

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ที่สภาวะสมดุลเคมีเพื่อทำนายก๊าซไอเสีย 10 ชนิด  
Combustion Modeling of Practical Chemical Equilibrium for Estimating 10 species of  
Combustion Products

เอนก บุญกว้าง<sup>1\*</sup> และ มกร ลักขณา<sup>2</sup>

<sup>1</sup>สาขาวิชาวิศวกรรมเมคคาทรอนิกส์ คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีปทุมวัน

<sup>2</sup>สาขาวิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีปทุมวัน

833 ถนนพระราม 1 เขตปทุมวัน กรุงเทพมหานคร 10330 E-mail: anek.jet@gmail.com

Anek Bunkwang<sup>1\*</sup> and Makorn Lakkana<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Mechatronics Engineering, Faculty of Engineering,

Pathumwan Institute of Technology

<sup>2</sup>Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering,

Pathumwan Institute of Technology

833 Rama I Road, Pathumwan, Bangkok 10330, THAILAND. E-mail: anek.jet@gmail.com

บทคัดย่อ

บทความนี้พิจารณาการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์การเผาไหม้ที่สภาวะสมดุลเคมีเพื่อทำนายก๊าซไอเสียจำนวน 10 ชนิด ได้แก่ ก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ (CO<sub>2</sub>) น้ำ (H<sub>2</sub>O) ก๊าซไนโตรเจน (N<sub>2</sub>) ก๊าซออกซิเจน (O<sub>2</sub>) ก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) ก๊าซไฮโดรเจน (H<sub>2</sub>) ก๊าซไฮโดรเจน (H) ก๊าซออกซิเจน (O) ก๊าซไฮดรอกซี (OH) และก๊าซไนตริกออกไซด์ (NO) โดยการประยุกต์แบบจำลองคณิตศาสตร์จาก Ferguson model และอาศัยวิธีสมดุลเคมีของ Olikala-Borman โดยการป้อน ความดัน อุณหภูมิ และองค์ประกอบของเชื้อเพลิงเข้าสู่โปรแกรมเพื่อคำนวณสัดส่วนโมลก๊าซไอเสียจากการเผาไหม้ ผลการศึกษาโดยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ Practical Chemical Equilibrium (PCE) ที่สภาวะความดัน 1 bar ถูกเปรียบเทียบกับแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ HPFLAME Software (adi-turn) พบว่าปริมาณไอเสียทั้ง 10 ชนิด มีแนวโน้มเป็นไปในทิศทางเดียวกัน ค่าความผิดพลาดโดยเฉลี่ยตลอดช่วงการจำลองเท่ากับ 3.65% ผลการศึกษาก๊าซไอเสียที่เป็นสาเหตุของมลพิษทางอากาศซึ่งได้แก่ ก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ (CO<sub>2</sub>) ก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) และก๊าซไนตริกออกไซด์ (NO) สภาวะการเผาไหม้ที่ ความดัน 1 บรรยากาศ อัตราส่วนสมมูล (φ) เท่ากับ 1 พบว่าปริมาณองค์ประกอบของก๊าซไอเสียจะขึ้นกับอุณหภูมิมากกว่าความดัน โดยที่เชื้อเพลิง LPG จะมีค่ามากกว่าปริมาณก๊าซไอเสียจากเชื้อเพลิง

Methane เนื่องจากว่าที่ 1 โมลของเชื้อเพลิงสำหรับ LPG จะต้องใช้ปริมาณอากาศมากกว่า Methane เพื่อให้เกิดการเผาไหม้ที่สมบูรณ์ภายใต้สภาวะสตอยคิโอเมตริก

คำสำคัญ: แพรคติกอล เคมีคอล อีควิลิเบรียม, อัตราส่วนสมมูล, สตอยคิโอเมตริก

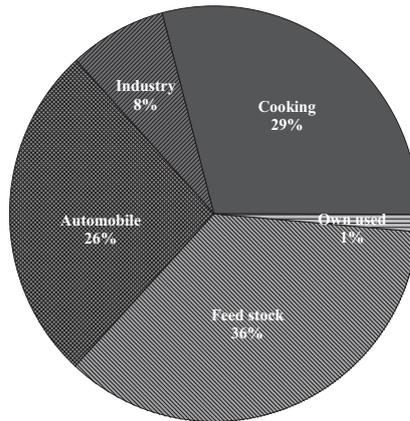
## Abstract

This paper deals with a combustion modeling of practical chemical equilibrium for estimating 10 species of combustion products, i.e. carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ), water ( $\text{H}_2\text{O}$ ), nitrogen ( $\text{N}_2$ ), oxygen ( $\text{O}_2$ ), carbon monoxide ( $\text{CO}$ ), hydrogen ( $\text{H}_2$ ), hydrogen ( $\text{H}$ ), oxygen ( $\text{O}$ ), hydroxy ( $\text{OH}$ ) and nitric oxide ( $\text{NO}$ ). Ferguson modeling is adopted and the curve fitting of the chemical equilibrium performed by Olikala-Borman is also conducted by entering the values of pressure, flame temperature and atomic contents of fuel. Predicted results of Practical Chemical Equilibrium (PCE) at 1 bar of combustion pressure are validated HPFLAME Software (adi-turn). The tendency of mole fraction of product species is agreeable and absolute error for all simulation ranges is 3.65%. The amount of exhaust gas, namely  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  and  $\text{NO}$  resulting in air pollution was investigated. The pressure and equivalence ratio are set at 1 bar and unity (stoichiometric), respectively. The results show that the species' mole fraction strongly depends on more temperature than pressure of combustion. For comparing mole fraction of two fuel combustion, LPG is always higher quantitative than methane because LPG needs more air than methane for complete combustion.

**Keywords :** practical chemical equilibrium, equivalence ratio, stoichiometric

## 1. บทนำ

การเผาไหม้ภายใต้สภาวะความดันบรรยากาศ (1atm) มีความสำคัญเป็นอย่างมาก โดยเฉพาะกระบวนการเผาไหม้ของหัวเผาที่นิยมใช้กันอย่างแพร่หลายในครัวเรือน ภาคอุตสาหกรรมอาหารทั้งขนาดเล็ก และขนาดกลาง ต่างใช้แก๊ส LPG (Liquefied Petroleum Gas) เป็นเชื้อเพลิง โดยในปี พ.ศ. 2557 ประเทศไทยใช้แก๊ส LPG ในภาคครัวเรือนคิดเป็นปริมาณมากถึง 29 เปอร์เซ็นต์ของการใช้แก๊ส LPG ทั้งหมดดังรูปที่ 1 และแนวโน้มการบริโภครวมทั้งราคาของแก๊ส LPG เพิ่มขึ้นทุกๆ ปี [1]



รูปที่ 1 สัดส่วนรวมของปริมาณการใช้แก๊ส LPG ในประเทศไทย [1]

การเข้าใจถึงกลไกการเผาไหม้และปัจจัยที่ส่งผลกระทบต่อกระบวนการการเผาไหม้นั้นจะทำให้เราสามารถควบคุมปริมาณแก๊สมลพิษเช่น คาร์บอนไดออกไซด์ ( $CO_2$ ) ก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) ก๊าซไนตริกออกไซด์ (NO) เหล่านี้ที่เกิดจากกระบวนการเผาไหม้ให้มีปริมาณลดลงได้ ปรมัตต์ จันทรโคตร และ คณะ [2] ได้ศึกษาการนำแบบจำลองคณิตศาสตร์จาก Ferguson model และการดัดแปลงวิธีสมมูลเคมีของ Olikala-Borman [6] ซึ่งใช้ในการประมาณความดันและอุณหภูมิ มาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์การฉีดน้ำเข้ากระบอกสูบผสมไอเสีย ความร้อนสูงของเครื่องยนต์จุดระเบิดด้วยประกายไฟ ในการศึกษาประสิทธิภาพเชิงความร้อนของเครื่องยนต์ต่อการเปลี่ยนแปลงสัดส่วนมวลน้ำต่อมวลเชื้อเพลิง (Xv) ที่ถูกฉีดเข้าไปในเครื่องยนต์ โดยการแปรผันตามช่วงอัตราส่วนอัด (8-12) และช่วงอัตราส่วนสมมูล (0.8-1.2) มีช่วงความเร็วรอบของเครื่องยนต์ 4 จังหวะอยู่ระหว่าง (1000-2500 RPM) ซึ่งทำงานตามวัฏจักรเชื้อเพลิง-อากาศ เชื้อเพลิงที่ใช้ในการศึกษาคือน้ำมันแก๊สโซลีนและเพื่อให้ง่ายต่อการศึกษา Engine geometry จะใช้แบบเดียวกัน จากการจำลองพบว่าค่าความดันผลเฉลี่ยบ่งชี้ (imep) เพิ่มขึ้นประมาณ 30,000-50,000 Pa ประสิทธิภาพเชิงความร้อนเฉลี่ย ( $\eta$ ) เพิ่มขึ้นประมาณ 1% เมื่อเทียบกับระบบปกติของเครื่องยนต์ต่อการเพิ่มปริมาณน้ำที่ถูกฉีดเข้าไปในกระบอกสูบที่ 0.02-0.27 เท่ามวลของน้ำที่ฉีดต่อมวลเชื้อเพลิง ตามการเปลี่ยนแปลงช่วงอัตราส่วนอัด ช่วงอัตราส่วนสมมูล และช่วงความเร็วรอบ Ramachandran [3] ได้นำเสนอแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เครื่องยนต์สันดาปภายใน (SI engine) ภายใต้หลักการพื้นฐานที่ง่าย รวดเร็ว และแม่นยำ รองรับการจัดองเชื้อเพลิงกลุ่ม Alternate hydrocarbon (C-H-O-N) เทคนิคที่ใช้ในการจำลอง classical two-zone approach การสมมูลปฏิกิริยาเคมีการเผาไหม้และองค์ประกอบของไอเสียประยุกต์ใช้หลักการ Olikala-Borman [6] ร่วมกับ Ferguson model ส่วนคุณสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์ของเชื้อเพลิงประยุกต์ใช้ Hywood (Internal Combustion Engine Fundamentals) การจำลองการสันดาปภายในเครื่องยนต์ 4 จังหวะ 1 ลูกสูบ จุดระเบิดด้วยประกายไฟ ใช้เชื้อเพลิง Ethanol ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางลูกสูบ 0.1 เมตร ระยะชัก 0.08 เมตร อัตราส่วนการอัด 10 ความเร็วรอบของเครื่องยนต์ 2000 รอบต่อนาที อัตราส่วนสมมูล 0.8 รายงานผลในรูปแบบ

ความสัมพันธ์ระหว่างองศาหม้อเชื้อเพลิงต่อความดัน อุณหภูมิ งานเพลและปริมาณการถ่ายโอนความร้อนของห้องเผาไหม้มีแนวโน้มสอดคล้องกับการสันดาปภายในเครื่องยนต์จริง ผลการจำลองที่ได้จากโปรแกรมยังสามารถใช้ในการทำนายสภาพการสันดาปภายในเครื่องยนต์เบื้องต้นได้ อีกทั้งแบบจำลองยังสามารถประยุกต์ใช้กับห้องเผาไหม้รูปแบบต่างๆ ได้ง่ายเนื่องจากแบบจำลองไม่ซับซ้อน จากการประยุกต์ใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์การเผาไหม้ที่ผ่านมาโดยวิธีสมดุลเคมีของ Olikala-Borman [6] ส่วนมากจะพบกับกระบวนการเผาไหม้ภายในเครื่องยนต์เป็นส่วนใหญ่ ดังนั้นจึงเป็นที่มาของการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ที่สถานะสมดุลเคมีเพื่อทำนายก๊าซไอเสีย 10 ชนิด สำหรับการเผาไหม้ภายนอก (External combustion) ที่สถานะความดัน 1 บรรยากาศ เพื่อการศึกษาและพัฒนาต่อยอดซอฟต์แวร์ต่อไป

## 2. แบบจำลองทางคณิตศาสตร์

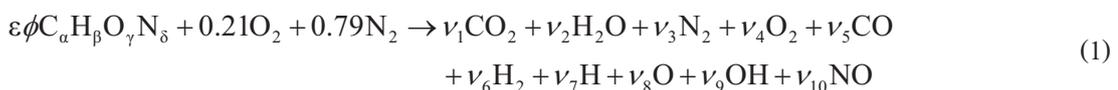
กำหนดให้เชื้อเพลิงผสมคลุกเคล้ากับอากาศอย่างสม่ำเสมอตามอัตราส่วนสมมูล ( $\phi$ ) ก่อนที่จะป้อนส่วนผสม (ไอดี) นั้นเข้าไปสู่หัวเผาหรือห้องเผาไหม้ดังรูปที่ 2



รูปที่ 2 การเกิดไอเสียในกระบวนการเผาไหม้

### 2.1 สมดุลเคมีการเผาไหม้

สมการสมดุลทางเคมีของการเผาไหม้เชื้อเพลิงและอากาศในการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์การเผาไหม้เชื้อเพลิงในสถานะสมดุลเคมีซึ่งอยู่ในสมการที่จะต้องแก้ ได้แก่ สมการส่วนประกอบของเชื้อเพลิงอากาศและไอเสียทางทฤษฎี เมื่อกำหนดให้เชื้อเพลิงมีส่วนผสมคือ  $C_\alpha H_\beta O_\gamma N_\delta$  และผลิตภัณฑ์ที่ได้หลังจากกระบวนการทางเคมีจะได้ก๊าซไอเสียทั้ง 10 ชนิด จากสมการการเผาไหม้สามารถแสดงได้ดังนี้ [4]



จากสมการที่ (1) ภายใต้สถานะสมดุลทางเคมีสามารถที่จะจัดรูปสมการหาสัดส่วน โมลของแก๊สไอเสียที่สถานะได้ 4 สมการย่อยดังนี้

$$C:\varepsilon\phi\alpha = (v_1 + v_3)N \quad (2)$$

$$H:\varepsilon\phi\beta = (2v_2 + 2v_6 + v_7 + v_9)N \quad (3)$$

$$O:\varepsilon\phi\gamma + 2(0.21) = (2v_1 + v_2 + 2v_4 + v_5 + v_8 + v_9 + v_{10})N \quad (4)$$

$$N:\varepsilon\phi\delta + 2(0.79) = (2v_3 + v_{10})N \quad (5)$$

กำหนดให้

$$v_i = y_i N \quad (6)$$

เมื่อ N คือ ผลรวมของจำนวนโมลทั้งหมด,  $N = v_i = \sum_{i=1}^{10} v_i$

y คือ สัดส่วนโมล,  $y_i = \frac{v_i}{N}$

เมื่อเขียนในรูปสัดส่วนโมลที่ของแก๊สไอเสียรวมทั้งหมดจะได้

$$\sum_{i=1}^{10} y_i - 1 = 0 \quad (7)$$

จากตารางที่ 1 เมื่อใช้คุณสมบัติของธาตุต่างๆจาก JANAF Table [5] สามารถคำนวณค่าคงที่ ( $K_p$ ) การแยกตัวของแก๊สไอเสียจากกระบวนการเผาไหม้ 6 ค่าและมีค่า  $y_i$  ไม่ทราบค่าที่ต้องแก้สมการอยู่ 10 ค่าดังแสดงในตารางที่ 1

## 2.2 การแก้ระบบสมการ

การแก้สมการสมดุลทางเคมีของการเผาไหม้ผลที่ได้จากการคำนวณได้พัฒนามาจาก Olikara และ Borman (1975) [6] ซึ่งหน่วยของความดันในตารางที่ 1 จะมีหน่วยเป็นความดันบรรยากาศปกติ โดยที่ Olikara และ Borman ได้สร้างสมการขึ้นจากค่าสมดุลคงที่ดังนี้

$$\text{Log}K_p = A \ln\left(\frac{T}{1000}\right) + \frac{B}{T} + C + DT + ET^2 \quad (8)$$

โดยค่าคงที่ของ A, B, C, D, E ให้ความแม่นยำอยู่ระหว่างอุณหภูมิอยู่ 600 ถึง 4000 K ดังตารางที่ 2

ตารางที่ 1 สมดุลเคมีของแก๊สไอเสียจากการเผาไหม้และค่าคงที่การเกิดปฏิกิริยา

$\frac{1}{2}H_2 \Leftrightarrow H$	$K_1 = \frac{p_H}{(p_{H_2})^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_7 P}{(y_6 P)^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_7 (P)^{\frac{1}{2}}}{(y_6)^{\frac{1}{2}}}$
$\frac{1}{2}O_2 \Leftrightarrow O$	$K_2 = \frac{p_O}{(p_{O_2})^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_8 P}{(y_4 P)^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_8 (P)^{\frac{1}{2}}}{(y_4)^{\frac{1}{2}}}$
$\frac{1}{2}H_2 + \frac{1}{2}O_2 \Leftrightarrow OH$	$K_3 = \frac{p_{OH}}{(p_{H_2})^{\frac{1}{2}}(p_{O_2})^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_9 P}{(y_6 P)^{\frac{1}{2}}(y_4 P)^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_9}{(y_6)^{\frac{1}{2}}(y_4)^{\frac{1}{2}}}$
$\frac{1}{2}O_2 + \frac{1}{2}N_2 \Leftrightarrow NO$	$K_4 = \frac{p_{NO}}{(p_{N_2})^{\frac{1}{2}}(p_{O_2})^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_{10} P}{(y_3 P)^{\frac{1}{2}}(y_4 P)^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_{10}}{(y_3)^{\frac{1}{2}}(y_4)^{\frac{1}{2}}}$
$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \Leftrightarrow H_2O$	$K_5 = \frac{p_{H_2O}}{(p_{H_2})(p_{O_2})^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_2 P}{(y_6 P)(y_4 P)^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_2}{(y_6)(y_4)^{\frac{1}{2}}(P)^{\frac{1}{2}}}$
$CO + \frac{1}{2}O_2 \Leftrightarrow CO_2$	$K_6 = \frac{p_{CO_2}}{(p_{CO})(p_{O_2})^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_1 P}{(y_5 P)(y_4 P)^{\frac{1}{2}}} = \frac{y_1}{(y_5)(y_4)^{\frac{1}{2}}(P)^{\frac{1}{2}}}$

ตารางที่ 2 ค่าคงที่ของ A, B, C, D, E เมื่ออุณหภูมิ (T) อยู่ระหว่าง 600 ถึง 4000 K

$K_i$	A	B	C	D	E
$K_1$	0.432168E + 00	-0.112464E + 05	0.267269E + 01	-0.745744E - 04	0.242484E - 08
$K_2$	0.310805E + 00	-0.129540E + 05	0.321779E + 01	-0.738336E - 04	0.344645E - 08
$K_3$	-0.141784E + 00	-0.213308E + 04	0.853461E + 00	0.355015E - 04	-0.310227E - 08
$K_4$	0.150879E - 01	-0.470959E + 04	0.646096E + 00	0.272805E - 05	-0.154444E - 08
$K_5$	-0.752364E + 00	0.124210E + 05	-0.260286E + 01	0.259556E - 03	-0.162687E - 07
$K_6$	-0.415302E - 02	0.148627E + 05	-0.475746E + 01	0.124699E - 03	-0.900227E - 08

จากสมการหลักที่ (1) ถึง (8) เมื่อใช้ความสัมพันธ์จากค่าคงที่สมดุลของสมการในตารางที่ 1 สามารถลดได้เหลือ 4 สมการหลักดังนี้

$$d_1 \left\{ C_6(y_5)(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} + d_1 \left\{ (y_5) \right\} = 2 \left\{ C_5(y_6)(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} + 2 \left\{ (y_6) \right\} + \left\{ C_1(y_6)^{\frac{1}{2}} \right\} + \left\{ C_3(y_6)^{\frac{1}{2}}(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (9)$$

$$2 \left\{ C_5(y_6)(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} + 2 \left\{ (y_6) \right\} + \left\{ C_1(y_6)^{\frac{1}{2}} \right\} + \left\{ C_3(y_6)^{\frac{1}{2}}(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} - d_1 \left\{ C_6(y_5)(y_4)^{\frac{1}{2}} + (y_5) \right\} = 0$$

$$2 \left\{ C_6(y_5)(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} + \left\{ C_5(y_6)(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} + 2 \left\{ (y_4) \right\} + (y_5) + \left\{ C_2(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} + \left\{ C_3(y_6)^{\frac{1}{2}}(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (10)$$

$$+ \left\{ C_4(y_4)^{\frac{1}{2}}(y_3)^{\frac{1}{2}} \right\} - d_2 \left\{ C_6(y_5)(y_4)^{\frac{1}{2}} + (y_5) \right\} = 0$$

$$2 \left\{ (y_3) \right\} + \left\{ C_4(y_3)^{\frac{1}{2}}(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} - d_3 \left\{ C_6(y_5)(y_4)^{\frac{1}{2}} + (y_5) \right\} = 0 \quad (11)$$

$$\left\{ C_6(y_5)(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} + \left\{ C_5(y_6)(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} + (y_3) + (y_4) + (y_5) + (y_6) + \left\{ C_1(y_6)^{\frac{1}{2}} \right\} + \left\{ C_2(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (12)$$

$$+ \left\{ C_3(y_6)^{\frac{1}{2}}(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} + \left\{ C_4(y_3)^{\frac{1}{2}}(y_4)^{\frac{1}{2}} \right\} - 1 = 0$$

ซึ่งสมการที่ (9) ถึง (12) เป็นสมการไม่เชิงเส้นของสัดส่วนโมล ดังนั้นจึงต้องใช้วิธีนิวตัน-ราฟสันในการแก้สมการหาสัดส่วนโมลทั้ง 4 สมการในสภาวะสมดุลโดยใช้ Matrix Algebra

$$[A][x] = [B] \quad (13)$$

โดยที่

$[x] = [A]^{-1} \cdot [B]$  คือเมทริกซ์สัดส่วนโมลของแก๊สไอเสีย

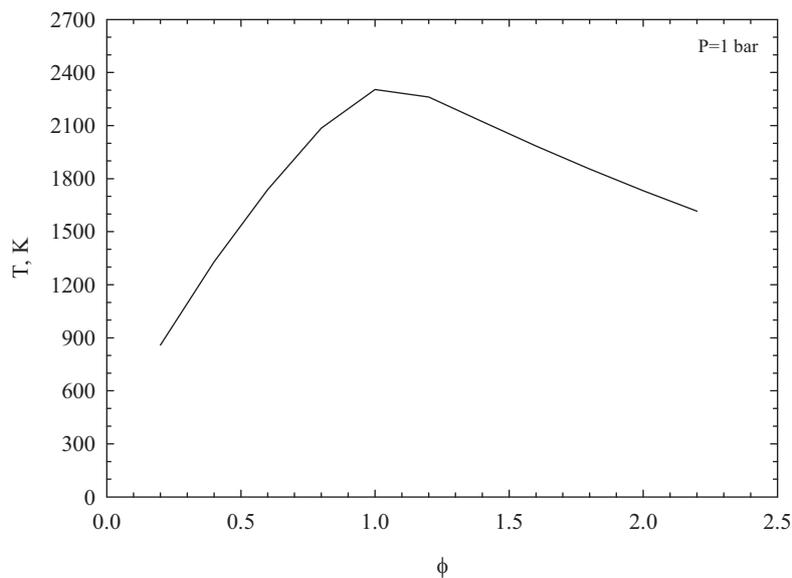
$[A] = \left[ \frac{\partial f_i}{\partial y_i} \right]$  คือเมทริกซ์ค่าคงที่อนุพันธ์

$[B] = [f_i]$  คือเมทริกซ์ของสมการหลัก

เงื่อนไขความผิดพลาดสมบูรณ์การลู่เข้าสู่คำตอบของกระบวนการแก้ระบบสมการไม่เชิงเส้น โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลขเท่ากับ  $10^{-6}$

### 3. ผลการจำลองและการวิเคราะห์

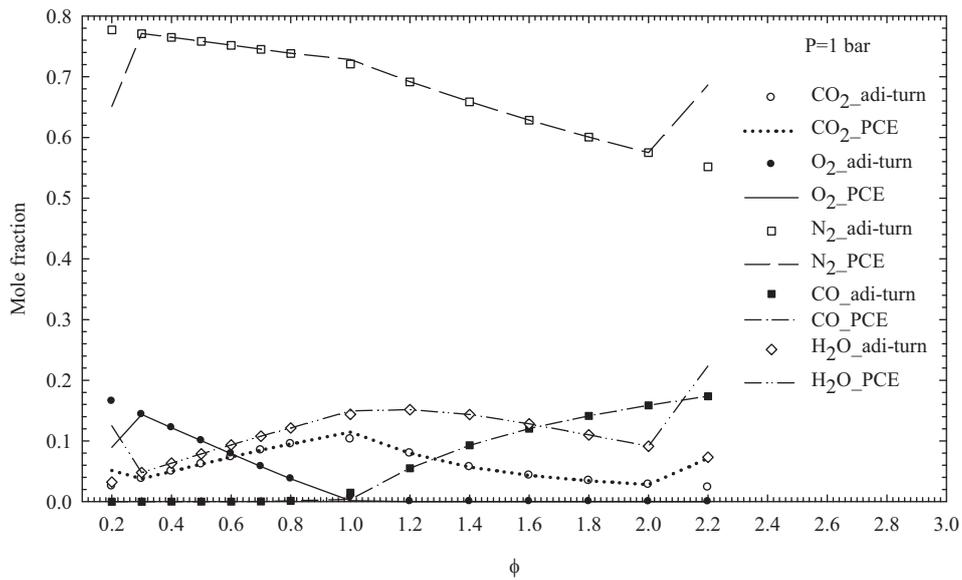
รูปที่ 3 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิเปลวไฟทางทฤษฎีต่ออัตราส่วนผสมของเชื้อเพลิง LPG โดยมีส่วนผสมระหว่าง Propane 60% และ n-Butane 40% อุณหภูมิสูงปรากฏที่อัตราส่วนผสมเท่ากับ 1 เพราะการเผาไหม้สมบูรณ์เกิดขึ้นภายใต้สภาวะสตอยคิโอเมตริก โดยที่ช่วง  $0 < \phi < 1$  การเผาไหม้เกิดขึ้นภายใต้เงื่อนไขส่วนผสมบาง (Lean; อากาศมากเกินไป) ช่วง  $1 < \phi < 2$  การเผาไหม้เกิดขึ้นภายใต้เงื่อนไขส่วนผสมหนา (Rich; อากาศน้อยเกินไป)



รูปที่ 3 อุณหภูมิเปลวไฟทางทฤษฎีของเชื้อเพลิง LPG

#### 3.1 เปรียบเทียบความแม่นยำของแบบจำลอง

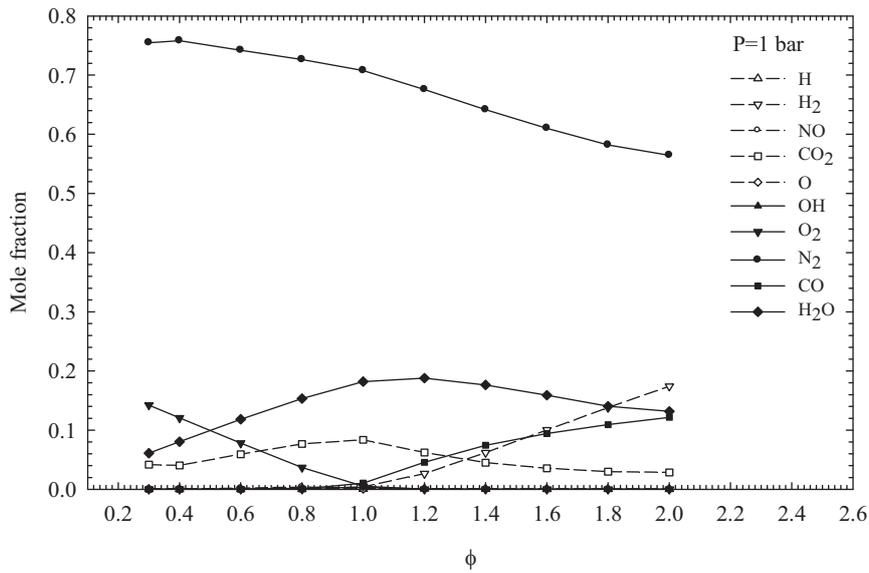
จากการเปรียบเทียบความถูกต้องของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์โดยใช้โปรแกรม HPFLAME Software (adi-tum) และโปรแกรม PCE ที่ความดัน 1 bar แสดงดังรูปที่ 4 โดยอุณหภูมิที่ใช้ในการคำนวณนั้นใช้อุณหภูมิเปลวไฟทางทฤษฎีของอัตราส่วนผสมช่วง 0.2-2.2 ดังแสดงในรูปที่ 3 แสดงการเปรียบเทียบสัดส่วนโมลของแก๊สไอเสีย 5 ชนิดจากทั้งหมด 10 ชนิด เนื่องจากเป็นสัดส่วนหลักของไอเสียที่เกิดจากการเผาไหม้ แนวโน้มของผลการจำลองจากทั้งสองโปรแกรมไปในทิศทางเดียวกันโดยมีค่าความผิดพลาดโดยเฉลี่ยตลอดช่วงการจำลองเท่ากับ 3.65% โดยที่ช่วงการจำลองที่แม่นยำของโปรแกรม PCE จะอยู่ระหว่าง  $0.2 < \phi < 2.2$  เนื่องจากข้อจำกัดของการแก้ระบบสมการไม่เชิงเส้นด้วยระเบียบวิธีการนิวตัน-ราฟสันให้ผลลัพธ์ลู่ออก



รูปที่ 4 เปรียบเทียบสัดส่วนโมลของแก๊สไอเสียของเชื้อเพลิง LPG ระหว่าง HPFLAME (adi-turn) กับ PCE

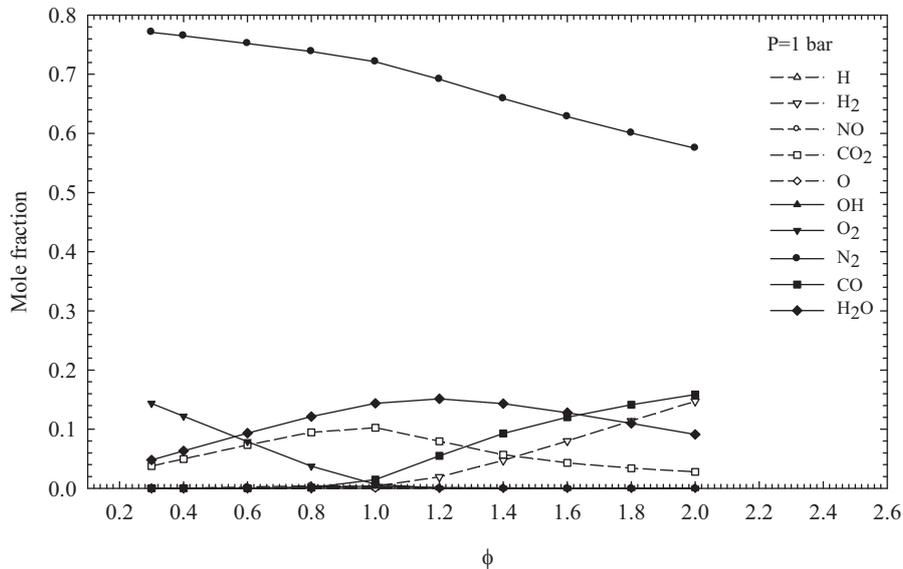
### 3.2 คุณสมบัติของตัวแปรที่มีผลกระทบต่อพฤติกรรมเผาไหม้

จากรูปที่ 5 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณไอเสียที่เกิดขึ้นจะกระบวนการเผาไหม้ต่ออัตราส่วนสมมูล ที่ความดัน 1 bar ใช้ Methane เป็นเชื้อเพลิง การคำนวณใช้อุณหภูมิเปลวไฟทางทฤษฎีของอัตราส่วนสมมูลช่วง 0.2-2.2 โดยที่อัตราส่วนสมมูลอยู่ในช่วง 0.1 ถึง 0.9 (สภาวะการเผาไหม้ส่วนผสมบาง; Lean) ปริมาณไอเสียที่มีคาร์บอน (C) และไฮโดรเจน (H) เป็นส่วนประกอบมีแนวโน้มสูงขึ้นเนื่องจากอัตราส่วนเชื้อเพลิงต่ออากาศเริ่มสูงขึ้นจึงส่งผลให้ ก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ (CO<sub>2</sub>), น้ำ (H<sub>2</sub>O), ก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์ (CO), ก๊าซไฮโดรเจน (H<sub>2</sub>), ก๊าซไฮโดรเจน (H) และก๊าซไฮดรอกซี (OH) มีปริมาณที่สูงขึ้นและเมื่ออัตราส่วนเชื้อเพลิงมากกว่าอากาศซึ่งอยู่ในช่วง 1.1 ถึง 2.2 (สภาวะการเผาไหม้ส่วนผสมหนา; Rich) ปริมาณ C และ H มีมากกว่าปริมาณของอากาศที่ใช้ในการทำปฏิกิริยา จึงทำให้ C และ H เหลือจากการทำปฏิกิริยาเลยส่งผลให้ก๊าซ CO, H<sub>2</sub> และ H มีแนวโน้มสูงขึ้น



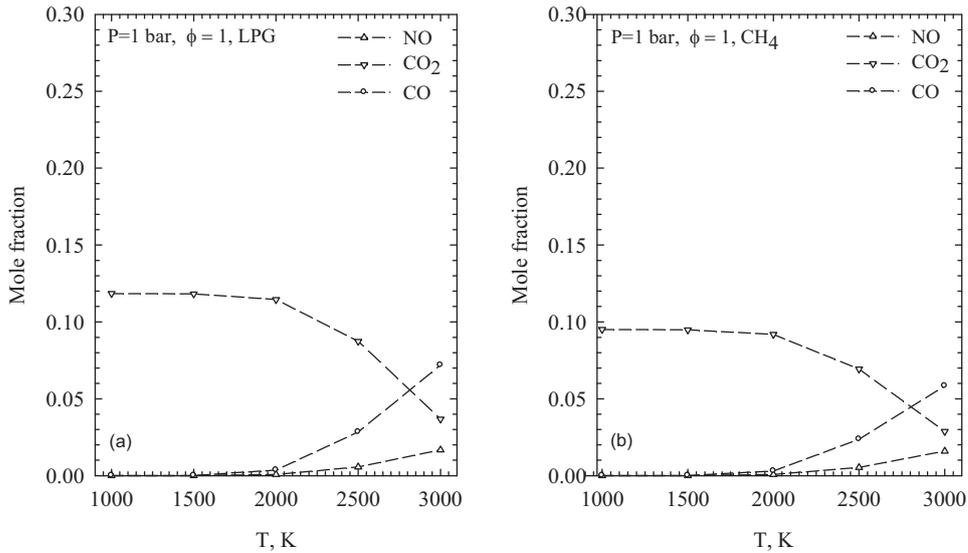
รูปที่ 5 สัดส่วน โมลของแก๊สไอเสียจากการเผาไหม้เชื้อเพลิง Methane

จากรูปที่ 6 เชื้อเพลิงที่ใช้ในการจำลองการเผาไหม้คือ LPG ซึ่งมีสูตรทางเคมีคือ  $C_{3.6}H_{9.2}$  ประกอบด้วย โพรเพนและบิวเทน 60% และ 40% โดยน้ำหนักตามลำดับ พบว่าจำนวนของ C และ H ที่เพิ่มขึ้น เมื่อเปลี่ยนเชื้อเพลิง ในการจำลอง Methane เป็น LPG พบว่าลักษณะของก๊าซไอเสีย 10 ชนิด ยังแสดงแนวโน้มของสัดส่วนแก๊สไอเสีย คล้ายกับรูปที่ 5 แสดงให้เห็นว่า C และ H ที่เพิ่มขึ้นนั้น ไม่มีผลต่อลักษณะการเกิดปฏิกิริยาของไอเสีย



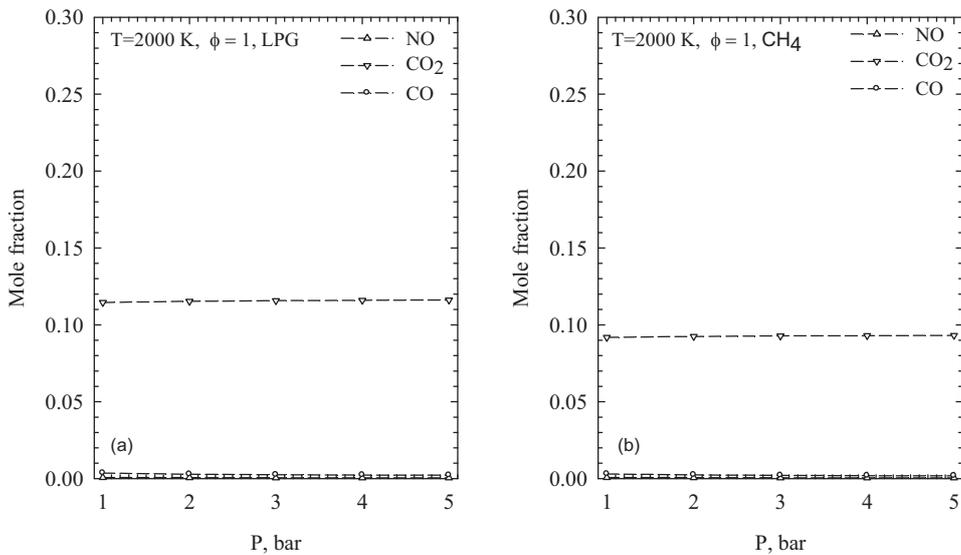
รูปที่ 6 สัดส่วน โมลของก๊าซไอเสียจากการเผาไหม้เชื้อเพลิง LPG

รูปที่ 7 แสดงสัดส่วนโมลของก๊าซ NO, CO<sub>2</sub> และ CO จากการเผาไหม้สถานะความดันและอัตราส่วนสมมูลคงที่ ซึ่งก๊าซไอเสียที่เป็นสาเหตุของมลพิษทางอากาศของแต่ละสถานะอุณหภูมิการเผาไหม้ที่เปลี่ยนไป เมื่ออุณหภูมิสูงกว่า 1600 K แสดงสัดส่วนของ NO และ CO เพิ่มสูงขึ้น ซึ่งตรงกันข้ามกับ CO<sub>2</sub> ที่แสดงสัดส่วนโมลลดลง เนื่องจากว่าที่อุณหภูมิการเผาไหม้สูงจะยิ่งเร่งปฏิกิริยาให้เกิด NO เพิ่มมากขึ้นหรือซึ่งเป็นไปตามหลักการของ Thermal NO [7]



รูปที่ 7 สัดส่วนโมลของก๊าซ NO, CO<sub>2</sub> และ CO จากการเผาไหม้สถานะความดันคงที่

รูปที่ 8 แสดงสัดส่วนโมลของก๊าซ NO, CO<sub>2</sub> และ CO จากการเผาไหม้สถานะอุณหภูมิและอัตราส่วนสมมูลคงที่ โดยก๊าซไอเสียที่เป็นสาเหตุของมลพิษทางอากาศของแต่ละสถานะอุณหภูมิการเผาไหม้ที่เปลี่ยนไป พบว่าเมื่อความดันของสภาวะเปลี่ยนไปส่งผลกระทบต่อสัดส่วนของ NO, CO และ CO<sub>2</sub> น้อยมากทั้งการเผาไหม้เชื้อเพลิง LPG และ Methane จากผลการเปรียบเทียบสัดส่วนโมลของสภาวะการเผาไหม้ที่เปลี่ยนไป ทั้งการเปลี่ยนแปลงความดันและอุณหภูมิ (รูปที่ 7 และ รูปที่ 8) จะสังเกตได้ว่าแนวโน้มยังคงเหมือนเดิม แต่สัดส่วนโมลของก๊าซไอเสียของ LPG จะแสดงค่าที่มากกว่า Methane เสมอ เนื่องจากว่าคาร์บอนที่เป็นองค์ประกอบทางเคมีของเชื้อเพลิง LPG มากกว่า Methane



รูปที่ 8 สัดส่วน โมลของแก๊ส NO, CO<sub>2</sub> และ CO จากการเผาไหม้สภาวะอุณหภูมิคงที่

#### 4. สรุป

การเปรียบเทียบสัดส่วนโมลก๊าซไอเสียจากการจำลองด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์มีแนวโน้มเป็นไปในทิศทางเดียวกันโดยมีค่าความผิดพลาดเท่ากับ 3.65% ที่  $0.2 < \phi < 2.2$  ผลการศึกษาก๊าซไอเสียที่เป็นสาเหตุของมลพิษทางอากาศซึ่งได้แก่ ก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ ก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์ ก๊าซไนตริกออกไซด์ สภาวะความดันการเผาไหม้ที่ความดัน 1 บรรยากาศ อัตราส่วนสมมูลเท่ากับ 1 พบว่าปริมาณองค์ประกอบของก๊าซไอเสียจะขึ้นกับอุณหภูมิมากกว่าความดัน สัดส่วนโมลของก๊าซไอเสียจากการเผาไหม้เชื้อเพลิง LPG จะมีค่ามากกว่าปริมาณก๊าซไอเสียจากการเผาไหม้เชื้อเพลิง Methane เพราะว่าที่ 1 โมลของเชื้อเพลิงสำหรับ LPG จะต้องใช้ปริมาณอากาศมากกว่า Methane เพื่อให้เกิดการเผาไหม้ที่สมบูรณ์ภายใต้สภาวะสตอยคิโอเมตริก

#### เอกสารอ้างอิง

- [1] สำนักงานนโยบายและแผนพลังงาน . (2014). ข้อมูลพลังงาน (Energy Database). Online: <http://www.eppo.go.th/info/index.html> [May 25, 2015].
- [2] ปรมัตต์ จันทโรตตร, วีระ จันทน์วัฒน์ และธนู นุชฉาย. การวิเคราะห์การฉีดน้ำเข้ากระบอกสูบผสมไอเสีย ความร้อนสูงของเครื่องยนต์จุดระเบิดด้วยประกายไฟ. การประชุมวิชาการเครือข่ายวิศวกรรมเครื่องกลแห่งประเทศไทย ครั้งที่ 22 เล่มที่ 1, 2551, หน้า 74-80.

- [3] S. Ramachandran, "Rapid Thermodynamic Simulation Model of an Internal Combustion Engine on Alternat Fuels," Proceeding of the International MultiConference of Engineers and Computer Scientists 2009 (IMECS 2009), Vol II, March 18 - 20, 2009, Hong Kong, 6 pages.
- [4] Colin R. Ferguson. Internal Combustion Engines; applied thermosciences. JOHN WILEY & SONS, U.S.A 1986.
- [5] JANAF Thermochemical Tables. (1971). U.S National Bureau of Standards Publications NSRDS-NBS 37.
- [6] C. Olikara and G. L. Borman. A Computer Program for Calculating Properties of equilibrium Combustion Products with Some Applications to I.C. Engines. 1975, SAE Technical Paper Series 750468.
- [7] สำเร็จ จักรใจ. การเผาไหม้. สำนักพิมพ์แห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, กรุงเทพฯ, 2547.