

การประมาณแรงตึงผิวของไบโอดีเซลจากค่าสะพานนิฟิเคชันและค่าไอโอติน

สุริยา พันธโกศล^{1,*} และ คณิต กฤษณังกูร²

¹สาขาวิชาการจัดการเทคโนโลยีและอุตสาหกรรม ภาควิชาวิทยาศาสตร์ประยุกต์

คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏบ้านสมเด็จเจ้าพระยา

²สายวิชาเทคโนโลยีชีวเคมี คณะทรัพยากรชีวภาพและเทคโนโลยี

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี

*Email: s.phankosol@gmail.com

บทคัดย่อ

แรงตึงผิวเป็นสมบัติทางกายภาพที่สำคัญของไบโอดีเซลโดยเป็นตัวกำหนดขนาดของละอองเชื้อเพลิงและการเผาไหม้ที่สมบูรณ์ในห้องเผาไหม้เครื่องยนต์ดีเซล แรงตึงผิวมีความสัมพันธ์กับจำนวนคาร์บอนอะตอม จำนวนพันธะคู่ และอุณหภูมิ ในงานวิจัยนี้สนใจศึกษาสมการเชิงประจักษ์เดียวทำนายแรงตึงผิวไบโอดีเซลจากค่าสะพานนิฟิเคชัน (SN) และค่าไอโอติน (IV) โดยไม่จำเป็นต้องทราบค่าแรงตึงผิวของกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์แต่ละตัวที่อยู่ในองค์ประกอบก่อน สำหรับทำนายแรงตึงผิวของไบโอดีเซลและไบโอดีเซลผสมที่อุณหภูมิต่างๆ ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากเอกสารอ้างอิงมาใช้ในการศึกษาและสนับสนุนเพื่อยืนยันความถูกต้องแม่นยำของสมการที่จะนำไปใช้ จากการศึกษาพบว่าสมการที่นำเสนอมีความถูกต้องแม่นยำในการใช้งานโดยค่าความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์เฉลี่ยของไบโอดีเซล 10 ชนิดในช่วงอุณหภูมิ 30-80°C เท่ากับ 2.17% การใช้สมการทำนายแรงตึงผิวนอกช่วงอุณหภูมิที่นำเสนออาจทำให้ความแม่นยำต่ำลง

คำสืบค้น

กรดไขมันเมทิลเอสเทอร์, ไบโอดีเซล, แรงตึงผิว, สมบัติทางกายภาพ

Estimation Surface Tension of Biodiesel from Saponification Number and Iodine Value

Suriya Phankosol^{1,} and Kanit Krisnangkura²*

¹ *Department of Industrial and Technology Management, Faculty of Science and Technology, Bansomdejchaopraya Rajabhat University.*

² *Division of Biochemical Technology, School of Bioresources and Technology, King Mongkut's University of Technology Thonburi (Bangkhuntien).*

**E-mail: s.phankosol@gmail.com*

ABSTRACT

Surface tension (γ) is an important physical property of biodiesel. It dictates fuel atomization and complete combustion in the diesel engine. The surface tension of biodiesel is correlated to number of carbon atoms, number of double bond(s) and temperature. In this work, an empirical approach for estimation surface tension of biodiesel by a single empirical equation can be estimated without the prior knowledge of the surface tension of an individual fatty acid methyl ester and can be predicted by using saponification number (SN) and iodine value (IV). Data available in literatures are used to validate, and support the speculations derived from the proposed equation. The proposed equation is easy to use and the predicted surface tension values of pure biodiesel and mixed biodiesel at different temperatures agree well with the literature values. The estimated surface tension values of ten biodiesel types are in good agreement with those reported in literatures at temperatures, within a narrow range of 30-80°C. The average absolute deviation (AAD) is 2.17%. The surface tension outside this temperature range may be possibly predicted by this but accuracy may be lower.

KEYWORDS

Fatty acid methyl ester, Biodiesel, Surface tension, Physical property

1. บทนำ

แรงตึงผิวเป็นหนึ่งในสมบัติที่สำคัญในของเชื้อเพลิงเหลวที่ใช้ในเครื่องยนต์แบบจุดระเบิด เพราะมีผลต่อกระบวนการพ่นฝอยละอองน้ำมันในห้องเผาไหม้ในช่วงเริ่มต้น โดยในขั้นแรกออกซิเจนในอากาศจะทำปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วกับละอองน้ำมันซึ่งจะเกิดขึ้นเฉพาะบริเวณผิวของละอองน้ำมันเท่านั้น และจะปล่อยพลังงานความร้อนออกมา ในขั้นตอนนี้พบว่าถ้าแรงตึงผิวของน้ำมันมีค่าสูงละอองน้ำมันที่พ่นจะมีขนาดใหญ่และมีแนวโน้มสูงมากที่จะเกิดปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชัน (Polymerization) ซึ่งส่งผลต่อการสึกหรอของเครื่องยนต์ ประสิทธิภาพและการปลดปล่อยมลพิษ[1, 2]แรงตึงผิวและสมบัติทางกายภาพต่างๆ ไบโอดีเซลอาจแตกต่างกันขึ้นอยู่กับองค์ประกอบทางเคมีของกรดไขมันที่มีอยู่ในวัตถุดิบที่นำมาใช้ ดังนั้นสมการทำนายแรงตึงผิวจึงมีความสำคัญเป็นอย่างยิ่งโดยช่วยลดเวลาในการวิเคราะห์แรงตึงผิว และหากสมการดังกล่าวเชื่อมสัมพันธ์กับโครงสร้างสารด้วยจะเป็นประโยชน์อย่างมากในการพัฒนาออกแบบโครงสร้างสารให้เหมาะสมกับความแรงตึงผิวที่ต้องการ สมการสำหรับทำนายแรงตึงผิวของของเหลวมีการนำเสนอมากพอสมควรแต่สมการสำหรับทำนายแรงตึงผิวของไบโอดีเซลยังมีอยู่ในปริมาณน้อย[3]

สมการของ Macleod [4] เป็นสมการสำหรับทำนายแรงตึงผิวของของเหลวบริสุทธิ์ที่ประเมินจาก ความหนาแน่นของของเหลว (ρ_L) และความหนาแน่นของไอ (ρ_v) ที่ภาวะสมดุลดังสมการที่ (1)

$$\gamma = K(\rho_L - \rho_v)^4 \quad (1)$$

เมื่อ K คือค่าคงที่ที่ไม่เปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิแต่เปลี่ยนแปลงตามองค์ประกอบทางเคมี

สมการที่ (1) ได้รับการปรับปรุงโดย Sugden [5] ดังแสดงในสมการที่ (2) เป็นสมการใช้ทำนายแรงตึงผิวของสารประกอบอินทรีย์ได้ดี

$$\gamma = [P_{ch}(\rho_L - \rho_v)]^4 \quad (2)$$

เมื่อ $P_{ch} = K^{1/4}$

พาราชอร์ (Parachor; P_{ch}) เป็นตัวแปรบนสมมติฐานที่มีความสัมพันธ์กับโครงสร้างทางเคมี ในเริ่มต้นมีกลุ่มโครงสร้างเพียง 11 กลุ่มในการพิจารณาค่า P_{ch} และต่อมา Quayle [6] ได้ขยายกลุ่มโครงสร้างจากโมเลกุลออกมากถึง 50 กว่ากลุ่มในการพิจารณา ค่าแรงตึงผิวจากการทำนายด้วยสมการที่ (2) มีความไวต่อค่าของ P_{ch} และความหนาแน่นเพราะมีความสัมพันธ์แบบดีกรีกำลัง 4 ดังนั้นถ้าเกิดความคลาดเคลื่อนของค่า P_{ch} หรือความหนาแน่นเพียงเล็กน้อยแต่ผลของค่าแรงตึงผิวจะมีความคลาดเคลื่อนสูงเนื่องจากถูกขยายความคลาดเคลื่อนด้วยดีกรีกำลัง 4 อีกทั้งในการใช้งานจำเป็นต้องทราบความหนาแน่นของสารที่ศึกษาที่อุณหภูมิที่สนใจด้วยทำให้เกิดข้อจำกัดในการคำนวณเป็นอย่างมาก ทำให้เกิดความยุ่งยากหลายขั้นตอน

Escobedo และ Mansoori [7] ได้ชี้ถึงข้อบกพร่องหลายประการของสมการที่ 2 ในการทำนายแรงตึงผิวดังนี้ P_{ch} ในความเป็นจริงเปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิ และเป็นเรื่องยากที่จะแสดงลักษณะเชิงประจักษ์ของ P_{ch} ที่มีผลต่อแรงตึงผิวอีกทั้งค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยสัมบูรณ์ในการทำนายแรงตึงผิวนั้นเพิ่มขึ้นกับความซับซ้อนของโครงสร้างโมเลกุลด้วย

Guggenheim [8] ได้ทำนายสมบัติทางกายภาพหลายค่า (แรงตึงผิวด้วย) ของแก๊สและของเหลวด้วยวิธีเดียวกันจากการศึกษาพบว่าดีกรีในสมการที่ (2) ควรเป็น $11/3$ ไม่ใช่ 4

Freitas et al. [9] ได้เปรียบเทียบผลการทดลองแรงตึงผิวของไบโอดีเซล 10 ชนิดกับค่าที่ได้จากสมการทำนายแรงตึงผิวแบบต่างๆ ด้วยสมการที่ (2) และสมการทฤษฎีผลต่างความหนาแน่น (Density gradient theory) บนพื้นฐานสมการสถานะ cubic-plus-association จากการเปรียบเทียบพบว่าค่าร้อยละความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์เฉลี่ย (Average absolute deviation) ที่ทำนายด้วยสมการ (2) โดยใช้ค่า P_{ch} ของ Allen [3] และของ Knotts [10] เท่ากับร้อยละ 7.7 และ 1.3 ตามลำดับ สำหรับค่าร้อยละความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์เฉลี่ยที่ทำนายจากทฤษฎีผลต่างความหนาแน่นมีค่าสูงถึงร้อยละ 9.7

Phankosol et al. [11] ได้เสนอสมการทำนายแรงตึงผิวของกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์และไบโอดีเซล จากพื้นฐานความสัมพันธ์แรงตึงผิวกับพลังงานอิสระของพื้นผิว (Free energy of interfacial interaction) โดยขยายสมการความสัมพันธ์ด้วยสมการของมาร์ติน (Martin's equation)[12] เป็นสมการที่พิจารณาความสัมพันธ์ของพลังงานอิสระกับโครงสร้างโมเลกุล จากการเปรียบเทียบกับไบโอดีเซล 10 ชนิด พบว่ามีค่าร้อยละความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์เฉลี่ยเท่ากับร้อยละ 2.13 โดยสมการทั่วไปของ Phankosol et al. [11] ดังแสดงในสมการที่ (3) เมื่อแทนค่าคงที่ต่างๆ แล้วดังแสดงในสมการที่ (3.1)-(3.3)

$$\gamma = a + bz + cT + dzT + en_d + fn_dT \quad (3)$$

เมื่อ z คือจำนวนอะตอมคาร์บอน
 n_d คือจำนวนพันธะคู่
 T คืออุณหภูมิสัมบูรณ์ (เคลวิน)

$$a = \frac{\Delta H_f^s}{\Delta A}, b = \frac{\delta H^s}{\Delta A}, c = \frac{-\Delta S_f^s}{\Delta A}, d = \frac{-\delta S^s}{\Delta A}, e = \frac{-\Delta H_{db}^s}{\Delta A} \text{ และ } f = \frac{-\Delta S_{db}^s}{\Delta A}$$

สมการสำหรับทำนายแรงตึงผิวของกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์ชนิดอิ่มตัว
 สายสั้น (C5:0-C12:0)

$$\gamma = 57.58 - 0.1645z - 0.1172T + 0.0024zT \quad (3.1)$$

สายยาว (C12:-C24:0)

$$\gamma = 60.21 - 0.4307z - 0.1125T + 0.00207zT \quad (3.2)$$

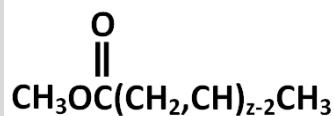
สมการสำหรับทำนายแรงตึงผิวของกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์ชนิดไม่อิ่มตัว

$$\gamma = 60.21 - 0.4307z - 0.1125T + 0.00207zT + 3.676n_d - 0.00893n_dT \quad (3.3)$$

อย่างไรก็ตามสมการที่ (4.1)-(4.3) ยังมีข้อจำกัดในการใช้งานจำเป็นต้องทราบข้อมูลองค์ประกอบของกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์ซึ่งต้องทำการวิเคราะห์จากเครื่อง GC หรือ HPLC โดยเครื่องมือทั้งคู่มีราคาค่อนข้างสูงและในการใช้งานจำเป็นต้องอาศัยความเชี่ยวชาญ ดังนั้นในงานวิจัยนี้สนใจศึกษาการทำนายแรงตึงผิวของไบโอดีเซลที่อุณหภูมิต่างจากค่าสะaponนิฟิเคชัน (Saponification Number; SN) และค่าไอโอดีน (Iodine Value; IV) ซึ่งค่าทั้งสองได้แสดงความสัมพันธ์อย่างใกล้ชิดกับลักษณะปรากฏของน้ำมันเช่น ค่าซีเทน [13] และค่าความร้อนการเผาไหม้ [14] เป็นต้น

2. ทฤษฎี

โครงสร้างทางเคมีของกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์



รูปที่ 1 โครงสร้างทางเคมีของกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์

จากรูปที่ 1 โครงสร้างทางเคมีของเมทิลเอสเทอร์ของกรดไขมันสามารถเขียนให้อยู่ในรูปสมการความสัมพันธ์ดังสมการที่ (4)

$$M = \text{COOCH}_3 + [\text{CH}_2, \text{CH}](z-2) - (2H)n_d + \text{CH}_3 \quad (4)$$

เมื่อ M คือมวลโมเลกุล

แทนค่ามวลอะตอมในสมการที่ (4) และจัดรูปใหม่ได้ดังสมการที่ (5)

$$z = \frac{M + 2n_d - 46}{14} \quad (5)$$

ค่าสะaponนิฟิเคชัน (Saponification Number; SN) [15]

ค่าสะaponนิฟิเคชันคือ จำนวนมิลลิกรัมของด่าง เช่น โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ ที่ใช้ในการทำปฏิกิริยากับไตรกลีเซอไรด์ (Triglyceride) ในไขมัน หรือน้ำมัน (เรียกว่า ปฏิกิริยา Saponification) อย่างสมบูรณ์ จำนวน 1 กรัม ได้เป็นสบู่ ซึ่งเป็นเกลือของกรดไขมัน (fatty acid) 3 โมเลกุลและกลีเซอรอล โดยค่าสะaponนิฟิเคชันเป็นค่าที่ขนาดโมเลกุล หรือน้ำหนักโมเลกุลของกรดไขมันที่เป็นส่วนประกอบในโมเลกุลไตรกลีเซอไรด์ หากน้ำมันที่มีค่าสะaponนิฟิเคชันสูง แสดงว่ากรดไขมันที่เป็นองค์ประกอบในโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์มีน้ำหนักโมเลกุลต่ำ จึงมีจำนวนโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์ต่อหน่วยน้ำหนักเป็นจำนวนมาก ดังนั้น จึงต้องใช้ด่างเป็นจำนวนมากในการไฮโดรไลซ์ ทำนองเดียวกันถ้าค่าสะaponนิฟิเคชันต่ำ แสดงว่ากรดไขมันที่เป็นองค์ประกอบในโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์มีน้ำหนักโมเลกุลมาก จึงมีจำนวนโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์ต่อหน่วยน้ำหนักเป็นจำนวนน้อย ทำให้ใช้ด่างน้อยในการทำปฏิกิริยา โดยค่าสะaponนิฟิเคชันมีความสัมพันธ์กับมวลโมเลกุล (M) ดังแสดงในสมการที่ (6)

$$SN = \frac{56000}{M} \quad (6)$$

ค่าไอโอดีน (Iodine Value; IV) [16]

ค่าไอโอดีน คือจำนวนของไอโอดีนที่ทำปฏิกิริยาพอกติดกับน้ำมันหนัก 100 กรัม เป็นค่าที่บอกถึงความไม่อิ่มตัวของกรดไขมัน ค่าไอโอดีนเป็นตัวชี้บ่งว่าไขมันหรือน้ำมันมีกรดไขมันชนิดไม่อิ่มตัวเป็นองค์ประกอบอยู่ในโมเลกุลมากน้อยเพียงใด ถ้าค่าไอโอดีนสูง แสดงว่ามีปริมาณกรดไขมันชนิดไม่อิ่มตัวเป็นองค์ประกอบมากและจะเกิดการหืนชนิด Oxidative rancidity ได้ง่ายด้วย การหาค่าของไอโอดีนโดยวิธีของฮานัส (Hanus) ใช้สารละลายไอโอดีนมาตรฐานในกรดอะซิติกที่มีไอโอดีนโบรไมด์ช่วยเร่งปฏิกิริยา ทำปฏิกิริยากับไขมันตัวอย่างที่ทราบปริมาณที่แน่นอนซึ่งจะละลายในคลอโรฟอร์มหรือคาร์บอนเตตระคลอไรด์ ทั้งไว้ในที่มีระยะเวลาหนึ่ง ไตรเตรทปริมาณไอโอดีนที่เหลือจากปฏิกิริยาด้วยสารละลายโซเดียมไทโอซัลเฟต ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$) โดยค่าไอโอดีนมีความสัมพันธ์กับมวลโมเลกุล (M) และจำนวนพันธะคู่ดังแสดงในสมการที่ (7)

$$IV = \frac{25400(n_d)}{M} \quad (7)$$

แทนสมการที่ (5)-(7) ในสมการที่ (3.3) และจัดรูปสมการใหม่ได้ดังสมการที่ (8) เป็นสมการทำนายแรงตึงผิวของไบโอดีเซล ที่อุณหภูมิต่างๆ จากค่า SN กับ IV

$$\gamma = 61.624 - 1722.89 \frac{1}{SN} - 0.1193T + 8.28 \frac{T}{SN} + 7.99 \frac{IV}{SN} - 0.01908 \frac{IV \times T}{SN} \quad (8)$$

3. ระเบียบวิธีวิจัย**3.1 การวิเคราะห์ค่าสะaponนิฟิเคชันและค่าไอโอดีน**

การวิเคราะห์ค่าสะaponนิฟิเคชันและค่าไอโอดีน ด้วยการคำนวณสมการที่ (6) และ (7)

3.2 ข้อมูลการทดลอง

ข้อมูลการทดลองแรงตึงผิวของไบโอดีเซลใช้ผลการทดลองของ Freitas et al. [9] ซึ่งทำการทดลองโดย Nima dynamic surface tensiometer รุ่น DST9005

3.3 การวิเคราะห์ทางสถิติ

การวิเคราะห์ค่าทางสถิติใช้โปรแกรมไมโครซอฟท์ เอ็กเซล รุ่น 2010 ค่าความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์เฉลี่ย (Average Absolute Deviation; AAD) ดังสมการที่ (9)

$$AAD = \sum_{i=1}^n \left[\frac{|\gamma_{lit} - \gamma_{cal}|}{\gamma_{lit}} \times 100 \right] / N \quad (9)$$

เมื่อ γ_{lit} และ γ_{cal} คือ แรงตึงผิวจากการทดลองและแรงตึงผิวจากการทำนายตามลำดับ และ N คือจำนวนข้อมูล

4. ผลการศึกษาและอภิปรายผล

ไบโอดีเซลเป็นผลิตภัณฑ์จากกระบวนการทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของแอลกอฮอล์กับน้ำมันหรือไขมันจากพืชและสัตว์ ถ้าวัตถุดิบที่นำมาใช้ในกระบวนการแตกต่างกันอาจทำให้องค์ประกอบของกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์ในไบโอดีเซลแตกต่างกันด้วย ในงานวิจัยนี้ได้รวบรวมกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์ของไบโอดีเซลไว้ในตารางที่ 1

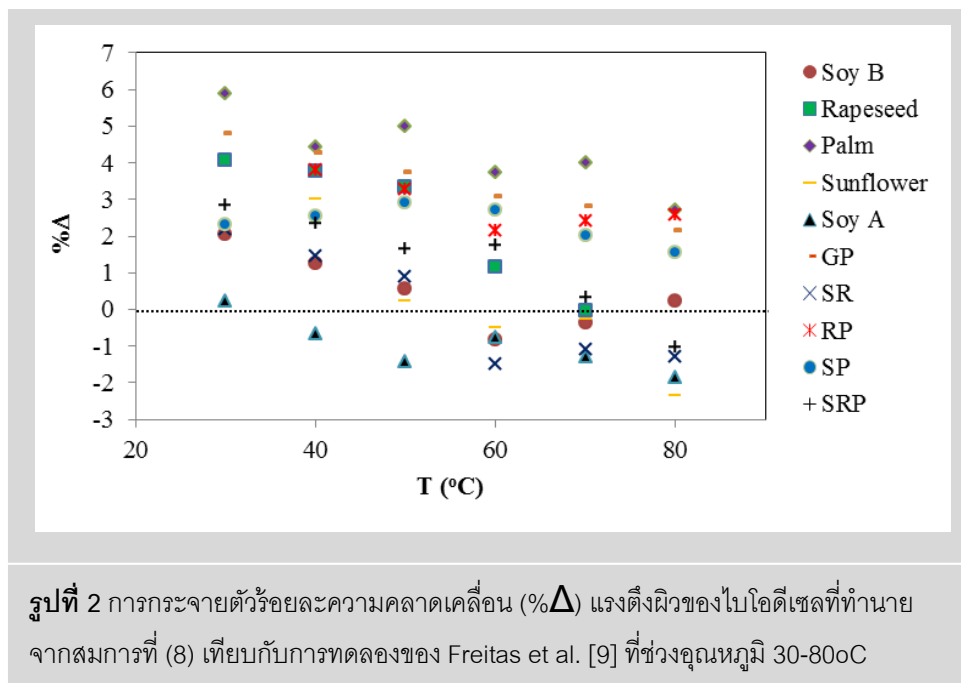
ตารางที่ 1 กรดไขมันเมทิลเอสเทอร์ของไบโอดีเซล [9]

Cz:n _d	Soy B	Rapeseed	Palm	Sunflower	Soy A	U	R	P	G	SP
C10:0	0.0000	0.0002	0.0005	0.0000	0.0000	0.0003	0.0000	0.0003	0.0002	0.0002
C12:0	0.0000	0.0006	0.0032	0.0003	0.0000	0.0016	0.0004	0.0027	0.0024	0.0019
C14:0	0.0008	0.0009	0.0067	0.0008	0.0000	0.1145	0.0011	0.0064	0.0001	0.0046
C16:0	0.1165	0.0570	0.4463	0.0695	0.1754	0.0014	0.0966	0.2471	0.2733	0.2048
C16:1	0.0008	0.0022	0.0014	0.0010	0.0000	0.0261	0.0016	0.0018	0.0012	0.0015
C18:0	0.0386	0.0160	0.0383	0.0415	0.0375	0.4056	0.0271	0.0293	0.0391	0.0321
C18:1	0.2267	0.6181	0.4020	0.2367	0.2848	0.3648	0.4139	0.5167	0.3232	0.4187
C18:2	0.5322	0.2111	0.0946	0.6399	0.5023	0.0711	0.3738	0.1521	0.3115	0.2770
C18:3	0.0703	0.0701	0.0009	0.0012	0.0000	0.0039	0.0704	0.0305	0.0354	0.0465
C20:0	0.0034	0.0054	0.0031	0.0068	0.0000	0.0060	0.0041	0.0043	0.0035	0.0041
C20:1	0.0021	0.0123	0.0013	0.0003	0.0000	0.0037	0.0061	0.0060	0.0018	0.0047
C22:0	0.0066	0.0029	0.0007	0.0007	0.0000	0.0010	0.0038	0.0020	0.0026	0.0027
C22:1	0.0020	0.0016	0.0000	0.0012	0.0000	0.0000	0.0010	0.0007	0.0010	0.0012
C24:0	0.0000	0.0017	0.0011	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0048	0.0000
SN	191.51	189.98	197.51	190.81	192.67	193.77	191.05	193.89	194.11	193.15
IV	129.82	108.84	51.18	131.09	110.96	47.27	118.90	78.07	90.90	96.29

หมายเหตุ

SR, soybean + rapeseed; GP, soybean + rapeseed biodiesel from portuguese biodiesel producers (prio and galp); RP, rapeseed + palm; SP, soybean + palm; SPR, soybean + palm + rapeseed

ข้อมูลกรดไขมันในไบโอดีเซลทั้ง 10 ชนิดในการศึกษานี้ดังแสดงในตารางที่ 1 พบว่าช่วงของค่า SV และ IV มีค่าเท่ากับ 189.98-197.51 และ 47.27-131.09 ตามลำดับ จากการทำนายค่าแรงตึงผิว (N/m) จากการทำนายด้วยสมการที่ (3.3) และสมการที่ (8) ของไบโอดีเซล และค่าร้อยละความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์เฉลี่ยเทียบกับผลการทดลองของ Freitas et al. [9] ที่ช่วงอุณหภูมิต่างๆแสดงในตารางที่ 2 พบค่าความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์สูงสุดและเฉลี่ยเท่ากับร้อยละ 4.30 (ปาล์ม) และ 2.17 ตามลำดับ และในรูปที่ 2 การกระจายตัวร้อยละความคลาดเคลื่อน ($\% \Delta$) แรงตึงผิวของไบโอดีเซลที่ทำนายจากสมการที่ (8) เทียบกับการทดลองของ Freitas et al. [9] ที่ช่วงอุณหภูมิ 30-80°C พบว่าค่าร้อยละความคลาดเคลื่อน ($\% \Delta$) ส่วนใหญ่มีค่าบวกแสดงว่าค่าแรงตึงผิวที่ได้จากการทำนายมีค่าสูงกว่าการทดลอง เปรียบเทียบค่าแรงตึงผิวที่ทำนายด้วยสมการที่ (8) มีค่าแตกต่างจากการทำนายด้วยสมการที่ (3.3) เพียงเล็กน้อย เนื่องจากการปัดเศษตัวเลขในขั้นตอนการแปลงความสัมพันธ์

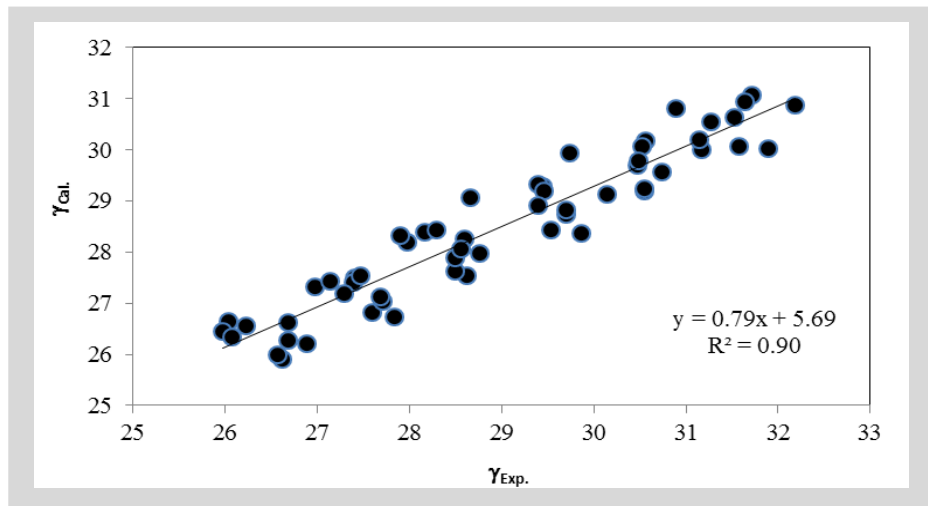


ตารางที่ 2 ค่าแรงตึงผิว (N/m) จากการทำนายด้วยสมการที่ (3.3) และสมการที่ (8) ของไบโอดีเซล และค่าร้อยละความคลาดเคลื่อนสัมบูรณ์ (AD) เทียบกับผลการทดลองของ Freitas et al. [9] ที่ช่วงอุณหภูมิต่างๆ

Biodiesels	T(K)	Literature [9]	Eq. (4.3) [*]	Eq. (8) ^{**}	% Δ^*	% Δ^{**}
Soy B	303.15	31.71	31.07	31.06	2.01	2.04
$z_{ave}=17.81$	313.15	30.56	30.18	30.17	1.24	1.26
$n_{d(ave)} = 1.51$	323.15	29.45	29.29	29.28	0.55	0.56
SN=191.51	333.15	28.16	28.40	28.39	-0.85	-0.83
IV=129.82	343.15	27.4	27.51	27.50	-0.39	-0.38
	353.15	26.68	26.62	26.61	0.24	0.25
AD					0.88	0.89
Rapeseed	303.15	32.18	30.86	30.87	4.09	4.08
$z_{ave}=17.94$	313.15	31.17	30.00	30.00	3.76	3.76
$n_{d(ave)} = 1.27$	323.15	30.14	29.13	29.13	3.35	3.34
SN=189.98	333.15	28.6	28.26	28.27	1.17	1.17
IV=108.84	343.15	27.39	27.40	27.40	-0.03	-0.04
AD					2.48	2.48
Palm	303.15	31.89	30.05	30.02	5.79	5.88
$z_{ave}=17.07$	313.15	30.55	29.22	29.19	4.35	4.44
$n_{d(ave)} = 0.60$	323.15	29.86	28.40	28.37	4.91	4.99
SN=197.51	333.15	28.62	27.57	27.55	3.67	3.75
IV=51.18	343.15	27.84	26.75	26.72	3.93	4.01
	353.15	26.62	25.92	25.90	2.63	2.71
AD					4.21	4.30
Sunflower	313.15	31.15	30.21	30.21	3.02	3.02
$z_{ave}=17.88$	323.15	29.39	29.32	29.32	0.24	0.24
$n_{d(ave)} = 1.52$	333.15	28.29	28.43	28.43	-0.49	-0.49
SN=190.81	343.15	27.47	27.54	27.54	-0.24	-0.25
IV=131.09	353.15	26.04	26.65	26.65	-2.33	-2.34
AD					1.26	1.27
Soy A	303.15	30.89	30.83	30.81	0.20	0.24
$z_{ave}=17.65$	313.15	29.74	29.95	29.94	-0.72	-0.68
$n_{d(ave)} = 1.29$	323.15	28.66	29.08	29.07	-1.47	-1.42
SN=192.67	333.15	27.98	28.21	28.20	-0.80	-0.77
IV=110.96	343.15	26.97	27.33	27.32	-1.34	-1.30
	353.15	25.97	26.46	26.45	-1.87	-1.84
AD					1.07	1.04
GP	303.15	31.57	30.08	30.06	4.71	4.79
$z_{ave}=17.50$	313.15	30.55	29.27	29.25	4.19	4.27
$n_{d(ave)} = 0.55$	323.15	29.54	28.46	28.43	3.66	3.74
SN=193.77	333.15	28.5	27.65	27.62	2.99	3.08
IV=47.27	343.15	27.59	26.84	26.81	2.74	2.83

	353.15	26.57	26.02	26.00	2.06	2.15
AD					3.39	3.48
SR	303.15	31.64	30.96	30.95	2.16	2.18
zave=17.84	313.15	30.52	30.08	30.07	1.45	1.46
nd(ave)= 1.38	323.15	29.46	29.20	29.19	0.89	0.90
SN=191.05	333.15	27.9	28.32	28.32	-1.50	-1.49
IV=118.90	343.15	27.14	27.44	27.44	-1.10	-1.10
	353.15	26.22	26.56	26.56	-1.30	-1.30
AD					1.40	1.41
RP	313.15	30.74	29.60	29.57	3.72	3.79
zave=17.49	323.15	29.70	28.75	28.73	3.20	3.27
nd(ave)= 0.92	333.15	28.50	27.91	27.89	2.09	2.15
SN=193.89	343.15	27.71	27.06	27.04	2.35	2.41
IV=78.07	353.15	26.89	26.21	26.20	2.51	2.57
AD					2.77	2.84
SP	303.15	31.27	30.57	30.55	2.23	2.31
zave=17.49	313.15	30.47	29.71	29.69	2.48	2.56
nd(ave)= 1.06	323.15	29.7	28.86	28.83	2.84	2.91
SN=194.11	333.15	28.76	28.00	27.98	2.64	2.71
IV=90.90	343.15	27.68	27.14	27.12	1.94	2.01
	353.15	26.68	26.29	26.27	1.48	1.55
AD					2.27	2.34
SRP	303.15	31.53	30.65	30.63	2.78	2.84
zave=17.59	313.15	30.49	29.79	29.77	2.29	2.35
nd(ave)= 1.12	323.15	29.4	28.93	28.91	1.59	1.65
SN=193.15	333.15	28.56	28.07	28.06	1.71	1.77
IV=96.29	343.15	27.29	27.21	27.20	0.29	0.34
	353.15	26.07	26.35	26.34	-1.07	-1.02
AD					1.62	1.66
Overall AAD					2.13	2.17

จากการวาดกราฟผลการทำนายด้วยสมการที่ (8) กับผลการทดลองแรงดึงผิวของไบโอดีเซล 10 ชนิดของ Freitas et al. [9] ดังแสดงในรูปที่ 3 พบว่ามีความสัมพันธ์กันในรูปเส้นตรงโดยมีค่า จุดตัดแกน ความชัน สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R^2) และค่า ความคลาดเคลื่อนมาตรฐานเท่ากับ 5.69, 0.786, 0.901 และ 0.194 ตามลำดับ พบว่าค่าความคลาดเคลื่อนมาตรฐานจากการทำนายด้วยสมการที่ (8) และสมการที่ (3.3) มีค่าใกล้เคียงกัน และในตารางที่ 3 แสดงค่าสถิติของการถดถอยของแรงดึงผิวไบโอดีเซลจากการคำนวณด้วยสมการที่ (8) กับการทดลองของ Freitas et al. [9] ที่ช่วงอุณหภูมิ 30-80°C ของไบโอดีเซลแต่ละชนิดโดยค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R^2) มีค่าใกล้เคียงกันอยู่ในช่วง 0.984-0.999



รูปที่ 3 ผลการทำนายแรงดึงผิวไบโอดีเซลด้วยสมการที่ (8) กับผลการทดลองของ Freitas et al. [9] ที่ช่วงอุณหภูมิ 30-80°C

ตารางที่ 3 ค่าสถิติของการถดถอยของแรงดึงผิวไบโอดีเซลจากการคำนวณด้วยสมการที่ (8) และการทดลองของ Freitas et al. [9] ที่ช่วงอุณหภูมิ 30-80oC

Biodiesel type	Intercept	Slope	R ²	AAD
Soy B	3.960	0.858	0.989	0.89
Repeseed	7.951	0.708	0.993	2.48
Palm	4.513	0.802	0.994	4.30
Sunflower	7.873	0.722	0.984	1.27
Soy A	2.926	0.906	0.996	1.04
GP	4.382	0.813	0.999	3.48
SR	6.109	0.786	0.992	1.40
RP	3.068	0.864	0.992	2.84
SP	1.515	0.924	0.995	2.34
SRP	5.530	0.794	0.996	1.66

5. สรุปผล

ในการศึกษานี้เสนอการทำนายแรงดึงผิวของไบโอดีเซลด้วยวิธีเชิงประจักษ์จากโครงสร้างทางเคมีหรือองค์ประกอบทางเคมีที่อุณหภูมิต่างๆ (30-80°C) วิธีการทำนายที่น่าเสนอสามารถทำนายโดยใช้ SN กับ IV เป็นวิธีการที่มีความแม่นยำสูง ข้อได้เปรียบของวิธีการทำนายที่น่าเสนอเปรียบเทียบกับวิธีอื่นคือ ไม่จำเป็นต้องทราบแรงดึงผิวของกรดไขมันเมทิลเอสเทอร์แต่ละตัวก่อน และความสัมพันธ์ที่น่าเสนอมีความสัมพันธ์โดยตรงกับค่า SN และ IV ซึ่งเป็นค่าที่วิเคราะห์หาได้ด้วยเครื่องมือที่มีราคาถูก อีกทั้งค่าทั้งสองมีความสัมพันธ์กับโครงสร้างทางเคมีโดยตรงซึ่งจะง่ายในการพัฒนาปรับปรุงการทำนายค่าแรงดึงผิวของไบโอดีเซลในอนาคตและสมบัติอื่นๆที่คล้ายคลึงกัน

บรรณานุกรม

- [1] C.E. Ejim, B.A. Fleck, A. Amirfazli, "Analytical study for atomization of biodiesels and their blends in a typical injector: Surface tension and viscosity effects", *Fuel*, vol. 86, no. 5, pp. 1534-1544, 7, 2007.
- [2] X. Wang, Z. Huang, O.A. Kutti, W. Zhang, K. Nishida, "Experimental and analytical study on biodiesel and diesel spray characteristics under ultra-high injection pressure", *Int J Heat Fluid Flow*, vol. 31, no. 4, pp. 659-666, 8, 2010.
- [3] C.W. Allen, K.C. Watts, R. Ackman, "Predicting the surface tension of biodiesel fuels from their fatty acid composition", *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 76, no. 3, pp. 317-323, 3, 1999.
- [4] D.B. Macleod, "On a relation between surface tension and density", *Trans. Faraday Soc*, vol. 19, pp. 38-41, 12, 1923.
- [5] S. Sugden, "VI.-The variation of surface tension with temperature and some related functions", *J Am Oil Chem Soc*, vol. 125, pp. 32-41, 1924.
- [6] O.R. Quayle, "The parachors of organic compounds. An interpretation and catalogue", *Chem. Rev.*, vol. 53, no. 3, pp. 439-589, 12, 1953.
- [7] J. Escobedo, G.A. Mansoori, "Surface tension prediction for pure fluids", *AIChE J.*, vol. 42, no. 5, pp. 1425-1433, 6, 1996.
- [8] E.A. Guggenheim, "The Principle of Corresponding States", *J. Chem. Phys.*, vol. 13, no. 7, pp. 53-261, 12, 1945.
- [9] S.V.D. Freitas, M.B. Oliveira, A.J. Queimada, M.J. Pratas, Á.S. Lima, J.A.P. Coutinho, "Measurement and Prediction of Biodiesel Surface Tensions", *Energy Fuels*, vol. 25 no. 10, pp. 4811-4817, 10, 2011.
- [10] T.A. Knotts, W.V. Wilding, J.L. Oscarson, R.L. Rowley, "Use of the DIPPR Database for Development of QSPR Correlations: Surface Tension", *J. Chem. Eng. Data*, Vol. 46, no. 3, pp. 1007-1012, 9, 2001.
- [11] S. Phankosol, K. Sudprasert, S. Lilitchan, K. Aryasuk, K. Krisnangkura, "Estimation of surface tension of fatty acid methyl ester and biodiesel at different temperatures", *Fuel*, vol. 126, no. 15, pp. 162-168, 6, 2014.
- [12] A.J.P. Martin, "Partition Chromatography", *Annu. Rev. Biochem.*, vol. 19, pp. 517-542, 7, 1950.
- [13] K. Krisnangkura, "A Simple Method for estimation of cetane index of vegetable oil methyl ester", *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 63, no. 4, pp. 552-553, 4, 1986.
- [14] K. Krisnangkura, "Estimation of heat of combustion of triglycerides and fatty acid methyl esters", *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 68, no. 1, pp. 56-58, 1, 1991.
- [15] อภิญา วัฒนา. 2551. การศึกษาองค์ประกอบของกรดไขมันและการประเมินศักยภาพในการผลิตไบโอดีเซลจากน้ำมันเมล็ดส้มโอ. ปัญหาพิเศษวิทยาศาสตร์บัณฑิต สาขาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยแม่โจ้. เชียงใหม่. หน้า 46.
- [16] นิธิยา รัตนานนท์. 2529. "วิทยาศาสตร์การอาหารของไขมันและน้ำมัน." มหาวิทยาลัยเชียงใหม่. เชียงใหม่. หน้า 83-87.