox}}{S}, B \frac{\phi_{pr}}{1+S}\right) \quad (15)$$

R_v คือค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาของก๊าซ volatile, A และ B คือค่าคงที่ที่ได้จากการทดลอง, ϕ_{fuel} คือ Mass fraction ของ volatile, ϕ_{ox} คือ Mass fraction ของ ออกซิเจน, ϕ_{pr} คือ Mass fraction ของ ผลิตภัณฑ์ของการเผาไหม้ ซึ่งประกอบด้วย ไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ และ S คือ ปริมาณ Stoichiometric ของก๊าซ volatile

ทางเดินของอนุภาคดำนหินในห้องเผาไหม้ถูกจำลองโดยใช้วิธี Lagrangian อนุภาคดำนหินถูกปล่อยที่ทางเข้า โดยกำหนดตำแหน่งแน่นอน การกระจายขนาดของดำนหินเหล่านั้นถูกแบ่งเป็นช่วง ๆ โดยแต่ละช่วงจะแทนด้วยขนาดเฉลี่ยของช่วงนั้น ๆ

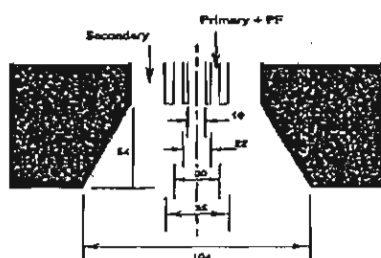
การถ่ายเทของมวล, โมเมนตัมและ พลังงานจากอนุภาคสู่ก๊าซหาค่าได้โดยใช้เทคนิคของเซลล์[10] การกระจายของอนุภาคเกิดขึ้นเนื่องจากความปั่นป่วนถูกสมมุติโดย[8]และใช้สมการอธิบายการถ่ายเทความร้อนจากการแผ่รังสีโดย[5,15] การถ่ายเทความร้อนเกิดจากการแผ่รังสีรวมกับสมการการถ่ายเทพลังงานโดยเทอมของ Source หรือ Sink

3. การจำลองการเผาไหม้ของเตาที่ใช้ดำนหินผง

3.1 ลักษณะห้องเผาไหม้

จาก[1] เตาเผาของ ICSTM มีลักษณะเป็นทรงกระบอกแนวตั้งและเปลวไฟจัดลงด้านล่าง มีเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.6 เมตร และ ความยาวรวม 3.0 เมตร เส้นผ่านศูนย์กลางของหัวเผา(d) 0.056 เมตร มีการสร้างคอนกรีตทนไฟที่บริเวณใกล้หัวเผาเพื่อป้องกันการสูญเสียความร้อน ข้อมูล

อุปกรณ์การทดลอง, คุณสมบัติของถ่านหินผง จาก[1] รูปที่ 1 เป็นโครงสร้างของหัวเผาที่ชื่อว่า Single Annular Orifice (SAO) ตารางที่ 1 เป็นเงื่อนไขต่าง ๆ ของห้องเผาไหม้โดยเตาเผาของ[1]



รูปที่ 1 โครงสร้างของหัวเผาในห้องเผาไหม้
ตารางที่ 1. เงื่อนไขห้องเผาไหม้ของเตาเผาที่(ICSTM)[12]

ห้องทดลองหัวเผา:	
อัตราการไหลของอากาศ, kg/s	2.777×10^{-4}
Swirl number	0.0
อุณหภูมิ, K	353
อัตราการป้อนถ่านหิน, kg/s	0.39×10^{-3}
ห้องวัดความเร่ง:	
อัตราการไหลของอากาศ, kg/s	8.833×10^{-3}
Swirl number	0.0
อุณหภูมิ, K	353
ห้องวัดเผาที่ห้อง:	
อัตราการไหลของอากาศ, kg/s	3.344×10^{-3}
Swirl number	1.03
อุณหภูมิ, K	573
อากาศส่วนเกิน, (%)	15
Proximate analysis:	
(% มวล)	
ถ่านหิน	35.8
Fixed carbon	53.7
ความชื้น	6.3
Ultimate Analysis:	
(% มวล)	
คาร์บอน	83.1
ไฮโดรเจน	4.35
ไนโตรเจน	1.29
ซัลเฟอร์	1.55
ออกซิเจน	9.71
Particle size distribution:	
(% มวล)	
0-10 μm .	15.0
10-25 μm .	25.0
25-40 μm .	20.0
40-75 μm .	20.0
>75 μm .	20.0
ปริมาณความร้อน (MJ/kg)	29.29

3.2 ลักษณะของโปรแกรม

การเปลี่ยนแปลงทางกายภาพ, เคมี, คุณสมบัติเกี่ยวกับความร้อนถูกพิจารณาพร้อมกันภายในปริมาตร

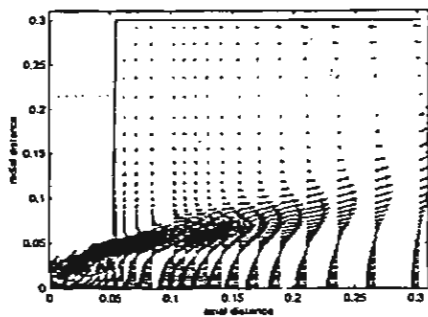
โดยกฎการอนุรักษ์มวล, โมเมนตัมและพลังงาน การเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติต่าง ๆ ของปริมาตรข้างเคียงสามารถหาได้โดยเทคนิคการประมาณค่า ของ Quadratic upstream interpolation for convection and kinematics Differencing scheme[9] และ Hybrid Differencing scheme[14] การแก้สมการที่เกี่ยวข้องด้วยการทำซ้ำจนกระทั่งเข้าหาคำตอบที่ถูกต้องโดยแบ่งปริมาตรให้ขนาดเล็กพอ เพื่อที่จะทำให้เกิดค่าผิดพลาดในการประมาณค่าน้อยจนถึงระดับที่ยอมรับได้[4]

4. ผลการคำนวณและวิเคราะห์ผล

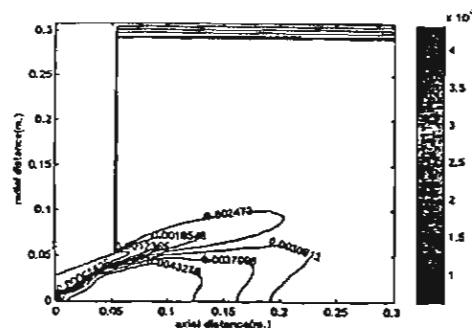
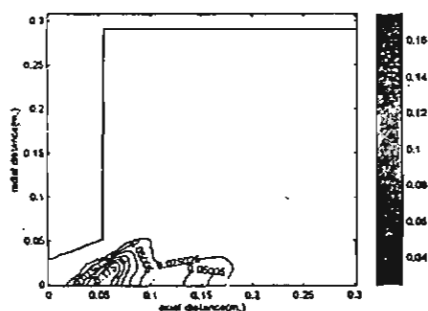
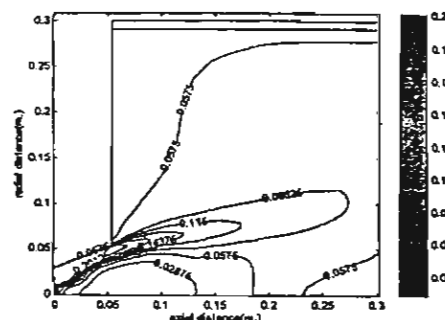
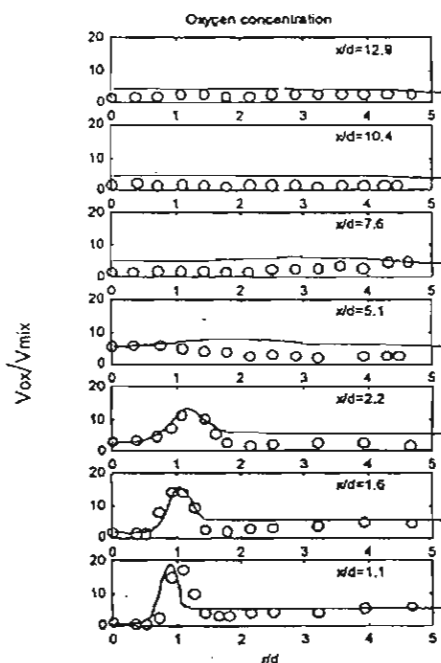
ถ้าจะถนัดในสารระเหยเมื่อเผาไหม้ได้รวมตัวกับออกซิเจนอย่างดีด้วยอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่สัมพันธ์กันกับอัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหยที่รวมตัวกับออกซิเจนทั้งนี้ขึ้นอยู่กับอากาศพลศาสตร์และแบบจำลองของการเผาไหม้ที่ถูกต้อง จากการศึกษาอัตราการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ แสดงให้เห็นว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาอยู่ในระดับเดียวกันกับปฏิกิริยาการเผาไหม้[13] ในการเผาไหม้ของถ่านหินภายในห้องเผาไหม้ที่สารตั้งต้นไม่ได้ผสมกันมาก่อนนั้นเมื่ออุณหภูมิห้องเผาไหม้สูงกว่า 1000°C อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะสูงกว่าอัตราผสมกันของสารตั้งต้นดังนั้นจึงทำปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วเมื่อผสมกัน การผสมกันแบบปั่นป่วนจึงมีอิทธิพลต่อปฏิกิริยาทั้งหมดปฏิกิริยาจะถูกควบคุมโดยอัตราการผสมของความปั่นป่วนซึ่งเป็นสมมุติฐานที่ใช้สำหรับเชื้อเพลิง และอากาศที่เข้ามาผสมกันในห้องเผาไหม้ (Non-premixed Combustion) ความสัมพันธ์พื้นฐานระหว่างอัตราการก่อตัวของซัลเฟอร์ไดออกไซด์กับอัตราการเผาไหม้ของสารระเหยคือสมการข้างล่างนี้

$$R_{\text{SO}_2} = x_s \cdot R_v \quad (16)$$

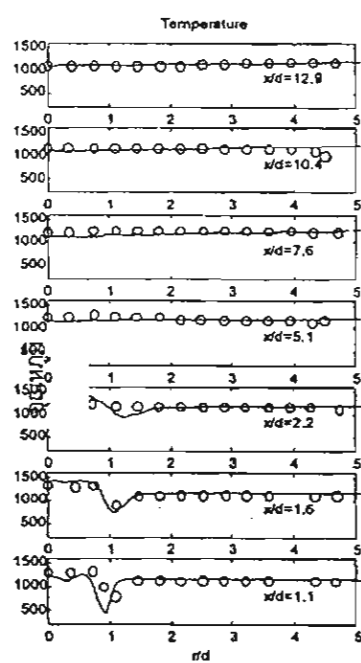
R_{SO_2} คือค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์, x_s คือ Mass fraction ของซัลเฟอร์ไดออกไซด์, R_v คืออัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหย ปริมาณค่าเริ่มต้นที่ป้อนเข้าห้องเผาไหม้เท่ากับ 9.621×10^{-6} kg/s ทางทฤษฎี SO_2 ที่ได้เท่ากับ 1.877×10^{-5} kg/s จากแบบจำลองปริมาณ SO_2 ที่ออกจากห้องเผาไหม้เท่ากับ 2.033×10^{-5} kg/s ค่าความผิดพลาดเท่ากับ 7.67%



รูปที่ 2 velocity vectors

รูปที่ 4 contour ของความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (kg_{SO_2}/kg_{mix})รูปที่ 3 contour ของความเข้มข้นของสารระเหย Volatile ($kg_{volatile}/kg_{mix}$)รูปที่ 5 contour ของความเข้มข้นของก๊าซออกซิเจน (kg_{O_2}/kg_{mix})

รูปที่ 6 เปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองของการกระจายตัวของ Oxygen Concentration

รูปที่ 7 เปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองของการกระจายตัวของอุณหภูมิ ($^{\circ}C$)

การก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นผลมาจากความร้อนและ ปริมาณความเข้มข้นของออกซิเจน, ในขณะที่เดียวกันเมื่อเกิดการเผาไหม้กำมะถัน

รวมตัวกับออกซิเจนจะคิดไฟได้ก๊าซ SO_2 พร้อมกับให้ความร้อนออกมา ดังนั้นจากรูปที่ 2 ถึง 7 สามารถอธิบายการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ได้เป็นอย่างดี จากรูปที่ 2 เราสามารถ

เห็น การไหลวนบริเวณทางออกของ burner ตามการไหลนี้กำหนดทางเดินของอนุภาคที่กำลังเข้ามาด้วยการกลับทิศทางของอนุภาคเหล่านั้นให้เข้าหาบริเวณที่กำลังเผาไหม้, ทำให้อนุภาคปลดปล่อยสารระเหย(devolatile) จากรูปที่ 3 อย่างสมบูรณ์ในบริเวณอุณหภูมิสูง จากรูปที่ 4 ออกซิเจนถูกใช้ในการเผาไหม้เกิดการผสมอย่างรุนแรงเกิดขึ้นระหว่างการไหลไปข้างหน้าของกระแสการไหลจากช่องทางเข้า (Secondary inlet) และกระแสการไหลย้อนกลับส่งผลให้เกิดการกระจายตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จากรูปที่ 5, และก๊าซอื่น ๆ ภายในห้องเผาไหม้ และได้อัตราการปลดปล่อยความร้อนสูง

รูปที่ 6 และ 7 แสดงกราฟการกระจายของความเข้มข้นของออกซิเจนและอุณหภูมิที่ได้จากการทดลองและค่าที่ได้จากการทำนายตามลำดับ, ที่ระยะทางตามแนวแกนที่วัดจากระนาบทางออกของ burner ที่แตกต่างกัน ค่าที่ได้จากการทดลองและค่าที่ได้จากการทำนายสอดคล้องกันเป็นอย่างดีโดยเฉพาะอย่างยิ่งในบริเวณใกล้ burner ซึ่งเกิดการเผาไหม้มากที่สุด ดังนั้นจึงมั่นใจได้ว่าอากาศพลศาสตร์และการเผาไหม้มีความถูกต้อง ข้อสมมุติฐานจากสมการที่ (1) บนพื้นฐานของการผสมแบบปั่นป่วนแบบจำลองนี้สามารถมั่นใจได้ระดับหนึ่งและจากการเปรียบเทียบค่าผิดพลาดจากการคำนวณกับทฤษฎีพบว่าเพียง 7.69%

5. สรุป

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้ได้นำไปใช้การจำลองการเผาไหม้ของถ่านหินผง และคุณสมบัติการถ่ายเทความร้อน ได้ผลเป็นที่น่าพอใจภายใต้ข้อสมมุติฐานข้างต้น อย่างไรก็ตามค่าที่ผิดพลาดเล็กน้อยระหว่างแบบจำลองกับการทดลองจริง สามารถสังเกตเห็นได้ สาเหตุใหญ่เนื่องมาจากอัตราการลดลงของโมเมนตัม เร็วเกินไปในทิศทางตามแนวแกน และผลเนื่องจาก Swirl ความไม่สอดคล้องนี้เกิดขึ้นในบริเวณที่ห่างจากการเผาไหม้ ซึ่งมีผลน้อยมากต่อการกระจายตัวของก๊าซต่าง ๆ ในบริเวณที่เกิดการเผาไหม้ ทำให้มีความมั่นใจมากขึ้นในการนำไปใช้และพัฒนาแบบจำลองนี้ต่อไป

6. กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบคุณ สำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) ที่ได้ให้ทุนสนับสนุนในการทำงานวิจัยครั้งนี้

7. เอกสารอ้างอิง

- [1] T. Abbas, "In-flame Measurement of N-Pollutant and Burnout in a Pulverised-Coal-Fired Furnace", Ph.D. Thesis. University of London, (1993).
- [2] D.B. Anthony, and J.B. Howard, "Coal Devolatilization and Hydrogasification", AICHE Journal, Vol.22, p.625, (1976).
- [3] M.M. Baum, "Predicting the Combustion Behaviour of Coal Particles", Combustion Science and Technology, Vol.3, p.231, (1971).
- [4] J. Charoensuk, "The Application of Mathematical Model for Scaling Pulverized coal combustors", Ph.D Thesis, University of London, (1996).
- [5] J. Gibb, "Internal note", Central Electrical Generating Board, MRM 85, See Rizvi, (1985).
- [6] J.O. Hinze, "Turbulence", Mc. Graw-Hill, (1959, 1975).
- [7] C.L.V. Jayatilleke, "The Influence of Prantl Number and Surface Roughness on the Resistance of the Laminar Sub-layer to Momentum and Heat Transfer", Progress in Heat and Mass Transfer, Vol. 1, Pergamon Press, (1969).
- [8] W.P. Jones, and B.E. Launder, "The prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence", International journal of heat and mass transfer, Vol. 15, p301, (1972).
- [9] B.P. Leonard, "A Stable and Accurate Convector Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation", Computer Methods in Applied Mechanics and engineering, Vol.19, p.59, (1979).
- [10] S.M.A. Rizvi, "Prediction of Flow Combustion and Heat Transfer in Pulverized Coal Flames", Ph.D. Thesis, University of London, (1985).
- [11] B. William, "Fossil Fuel Combustion", John Wiley & Sons, Inc. (1991).
- [12] T. Abbas, P. Costen and F.C. Lockwood, "The Influence of near Burner Region Aerodynamics on the formation and emission of Nitrogen-oxides in a Pulverized Coal-Fired Furnace", Combustion and flame, Vol.91, p.346, (1991).
- [13] A. Levy and E.L. Merryman, "The Microstructure of Hydrogen Sulphide Flames", combust and Flame, Vol.9, p.229-240, (1965).
- [14] S.V. Patankar, 'Numerical Heat Transfer and Fluid Flow', Hemisphere Publishing Corporation, (1980).

สัมนานาวิชาการวิศวกรรมเครื่องกลแห่งประเทศไทยครั้งที่ 13
2-3 ธันวาคม 2542 โรงแรม รอยัลคัลฟิเนียริสอร์ท พัทยาใต้ ชลบุรี

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยแคลเซียมออกไซด์

Mathematical Model for Sulfur Dioxide (SO_2) Absorption by Calcine (CaO) Particle

จารุวัตร เจริญสุข, วิชา ศรีสืบสาย

ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ถ.ฉลองกรุง เขตลาดกระบัง กรุงเทพฯ 10520

โทร 66(2)326-9987, โทรสาร 66(2)326-9053, E-Mail: kswipoo@kmitl.ac.th

บทคัดย่อ

บทความนี้เป็นรายงานการศึกษาและกล่าวถึงแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับปฏิกิริยาดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของแคลเซียมออกไซด์ (CaO) ซึ่งเกิดจากการแตกตัวของแคลเซียมคาร์บอเนต ผลการลดปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สร้างขึ้นจะถูกต้องและเปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง ทั้งยังแสดงถึงผลของการเปลี่ยนแปลงขนาดแคลเซียมออกไซด์ (CaO) ต่อการดูดซับปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์สำหรับเทคนิคที่ใช้แก้ปัญหาจะใช้วิธีวิเคราะห์เชิงตัวเลขแบบออยเลอร์ โดยเปรียบเทียบการอัตราการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์กับเวลา

Abstract

This paper concerns about a formulation of the semi – empirical mathematical model for sulfur dioxide (SO_2) absorption by Calcine (CaO) particle , dissociated from Calcium Carbonate. Euler's method is utilized for the time-domain solution of the absorption level. The model is able to predict the effect of particle size on SO_2 absorption level. Eventually, the numerical results are in good agreement with the experimental data

1. บทนำ

การพัฒนาทางด้านคอมพิวเตอร์นำไปสู่การสร้างวิธีการหาคำตอบของสมการคณิตศาสตร์ที่ซับซ้อนด้วยวิธีวิเคราะห์เชิงตัวเลข เช่น การหาคำตอบของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการไหล การเผาไหม้ และการถ่ายเทความร้อน ซึ่งมีประโยชน์อย่างยิ่งสำหรับกระบวนการในการศึกษาห้องเผาไหม้อุตสาหกรรม คำตอบที่ถูกคำนวณมาได้จะถูกเปรียบเทียบกับผลการทดลองเพื่อเป็นข้อมูลสำหรับวิศวกรหรือนักวิจัยเห็นประเด็นความแตกต่างระหว่างข้อสมมติทางทฤษฎี และสิ่งที่เกิดขึ้นจริงในการเผาไหม้ ซึ่งจะช่วยให้สามารถเข้าใจกระบวนการต่าง ๆ ที่เกิดขึ้นได้ดียิ่งขึ้น อย่างไรก็ตามแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ยังต้องมีการปรับปรุงเพื่อให้มีประสิทธิภาพที่ดียิ่งขึ้นไป เพื่อให้การคำนวณด้วย

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์มีความถูกต้องมากยิ่งขึ้นเมื่อเทียบกับผลที่ได้จากการทดลอง

ถ่านหินเป็นเชื้อเพลิงที่เกิดจากการทับถมของซากพืชซากสัตว์และมีความถูกต้องที่สุดเมื่อเทียบกับก๊าซธรรมชาติและน้ำมัน ถ่านหินถูกใช้เป็นต้นกำเนิดพลังงานเรื่อยมาตั้งแต่อดีตจนถึงปัจจุบัน แต่มันก็มีผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อม เช่น ก่อให้เกิดมลพิษทางอากาศ ในหลายปีที่ผ่านมาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ถูกนำมาใช้เพื่อพัฒนาระบบการเผาไหม้ถ่านหิน (Magnussen et. al., 1976; Salooja, 1979; Lockwood et. Al., 1984; Sloan et al., 1986; Romo – Millares, 1992; Lockwood et al., 1993; and Shen., 1994) และเมื่อไม่นานมานี้ผลงานของ Millares (Millares., 1992) ได้รวมกลไกการเกิดและสลายตัวของไนโตรเจนออกไซด์ (De Soete, 1988) เข้าไปในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ การถ่ายเทความร้อนรวมถึงการปล่อยก๊าซไนโตรเจนออกไซด์จากการเผาไหม้ ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นผลผลิตอีกชนิดหนึ่งจากการเผาไหม้ถ่านหิน ซึ่งทำให้เกิดการหมกร้อนของเตาเผา ถึงแม้ว่าจะได้มีการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของปฏิกิริยาดูดซับซัลเฟอร์ไดออกไซด์โดยอนุภาคหินปูนขึ้นมาในอดีต แต่แบบจำลองก็มีความซับซ้อนและมีข้อจำกัดสูงไม่สามารถนำมาใช้รวมกับแบบจำลองของการเผาไหม้ได้ (Solirchos and Yu 1985) จึงอาจเป็นเหตุผลว่า ก่อนหน้านี้ไม่มีผลงานที่รวมเอากลไกการเกิดและการสลายตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เข้าไปในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ดังนั้นในการศึกษาค้นคว้าครั้งนี้จึงมีจุดประสงค์ที่จะพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ง่ายแต่มีความแม่นยำในระดับที่ยอมรับได้เพื่อแสดงการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

จากการศึกษาถึงอัตราการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (A.Levy and E.L. merryman., 1965) แสดงให้เห็นว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาอยู่ในระดับเดียวกันกับปฏิกิริยาการเผาไหม้ ในการเผาไหม้ของถ่านหินในห้องเผาไหม้ที่สารตั้งต้นไม่ได้ผสมกันมาก่อนนั้น เมื่ออุณหภูมิห้องเผาไหม้สูงกว่า 1000°C อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะสูงกว่าอัตราการผสมกัน

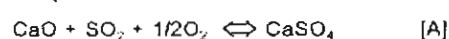
ของสารตั้งต้นทำให้สารตั้งต้นทำปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วเมื่อผสมกัน ดังนั้นการผสมกันแบบปั่นป่วนจึงมีอิทธิพลต่อปฏิกิริยาทั้งหมด อย่างไรก็ตามปฏิกิริยาการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์โดยมากจะเกิดขึ้นในช่วงอุณหภูมิที่ต่ำและช่วงเวลานานกว่าหลังการเผาไหม้ มีอยู่หลายวิธีที่จะลดปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ เช่นวิธีการกำจัดด้านหินที่มีคุณภาพต่ำออกไปก่อนที่จะใส่เข้าไปในห้องเผาไหม้ การผสมด้วยถ่านหินที่มีคุณภาพสูง หรือการแยกองค์ประกอบของกำมะถันด้วยวิธีการล้างหรือวิธีแรงดึงดูดของโลก เป็นต้น มีการทดลองและประสบความสำเร็จในการกำจัดเหล็กซัลไฟด์ (FeS_2) (W.D. Holstead and E. Raask, 1969) แต่ยังไม่สามารถกำจัดพันธะทางเคมีที่เป็นองค์ประกอบของกำมะถันได้ ยังมีวิธีการที่สามารถลดปริมาณก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ได้ในระหว่างหรือหลังการเผาไหม้ เช่นการฉีดตัวดูดซับเข้าไปในเตาเผาในตำแหน่งที่ดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ได้ดีที่สุด ตัวดูดซับดังกล่าวที่รู้จักกันดี 2 ชนิดคือ แคลเซียมคาร์บอเนตหรือหินปูน (CaCO_3) และแคลเซียมไฮดรอกไซด์ ซึ่งจะมีวิธีการฉีดด้วยกัน 2 วิธีคือแบบแห้งและเปียกเพื่อให้ดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่ก๊าซไอเสีย ซึ่งการเลือกใช้วิธีทั้ง 2 นี้ก็ขึ้นอยู่กับความต้องการหรืออุปกรณ์ที่ใช้ตามความเหมาะสมและงบประมาณ ในกระบวนการกำจัดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์แบบแห้งจะมีราคาถูกที่สุดแต่การดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จะต่ำโดยสามารถลดปริมาณซัลเฟอร์ได้เพียง 50 % (Tetsuo KAWAMURA, 1999) เนื่องจากเวลาที่อยู่ในเตาเผาสั้น ฉะนั้นการเพิ่มประสิทธิภาพการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จึงเป็นหัวข้อที่น่าสนใจในการทำวิจัยเพื่อการพัฒนา

แคลเซียมคาร์บอเนตหรือหินปูน (CaCO_3) เมื่อใส่เข้าไปในอุณหภูมิสูงจะแตกตัวเป็นอนุภาคของแคลเซียมออกไซด์ที่มีรูพรุน (CaO) และปลดปล่อยก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์อย่างรวดเร็ว จากนั้นจะจับตัวกับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์และโมเลกุลของออกซิเจนกลายเป็นแคลเซียมซัลเฟต (CaSO_4) อัตราความร้อนที่สูงจากเตาเผาจะทำให้เกิดแคลเซียมออกไซด์ซึ่งมีพื้นที่จำเพาะสูงถึง 90 ตารางเมตรต่อกรัม (Borgwardt, R.H., 1985) ในการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของแคลเซียมคาร์บอเนตเมื่อเปลี่ยนเป็นแคลเซียมออกไซด์แม้ว่าจะมีประสิทธิภาพต่ำกว่าการดูดซับของแคลเซียมไฮดรอกไซด์ (Ca(OH)_2) (Bruce et.al., 1989) แต่ก็ยังใช้กันอย่างกว้างขวางเนื่องจากง่ายต่อการใช้งาน การศึกษาด้วยวิธีการทดลองอันหนึ่งของ Zarkanitis, S. และ Sotirchos S.V. ให้เห็นว่าอนุภาคจะมีช่องว่างสำหรับดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์และสิ่งนี้จะสัมพันธ์กับการกระจายตัวของขนาดรูพรุนของอนุภาคและความสามารถในการส่งถ่ายมวลภายในอนุภาค ซึ่งสรุปไว้ว่าการกระจายตัวของขนาดและรูพรุนซึ่งติดต่อกันและกันเป็นปัจจัยสำคัญในการดูดซับแคลเซียม มากกว่าปัจจัยในแง่ความพรุนของอนุภาค ผลของการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์คือเวลาจะลดลงเมื่อขนาดของอนุภาคใหญ่ขึ้นในขณะที่อุณหภูมิการเกิดแคลเซียมออกไซด์สูงขึ้นและอุณหภูมิการเกิดก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์สูงขึ้น โดยสามารถอธิบายได้ในรูปของการแพร่ที่ถูกจำกัดด้วยการดูดซับของรูพรุนที่ผิวด้านนอก การศึกษานี้ยังแสดงให้เห็นว่าอุณหภูมิในช่วง 750 – 850 °C ซึ่งจะเป็นช่วงที่ดีที่สุดของการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ซึ่งอุณหภูมิจะต่ำกว่าบริเวณที่มีการเผาไหม้ (1000 °C)

โครงสร้างของรูพรุนนั้นจะเปลี่ยนไปเมื่อเกิดปฏิกิริยากับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ Newton et.al., 1989 กล่าวไว้ว่าอุณหภูมิเป็นตัวแปรที่ก่อให้เกิดการลดลงของความพรุนของแคลเซียมออกไซด์เนื่องมาจากคาร์บอนไดออกไซด์ทำให้เกิดผลึกในช่วงอุณหภูมิสูงประมาณ 900 – 1300 °C ในช่วงเวลาอันสั้น (< 1 วินาที) ระหว่างดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ในกระบวนการนี้ (ประมาณ 970 °C) ผลึกเล็ก ๆ จำนวนมากในอนุภาคแคลเซียมออกไซด์จะรวมตัวกันเป็นผลึกที่มีขนาดใหญ่ขึ้นซึ่งจะมีจำนวนลดลง ซึ่งมีผลต่อการลดลงของพื้นที่ผิวจำเพาะและการลดลงของอัตราการดูดซับ ผลดังกล่าวเป็นไปในแนวทางเดียวกันกับผลของ Borgwardt และ Bruce ในปี 1986 ซึ่งได้แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่ผิวจำเพาะและอัตราการเกิดแคลเซียมซัลเฟต (CaSO_4) ในปี 1970 Borgwardt แสดงให้เห็นถึงการลดลงของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์และการเพิ่มขึ้นของการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ซึ่งสัมพันธ์กันแบบเอ็กโปเนนเชียล ในแบบจำลองเชิงการทดลองส่วนมากจะบรรยายถึงกระบวนการดูดซับของรูพรุนที่ผิวด้านนอกเนื่องจากการแพร่ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ผ่านรูของแคลเซียมออกไซด์ (Georgakis et.al., 1979; Lee and Goergakis, 1981; Hartman and Couglin, 1974, 1976, 1978; Bhatia and Perlmutter, 1981; Christman and Edgar, 1983; Bardakci, 1984, Marsh and Uirichson, 1982 and Ramachandran and Smith, 1977.) หลังจากนั้น Simons, 1982; Simons and Garman, 1986 พบว่าการเกิดการดูดซับที่รูพรุนของอนุภาคจะลดปริมาณการแพร่ซึ่งทำให้เกิดปฏิกิริยาได้น้อยลง ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จะถูกดูดซับได้ระหว่างช่วงอุณหภูมิ 900 °C ถึง 1300 °C เนื่องมาจากการแพร่และจลนพลศาสตร์เคมีของพันธะเคมีเกิดขึ้นน้อยที่อุณหภูมิต่ำกว่า 900 °C ในขณะที่จะเกิดความไม่เสถียรของการเกิดปฏิกิริยาขึ้นที่อุณหภูมิสูงกว่า 1300 °C (Cole et.al, 1987; Newton, 1987) การศึกษาของ Sotirchos and Yu 1985 ได้พัฒนาแบบจำลองโครงสร้างของรูพรุนแบบสุ่มรวมเข้ากับแบบจำลองการเกิดปฏิกิริยาเพื่อจะจำลองการเกิดปฏิกิริยาของของแข็งและก๊าซ ซึ่งได้จำลองการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่มีความเข้มข้น 0.3 % โดยปริมาตรด้วยแคลเซียมที่อุณหภูมิ 850 °C และได้นำผลมาเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Cole et.al, 1987; Newton, 1987 เป็นที่น่าสังเกตว่าอุณหภูมิที่ใช้จะต่ำกว่าอุณหภูมิที่ได้มีการแนะนำไว้ในบทความของ Cole et.al, 1987; Newton, 1987 ได้มีการเปรียบเทียบผลที่ได้จากการคำนวณกับผลที่ได้จากการทดลองไว้ในรายงานนั้นเช่นกัน

2.แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

ปฏิกิริยาเคมีระหว่างแคลเซียมออกไซด์และซัลเฟอร์ไดออกไซด์ แสดงได้ดังสมการสมดุลเคมีดังนี้



โดยที่อัตราการเกิดปฏิกิริยา (r) (Borgwardt, R.H., 1970) คือ

$$r = \frac{1}{w} \frac{dn'}{dt} = \frac{\eta}{\rho} k_p c^m \quad [1]$$

ในหน่วยของกรัมโมลต่อกรัมของแคลเซียมออกไซด์ต่อวินาที และ w คือน้ำหนักของอนุภาค C และ m เป็นลำดับความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์และลำดับของปฏิกิริยา ตามลำดับ k , เป็นอัตราคงที่ ซึ่งเป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ อธิบายด้วยสมการของ Arrhenius

$$k_v = Ae^{-E/RT} \quad [2]$$

ตารางที่ 1 ค่าพลังงานกระตุ้น, อัตราการเกิดปฏิกิริยาและ frequency factor ของหิน dolomite, Borgwardt, R.H., 1970.

Stone	Activation energy, E, cal./g. mole	Reaction rate constant, K_v , sec. ⁻¹	Frequency factor, A, sec. ⁻¹
1337	10,000	4.8×10^3	2.4×10^5
1351	18,100	7.2×10^3	9.0×10^6
1343	14,200	4.0×10^3	1.1×10^6
1360	8,100	2.3×10^3	5.5×10^4

η เป็นตัวแปรที่ชี้ให้เห็นถึงการลดลงของอัตราการดูดซับเนื่องจากก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ โดยตัวแปรนี้สัมพันธ์กับ $\frac{n'}{w}$ ตามสมการ

$$\ln \eta \frac{Ac^m}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w} + \ln r_0 \quad [3]$$

β เป็นตัวแปรที่ได้จากการทดลอง n' เป็นอนุภาคของซัลไฟด์ในหน่วยกรัมโมล r_0 เป็นการเกิดปฏิกิริยาในสภาวะเริ่มต้น (ไม่มีซัลเฟต) ดังสมการ

$$r_0 = \eta_0 \frac{A_0 c^m}{\rho_0} e^{-E/RT} \quad [4]$$

จากสมการ 3 และ 4 จะได้

$$A = \frac{\eta_0}{\eta} \frac{\rho}{\rho_0} A_0 e^{-\beta \frac{n'}{w}} \quad [5]$$

จากสมการที่ 2, 4 และ 5 จะได้

$$r = \frac{\eta}{\rho} \frac{\rho}{\rho_0} r_0 \frac{\rho_0 e^{E/RT}}{\eta_0 c^m} \frac{\eta_0}{\eta} e^{-\beta \frac{n'}{w}} e^{-E/RT} c^m \quad [6]$$

$$\text{ดังนั้น } r = r_0 e^{-\beta \frac{n'}{w}} \quad [7]$$

สมการที่ 7 แสดงให้เห็นว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเป็นฟังก์ชันตัวแปรไม่กี่ตัวซึ่งไม่สัมพันธ์กับการสังเกตจากการทดลอง จากข้อมูลเมื่อมีปริมาณซัลเฟต 1×10^{-3} กรัมโมลต่อกรัม ผู้ศึกษาได้แสดงให้เห็นถึงความสัมพันธ์แบบเชิงเส้นตรงระหว่าง $\ln(r)$ และส่วนกลับของอุณหภูมิ $1/T$ (K⁻¹) ดังนั้นสมการที่ 7 จะถูกเปลี่ยนเป็น

$$r = r_0 e^{-\beta \frac{n'}{w}} e^{\frac{-E}{RT} + c_0} \quad [8]$$

$$c_0 = \frac{E}{RT_{ref}} \quad [9]$$

โดยที่ T_{ref} เป็นอุณหภูมิอ้างอิงที่ 1143 K (870 °C) สมการข้างต้นจะเหมือนกับสมการที่ 7 เมื่ออุณหภูมิเท่ากับอุณหภูมิอ้างอิง นอกจากนี้นี้การเพิ่มขึ้นของอัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นอยู่กับเพิ่มขึ้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ซึ่งจะได้

$$r = r_0 e^{-\beta \frac{n'}{w}} e^{(-E/RT) + (E/R_{ref})} \frac{C^m}{C_{ref}^m} \quad [10]$$

เมื่อ C_{ref} เป็นความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ 2.9×10^{-3} กรัมโมลต่อลูกบาศก์เซนติเมตร ค่า r_0 ของแคลเซียมออกไซด์แต่ละชนิดได้มาจากการประมาณค่าแบบเชิงเส้นตรงของการเกิดปฏิกิริยาที่มีความเข้มข้นของซัลเฟต 1×10^{-3} กรัมโมลต่อกรัม เป็นไปตามสมการ

$$\ln r_0 = \ln r_{1 \times 10^{-3}} - \beta (1 \times 10^{-3}) \quad [11]$$

β ได้มาจากการที่กล่าวไว้ข้างต้นซึ่งรู้อัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ 1×10^{-3} และ 2×10^{-3} ซึ่งได้จากการทดลอง (Borgwardt, 1970) โดยแสดงไว้ดังตารางที่ 2 และ 3

$$\beta = \frac{\ln r_{2 \times 10^{-3}} - \ln r_{1 \times 10^{-3}}}{2 \times 10^{-3} - 1 \times 10^{-3}} \quad [12]$$

ตารางที่ 2 ผลของอนุภาคกับอัตราการเกิดปฏิกิริยาสภาวะ sulfate loading ที่ 2×10^{-3} g mole/g, 870 °C.

Stones	Reaction rate (g mole/g sec) X 10 ⁵		
	D _p 0.0096 cm.	D _p 0.025 cm.	D _p 0.13 cm.
1337	4.2	3.2	1.4
1351	3.2	2.1	1.3
1343	2.1	1.4	0.7
1360	2.5	1.8	1.1

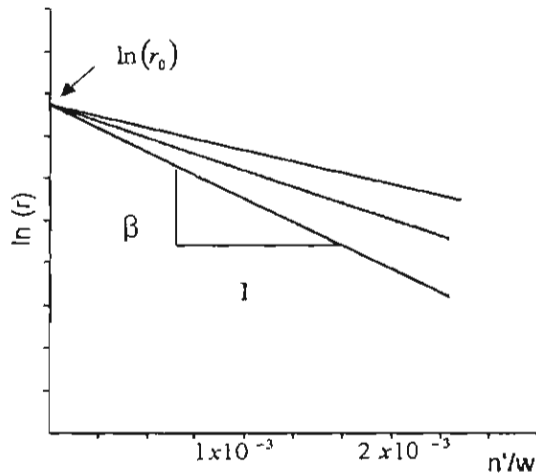
ตารางที่ 3 ค่าที่ได้จากการทดลองของอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่อุณหภูมิ 870 °C สภาวะ sulfate loading ที่ 1×10^{-3} g mole/g ของอนุภาคขนาด 0.0096 ซม. (150/170-mesh particle size).

Stones	Reaction rate (g mole/g sec) X 10 ⁵
1337	6.4
1351	5.9
1343	3.6
1360	3.1

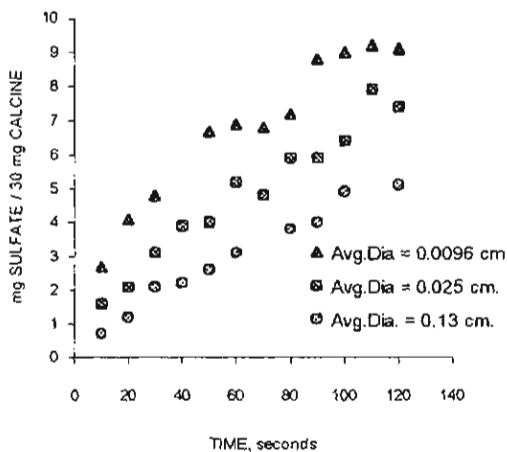
จากความสัมพันธ์ข้างต้นตัวอย่างของกราฟสำหรับอนุภาคของแคลเซียมออกไซด์ 1337 แสดงไว้ดังรูปที่ 1 ค่าของ r_0 และ β ของอนุภาคแคลเซียมออกไซด์แต่ละชนิดได้มาในทำนองเดียวกัน โดยสรุปรวมไว้ในตารางที่ 4

ตารางที่ 4 อัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ภาวะไม่มีซัลเฟอร์ (Zero sulfation)

Type	$\ln r_0$	β		
		0.0096cm.	0.025cm.	0.13cm.
1337	-9.24	-420	-550	-970
1351	-8.97	-690	-900	-1140
1343	-9.69	-540	-740	-1090
1360	-10.16	-220	-385	-630



รูปที่ 1 ความสัมพันธ์ของ sulfation load กับอัตราการเกิดปฏิกิริยา , รวมทั้งการหาค่า r_0 และ β



รูปที่ 2 การดูดซับของซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่ขนาดของอนุภาคชนิด 1351 ต่าง ๆ กัน, Borgwardt, R.H., 1970.

ผลจากการทดลองดังรูปที่ 2 พบว่าการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ต่อหน่วยมวลของอนุภาคที่มีขนาดเล็กกว่าจะดูดซับได้ดีกว่าอนุภาคที่มีขนาดใหญ่ซึ่งสังเกตได้อย่างชัดเจนในตอนเริ่มของการเกิดปฏิกิริยา ซึ่งเกิดขึ้นเนื่องจาก รูปทรงของอนุภาคตอนเริ่มต้นมีมากกว่าอนุภาคที่มีขนาดใหญ่

สมการที่ 3 สามารถเขียนได้เป็น

$$\ln \eta_0^* \eta A \frac{c^m}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w} + \ln r_0 \quad [13]$$

หรือ

$$\ln \eta_0^* + \ln \eta A \frac{c^m}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w} + \ln r_0 \quad [14]$$

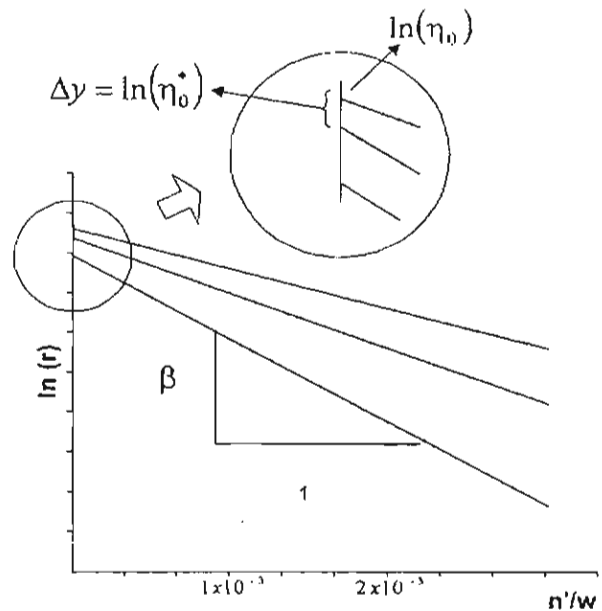
หรือ

$$\ln \eta A \frac{c^m}{\rho} - \frac{E}{RT} = -\beta \frac{n'}{w} + \ln \left(\frac{r_0}{\eta_0^*} \right) \quad [15]$$

ทุกเทอมยกเว้นสมการที่ 15 ทางด้านขวามือจะเหมือนกันสมการที่ 3 ดังนั้นสมการเชิงเส้นตรงระหว่าง $\ln(r)$ และ $1/T$ ยังคงอยู่ ค่าของ η_0^* แสดงถึงการแพร่ที่ภาวะเริ่มต้นซึ่งต่างจาก η ซึ่งแสดงถึงประสิทธิภาพของอัตราการเกิดปฏิกิริยาตลอดช่วงเวลา ค่า η_0^* นี้จะคงที่สำหรับอนุภาคแต่ละชนิดแต่ η จะลดลงเรื่อยๆ เนื่องจากการเกิดซัลเฟตในอนุภาค สำหรับสมการในรูปทั่วไปของ β อาจเขียนได้ดังนี้

$$\beta = \frac{\ln r_{2 \times 10^{-3}} - \ln \left(\frac{r_0}{\eta_0^*} \right)_{0.0}}{2 \times 10^{-3}} \quad [16]$$

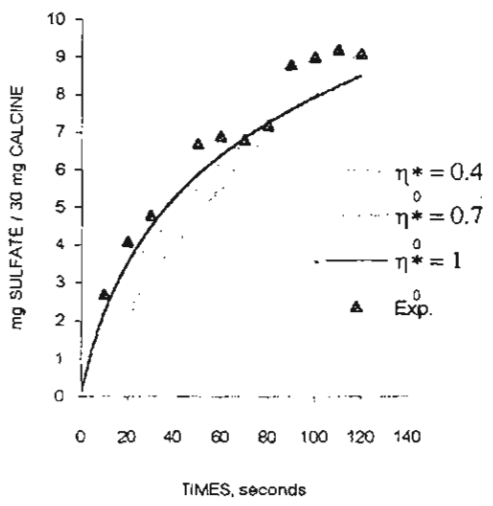
r_0 เป็นอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่สภาวะเริ่มต้น ตัวแปรนี้สะท้อนให้เห็นถึงอัตราการเกิดปฏิกิริยาโดยรวม [A] โดยปราศจากผลของการแพร่และการดูดซับภายในอนุภาค ซึ่งได้ให้ไว้ในตารางที่ 4 ในรูปลอการิทึม และกราฟแสดงค่า β ดังรูปที่ 3



รูปที่ 3 ผลของ η_0^* ต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ Sulfation loading ต่าง ๆ

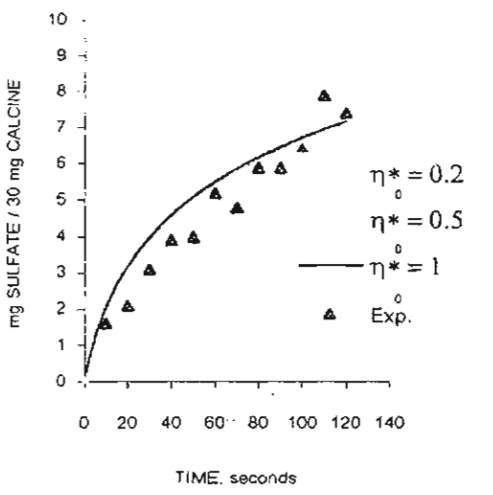
รูปที่ 4 แสดงผลของการแพร่ในช่วงการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ด้วยการเปลี่ยนค่า η_0^* จาก 1 (ตอนภาวะเริ่มต้น) ลดลงถึง 0.1

สำหรับแคลเซียมออกไซด์ต่างๆ กัน ข้อมูลที่ได้จากการทดลองถูกนำมาเปรียบเทียบกับผลการคำนวณ จากสมการที่ 10 ด้วยพลังงานการกระตุ้นจากตารางที่ 1 r_0 และ β จากตารางที่ 4



รูปที่ 4 ผลของความต้านทานการแพร่ที่ภาวะไม่มีซิลเฟอ์ของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.0096$ cm. เปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง

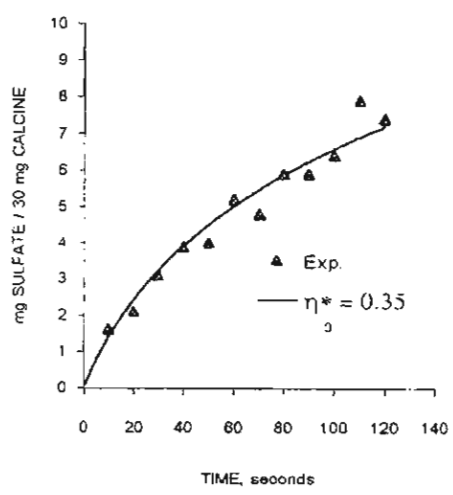
จากสมการที่ 16 หึ่งสังเกตว่าค่าของ β ถูกแสดงในตารางที่ 4 นั้นหาได้จากสมการที่ 12 ภายใต้สมมติฐานที่ว่าในภาวะเริ่มต้นปฏิกิริยา r_0 ไม่เปลี่ยนแปลงในอนุภาคชนิดเดียวกันที่มีขนาดต่างกัน ดังนั้น ค่าเหล่านี้จะถูกแสดงเฉพาะความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(r)$ และ ปริมาณซิลเฟต g/w ในกรณีที่ไม่มีผลจากการแพร่ ($\eta_0^* = 1$) ในภาวะเริ่มต้น



รูปที่ 5 ผลของความต้านทานการแพร่ที่ภาวะไม่มีซิลเฟอ์ของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.025$ cm เปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง

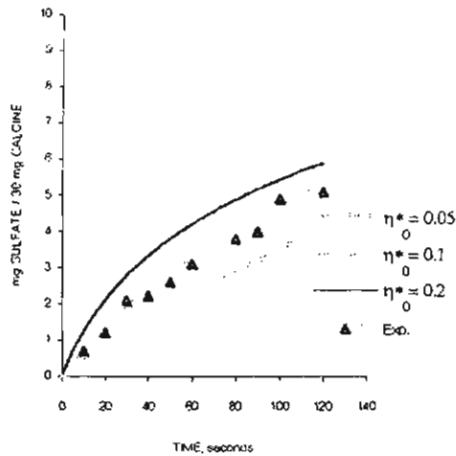
โดยทั่วไปจะสังเกตเห็นว่าผลที่ได้จะต่ำกว่าข้อมูลที่ได้จากการทดลอง การเปลี่ยนความต้านทานในการแพร่มีผลต่อการดูดซับ การลดลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่สภาวะแรก ๆ ของการเกิดปฏิกิริยาในสภาวะที่มีซิลเฟต 2×10^{-3} กรัมต่อ 1 กรัมของน้ำหนัอนุภาค อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะเท่ากับค่าที่แสดงไว้ในตารางที่ 2 ในขณะที่พจน์ที่เป็นลอคกาลีทึมของอัตราการเกิดปฏิกิริยาลดลงแบบเชิงเส้นต่อการเพิ่มขึ้นของซิลเฟตจึงทำให้อัตราการลดลงนี้สำหรับกรณี $\eta_0^* < 1$ จะน้อยกว่าในกรณีที่ $\eta_0^* = 1$ เป็นผลให้เกิดปฏิกิริยาที่สูงกว่าเมื่อมีซิลเฟตมากกว่า 2×10^{-3} กรัมต่อ 1 กรัมของน้ำหนัอนุภาค การเพิ่มขึ้นของซิลเฟตในกรณี $\eta_0^* < 1$ จะมากกว่าในกรณี $\eta_0^* = 1$ หลังระยะเวลาหนึ่ง

ในรูปที่ 5 แสดงถึงสิ่งที่เกิดขึ้นในลักษณะเดียวกันในการเปลี่ยน η_0^* อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะน้อยเมื่ออนุภาคมีขนาดเล็ก ($dp = 0.0096$ เซนติเมตร) เนื่องจากขนาดของ β มีค่าน้อย ที่เวลา 0 วินาที และ $\eta_0^* = 1$ นั้น ทั้ง 2 กรณีมีอัตราการเกิดปฏิกิริยาเท่ากันหากแต่สำหรับเวลาที่มากกว่า 0 วินาที อัตราการเกิดปฏิกิริยาสำหรับอนุภาคขนาด 0.25 เซนติเมตร จะน้อยกว่าอนุภาคขนาด 0.0096 เซนติเมตร และความแตกต่างจะเห็นได้ชัดขึ้นเมื่อเวลาเพิ่มขึ้น เนื่องมาจากการเพิ่มขึ้นของซิลเฟตดังนั้นเมื่อใช้ค่า $\eta_0^* = 0.35$ จะเป็นค่าที่ดีที่สุด ดังรูปที่ 6

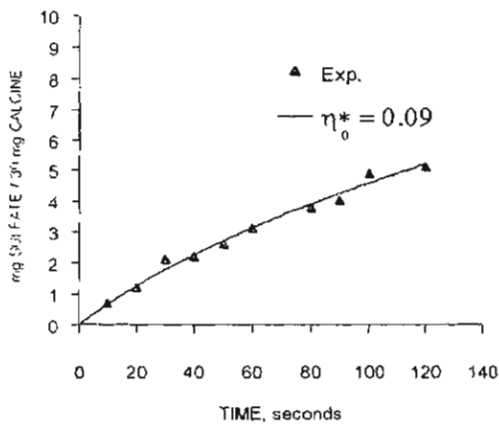


รูปที่ 6 เปรียบเทียบระหว่างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เมื่อใช้ $\eta_0^* = 0.35$ กับผลที่ได้จากการทดลองของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.025$ cm

ในขณะที่การดูดซับด้วยอนุภาคขนาด 0.13 เซนติเมตร ค่า η_0^* ที่ 0.09 เป็นค่าที่ดีที่สุด ที่ η_0^* มีค่าเป็น 0.05 จะเพิ่มความเป็นเส้นตรงเทียบกับเวลาที่ผ่านไป ซึ่งแสดงให้เห็นว่าอิทธิพลของ $\frac{\eta'}{w}$ มีน้อยมากที่สภาวะดังกล่าว



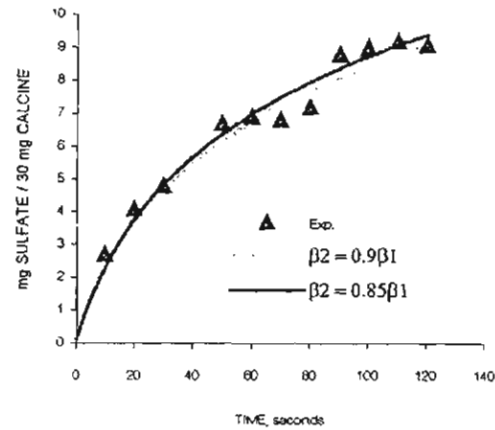
รูปที่ 7 ผลของความต้านทานการแพร่ที่ภาวะไม่มีซัลเฟอร์ของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.13$ cm เปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง



รูปที่ 8 เปรียบเทียบระหว่างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เมื่อใช้ $\eta_0^* = 0.09$ กับผลที่ได้จากการทดลองของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.13$ cm เมื่อใช้ β ต่าง ๆ กัน

สำหรับรูปที่ 7 แสดงให้เห็นถึงความแตกต่างของ η_0^* เช่นเดียวกับรูปที่ 5 แต่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.13 cm. และรูปที่ 8 เป็นค่าที่เหมาะสมของ η_0^* สำหรับอนุภาคชนิด 1351 ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.13 cm. ผลของ β ต่อการดูดซับซัลเฟอร์ไดออกไซด์แสดงได้ดังรูปที่ 9 ที่ค่าคงที่ของ $\eta_0^* = 1$ การลดลงของขนาดของ β จะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น ค่า β ที่มากขึ้นจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาลดลง สำหรับอนุภาคแต่ละชนิด แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ที่มีความสัมพันธ์ระหว่างการเพิ่มขึ้นของซัลเฟอร์ไดออกไซด์ตลอดช่วงเวลาและ η_0^* รวมถึง β จะหาได้จากข้างต้น อย่างไรก็ตามปฏิกิริยาเคมีและโครงสร้างของอนุภาค

เป็นสิ่งที่แตกต่างกัน ดังนั้น η_0^* และ β ควรถูกกำหนดขึ้นสำหรับอนุภาคแต่ละชนิด



รูปที่ 9 ผลของ β ต่อการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์เปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการทดลอง ของอนุภาคชนิด 1351, $dp = 0.0096$ cm

3. บทสรุป

งานวิจัยที่นำมารายงานในบทความนี้เป็นส่วนหนึ่งของการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ซึ่งยังต้องทำการพัฒนาอีกต่อไปเพื่อให้สามารถครอบคลุมช่วงของการทำปฏิกิริยาในห้องเผาไหม้อุตสาหกรรม ในขั้นนี้พอจะสรุปได้ว่า แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ได้ถูกพัฒนาขึ้นให้ผลการจำลองเป็นที่น่าพอใจสำหรับขนาดและชนิดของหินปูนที่มีผลการทดลองจากโรงงานในอดีต โดยตัวแปรที่ทำการปรับแต่ง 2 ตัวคือ η_0^* และ β ซึ่งไม่ยุ่งยากในการนำไปรวมกับแบบจำลองหลักทางด้านการเผาไหม้

4. รายการสัญลักษณ์

- A = frequency factor, $\text{sec}^{-1} (\text{g.moles/cc.})^{-1}$
- A_0 = frequency factor ในสภาวะไม่มีการทำปฏิกิริยา, $\text{sec}^{-1} (\text{g.moles/cc.})^{-1}$
- C = ความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์, g.moles/cc.
- C_{ref} = ความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ 2.9×10^{-6} g.moles/cc.
- D_p = เส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค, cm.
- E = พลังงานการกระตุ้น, cal./g.mole
- k_v = ค่าคงที่ของอัตราการเกิดปฏิกิริยาค่อนหน่วยปริมาตรของของแข็ง, $\text{sec}^{-1} (\text{g.moles/cc.})^{-1}$
- m = ลำดับความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์
- n' = ซัลเฟอร์ใน SO_3 g.mole
- r = อัตราการเกิด SO_3 g.moles/(g.sec)
- r_c = อัตราการเกิด SO_3 ที่สภาวะไม่มีซัลเฟอร์, g.moles/(g.sec)
- V = ปริมาตร, cc.

w = น้ำหนัก, g.

T = อุณหภูมิ, K

T_{ref} = อุณหภูมิอ้างอิงที่ 1143K (870°C)

t = เวลา, sec

β = สัมประสิทธิ์ที่ได้จากกราฟและแสดงในตารางที่ 4

η = อัตราส่วนของอัตราการเกิดปฏิกิริยา

ρ = ความหนาแน่น, g/cc.

5. เอกสารอ้างอิง

A. Levy and E. L. Merryman. (1965). The Microstructure of Hydrogen Sulphide Flames. Combust. Flame. Vol. 9 p.229-240.

Bardakci, T. (1985). Diffusional Study of the Reaction of Sulfur Dioxide with Reactive Porous Matrices. Thermochemica Acta. Vol 76. p. 287.

Bhatia, S.K., and D.D. perlmutter. (1981a). The Effect of Pore Structure on Fluid – Solid Reactions. I : Application to the SO₂ – lime Reaction. AIChE J. Vol. 27. p. 226.

Bhatia, S.K., and D.D. perlmutter. (1981b). A Random – Pore Model for Fluid – Solid Reactions. II : Diffusion and Transport Effects. AIChE J. Vol. 27. p. 274.

Borgwardt, R.H. (1970). Kinetics of the Reaction of SO₂ with Calcined Limestone. AIChE J. Vol. 4. p. 59.

Borgwardt, R.H., and Bruce, K.R. (1986). Effect of Specific Surface Area on the Reactivity of CaO with SO₂. AIChE J. Vol.32. p. 239.

Christman, P.G., and T. F. Edgar. (1983). Distributed Pore – Size Model for Sulfation of Limestone. AIChE J. Vol. 29. p. 388.

De Soete F.F. (1988). Fundamentals of NO Formation and Destruction (Gas phase). Course on combustion of solid fuels. IFRF, Noordwijkerhout, The Netherlands.

Georgakis, C., c.W. Chang, and J. Szekely. (1979). A Changing GrainSize Model for Gas – Solid Reactions. Chem. Eng. Sci. Vol. 34. p. 1072.

Hartman, M., and R. W. Coughlin. (1974). Reaction of Sulfur Dioxide with Limestone and the Influence of Pore Structure. Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Develop. Vol. 13. p. 248.

Hartman, M., and R. W. Coughlin. (1976). Reaction of Sulfur Dioxide with Limestone and the Grain Model. AIChE J. Vol. 22. p. 490.

Hartman, M., and R. W. Coughlin. (1978). Influence of Porosity of Calcium Carbonates on Their Reactivity with Sulfur Dioxide. Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev. Vol. 17. p. 411.

Lee, D.C., and C. Georgakis. (1981). A Single – Particle Size Model for Sulfur Retention in Fluidized Bed Coal Combustors. AIChE J. Vol.27. p. 472.

Lockwood F.C. and Jones W.P. (1993). The Mathematical Modelling of Combustion Chambers Furnaces and Fires: Prediction of NO emissions from a staged burner. Outline of Lecture notes. Vol.3. October 1993. Post Experience Course Lectures. Dept. of Mech. Eng., ICSTM, London.

Lockwood F.C., Rizvi S.M.A., Lee F.K. and Whalet K. (1994). Coal Combustion Model Validation Using Cylindrical Furnace Data. Twentieth Symposium (Int.) on Combustion. The Combustion Institute. p.513.

Magnussen B.F. and Hjertager B.H. (1976). On Mathematical Midelling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. Sixteenth Symposium (Int.) on Combustion. The Combustion Institute. p.719

Marsh, D.W., and D. L. Ulrichson. (1982). Rate and Diffusional Study of the Reaction of Calcium Oxide with Sulfur Dioxide. AIChE Ann. Meet., Los Angeles.

Newton, G. H., Chen, S. L., and Kramlich, J.C. (1989). Role of Porosity Loss in Limiting SO₂ Capture by Calcium Based Sorbents. AIChE J. Vol. 35. p.988.

Ramachandran, P.A., and J. M. Smith. (1977). A Single – Pore Model for Gas – Solid Monocatalytic Reactions. AIChE J. Vol. 23. p. 353.

Romo – Millares C.A. (1992). Mathematical Modelling of Fuel NO Emissions from PF Burners. Ph.D. Thesis. University of Lodon.

Salooja A.P. (1979). Mathematical Modelling of and experimental Studies in Axi – Symmetrical Combustors. Ph.D. Thesis. University of London.

Shen B. (1994). The Application of Second – Moment Turbulence Closures to 2D Pulverised –Coal Flames. Ph.D. Thesis. University of London.

Simons, G. A. (1982). The Pore Tree Structure of Pore Char. 19th Int. Symp. Combustion, Combustion Institute.

Simons, G.a., and Garman, A.R. (1986). Small Pore Closure and the Deactivation of the Limestone Sulfation Reaction. AIChE J. Vol. 32. p. 1491.

Sloan D.F., Smith P.F., and Smoot L.D. (1986). Modelling of Swirl in Turbulent Flow System. Progress in Energy Combustion Science. Vol.12. p.163.

Sotirchos, S. V., and H. C. Yu. (1985). Mathematical Modelling of Gas – Solid Reactions with Solid Product. Chem. Eng. Sci. Vol. 40. p. 2039.

Tetsuo KAWAMURA, (1999). Flue Gas Desulfurization Technology. Clean Coal Technology Seminar in Thailand. p. 26.

W.H. Holstead and E. Raask. (1969). The Behavior of Sulphur and Chlorine Compounds in Pulverized Coal – Fired Boilers. J. Inst. Fuel. Vol. 42 p. 344.

Zarkanitis, S., and Sotichos, S. V. (1989). Pore Structure and Particle Size Effects on Limestone Capacity for SO₂ Removal. AIChE J. Vol. 35. p. 821.

การจำลองผลของตำแหน่งฉีดต่อเส้นทางเดินอนุภาคในขบวนการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์

A Simulation on the Effect of Particle Injection Location on Sulfur Dioxide Adsorption

จารุวัตร เจริญสุข นิตินัย ปัญญบุญสกุล
ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้ศึกษาถึงการใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการหาตำแหน่งที่เหมาะสมของการพ่นแคลเซียมคาร์บอเนต (CaCO_3) เพื่อดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (SO_2) ในห้องเผาไหม้ถ่านหินผง โดยหลังจากการพ่นแคลเซียมคาร์บอเนตเข้าไปในห้องเผาไหม้จะเกิดการแตกตัว (calcination) เป็นแคลเซียมออกไซด์ ซึ่งจะเข้าไปดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ไว้อีกทีหนึ่ง จากการศึกษาพบว่าอัตราการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์นอกจากจะเป็นฟังก์ชันของตัวแปรอื่น ๆ แล้วยังเป็นฟังก์ชันของเวลา ดังนั้นจึงจำเป็นต้องหาตำแหน่งในการพ่นที่จะทำให้อนุภาคอยู่ในห้องเผาไหม้ได้นานที่สุด โดยในที่นี้จะพบว่าอนุภาคไปยังบริเวณที่เกิดกระแสไหลวนด้านนอกของการเผาไหม้ จะทำให้อนุภาคมีเวลาในการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ได้นานกว่า และมีการแพร่กระจายได้ดีกว่าการพ่นที่ตำแหน่งอื่น ซึ่งจะเห็นได้ว่าอัตราการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์น่าจะมีแนวโน้มดีกว่าการพ่นที่ตำแหน่งอื่น

Abstract

This research studies about utilization of mathematical model for determining the suitable position of sulfur dioxide (SO_2) absorption by Calcium Carbonate (CaCO_3) particles emitting to coal combustion chamber. After CaCO_3 was introduced to combustion chamber, it will be calcinated to Calcium oxide (CaO) and consequently absorb SO_2 producing CaSO_4 . The previous literatures showed that the SO_2 absorption rate was not only a function of SO_2 concentration, but also a function of time. So it is necessary to find emitting position which lead to maximizing SO_2 absorption. The result showed that by emitting the particle to the external recirculation zone of combustion will enable the particle a greater time to absorb SO_2 and better dispersion than other positions.

1. บทนำ

การแพร่ของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จากการเผาไหม้ของถ่านหินทำให้เกิดมลภาวะ เช่น ฝนกรด ซึ่งเป็น

อันตรายต่อมนุษย์ สัตว์ พืช และสิ่งก่อสร้างต่าง ๆ จากปัญหาดังกล่าว จึงได้นักวิจัยพยายามพัฒนาเทคโนโลยีในการควบคุมก๊าซ SO_2 วิธีหนึ่งที่สามารถทำได้คือการลด

ปริมาณ SO_2 ในระหว่างหรือหลังการเผาไหม้ ซึ่งทำได้โดยการฉีดตัวดูดซับ SO_2 ซึ่งทำได้ 2 วิธีคือ แบบแห้งและแบบเปียกโดยตัวดูดซับที่นิยมใช้มี 2 ชนิดคือ แคลเซียมคาร์บอเนตหรือหินปูน และแคลเซียมไฮดรอกไซด์ ($\text{Ca}(\text{OH})_2$) เพื่อดูดซับ SO_2 จากก๊าซไอเสีย ซึ่งการเลือกวิธีใดวิธีหนึ่งขึ้นอยู่กับวัตถุประสงค์หรือความพร้อมของอุปกรณ์และงบประมาณโดยการฉีดแบบแห้งจะมีราคาถูกแต่การดูดซับ SO_2 จะต่ำ โดยสามารถลดปริมาณ SO_2 ได้เพียง 50 % [2] เนื่องจากเวลาที่อยู่ในเตาเผาสั้น ซึ่งการเพิ่มประสิทธิภาพการดูดซับ SO_2 นั้นทำได้หลายวิธี เช่น การพ่น CaCO_3 เข้าไปในห้องเผาไหม้จนเกิดการแตกตัวเป็น CaO ซึ่งจะเข้าไปจับกับ SO_2 วิธีอีกที่หนึ่ง ปัจจุบันได้มีการรวมเอากลไกการเกิดและการสลายตัวของ SO_2 เข้าไว้ในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ถ่านหินผงเพื่อทำนายการดูดซับ SO_2 ในห้องเผาไหม้ ซึ่งการศึกษานี้มีจุดประสงค์เพื่อหาตำแหน่งที่เหมาะสมในการพ่นผงหินปูนเข้าไปในห้องเผาไหม้เพื่อดูดซับ SO_2 ให้ได้มากที่สุด

2. สมการพื้นฐานของแบบจำลอง

2.1 สมการทางคณิตศาสตร์ของก๊าซ [1], [4]

สมการที่ใช้อธิบายการไหลของก๊าซในห้องเผาไหม้สามารถเขียนในรูปพิกัดทรงกระบอก โดยพิจารณาเตาเผาเป็นแบบสมมาตรคือ

2.1.1 สมการความต่อเนื่อง

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \bar{v}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{u}) = \bar{S}_m \quad (1)$$

2.1.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัม

ทิศทางการแนวรัศมี (ทิศ r):

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \bar{v} \bar{v}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{v}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) + \bar{S}_v + \bar{S}_{m,v} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \text{ซึ่ง } \bar{S}_v = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) \\ + \frac{\bar{\rho} \bar{v}^2}{r} - 2 \mu_{\text{eff}} \frac{\bar{v}}{r^2} \end{aligned} \quad (3)$$

และ $\bar{S}_{m,v}$ คือ การถ่ายโอนของโมเมนตัมที่เกิดขึ้นในปริมาตรควบคุมโดยอนุภาคของแข็ง

ทิศทางการแนวแกน (ทิศ z):

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \bar{v} \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{u}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \bar{S}_u + \bar{S}_{m,u} \end{aligned} \quad (4)$$

ทิศทางการแนวเส้นรอบวง (ทิศ θ):

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \bar{v} \bar{w}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{w}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{w}}{\partial r} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) + \bar{S}_w + \bar{S}_{m,w} \end{aligned} \quad (5)$$

2.1.3 สมการการถ่ายเทความร้อน

สมการการเคลื่อนย้ายพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \bar{v} \bar{k}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{k}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial r} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial z} \right) + G + \bar{p} \varepsilon \end{aligned} \quad (6)$$

สมการการเคลื่อนย้ายของอัตราการสลายตัวของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \bar{v} \bar{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{\varepsilon}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial r} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial z} \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} G + C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (7)$$

2.1.4 การเคลื่อนย้ายของสเกลลาร์

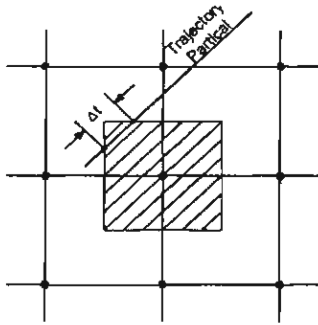
$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \bar{v} \bar{\phi}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{\phi}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial r} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial z} \right) + \bar{S}_\phi \end{aligned} \quad (8)$$

โดย ϕ คือ ปริมาณสเกลลาร์ที่พิจารณาในแต่ละปัญหา เช่น การเคลื่อนย้ายอุณหภูมิ การเคลื่อนย้ายพลังงาน (สมการอนุรักษ์พลังงาน)

2.2 แบบจำลองของอนุภาค

การกระจายตัวของอนุภาคโดยเริ่มต้นตั้งแต่ CaCO_3 เกิดกระบวนการแตกตัวและเริ่มดูดซับ SO_2 ถูกจำลองโดยใช้วิธี Lagrangian โดยสมมติว่าอนุภาคที่ถูกปล่อยเข้าไปเป็นทรงกลมและความหนาแน่นที่ทางเข้ามีค่าคงที่ การถ่ายเทมวล โมเมนตัม และพลังงานของอนุภาคและก๊าซเกี่ยวข้องกับตำแหน่ง ซึ่ง Source Terms สำหรับการคำนวณด้วย

Eulerian สามารถหาค่าโดยใช้ Partial Source in Cell Techniques รูปที่ (1) แสดงการกระจายตัวของอนุภาคเพื่อหาคำตอบสำหรับขนาดอนุภาคและตำแหน่งเริ่มต้น



รูปที่ 1 การกระจายตัวของอนุภาคโดยใช้วิธี Lagrangian ผ่านเซลล์

2.2.1 สมการอนุรักษ์มวล

การถ่ายเทมวลจากอนุภาคสู่ก๊าซสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\frac{dm_p}{dt} = -R_m \quad (9)$$

ซึ่ง R_m คืออัตราเชิงปริมาตรของ Mass efflux จากอนุภาคสู่ก๊าซโดยการปลดปล่อย CO_2 ในช่วงการเกิดการแตกตัวและในช่วงการดูดซับ SO_2

2.2.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัมของอนุภาค

2.2.2.1 การเคลื่อนที่เฉลี่ยของอนุภาค

สมการโมเมนตัมของอนุภาคที่เคลื่อนที่เขียนได้ดังนี้

$$\frac{dm_p \tilde{u}_i}{dt} = \sum \bar{F}_i \quad (10)$$

พจน์ทางด้านขวาเกิดจากแรงภายนอก ดังนั้นแรงดูดเขียนได้ดังนี้

$$F_d = C_D \rho \frac{A_p}{2} (\tilde{u}_g - \tilde{u}_p) |\tilde{u}_g - \tilde{u}_p| \quad (11)$$

$$C_D = \left(1 + 0.15 Re_p^{0.687}\right) \frac{Re_p}{24} \quad (12)$$

$\tilde{u}_g$ คือค่าความเร็วที่เวลาเฉลี่ยของก๊าซ $\tilde{u}_p$ คือค่าความเร็วที่เวลาเฉลี่ยของอนุภาค A_p คือพื้นที่หน้าตัดของอนุภาค ρ คือค่าความหนาแน่นของก๊าซ C_D คือสัมประสิทธิ์แรงดูด และ Re_p คือ ค่า Reynolds number ของอนุภาค

$$Re_p = \frac{\rho |\tilde{u}_g - \tilde{u}_p| d_p}{\mu} \quad (13)$$

ซึ่ง μ คือความหนืดจลนศาสตร์ของก๊าซ และ d_p คือเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค

2.2.2.2 การกระจายของอนุภาคเกิดขึ้นจากความปั่นป่วน

แบบจำลองของ Lockwood (1980) อธิบายการกระจายตัวของอนุภาคเกิดขึ้นจากความปั่นป่วน ดังสมการ

$$u_{disp} = C_{1d} (\overline{u'^2})^{1/2} \quad (14)$$

$$v_{disp} = C_{2d} (\overline{v'^2})^{1/2} \quad (15)$$

ซึ่งค่า C_{1d} และ C_{2d} คือค่าคงที่ที่ได้จากการทดลองประยุกต์กับข้อสมมติฐานของ Boussinesq. ความเร็วที่แกว่งไปมาสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\overline{u'^2} = -c_a 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} k \quad (16)$$

$$\overline{v'^2} = -c_b 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{2}{3} k \quad (17)$$

ซึ่งค่า C_a และ C_b คือค่าคงที่เฉพาะ ความเร็วของการกระจายสามารถแสดงอยู่ในพจน์ของการเปลี่ยนแปลงความเร็วเฉลี่ยและพลังงานจลน์

$$u_{disp} = c_1 \left(-c_a 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} k \right)^{1/2} \quad (18)$$

$$v_{disp} = c_2 \left(-c_b 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r} \right) + \frac{2}{3} k \right)^{1/2} \quad (19)$$

ดังนั้นสมการสมดุลโมเมนตัมในรูปพิกัดทรงกระบอกคือ

$$\frac{d\tilde{u}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{u}_p \pm u_{disp} - \tilde{u}_g) \quad (20)$$

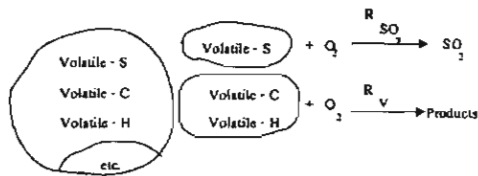
$$\frac{d\tilde{v}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{v}_p \pm v_{disp} - \tilde{v}_g) + \frac{\tilde{\omega}^2}{r_p} \quad (21)$$

$$\alpha = \frac{18\mu C_d Re_p}{24\rho_p d_p^2} \quad (22)$$

r_p คือระยะจากแกนสมมาตรของอนุภาค โดยสมมติว่าการไหลเป็นแบบสมมาตรตามแนวแกน ดังนั้นการกระจายของอนุภาคในทิศทางตามแนวเชิงมุมสามารถละทิ้งได้

2.3 แบบจำลองของออกไซด์ของกำมะถัน [1]

ถ่านหินเมื่อถูกทำให้ร้อนจะปลดปล่อยสารระเหยโดยส่วนที่เหลือจะอยู่ในรูปของแข็งคือคาร์บอนและขี้เถ้า สารระเหยที่มีกำมะถันเป็นองค์ประกอบจะเผาไหม้โดยรวมตัวกับอากาศจะก่อให้เกิดออกไซด์ของกำมะถันและก๊าซอื่น ๆ ดังรูปที่ (2) โดยสมมติว่ากำมะถันในสารระเหยรวมตัวกับออกซิเจนเกิดเป็น SO_2 ทั้งหมด



รูปที่ 2 การเกิดออกไซด์ของกำมะถันของการเผาไหม้สารระเหย

ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดตัวของ SO_2 กับอัตราการเผาไหม้ของสารระเหยคือสมการข้างล่างนี้

$$R_{SO_2} = x_s \cdot R_v \quad (23)$$

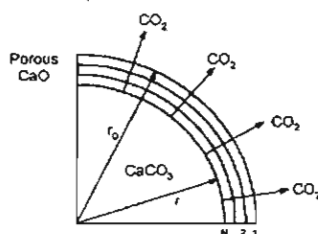
R_{SO_2} คือค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาของ SO_2 x_s คือสัดส่วนโดยมวลของกำมะถัน R_v คืออัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหย

2.4 สมการทางคณิตศาสตร์สำหรับการแตกตัวของแคลเซียมคาร์บอเนต ($CaCO_3$) [3]

สมดุลเคมีของการแตกตัวของ $CaCO_3$ แสดงได้ดังนี้



แนวความคิดทั้งหมด [3] แสดงดังรูปที่ (3) กระบวนการแตกตัว (Calcination) ถูกอธิบายโดยรูปแบบของแกนที่กำลังหดตัวสำหรับอนุภาคที่เป็นทรงกลม



รูปที่ 3 แสดง Schematic Diagram ของ Calcination Model

สมการที่เกี่ยวข้องในกระบวนการ Calcination คือ

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{M}{\rho} R_D \quad (25)$$

$$\text{และที่ } t=0 \quad r = r_0 \quad (26)$$

$$R_D = k_D (P_e - P) \quad (27)$$

$$k_D = 0.00122 \exp(-4026/T) \quad (28)$$

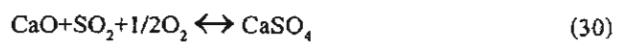
$$P_e = \exp(17.74 - 0.00108T + 0.332 \ln T - 22020/T) \quad (29)$$

r คือรัศมีของแกนที่หดตัวของ $CaCO_3$ t เป็นเวลา M คือน้ำหนักโดยโมลของ $CaCO_3$ ρ คือ ความหนาแน่น ของ $CaCO_3$ R_D คืออัตราการสลายตัว r_0 คือรัศมีของอนุภาคเริ่ม

ต้น ซึ่งสมมติให้มีค่าคงที่ k_D คือค่าคงที่ของอัตรา P_e คือสมดุลความดันแยกตัวของ CO_2 (Weast, 1975) P คือ partial pressure ของ CO_2 ที่ผิวระหว่าง CaO กับ $CaCO_3$ และ T เป็นค่าอุณหภูมิสัมบูรณ์

2.5 สมการทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ด้วยแคลเซียมออกไซด์ [2], [5]

สมดุลเคมีระหว่าง CaO และ SO_2 แสดงได้ดังนี้



อัตราการเกิดปฏิกิริยานิยามได้ดังนี้คือ

$$r = \frac{1}{W} \frac{dn'}{dt} \quad (31)$$

r คือ อัตราการเกิดปฏิกิริยา w คือน้ำหนักของ calcined stone n' คือ gram moles ของ SO_3 ในเวลานั้น ๆ สำหรับปฏิกิริยาใน solid ที่มีรูพรุน [5]

$$\frac{-dn}{dt} = k_v V C^m \eta \quad (32)$$

$$\text{แต่ว่า } \frac{dn'}{dt} = -\frac{dn}{dt} \quad (33)$$

dn/dt คืออัตราการเปลี่ยน SO_2 ในก๊าซเฟส k_v คือค่าคงที่ของอัตราการเกิดปฏิกิริยาต่อหน่วยปริมาตรของของแข็ง V คือปริมาตรของอนุภาค C คือความเข้มข้นของ SO_2 m คืออันดับของปฏิกิริยาเทียบกับ SO_2 η คือตัวแปรที่ชี้ให้เห็นถึงการลดลงของอัตราการดูดซับเนื่องจาก SO_2 ดังนั้นอัตราการเกิดปฏิกิริยาเท่ากับ

$$r = \frac{1}{w} \frac{dn'}{dt} = \frac{\eta}{\rho} k_v C^m \quad (34)$$

ρ คือความหนาแน่น นอกจากนั้นการเพิ่มขึ้นของอัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นอยู่กับเพิ่มขึ้นของ SO_2 ซึ่งจะได้

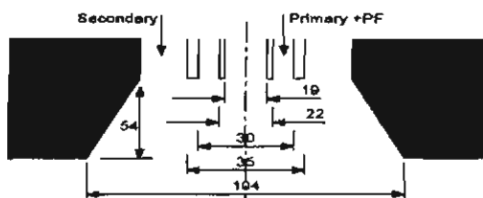
$$r = r_0 e^{-\beta \frac{\eta}{w}} e^{(-E/RT) + (E/RT_{ref})} \frac{C^m}{C_{ref}^m} \quad (35)$$

r_0 เป็นการเกิดปฏิกิริยาในสภาวะเริ่มต้น r คืออัตราการเกิดปฏิกิริยา [5], [2] β เป็นตัวแปรที่ได้จากการทดลอง E คือ Activation energy R คือ ค่าคงที่ของก๊าซ T คืออุณหภูมิ T_{ref} คืออุณหภูมิอ้างอิงที่ 1143 °K C_{ref} เป็นความเข้มข้นของ SO_2 2.9×10^{-8} กรัมโมล/cm³

3. ลักษณะห้องเผาไหม้ [1], [4]

เตาเผาที่มีลักษณะเป็นทรงกระบอกแนวตั้งและเปลวไฟลดลงด้านล่าง มีเส้นผ่านศูนย์กลาง 0.6 เมตร และ ความ

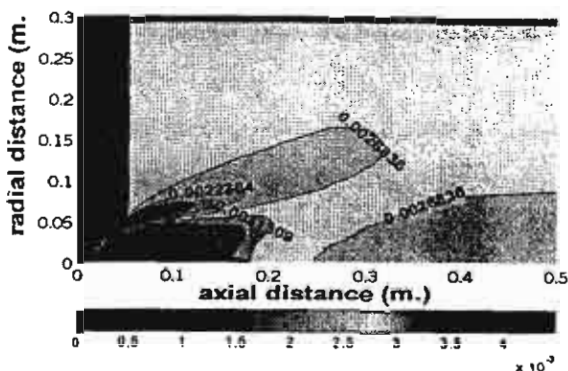
ยาวรวม 3.0 เมตร เส้นผ่านศูนย์กลางของหัวเผา (d) 0.056 เมตร มีการสร้างคอนกรีตทนไฟที่บริเวณใกล้หัวเผาเพื่อป้องกันการสูญเสียความร้อน รูปที่ 4 เป็นโครงสร้างของหัวเผาที่ชื่อว่า Single Annular orifice



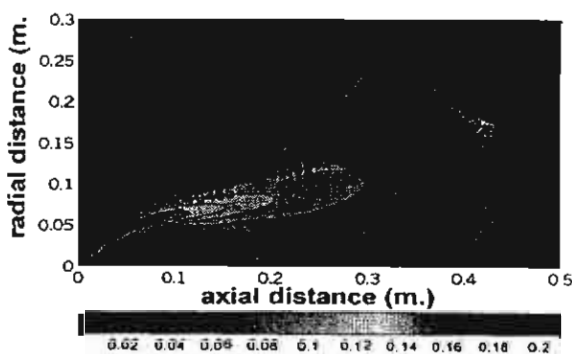
รูปที่ 4 โครงสร้างของหัวเผาในห้องเผาไหม้

4. ผลการคำนวณและการวิเคราะห์

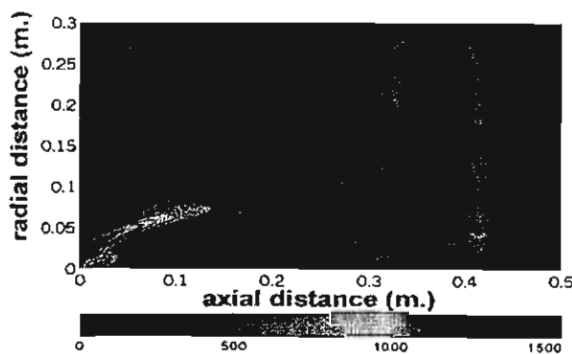
จากรูปที่ 5, 6 และ 7 ความเข้มข้นของ SO_2 จะสูงที่สุดในช่วง 0.05-0.18 เมตร ความเข้มข้นของ O_2 จะสูงที่สุดในช่วง 0-0.1 เมตร และอุณหภูมิจะสูงที่สุดในช่วง 0.05-0.18 เมตร จากทางออกของหัวเผา พบว่า SO_2 , O_2 และอุณหภูมิจะสัมพันธ์กัน เนื่องจากถ่านหินปลดปล่อยสารระเหยออกมาและเกิดการเผาไหม้ในช่วงดังกล่าว โดยในช่วง 0-0.12 เมตรจะมีความดันต่ำที่สุด (รูปที่ 8) จากรูปที่ 9 พบว่าอนุภาคจะถูกพ่นเข้าไปใกล้กระแสการไหลวนบริเวณทางออกของ burner โดยอนุภาคจะเคลื่อนที่ผ่านบริเวณที่มีความเข้มข้นของ SO_2 อยู่ในระดับที่สูง และมีอุณหภูมิประมาณ 1300°C โดยเวลาเฉลี่ยที่อยู่ในห้องเผาไหม้ประมาณ 42 วินาที จากรูปที่ 10 อนุภาคจะถูกพ่นทางด้านบนที่ระยะตามแนวแกนเท่ากับ 0.09 เมตร โดยอนุภาคจะถูกพ่นเข้าไปในบริเวณที่เกิดกระแสไหลวนด้านนอกของการเผาไหม้ ซึ่งจะทำให้อนุภาคไหลวนอยู่นานกระทั่งเกิดจลจลของการจำลองภายในห้องเผาไหม้ โดยอนุภาคจะเคลื่อนที่ผ่านบริเวณที่มีอุณหภูมิประมาณ 1300°C และมีการแพร่กระจายได้ดีกว่าการพ่นที่ตำแหน่งอื่น จากรูปที่ 11 พบว่าอนุภาคถูกพ่นทางด้านบนที่ระยะตามแนวแกนเท่ากับ 0.4 เมตร อนุภาคจะเคลื่อนที่ไปทางด้านขวาซึ่งจะเลยช่วงการเกิดกระแสการไหลวนด้านนอกของการเผาไหม้ โดยเวลาเฉลี่ยที่อยู่ภายในห้องเผาไหม้ประมาณ 35 วินาที ซึ่งอนุภาคจะไม่เข้าบริเวณที่มีความเข้มข้นของ SO_2 สูงเลย และบริเวณที่อนุภาคเคลื่อนที่ผ่านอุณหภูมิจะ drop ลงเรื่อย ๆ จนต่ำกว่า 900°C ซึ่งจากรูปที่ 10 แสดงให้เห็น



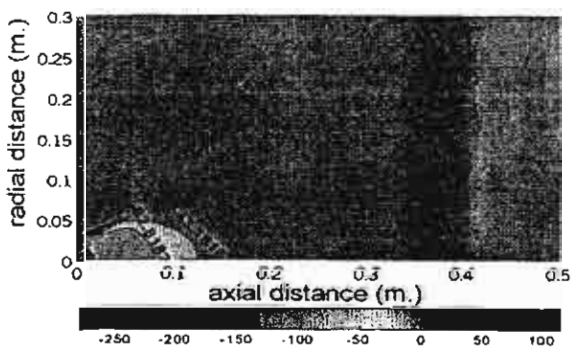
รูปที่ 5 การกระจายตัวของความเข้มข้นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่บริเวณใกล้หัวเผา



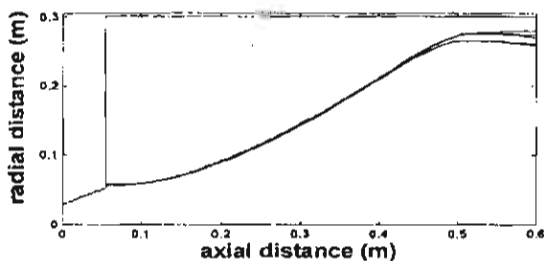
รูปที่ 6 การกระจายตัวของความเข้มข้นของก๊าซออกซิเจนที่บริเวณใกล้หัวเผา



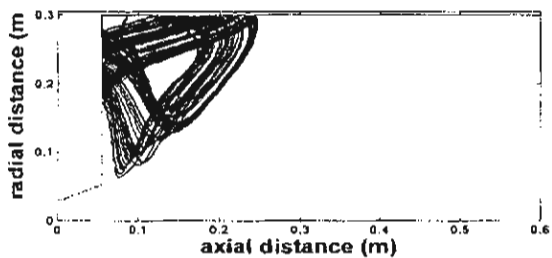
รูปที่ 7 การกระจายตัวของอุณหภูมิ($^\circ\text{C}$)ที่บริเวณใกล้หัวเผา



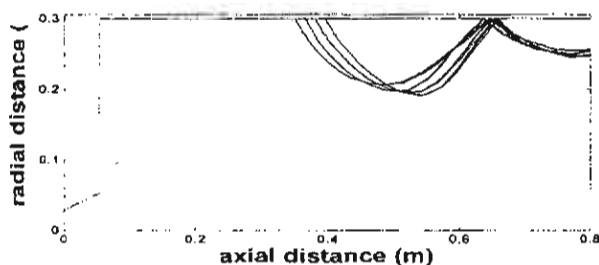
รูปที่ 8 การกระจายตัวของความดันที่บริเวณใกล้หัวเผา



รูปที่ 9 เส้นทางเดินเฉลี่ยของอนุภาคที่บริเวณใกล้หัวเผา
โดยพันททางด้านซ้าย $\phi = 0.0096$ cm, $y=0.055$ m



รูปที่ 10 เส้นทางเดินเฉลี่ยของอนุภาคที่บริเวณใกล้หัวเผา
โดยพันททางด้านบน $\phi = 0.0096$ cm, $x=0.09$ m



รูปที่ 11 เส้นทางเดินเฉลี่ยของอนุภาคที่บริเวณใกล้หัวเผา
โดยพันททางด้านบน $\phi = 0.0096$ cm, $x=0.4$ m

ถึงตำแหน่งที่ทำให้มีแนวโน้มในการดูดซับ SO_2 อยู่ในเกณฑ์ที่ดี เนื่องจากอนุภาคจะใช้เวลาอยู่ในห้องเผาไหม้นานกว่า โดยการแพร่กระจายของอนุภาคดีกว่าการพ่นที่ตำแหน่งอื่น ๆ และจาก [2] ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จะถูกดูดซับได้ดีในช่วงอุณหภูมิประมาณ 900°C และ 1300°C ซึ่งจะเห็นได้ว่าอนุภาคจะเคลื่อนที่ผ่านบริเวณที่มีอุณหภูมิอยู่ในช่วงดังกล่าว

5. สรุป

จากการศึกษาพบว่านอกจากตำแหน่งของการพ่นสารดูดซับคือ CaCO_3 มีผลต่ออัตราการแตกตัวของ CaCO_3 และอัตราการดูดซับ SO_2 เป็นอย่างมาก อัตราการดูดซับ SO_2 ยังเป็นฟังก์ชันของเวลา ดังนั้นจึงจำเป็นที่จะต้องออก

แบบห้องเผาไหม้เพื่อที่จะทำให้อนุภาคอยู่ในห้องเผาไหม้ได้นานที่สุดและการกระจายตัวให้ได้มากที่สุดเพื่อที่ดูดซับ SO_2 ได้มากขึ้น ซึ่งงานวิจัยที่นำมารายงานในบทความนี้เป็นส่วนหนึ่งของการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ซึ่งรวมการเกิดและการสลายตัวของ SO_2 ไว้ด้วยกันซึ่งอยู่ในช่วงของการสมดุลพลังงาน (energy balance) และสมดุลมวล (mass balance) ภายในห้องเผาไหม้ ซึ่งยังต้องทำการพัฒนาต่อไปอีก

6. เอกสารอ้างอิง

- [1] จารุวัตร เจริญสุข และ ปัญญา แดงวิไลลักษณ์, “แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการเผาไหม้ของถ่านหินผง,” วิศวกรรมลาดกระบัง, ปีที่ 16, ฉบับที่ 2, หน้า 24-29, มิถุนายน 2542.
- [2] จารุวัตร เจริญสุข และ วิภู ศรีสืบสาย, “แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยแคลเซียมออกไซด์,” สัมมนาวิชาการวิศวกรรมเครื่องกลครั้งที่ 13 สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง กรุงเทพฯ, หน้า 1-8, 2542.
- [3] D.S. Geoffrey, C.K. John and W.P. David, “A Mathematical Model for the flash Calcination of Dispersed CaCO_3 and Ca(OH)_2 Particles,” Ind.Eng. Chem. Res., Vol 28, No 2., pp.155-160, 1989.
- [4] J. Charoensuk, “The Application of Mathematical Model for Scaling Pulverized coal combustors,” Ph.D Thesis, University of London, 1996.
- [5] R.H. Borgwardt, “Kinetics of the Reaction of SO_2 with Calcined Limestone,” AIChE J. Vol.4, No.1., pp.59-64. Jan., 1970.

การศึกษาผลกระทบของขนาดต่อเส้นทางเดินของอนุภาค แคลเซียมคาร์บอเนตในห้องเผาไหม้ถ่านหินผง

Effect of Calcium Carbonate Particle Size on its Trajectory in Coal Combustion Chamber

จรรุวัตร เจริญสุข สนั่นยา มิเลียง
คณะวิศวกรรมศาสตร์ ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

บทคัดย่อ

บทความนี้ศึกษาถึงผลของขนาดต่อเส้นทางเดินของผงหินปูน หรือ แคลเซียมคาร์บอเนต (CaCO_3) ซึ่งใช้ดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (SO_2) ในห้องเผาไหม้ถ่านหินผงจำลอง[4] แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของเส้นทางเดินอนุภาคหินปูนถูกพัฒนาขึ้นในงานวิจัยนี้ โดยพัฒนาต่อเนื่องจากแบบจำลองการเผาไหม้ถ่านหินผง[6] ใช้การพ่นแคลเซียมคาร์บอเนตไปในห้องเผาไหม้ พิจารณาจาก สมการถ่ายเทมวล สมการโมเมนตัม ผลที่ได้นำไปหาเส้นทางเดินเฉลี่ยอนุภาคเปรียบเทียบกับการกระจายตัวของซัลเฟอร์ไดออกไซด์ จากการศึกษาพบว่าขนาดที่เปลี่ยนแปลงมีผลต่อเส้นทางเดินของผงหินปูนน้อยมาก และจากการศึกษาเส้นทางเดินอนุภาคผงหินปูนที่ขนาด 0.025 ซม. ที่ปล่อยจากทางเข้าของผงถ่านหิน ทางเดินอนุภาคผงหินปูนที่ผ่านช่วงที่มีความเข้มข้นของซัลเฟอร์ไดออกไซด์สูง มีแนวโน้มการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ได้มาก

Abstract

This research concerns about a study on the effect of particle size of limestone (calcium carbonate; CaCO_3) on its trajectory for use in sulfur dioxide (SO_2) adsorption in the coal combustion chamber[4]. The mathematical model for limestone particle trajectory is incorporated with the model of coal combustion developed earlier [6]. Calcium carbonate is injected the combustion chamber and its trajectory is determined by mass transfer and momentum equations. From the study it is found that the change in size has little effect on limestone particle trajectory. As when the particle, 0.025 cm. in diameter, is injected from the burner inlet next to the coal exit port, its trajectory passes a high sulfur concentration region. Moreover, due to an effect of flow aerodynamic the higher degree of dispersion is observed. It is more likely that emitting limestone particle from the burner exit will lead to greater sulfur oxide adsorption than emitting it from the circumferential position around the burner.

1. บทนำ

ถ่านหินเป็นเชื้อเพลิงราคาถูกและมีปริมาณสำรองมากกว่าเมื่อเทียบกับเชื้อเพลิงอื่น แต่เมื่อนำมาใช้งานกลับมีผลกระทบตามมา โดยถ่านหินผงจะถูกป้อนเข้าในหีบเผาไหม้ที่มีอุณหภูมิสูง ถ่านหินจะติดไฟและเกิดการเผาไหม้ซึ่งจะทำให้การปล่อยสารระเหย (Volatile) และ Tar รวมตัวกับออกซิเจนก่อให้เกิดความร้อนและก๊าซต่างๆ เช่น น้ำ คาร์บอนไดออกไซด์ ออกไซด์ของไนโตรเจน ออกไซด์ของกำมะถัน ฯลฯ แต่ที่มีผลกระทบมาก คือ ออกไซด์ของกำมะถัน (Sulfur Oxide) ซึ่งเกิดจากการเผาไหม้และเป็นก๊าซที่เป็นอันตรายต่อสุขภาพ และ สิ่งแวดล้อม เช่น ฝนกรด ฯลฯ ต้องเสียค่าใช้จ่ายสูงในการกำจัด จึงมีการควบคุมการปล่อยก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์จากการเผาไหม้ถ่านหินผง ในพื้นที่จะใช้วิธีลดปริมาณ SO_2 ในช่วงหลังการเผาไหม้ซึ่งมีวิธีการมี 3 วิธี คือ แบบแห้ง แบบกึ่งแห้ง และ แบบเปียก โดยใช้ แคลเซียมคาร์บอเนต หรือ แคลเซียมออกไซด์ ซึ่งในการดูดซับ SO_2 ให้ได้ดีที่สุดนั้นขึ้นอยู่กับตัวแปรหลายอย่าง บทความนี้จะทำการศึกษาผลกระทบของขนาดต่อเส้นทางเดินอนุภาคแคลเซียมคาร์บอเนตในหีบเผาไหม้ถ่านหินผง โดยนำโปรแกรมแบบจำลองการเผาไหม้ของถ่านหินผง[4] ที่เพิ่มแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการก่อตัวของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์[2] ช่วยในการคำนวณ สำหรับการศึกษผลกระทบของขนาดต่อเส้นทางเดินอนุภาคแคลเซียมคาร์บอเนตในหีบเผาไหม้ มีสมการที่เกี่ยวข้อง คือ สมการทางคณิตศาสตร์ของก๊าซ สมการการถ่ายเทความร้อนป้อน สมการอนุรักษ์มวล สมการโมเมนตัม สมการคณิตศาสตร์สำหรับการแตกตัวของ $CaCO_3$ และสมการสำหรับการดูดซับ SO_2 ด้วย CaO โดยอยู่ภายใต้สมมติฐานที่ว่า อนุภาคของ $CaCO_3$ เป็นทรงกลมและความหนาแน่นทางเข้าคงที่

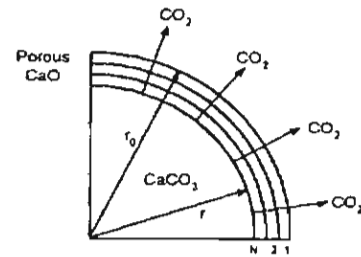
2. สมการพื้นฐาน

2.1 สมการสำหรับการแตกตัวของแคลเซียมคาร์บอเนต [3]

สมดุลเคมีของการแตกตัวของ $CaCO_3$ คือ

$$CaCO_3 \leftrightarrow CaO + CO_2 \quad (1)$$

กระบวนการแตกตัว (Calcination) อธิบายโดยรูปแบบของแกนที่กำลังหดตัวสำหรับอนุภาคที่เป็นทรงกลมดังรูปที่ 1



รูปที่ 1 แสดง Schematic Diagram ของ Calcination Model

สมการในกระบวนการ calcination คือ

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{M}{\rho} R_D \quad (2)$$

$$\text{และที่ } t = 0 \quad r = r_0 \quad (3)$$

$$R_D = k_D (P_e - P) \quad (4)$$

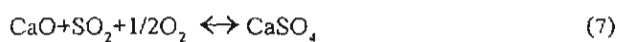
$$k_D = 0.00122 \exp(-4026/T) \quad (5)$$

$$P_e = \exp(17.74 - 0.00108T + 0.332 \ln T - 22020/T) \quad (6)$$

r คือ รัศมีของแกนที่หดตัวของ $CaCO_3$ (m.) t คือ เวลา (s.) M คือ น้ำหนักโมลของ $CaCO_3$ ($kg.kmol^{-1}$) ρ คือ ความหนาแน่นของ $CaCO_3$ ($kg.m^{-3}$) R_D คือ อัตราการสลายตัว ($kmol.m^{-2}.s^{-1}$) r_0 คือ รัศมีของอนุภาคเริ่มต้น (m.) สมมติให้คงที่ k_D คือ ค่าคงที่ของอัตรา ($kmol.m^{-2}.s^{-1}.atm^{-1}$) P_e คือ สมดุลความดันแยกตัวของ CO_2 (atm)[3] P คือ partial pressure ของ CO_2 ที่ผิวระหว่าง CaO กับ $CaCO_3$ (atm) และ T คือ ค่าอุณหภูมิสัมบูรณ์ (K)

2.2 สมการสำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ด้วย CaO [1], [5]

สมดุลเคมีระหว่าง CaO และ SO_2 แสดงได้ดังนี้



สำหรับปฏิกิริยาใน solid ที่มีรูพรุน [5]

$$\frac{-dn}{dt} = k_v V C^m \eta \quad (8)$$

$$\text{แต่ว่า} \quad \frac{dn'}{dt} = \frac{-dn}{dt} \quad (9)$$

$\frac{dn}{dt}$ คือ อัตราการเปลี่ยน SO_2 ในก๊าซเฟส ($g.moles/sec.$) k_v คือ ค่าคงที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาต่อหน่วยปริมาตรของแข็ง ($sec^{-1}(g.moles/cc.)^m$) V คือ ปริมาตรของอนุภาค

C คือ ความเข้มข้นของ SO_2 (g.moles/cc.) m คือ ลำดับความเข้มข้นของ SO_2 , η คือ ตัวแปรที่ชี้ให้เห็นถึงการลดลงของอัตราการดูดซับเนื่องจาก SO_2 , n' คือ gram moles ของ SO_2 (g.moles) ดังนั้นอัตราการเกิดปฏิกิริยาเท่ากับ

$$r = \frac{1}{w} \frac{dn'}{dt} = \frac{\eta}{\rho} k_v C^m \quad (10)$$

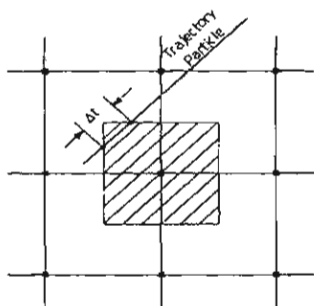
r คือ อัตราการเกิดปฏิกิริยา SO_2 (g.moles/g.sec.) w คือ น้ำหนักของ calcined stone (g.) ρ คือ ความหนาแน่น bulk ของของแข็ง (g./cc.) นอกจากนี้การเพิ่มขึ้นของอัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นอยู่กับเพิ่มขึ้นของ SO_2 จะได้

$$r = r_0 e^{-\beta \frac{n}{w}} e^{(-E/RT) + (E/RT_{ref})} \frac{C^m}{C_{ref}^m} \quad (11)$$

r_0 คือ การเกิดปฏิกิริยาในสภาวะเริ่มต้น (ไม่มีซัลเฟต) (g.moles/g.sec.) r คืออัตราการเกิดปฏิกิริยา [5],[2] β คือ ตัวแปรจากการทดลอง E คือ ค่าคงที่ของก๊าส (Activation energy) (cal./g.mole) T คืออุณหภูมิ T_{ref} คือ อุณหภูมิอ้างอิงที่ 1143 K C_{ref} คือ ความเข้มข้นของ SO_2 มีค่าเท่ากับ 2.9×10^{-8} g.mole/ cm^3 .

2.3 แบบจำลองของอนุภาค[2]

การกระจายตัวของอนุภาคผงหินปูนใช้วิธี Lagrangian เหมือนถ่านหินผง สมมติว่าอนุภาคผงหินปูนที่ถูกปล่อยเข้าไปลักษณะเป็นทรงกลมและความหนาแน่นทางเข้าคงที่ โดยกำหนดตำแหน่งแน่นอน การกระจายขนาดผงหินปูนจะถูกแบ่งเป็นช่วงๆ แต่ละช่วงจะแทนด้วยขนาดเฉลี่ยของช่วงนั้นๆ รูปที่ 2 แสดงการกระจายตัวของอนุภาคเพื่อหาค่าตอบสำหรับขนาดอนุภาคและตำแหน่งเริ่มต้น



รูปที่ 2 การกระจายตัวของอนุภาคโดยวิธี Lagrangian ผ่านเซลล์

2.3.1 สมการอนุพันธ์มวล[2]

การถ่ายเทมวลจากอนุภาคสู่ก๊าซสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\frac{dm_p}{dt} = -R_m \quad (12)$$

ซึ่ง R_m คือ อัตราเชิงปริมาตรของ Mass efflux จากอนุภาคสู่ก๊าซโดยการปลดปล่อย CO_2 ในช่วงการเกิดการแตกตัว และช่วงการดูดซับ SO_2

2.3.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัมของอนุภาค

2.3.2.1 การเคลื่อนที่เฉลี่ยของอนุภาค[2]

สมมูลโมเมนตัมของอนุภาคที่เคลื่อนที่เขียนได้ดังนี้

$$\frac{dm_p \bar{u}_i}{dt} = \sum \bar{F}_i \quad (13)$$

พจน์ทางด้านขวามือของสมการเป็นผลจากแรงกระทำภายนอก ดังนั้นแรงนี้อาจจะเขียนในรูปสมการได้ดังนี้

$$F_d = C_D \rho \frac{A_p}{2} (\bar{u}_g - \bar{u}_p) |\bar{u}_g - \bar{u}_p| \quad (14)$$

$$C_D = (1 + 0.15 \text{Re}_p^{0.687}) \frac{\text{Re}_p}{24} \quad (15)$$

$\bar{u}_g$ คือ ค่าความเร็วที่เวลาเฉลี่ยของก๊าซ $\bar{u}_p$ คือ ค่าความเร็วที่เวลาเฉลี่ยของอนุภาค A_p คือ พื้นที่หน้าตัดของอนุภาค ρ คือ ค่าความหนาแน่นของก๊าซ C_D คือ สัมประสิทธิ์แรงดูด และ Re_p คือ ค่า Reynolds number ของอนุภาค

$$\text{Re}_p = \frac{\rho |\bar{u}_g - \bar{u}_p| d_p}{\mu} \quad (16)$$

μ คือ ค่าความหนืดจลนศาสตร์ของก๊าซ และ d_p คือ เส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาค

$$\alpha = \frac{18\mu C_d \text{Re}_p}{24\rho_p d_p^2} \quad (17)$$

α คือ สัมประสิทธิ์แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเร่งของอนุภาคกับความเร่งสัมพัทธ์

2.3.2.2 การกระจายของอนุภาคเกิดขึ้นจากความปั่นป่วน

แบบจำลองของ Lockwood(1980)[3] อธิบายการกระจายตัวของอนุภาคเกิดขึ้นจากความปั่นป่วน ดังสมการ

$$u_{\text{disp}} = c_{1d} (\overline{u'^2})^{1/2} \quad (18)$$

$$v_{\text{disp}} = c_{2d} (\overline{v'^2})^{1/2} \quad (19)$$

ซึ่งค่า C_{1d} และ C_{2d} คือ ค่าคงที่ที่ได้จากการทดลองมีค่าเท่ากับ 1 ประยุกต์กับข้อสมมติฐานของ Boussinesq ความเร็วที่แกว่งไปมาสามารถเขียนได้ดังนี้

$$\overline{u'^2} = -c_u 2 \frac{\mu_1}{\rho} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} k \quad (20)$$

$$\overline{v'^2} = -c_b 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} k \quad (21)$$

ซึ่งค่า C_μ และ C_b คือค่าคงที่เฉพาะเท่ากับ 1 ความเร็วของการกระจายสามารถแสดงอยู่ในพจน์ของการเปลี่ยนแปลงความเร็วเฉลี่ยและพลังงานจลน์

$$u_{disp.} = c_1 \left(-c_a 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} k \right)^{1/2} \quad (22)$$

$$v_{disp.} = c_2 \left(-c_b 2 \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} \right) + \frac{2}{3} k \right)^{1/2} \quad (23)$$

ดังนั้นสมการสำหรับสมมูลของโมเมนตัมในรูปพีคิตทรงกระบอก คือ

$$\frac{d\tilde{u}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{u}_p \pm u_{disp.} - \tilde{u}_g) \quad (24)$$

$$\frac{d\tilde{v}_p}{dt} = -\alpha (\tilde{v}_p \pm v_{disp.} - \tilde{v}_g) + \frac{\tilde{w}^2}{r_p} \quad (25)$$

r_p คือ ระยะทางจากแกนสมมาตรของอนุภาค โดยสมมุติว่าการไหลเป็นแบบสมมาตรตามแนวแกน

2.4 สมการทางคณิตศาสตร์ของก๊าซ

2.4.1 สมการความต่อเนื่อง[2]

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tilde{\rho} \tilde{v}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tilde{\rho} \tilde{u}) = \tilde{S}_{\rho} \quad (26)$$

$\tilde{S}_{\rho}$ คือ Source term ของการถ่ายโอนมวลของแก๊สสู่ก๊าซ

2.4.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัม[2]

$$\frac{\partial}{\partial x_i} [\tilde{\rho} \tilde{u}_i \Phi] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Gamma_{\phi, \mu} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right] + S_{\phi, \mu} + S_{\phi, \phi} \quad (27)$$

$\Gamma_{\phi, \mu}$ คือ สัมประสิทธิ์การนำหรือการพาความร้อน Φ คือ ค่าเฉลี่ยของคุณสมบัติการไหล[4] $S_{\phi, \mu}$ คือ Source term ของก๊าซ $S_{\phi, \phi}$ คือ Source term ของอนุภาคของแข็ง

2.4.3 สมการการถ่ายเทความร้อนปั่นป่วน[2]

พลังงานจลน์ของความปั่นป่วนและอัตราการสลายตัวของมันสามารถแสดงอยู่ในรูปแบบได้ดังนี้

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{\infty}}{\sigma_k} + \mu_1 \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \\ &+ \tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} - \tilde{\rho} \varepsilon \end{aligned} \quad (28)$$

μ_{∞} คือ Eddy viscosity ε คือ อัตราสลายตัวของความปั่นป่วน

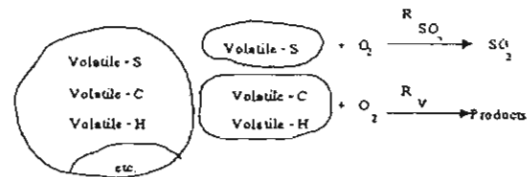
สมการการเคลื่อนย้ายอัตราการสลายตัวของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน[2]

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{\infty}}{\sigma_\varepsilon} + \mu_1 \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \\ &- C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} G + C_{\varepsilon 2} \tilde{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (29)$$

σ_ε คือ Prandtl/Schmidt number สำหรับอัตราการกระจาย $C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$ คือ ค่าคงที่ eddy viscosity ในเทอมพลังงานจลน์

2.5 แบบจำลองของออกไซด์ของกำมะถัน [2]

การเกิดออกไซด์ของกำมะถันที่ประกอบอยู่ในสารระเหยสามารถอธิบายได้ดังรูปที่ 2



รูปที่ 3 การเกิดออกไซด์ของกำมะถันการเผาไหม้สารระเหย

จากรูปที่ 3 การเกิดปฏิกิริยาถูกควบคุมโดยอัตราการผสมความปั่นป่วน เป็นสมมติฐานที่ใช้สำหรับเชื้อเพลิงและอากาศที่เข้ามาผสมกันในห้องเผาไหม้ (non-premixed combustion) ซึ่งความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการเกิดตัวของ SO_2 กับ อัตราการเผาไหม้ของสารระเหย[5] คือ

$$R_{SO_2} = x_s \cdot R_v \quad (30)$$

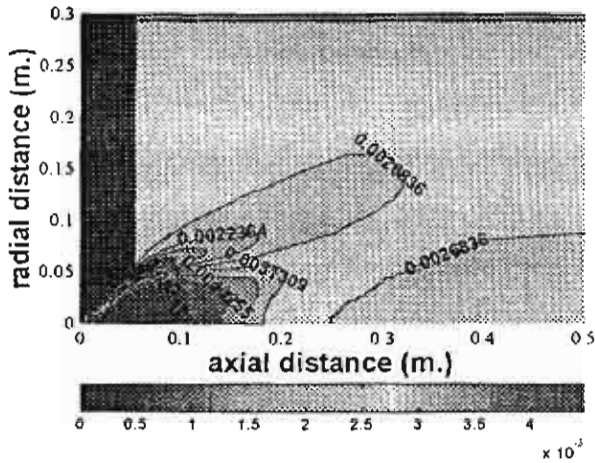
R_{SO_2} คือ อัตราการเกิดปฏิกิริยาของก๊าซ SO_2 x_s คือ สัดส่วนโดยมวลของกำมะถัน R_v คือ อัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารระเหย

2.5 โครงสร้างโปรแกรมแบบจำลองห้องเผาไหม้ [2]

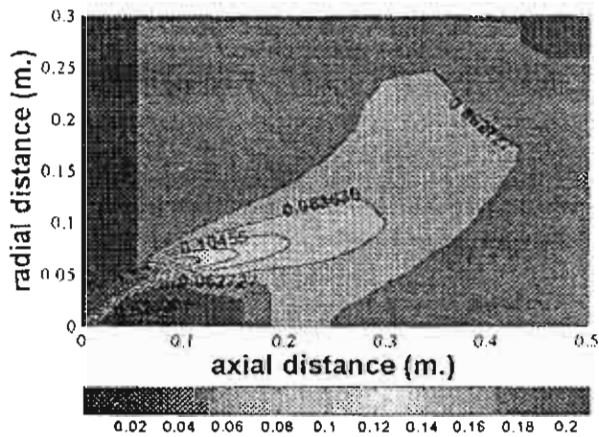
แบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้คำนวณ ความเร็ว ความดัน อุณหภูมิ และคุณสมบัติต่างๆ ของการเผาไหม้ภายในห้องเผาไหม้ โดยใช้สมการความต่อเนื่อง โมเมนตัม การถ่ายเทพลังงานของ Turbulence โดยนำวิธี PISO algorithm และ วิธี Hybrid Scheme แก้สมการเพื่อหาค่า $\tilde{p}$, $\tilde{u}$, $\tilde{v}$, $\tilde{w}$ ใช้วิธี QUICKS Scheme แก้สมการการเคลื่อนย้ายหาค่า k , ε , ส่วนคุณสมบัติต่างๆของการเผาไหม้ ใช้วิธี TDMA [2] แก้สมการเพื่อหาค่าตอบของระบบ

3. ผลการคำนวณและการวิเคราะห์

การวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคและองค์ประกอบอื่นๆ มีผลต่อปฏิกิริยาการดูดซับ SO_2 โดยรูปที่ 4 การกระจายความเข้มข้นของ SO_2 จะมากในช่วง 0.03-0.15 เมตร จากทางออกของหัวเผา รูปที่ 5 การกระจายตัวของ O_2 อยู่ในช่วง 0.03-0.18 เมตร จากทางออกของหัวเผา รูปที่ 6 การกระจายตัวของอุณหภูมิ จะสูงในช่วง 0.08-0.18 เมตร จากทางออกหัวเผา



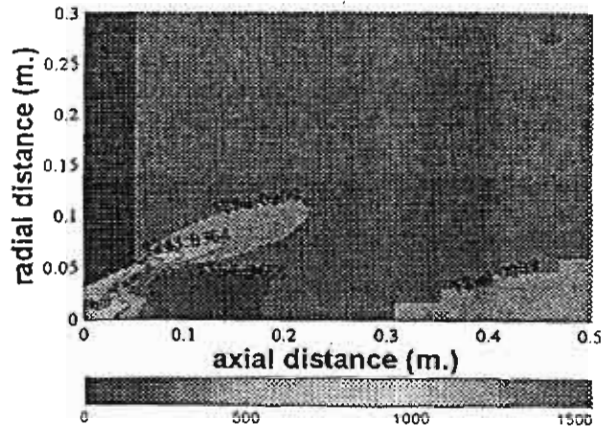
รูปที่ 4 การกระจายตัวความเข้มข้น SO_2 บริเวณใกล้หัวเผา



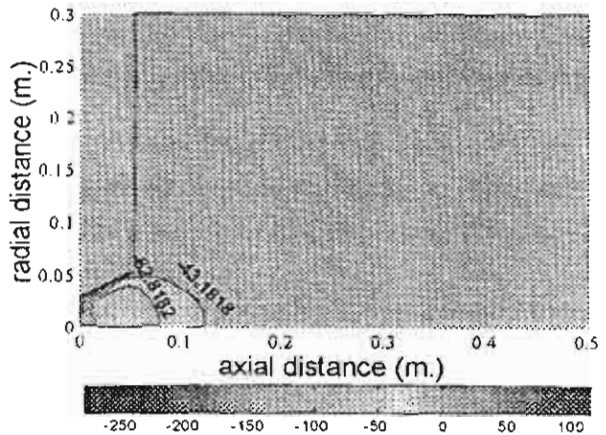
รูปที่ 5 การกระจายตัวของก๊าซออกซิเจนบริเวณใกล้หัวเผา

รูปที่ 8 อนุภาคถูกพ่นเข้าทางซ้ายห้องเผาไหม้ผ่านบริเวณที่มีความเข้มข้น SO_2 สูง ผ่านแนวการกระจายความเข้มข้นของ SO_2 มีระยะทางเดินอนุภาคที่เริ่มติดถึงผนังด้านบน 0.36 เมตร และ เวลา 13.89 วินาที เมื่ออนุภาคเคลื่อนที่ต่อความเข้มข้นของ SO_2 และ O_2 น้อยลง ความดันจะสูงขึ้น รูปที่ 9 เส้นทางเดินอนุภาคมีลักษณะคล้ายรูปที่ 8 แต่ระยะทางเดินอนุภาคที่เริ่มติดถึงผนังด้านบน 0.38 เมตร และ เวลา 18.9 วินาที รูปที่ 10 จะมีเส้นทางเดินที่ผ่านช่วงที่มี

ความเข้มข้น SO_2 สูงกว่ารูปที่ 9 เนื่องจากเส้นทางเดินอนุภาค CaCO_3 การกระจายตัวทั่วบริเวณความเข้มข้น SO_2

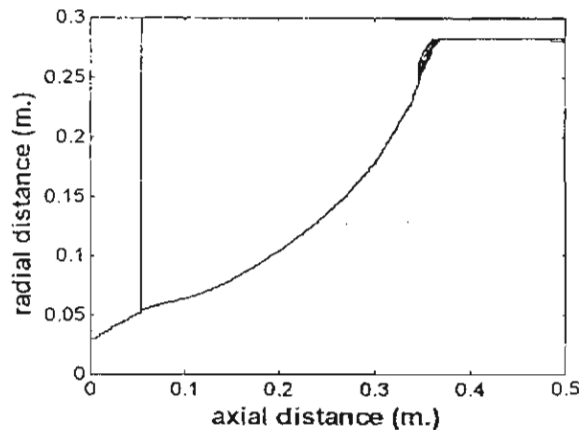


รูปที่ 6 การกระจายตัวของอุณหภูมิ($^{\circ}\text{C}$) บริเวณใกล้หัวเผา

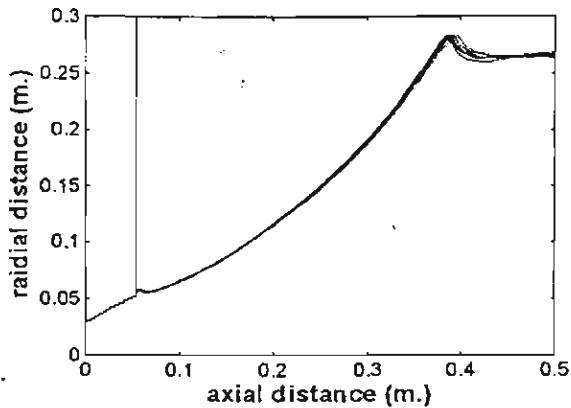


รูปที่ 7 การกระจายตัวของความดัน(kPa) บริเวณใกล้หัวเผา

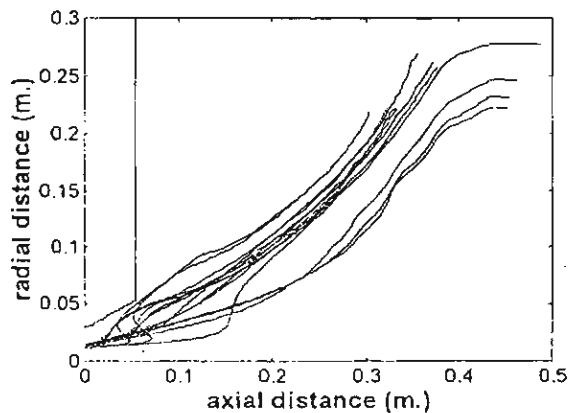
จากแบบจำลองการศึกษาผลกระทบของขนาดต่อเส้นทางเดินอนุภาค CaCO_3 ในห้องเผาไหม้ มีการเคลื่อนที่ของอนุภาค CaCO_3 ที่ขนาดต่างๆ กันแสดงได้ดังนี้



รูปที่ 8 เส้นทางเดินเฉลี่ยของอนุภาค CaCO_3 ระหว่างการเกิดปฏิกิริยาที่บริเวณใกล้หัวเผา โดยพ่นเข้าด้านซ้ายของห้องเผาไหม้ ขนาดอนุภาคคือ 0.0001 ซม.



รูปที่ 9 เส้นทางเดินเฉลี่ยของอนุภาค CaCO_3 ระหว่างการเกิดปฏิกิริยาที่บริเวณใกล้หัวเผาโดยพ่นเข้าด้านซ้ายของห้องเผาไหม้ ขนาดอนุภาค คือ 0.025 ซม.



รูปที่ 10 เส้นทางเดินเฉลี่ยของอนุภาค CaCO_3 ระหว่างการเกิดปฏิกิริยาที่บริเวณใกล้หัวเผาโดยพ่นตรงทางเข้าถ่านหิน ขนาดอนุภาค คือ 0.025 ซม.

4.สรุป

จากการศึกษาผลการเปลี่ยนแปลงขนาดต่อเส้นทางเดินของแคลเซียมคาร์บอเนตที่พ่นเข้าไปในห้องเผาไหม้มีผลต่อการดูดซับ SO_2 จากการสังเกตเส้นทางเดินอนุภาค CaCO_3 รูปที่ 9 ระยะทางเดินอนุภาคที่มีการดูดซับ SO_2 ประมาณ 0.38 เมตร และเวลาที่เริ่มฉีกจนถึงผนังด้านบนประมาณ 18.9 วินาที รูปที่ 8 ระยะทางเดินอนุภาคที่มีการดูดซับ SO_2 ประมาณ 0.36 เมตรและเวลาที่เริ่มฉีกจนถึงผนังด้านบนประมาณ 13.89 วินาที พบว่าอนุภาคทั้งสองขนาดที่ศึกษามีเส้นทางเดินเฉลี่ยที่ผ่านแนวกลางของการกระจายความเข้มข้น SO_2 คล้ายกัน และมีความแตกต่างกันน้อยมาก รูปที่ 10 อนุภาค CaCO_3 มีการกระจายตัวดีกว่า เนื่องจากเส้นทางเดินอนุภาคที่ผ่านแนวการกระจายความเข้มข้น SO_2 ซึ่งมี

การกระจายตัวสูงกว่ารูปที่ 9 ประกอบกับการกระจายของอุณหภูมิไม่สูง การกระจายตัวความดันไม่เปลี่ยนแปลง และ การกระจายความเข้มข้นของก๊าซออกซิเจนที่ดี ทำให้มีแนวโน้มการเกิดการแตกตัว และการดูดซับของ CaCO_3 สูงกว่ารูปที่ 9

งานวิจัยชิ้นนี้เป็นส่วนหนึ่งการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์การเผาไหม้ถ่านหินผง ขณะนี้กำลังอยู่ในช่วงของการพัฒนาสมดุลพลังงาน (energy balance) ซึ่งจะทำให้ผลของการทำแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สมบูรณ์ยิ่งขึ้น

5. เอกสารอ้างอิง

- [1] จารุวัตร เจริญสุข และ วิฑู ศรีสืบสาข, "แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับการดูดซับก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ด้วยแคลเซียมออกไซด์," สัมมนาวิชาการวิศวกรรมเครื่องกลครั้งที่ 13 สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง กรุงเทพฯ, หน้า 1-8, 2542.
- [2] ปัญญา แดงวิไลลักษณ์, "แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเกิดออกไซด์ของกำมะถันจากการเผาไหม้ถ่านหินผง," วิทยานิพนธ์, สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง, 2543.
- [3] D.S. Geoffrey, C.K. John and W.P. David, "A Mathematical Model for the flash Calcination of Dispersed CaCO_3 and Ca(OH)_2 Particles," Ind.Eng. Chem. Res., Vol 28, No 2., pp.155-160, 1989.
- [4] J. Charoensok, "The Application of Mathematical Model for Scaling Pulverized coal combustors," Ph.D Thesis, University of London, 1996.
- [5] R.H. Borgwardt, "Kinetics of the Reaction of SO_2 with Calcined Limestone," J.AICHE Vol.4, No.1., pp.59-64. Jan., 1970.
- [6] Rizvi S.M.A., " Prediction of Flow, Combustion and Heat Transfer in Pulverized Coal Flame," Ph.D. Thesis, University of London and the Diploma of Membership of the Imperial College, 1985.