

รายงานฉบับสมบูรณ์

หัวข้อโครงการวิจัย

การเคลื่อนผิวแบบฟลูอิดิซ์เบดโดยอาศัยการขยายตัวอย่าง

รวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต

หัวข้อย่อย

การจำลองปรากฏการณ์การขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลาย

เหนือวิกฤต

Simulation of Rapid Expansion of Supercritical Solution

โดย ศาสตราจารย์ ดร. วิวัฒน์ ตันทะพานิชกุล และคณะ

ศูนย์เชี่ยวชาญเฉพาะด้านเทคโนโลยีอนาคต

ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ศูนย์วิจัยทรัพย์สินทางปัญญา

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

เสนอต่อ

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

มิถุนายน 2547

รายงานฉบับสมบูรณ์

หัวข้อโครงการวิจัย

การเคลือบผิวแบบฟลูอิดไอซ์เบดโดยอาศัยการขยายตัวอย่าง
รวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต

หัวข้อย่อย

การจำลองปรากฏการณ์การขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลาย
เหนือวิกฤต

Simulation of Rapid Expansion of Supercritical Solution

โดย ศาสตราจารย์ ดร. วิวัฒน์ ตันตะพานิชกุล และคณะ

ศูนย์เชี่ยวชาญเฉพาะด้านเทคโนโลยีอนาคต

ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ศูนย์วิจัยทรัพย์สินทางปัญญา

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

เสนอต่อ

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

มิถุนายน 2547

ใบรายละเอียดโครงการวิจัย

1. หัวข้อเรื่องการวิจัย การเคลื่อนผิวแบบฟลูอิดซ์เบคโดยอาศัยการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต

หัวข้อย่อย ภาษาไทย การจำลองปรากฏการณ์การขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต
ภาษาอังกฤษ Simulation of Rapid Expansion of Supercritical Solution

2. ชื่อผู้วิจัย

2.1 หัวหน้าโครงการวิจัย : ศาสตราจารย์ ดร. วิวัฒน์ คั่นชะพานิชกุล

ที่ทำงาน ศูนย์เชี่ยวชาญเฉพาะด้านเทคโนโลยีอนาคต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

โทร. 02-218-6894 โทรสาร 022-218-6877

e-mail : twiwut@pioneer.chula.ac.th

2.2 หัวหน้าโครงการวิจัยย่อย : รองศาสตราจารย์ ดร. ธวัชชัย ชรินพานิชกุล

ที่ทำงาน ศูนย์เชี่ยวชาญเฉพาะด้านเทคโนโลยีอนาคต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

โทร. 02-218-6894 โทรสาร 022-218-6877

e-mail : ctawat@pioneer.chula.ac.th

2.3 รองหัวหน้าโครงการย่อย : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. มานะ อมรกิจบำรุง

ที่ทำงาน สำนักวิชาพลังงาน คณะวิศวกรรมศาสตร์

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้า ธนบุรี

2.4 ที่ปรึกษาโครงการ : Assoc. Prof. Dr. Atsushi Tsustsumi

Dept. of Chemical System Engineering, Faculty of Engineering

The University of TOKYO

2.5 ผู้ช่วยวิจัย นางสาวกนกวรรณ กรร โฉ

ที่ทำงาน ศูนย์เชี่ยวชาญเฉพาะด้านเทคโนโลยีอนาคต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

โทร. 02-218-6451

2.6 องค์กร และ บริษัทที่จะให้ความร่วมมือ สถาบันวิจัยวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทย

บทคัดย่อ

โครงการวิจัยย่อยนี้เป็นผลงานส่วนหนึ่งของโครงการวิจัยการประยุกต์ใช้ฟลูอิดไฮดรอนเทคโนโลยี ซึ่งดำเนินอยู่ในศูนย์เชี่ยวชาญเฉพาะทางด้านเทคโนโลยีอวกาศ โดยมุ่งเน้นที่จะศึกษาปรากฏการณ์การขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนียวิกฤตของคาร์บอนไดออกไซด์ ในเชิงทฤษฎี เพื่อจำลองกระบวนการ และเก็บข้อมูลซึ่งจะสามารถนำมาประยุกต์ใช้สำหรับการพัฒนาชุดเครื่องมือสำหรับเคลือบผิววัสดุอวกาศด้วยการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนียวิกฤตต่อไปในอนาคต

ในโครงการนี้ คณะผู้วิจัยได้ทำการศึกษาหาสมการสภาวะที่เหมาะสมสำหรับประมาณค่าคุณสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์ของคาร์บอนไดออกไซด์เหนียวิกฤต จากนั้นจึงได้ทำการจำลองปรากฏการณ์การขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์บริสุทธิ์ โดยได้ทำการปรับเปลี่ยนค่าตัวแปรดำเนินการอันได้แก่ อุณหภูมิ ความดัน และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์เหนียวิกฤต ก่อนเกิดการขยายตัว ตามลำดับ

จากผลการศึกษาสามารถสรุปได้ว่า ค่าความเร็วขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์มีผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนียวิกฤตน้อยมาก ส่วนอุณหภูมิขาเข้าของของคาร์บอนไดออกไซด์ส่งผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วพอสมควร และสำหรับค่าความดันขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ส่งผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วมากที่สุด โดยปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ จะมีลักษณะคล้ายคลึงกันคือ อุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์จะลดลงอย่างรวดเร็วเมื่อถูกฉีดออกจากหัวฉีดในระยะห่างจากหัวฉีด 1 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางหัวฉีด และเมื่อคาร์บอนไดออกไซด์ไหลออกจากหัวฉีดไปถึงระยะ 2 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางหัวฉีด ค่าอุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์จะเพิ่มมากขึ้นเล็กน้อยจนกระทั่งมีค่าเข้าสู่อุณหภูมิของสิ่งแวดล้อม ข้อมูลการศึกษาในที่นี้จะเป็นประโยชน์ในการนำไปใช้อ้างอิงในการออกแบบระบบเคลือบผิวอวกาศในภาชนะ ซึ่งประยุกต์ใช้กระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายคาร์บอนไดออกไซด์

เลขหมู่

เลขทะเบียน 014595

วัน, เดือน, ปี 6 ก.ค. 53

Abstract

This research project is also a part of Fluidization Technology Application Project being conducted in Center of Excellence in Particle Technology. The project sets its aim to investigate the phenomena of rapid expansion of supercritical carbon dioxide (RESC) theoretically. Simulation data obtained from this work is expected to utilize as reference of the actual process for particulate material coating by RESC in the future.

In this work, the appropriate equation of state (EOS) for estimating thermodynamics properties of carbon dioxide has been investigated. Then a mass, momentum and energy balance model of rapid expansion of supercritical carbon dioxide has been developed by incorporating with the selected EOS. Specific operating variables, which are temperature, pressure and flow rate of carbon dioxide, have been varied for investigating their influences on the rapid expansion phenomena.

From the experimental results it could be concluded that the inlet velocity exhibit smallest effect while the inlet temperature and inlet pressure of supercritical carbon dioxide could provided more significant effects on the rapid expansion phenomena. Somehow, the expansion processes under the influence of those different parameters show the analogical behavior of the rapid decrease in the fluid temperature along with the distance of one time of the nozzle diameter away from the nozzle tip. However, at the longer distance, i.e. 2 times of the nozzle diameter, temperature of the expanding fluid becomes increased due to the heat transferred from the environment. This finding will be useful for applying with design of coating chamber which makes use of RESC process.

ศูนย์วิจัยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

กิตติกรรมประกาศ

รายงานการศึกษาวิจัยฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของ โครงการวิจัยความร่วมมือระหว่างภาครัฐ-เอกชน (งบประมาณแผ่นดิน) ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย โดยได้ดำเนินการในศูนย์เชี่ยวชาญด้านเทคโนโลยีอนาคต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เพื่อทำการศึกษา กระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต ทั้งนี้เพื่อเป็นการจำลองกระบวนการ และนำข้อมูลที่ได้ไปใช้อ้างอิงในการพัฒนาระบบเคลือบผิวอนุภาคในฟลูอิดไรต์เบดที่ประยุกต์ใช้เทคนิคการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤตของคาร์บอนไดออกไซด์ในอนาคต โครงการนี้ไม่อาจสำเร็จลุล่วงไปได้ หากปราศจากความร่วมมือของมหาวิทยาลัย TOKYO ประเทศญี่ปุ่น ที่ได้ช่วยสนับสนุนทางด้านข้อมูลการทดลอง และความเห็นในการทำวิจัย ดังนั้นในนามของคณะวิจัยจึงขอแสดงความขอบพระคุณมา ณ ที่นี้ด้วย

พร้อมกันนี้ คณะวิจัยยังขอขอบคุณการสนับสนุนบางส่วนจากโครงการเมธีวิจัยอาวุโส (ศาสตราจารย์ ดร. วิวัฒน์ ตันตะพานิชกุล) ของสำนักงานส่งเสริมการวิจัย (สกว.) มา ณ ที่นี้ด้วยเช่นกัน



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญ

	Page
บทคัดย่อ	i
ABSTRACT	ii
กิตติกรรมประกาศ	iii
สารบัญ.....	iv
สารบัญรูป.....	vi
สารบัญตาราง.....	x
สัญลักษณ์.....	xi
บทที่	
1. บทนำ	1
1.1 มุลเหตุจูงใจของงานวิจัย	1
1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย	2
1.3 ขอบเขตของงานวิจัย	2
1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากโครงการวิจัย	3
2. ทฤษฎีพื้นฐาน	4
2.1 กระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต	4
2.2 สมการสภาวะ Equation of state (EOS)	5
2.3 Computational Fluid Dynamics, CFD	7
2.4 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	24
3. การตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรมคอมพิวเตอร์	26
3.1 การทดสอบสมการสภาวะที่เลือกใช้	26
3.2 โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่พัฒนาขึ้นเพื่อจำลองกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต	31
4. การศึกษาอิทธิพลของปัจจัยดำเนินการ	42
4.1 อิทธิพลของอุณหภูมิขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์	42
4.2 อิทธิพลของความเร็วขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์	43
4.3 อิทธิพลของความดันขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์	44

5. ข้อสรุปและข้อเสนอแนะ	61
5.1 ข้อสรุป	61
5.2 ข้อเสนอแนะ	62
เอกสารอ้างอิง	63
ภาคผนวก	65



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญรูป

		หน้า
รูปที่ 2.1	ชุดอุปกรณ์ในการทดลอง	4
รูปที่ 2.2	Schematic Diagram for Predictor and Corrector steps	9
รูปที่ 2.3	Block diagram ของขั้นตอนการจำลองกระบวนการขยายตัว อย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ โดยใช้เทคนิค explicit finite difference	12
รูปที่ 2.4	หลักการของ control volume ที่ใช้กับ continuity equation	13
รูปที่ 2.5	หลักการของ control volume ที่ใช้กับ momentum equation	14
รูปที่ 2.6	หลักการของ control volume ที่ใช้กับ energy equation	18
รูปที่ 2.7	Block diagram ของขั้นตอนการจำลองกระบวนการขยายตัว อย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ โดยใช้เทคนิค implicit finite difference	23
รูปที่ 3.1	ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของ คาร์บอนไดออกไซด์ที่อุณหภูมิ 313 K	28
รูปที่ 3.2	ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของ คาร์บอนไดออกไซด์ที่อุณหภูมิ 333 K	28
รูปที่ 3.3	ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของ คาร์บอนไดออกไซด์ที่อุณหภูมิ 353 K	29
รูปที่ 3.4	ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของ คาร์บอนไดออกไซด์ที่อุณหภูมิ 373 K	29
รูปที่ 3.5	ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างจากสมการ Soave Redlich-Kwong ที่ใช้ค่า compressibility factor ของ คาร์บอน ไดออกไซด์ 0.274	30
รูปที่ 3.6	Simplified scheme of the expansion nozzle	31
รูปที่ 3.7	ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความ ดันขาเข้า 200 bar และอุณหภูมิขาเข้า 333 K	35
รูปที่ 3.8	ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความ ดันขาเข้า 200 bar และอุณหภูมิขาเข้า 353 K	36

รูปที่ 4.13	ความสัมพัทธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ ความเร็วขาเข้า 100.0 m/s และอุณหภูมิขาเข้า 300 K	57
รูปที่ 4.14	ความสัมพัทธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ ความเร็วขาเข้า 100.0 m/s และอุณหภูมิขาเข้า 340 K	58
รูปที่ 4.15	ความสัมพัทธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ ความเร็วขาเข้า 100.0 m/s และอุณหภูมิขาเข้า 380 K	59
รูปที่ 4.16	PT diagram for throttling process	60



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญตาราง

	หน้า	
ตารางที่ 3.1	ค่าตัวแปรที่ใช้ในการคำนวณ	27
ตารางที่ 3.2	สภาวะที่ใช้ในการคำนวณในงานวิจัยของ Revenchon and Pallado (1996)	32
ตารางที่ 3.3	สภาวะที่ใช้ในการคำนวณด้วยเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน	33
ตารางที่ 3.4	สภาวะที่ใช้ในการคำนวณด้วยเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย	34
ตารางที่ 3.5	ค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างที่ได้จากการทดสอบระเบียบวิธีที่ใช้	40
ตารางที่ 4.1	สภาวะที่ใช้ในการศึกษาอิทธิพลของปัจจัยต่างๆ	42
ตารางที่ 4.2	สภาวะที่ใช้ในการคำนวณ	43

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สัญลักษณ์

p	= pressure (Pa)
t	= time (sec)
T_{ref}	= Ref. Temperature
E_t	= sum of kinetic and internal energy per unit volume
k	= thermal conductivity
C_p	= heat capacity for constant pressure
C_v	= heat capacity for constant volume
Pr	= Prandtl number
V	= fluid velocity in y direction (horizontal direction)
W	= fluid velocity in z direction (vertical upward direction)
Δt	= Step size of integration, sec
e	= internal energy per unit volume
q_y	= heat flux vector in y direction
q_z	= heat flux vector in z direction

Greek symbol

ρ	= fluid density (kg/m ³)
μ_{ref}	= ref. fluid viscosity (g/cm .s)
μ	= fluid viscosity (g/cm .s)

ศูนย์วิจัยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 1

บทนำ

1.1 มุมเหตุจูงใจของงานวิจัย

กระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต (RESS) เป็นเทคโนโลยีใหม่ที่นำมาประยุกต์ใช้ในหลายวัตถุประสงค์ ไม่ว่าจะเป็นการสกัดสารจากผลิตภัณฑ์ทางชีวภาพหรือทางเคมี รวมทั้งการเคลือบผิวอนุภาคขนาดเล็กด้วยอนุภาคขนาดเล็กมากๆ

ในเวลาเดียวกัน เป็นที่ทราบกันว่าเทคนิคดังกล่าวเหมาะสมที่จะนำมาใช้ในการเคลือบผิวอนุภาคที่มีการเกาะตัวกัน เช่น เม็ดยา เพราะจะไม่ทำให้เกิดการจับตัวรวมกันเป็นก้อนของอนุภาคอื่นเนื่องมาจากหยดของสารละลาย ดังนั้นการเคลือบผิวด้วยกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤตจึงถูกประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมผลิตยาอย่างกว้างขวาง

โดยทั่วไป คาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตนับเป็นสารที่ถูกนำมาใช้เป็นตัวทำละลายของสารละลายเหนือวิกฤต เนื่องจากคาร์บอนไดออกไซด์มีราคาถูก จัดหาได้ง่าย ไม่เป็นพิษ ไม่ติดไฟ อีกทั้งยังมีค่าอุณหภูมิจุดเดือดและความดันวิกฤตต่ำอีก

กระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤตของระบบที่มีขนาดเล็กเช่นระบบ ฟันโดยใช้หัวฉีดเดี่ยวนั้นมีความสะดวกและง่ายต่อการจัดเครื่องมือและอุปกรณ์ แต่สำหรับระบบที่มีขนาดใหญ่ในภาคอุตสาหกรรมซึ่งต้องใช้หัวฉีดเป็นจำนวนมากนั้นมีความซับซ้อนของระบบมากและยากต่อการควบคุมขนาดของอนุภาคที่ได้ ดังนั้นจึงจำเป็นที่จะต้องทำความเข้าใจอิทธิพลของปัจจัยต่างๆ ที่มีต่อการเคลือบผิวอนุภาคด้วยกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต แต่เนื่องจากการศึกษากระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤตด้วยการทดลองจำเป็นต้องใช้ค่าใช้จ่ายสูงมาก ประกอบกับในปัจจุบัน ยังมีข้อมูลเชิงวิชาการเพียงจำนวนจำกัด ดังนั้นการพัฒนาระบบดังกล่าวขึ้นมาใช้งานในด้านอุตสาหกรรมจึงยังคงทำได้ยาก

ในเวลาเดียวกัน ความก้าวหน้าทางด้านเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ และการพัฒนาองค์ความรู้ในการสร้างสมการแบบจำลองของกระบวนการต่างๆ โดยนักวิจัยทั่วโลกมีมากขึ้น ส่งผลให้ การสร้างแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์เป็นอีกทางเลือกหนึ่งที่น่านำมาใช้ศึกษากระบวนการต่างๆ ได้อย่างมีประสิทธิภาพ ดังนั้นด้วยข้อจำกัดในการจัดสร้างชุดเครื่องมือทดลองสำหรับกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต แต่ในเวลาเดียวกันเนื่องด้วยความพร้อมของหลักการพัฒนาแบบจำลองคณิตศาสตร์เพื่อทำการจำลองกระบวนการดังกล่าว จึงทำให้โครงการวิจัยนี้มุ่งเน้นที่จะนำองค์ความรู้เกี่ยวกับกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของ

สารละลายเหนือวิกฤต มาทำการจำลองเพื่อศึกษาการขยายตัวของสารละลายเหนือวิกฤตที่ถูกพ่นผ่านหัวฉีด โดยคาดหวังว่าองค์ความรู้นี้จะสามารถนำไปใช้ประโยชน์ในการประยุกต์เพื่อการเคลื่อนที่อนุภาคในเครื่องเคลือบแบบฟลูอิดิซ์เบดในอนาคตต่อไป

1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย

โครงการวิจัยย่อยนี้มีวัตถุประสงค์ที่มุ่งเน้นดังต่อไปนี้

1. เพื่อศึกษาสมการสภาวะที่เหมาะสมต่อการประมาณคุณสมบัติของคาร์บอนไดออกไซด์
2. เพื่อพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์และโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อใช้ในการจำลองปรากฏการณ์การขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ โดยพิจารณาในระบบแกนมุมฉาก 2 มิติ
3. เพื่อศึกษาอิทธิพลของค่าอุณหภูมิ ความดันและความเร็วขาเข้าที่มีผลต่อการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ โดยเฉพาะอย่างยิ่งบริเวณใกล้หัวฉีด

1.3 ขอบเขตของงานวิจัย

สำหรับขอบเขตของโครงการวิจัยย่อยนี้จะพิจารณาดังต่อไปนี้

1. ทำการศึกษาสมการสภาวะที่เหมาะสมต่อการประมาณคุณสมบัติของคาร์บอนไดออกไซด์
2. ทำการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกลไกการไหลของของไหลในกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ และเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อใช้ในการจำลองปรากฏการณ์การขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ โดยพิจารณาในระบบแกนมุมฉาก 2 มิติ
3. ทำการศึกษาอิทธิพลของค่าอุณหภูมิ ความดันและความเร็วขาเข้าที่มีผลต่อการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ โดยเฉพาะอย่างยิ่งบริเวณใกล้หัวฉีด
4. ใช้สมมติฐานว่า ไม่มีปฏิกิริยาทางเคมีเกิดขึ้นภายในระบบ
5. พิจารณาให้ของไหลที่มีความเร็วสูงถูกฉีดออกจากหัวฉีดที่บริเวณกึ่งกลางของภาชนะซึ่งในเบื้องต้นถือว่าเป็นภาชนะว่างเปล่า

1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากโครงการวิจัย

ในการทำโครงการนี้ ผลประโยชน์ที่คาดว่าจะได้คือ ข้อมูลของสมการสถานะที่เหมาะสมในการประมาณคุณสมบัติของคาร์บอนไดออกไซด์ ได้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตที่ถูกฉีดผ่านหัวฉีด ได้ข้อมูลของอิทธิพลของอุณหภูมิ ความดันและความเร็วขาเข้าที่มีผลต่อการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ โดยเฉพาะอย่างยิ่งบริเวณใกล้หัวฉีด



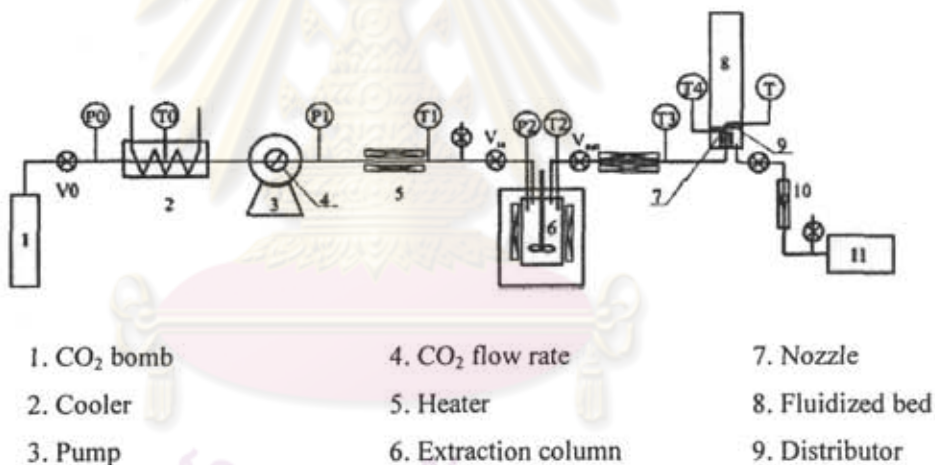
ศูนย์วิจัยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 2

ความรู้พื้นฐาน

2.1 กระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต

กระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต เป็นเทคโนโลยีใหม่ที่ถูกพัฒนาขึ้นเพื่อใช้ในการเคลือบผิวอนุภาคระดับนาโนเมตร โดยการใช้ของไหลเหนือวิกฤต (ตัวทำละลาย) ในการป้อนสารเคลือบผิวเข้าไปกระทบกับอนุภาคที่กำลังถูกฟลูอิดไดซ์ หลักการเคลือบผิวอนุภาคถูกนำมาใช้ในอุตสาหกรรมหลายด้าน อาทิเช่น อุตสาหกรรมยา, ปุ๋ยเคมี เป็นต้น โดยวัตถุประสงค์ในการเคลือบผิวอนุภาค คือควบคุมการปลดปล่อยสารที่อยู่ภายในอนุภาคที่ถูกเคลือบ สารที่นิยมนำมาเคลือบผิวอนุภาคคือสารจำพวกพอลิเมอร์, พาราฟิน ส่วนตัวทำละลายที่นิยมนำมาใช้ละลายสารเคลือบผิวคือคาร์บอน ไดออกไซด์ (ตัวทำละลายในอุดมคติ)



รูปที่ 2.1 ชุดอุปกรณ์ในการทดลอง

ในการนี้ คาร์บอนไดออกไซด์บริสุทธิ์จะถูกอัดด้วยความดันสูงโดยใช้ปั๊มจากนั้นจะให้ความร้อนโดยเครื่องแลกเปลี่ยนความร้อนจนอยู่ในสภาวะเหนือวิกฤต จากนั้นคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตจะถูกส่งผ่านเข้าสู่หอคูดซับเพื่อที่จะทำละลายสารเช่น พอลิเมอร์ พาราฟิน จากนั้นสารละลายเหนือวิกฤตจะถูกฉีดออกจากหัวฉีดเข้าสู่ถึงแวดล้อมที่มีความ

ความดันต่ำๆ ค่าความดันของสารละลายจะลดลงอย่างรวดเร็วก่อให้เกิดการรวมตัวกันอนุภาคขนาดเล็กมากๆ

2.2 สมการสถานะ Equation of state (EOS)

คุณสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกของสสารจะมีค่าที่ทราบแน่นอน เมื่อสถานะของสสารนั้นถูกกำหนดให้คงที่ หรือโดยทั่วไปคือ การกำหนดให้ค่าความดัน อุณหภูมิและปริมาตรไม่มีการเปลี่ยนแปลง จากความสัมพันธ์ของ PVT นี้สามารถเขียนเป็นสมการสถานะได้ซึ่งสมการสถานะ PVT จะถูกนำมาใช้ในการประมาณค่าคุณสมบัติที่สำคัญๆ ของสารบริสุทธิ์หรือสารประกอบได้เช่น

- ค่าความหนาแน่นของของเหลวและก๊าซ
- ค่าความดันไอ
- คุณสมบัติที่จุดวิกฤติของสารประกอบ
- ความสัมพันธ์ของสมมูลไอและของเหลว
- ความเบี่ยงเบนของค่าสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์ เช่น เอนทัลปี เอนโทรปี เป็นต้น

เพื่อให้สามารถประมาณค่าสมบัติสถานะของสสารได้ สมการสถานะได้ถูกพัฒนามาจากกฎของ Boyle (1662) อย่างต่อเนื่อง ปัจจุบันมีสมการสถานะที่ถูกพัฒนาและสร้างขึ้นมามากมาย แต่ไม่มีสมการสถานะใดที่ได้รับการยอมรับว่าสามารถใช้ได้กับสสารทุกชนิด ดังนั้นการเลือกใช้สมการสถานะจะต้องคำนึงถึงระบบและคุณสมบัติของสสาร อาทิ เช่น โครงสร้างของโมเลกุล ค่าความมีขั้วของโมเลกุล เป็นต้น สำหรับงานวิจัยนี้ของไหลที่จะมุ่งเน้นศึกษา คือ CO_2 ซึ่งถึงแม้จะมีค่า dipole moments เท่ากับ 0 debye และเป็น symmetrical molecules แต่เนื่องจากมีคาร์บอนไดออกไซด์ มี opposed dipoles จึงทำให้คาร์บอนไดออกไซด์มีสมบัติเป็น highly polar ด้วยเหตุนี้ทำให้ งานวิจัยนี้จึงได้เลือกใช้สมการสถานะ Peng – Robinson EOS และ Soave Redlich-Kwong EOS ในการประมาณค่าคุณสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกกับคุณสมบัติทางกายภาพของ CO_2 สำหรับรูปสมการของสมการสถานะทั้งสองได้แสดงไว้ข้างล่างนี้

Peng-Robinson Equation of State

Standard form:
$$\frac{P}{(V-b)} = \frac{(RT-a)}{V^2 + 2Vb - b^2} \quad (2.1)$$

เมื่อ

$$a = 0.45724R^2T_c^2/P_c$$

$$b = 0.07780RT_c/P_c$$

$$\alpha = (1+(0.37464+(1.5422\omega)-(0.26992\omega^2))(1-(T/T_c)^{0.5}))^2$$

$$\omega = (0.2905-Z_c)/0.085$$

$$Z_c = 0.307$$

Soave Redlich-Kwong Equation of State

Standard form:
$$\frac{P}{(V-b)} = \frac{a\alpha}{V(V+b)} \quad (2.2)$$

เมื่อ

$$a = 0.42747R^2T_c^2/P_c$$

$$b = 0.08664RT_c/P_c$$

$$\alpha = (1+(0.48508+(1.5517\omega)-(0.15613\omega^2))(1-(T/T_c)^{0.5}))^2$$

$$\omega = (0.2905-Z_c)/0.085$$

$$Z_c = 0.333$$

เมื่อ

V คือ ปริมาตร (m^3)

R คือ ค่าคงที่ของก๊าซ ($0.08205 m^3 \cdot atm / kg \cdot mol \cdot K$)

T คือ อุณหภูมิ (K)

P คือ ความดัน (atm)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

2.3 Computational Fluid Dynamics, CFD

ในการศึกษาปรากฏการณ์การไหลของของไหลจะต้องเลือกใช้ทฤษฎีพื้นฐานจากกฎการอนุรักษ์มวล การอนุรักษ์พลังงานและการอนุรักษ์โมเมนตัม การศึกษากลไกการเคลื่อนที่ของของไหลด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ดังกล่าวนี้ จะถูกนำไปใช้พัฒนาเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อนำไปใช้คำนวณ ซึ่งจะมีความสะดวก รวดเร็วและประหยัดค่าใช้จ่ายในการดำเนินงาน อีกทั้ง โดยอาศัยผลลัพธ์ที่ได้จากการจำลอง จะสามารถอธิบายกลไกและปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นภายในการไหลของของไหลในระบบที่มีการถ่ายเทความร้อน รวมไปถึงระบบที่มีปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นได้ด้วย ดังนั้นเทคนิควิธีนี้จึงมีคุณประโยชน์และถูกใช้อย่างแพร่หลายทั้งในด้านการศึกษาค้นคว้าและในด้านอุตสาหกรรม ยกตัวอย่างเช่น

- Aerodynamics of aircraft and vehicles : lift and drag
- Hydrodynamics of ships
- Power plant : combustion in IC engines and gas turbines
- Chemical process : mixing and separation
- Environmental engineering : distribution of pollutant and effluents

สำหรับสมการที่ใช้ในการพิจารณากระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตในระบบแกนหมุนจาก 2 มิติ

Equation of continuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (2.3)$$

Momentum equation: Euler equations

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v w) = 0 \quad (2.4)$$

z-component (vertical direction)

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v w) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w^2 + p) = 0 \quad (2.5)$$

Equation of Energy

$$\frac{\partial E_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}[(E_t + p)v + q_y] + \frac{\partial}{\partial z}[(E_t + p)w + q_z] = 0 \quad (2.6)$$

โดยที่
$$E_t = \rho \left(e + \frac{X^2}{2} \right) \quad (2.7)$$

$$\text{Pr} = \frac{\mu C_p}{k} \quad (2.8)$$

$$q_y = -k \frac{\partial T}{\partial y} \quad (2.9)$$

$$q_z = -k \frac{\partial T}{\partial z} \quad (2.10)$$

$$e = C_v T \quad (2.11)$$

$$X = \sqrt{v^2 + w^2} \quad (2.12)$$

$$k = \frac{\mu C_p}{\text{Pr}} \quad (2.13)$$

$$p = \rho R T \quad (2.14)$$

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{T_{ref} + 110}{T + 110} \quad (2.15)$$

2.3.1 เทคนิควิธีการหาคำตอบเชิงตัวเลข

ในงานวิจัยนี้เทคนิควิธีการหาคำตอบเชิงตัวเลขนำมาใช้ในการพิจารณากระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตมี 2 เทคนิควิธีคือระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit finite difference technique) และระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique)

ระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit finite difference technique) เป็นระเบียบวิธีที่ง่ายต่อการทำความเข้าใจและสะดวกในการประยุกต์โปรแกรมคอมพิวเตอร์ แต่มีข้อเสียคือค่า Δt ที่ใช้ในการคำนวณจะต้องมีค่าน้อยกว่าช่วงเวลาวิกฤตซึ่งส่งผลให้เวลาที่ใช้ในการคำนวณมากตามไปด้วย

ระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) เป็นระเบียบวิธีที่เสี่ยงปัญหาการลู่ออกของผลลัพธ์จากระเบียบวิธีแบบชัดเจนเนื่องจากการใช้ค่า Δt ที่มากกว่าค่าช่วงเวลาวิกฤต แต่ระเบียบวิธีนี้ก็มีข้อเสียคือมีความยุ่งยากซับซ้อนต่อการทำความเข้าใจและการประยุกต์โปรแกรมคอมพิวเตอร์

ทั้งนี้ รายละเอียดของวิธีการหาคำตอบเชิงตัวเลขทั้งสอง จะได้อธิบายต่อไป ดังนี้

2.3.1.1 ระเบียบวิธีแบบชัดเจน (Explicit Finite Difference Technique)

เมื่อจัดรูปสมการใหม่ดังนี้

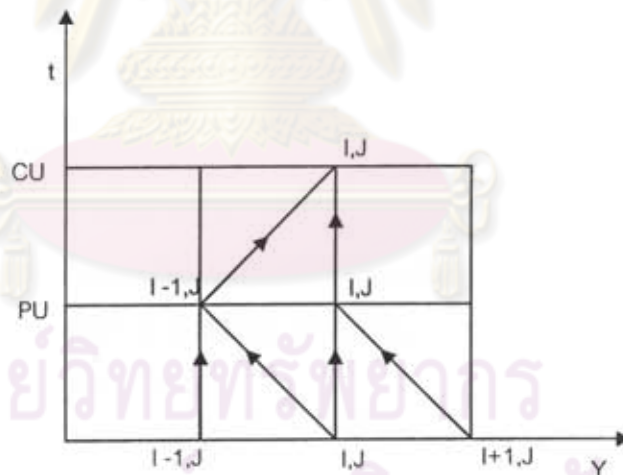
$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial z} = 0 \quad (2.16)$$

เมื่อ

$$U = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho w \\ E_t \end{Bmatrix} \quad (2.17)$$

$$E = \begin{Bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho v w \\ (E_t + p)v + q_y \end{Bmatrix} \quad (2.18)$$

$$F = \begin{Bmatrix} \rho w \\ \rho v w \\ \rho w^2 + p \\ (E_t + p)w + q_z \end{Bmatrix} \quad (2.19)$$



รูปที่ 2.2 Schematic Diagram for Predictor and Corrector steps

ก) Predictor Steps

คำนวณค่า partial derivative terms โดยใช้ forward finite differences

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,j}^t = -\frac{(E_{i+1,j}^t - E_{i,j}^t)}{\Delta y} - \frac{(F_{i,j+1}^t - F_{i,j}^t)}{\Delta z} \quad (2.20)$$

จากค่าที่คำนวณได้จากสมการ (2.20) สามารถนำมาคำนวณหาค่า U ที่เวลา $t+\Delta t$ โดย

$$U_{i,j}^{t+\Delta t} = U_{i,j}^t + \left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,j}^t \Delta t \quad (2.21)$$

ข) Corrector Step

ใช้ rearward partial differences ในการคำนวณค่า time derivative terms โดย

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,j}^{t+\Delta t} = -\frac{(E_{i,j}^{t+\Delta t} - E_{i-1,j}^{t+\Delta t})}{\Delta y} - \frac{(F_{i,j}^{t+\Delta t} - F_{i,j-1}^{t+\Delta t})}{\Delta z} \quad (2.22)$$

จากค่าที่คำนวณได้ สามารถหาค่าของ $\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{av}$ จาก

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{av} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,j}^t + \left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,j}^{t+\Delta t} \right] \quad (2.23)$$

ในลำดับท้ายสุด สามารถคำนวณหาค่า second-order-accurate values ของ U ที่เวลา $t+\Delta t$ ได้โดย

$$\bar{U}_{i,j}^{t+\Delta t} = U_{i,j}^t + \left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{av} \Delta t \quad (2.24)$$

ค) สมมติฐานที่ใช้กับเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน

1. ไม่มีปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นในระบบ
2. ของไหลความเร็วสูงถูกฉีดออกจากหัวฉีดบริเวณกึ่งกลางเบด
3. สภาวะเริ่มต้น เบดมีความดันคงที่ที่ 1 บรรยากาศ
4. ของไหลสามารถบีบอัดได้
5. พิจารณาผลกระทบของค่าอุณหภูมิ ความดัน และ ความเร็วขาเข้าที่มีต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เฉพาะบริเวณใกล้หัวฉีดเท่านั้น
6. พิจารณาระบบในแกนมุมฉาก 2 มิติ

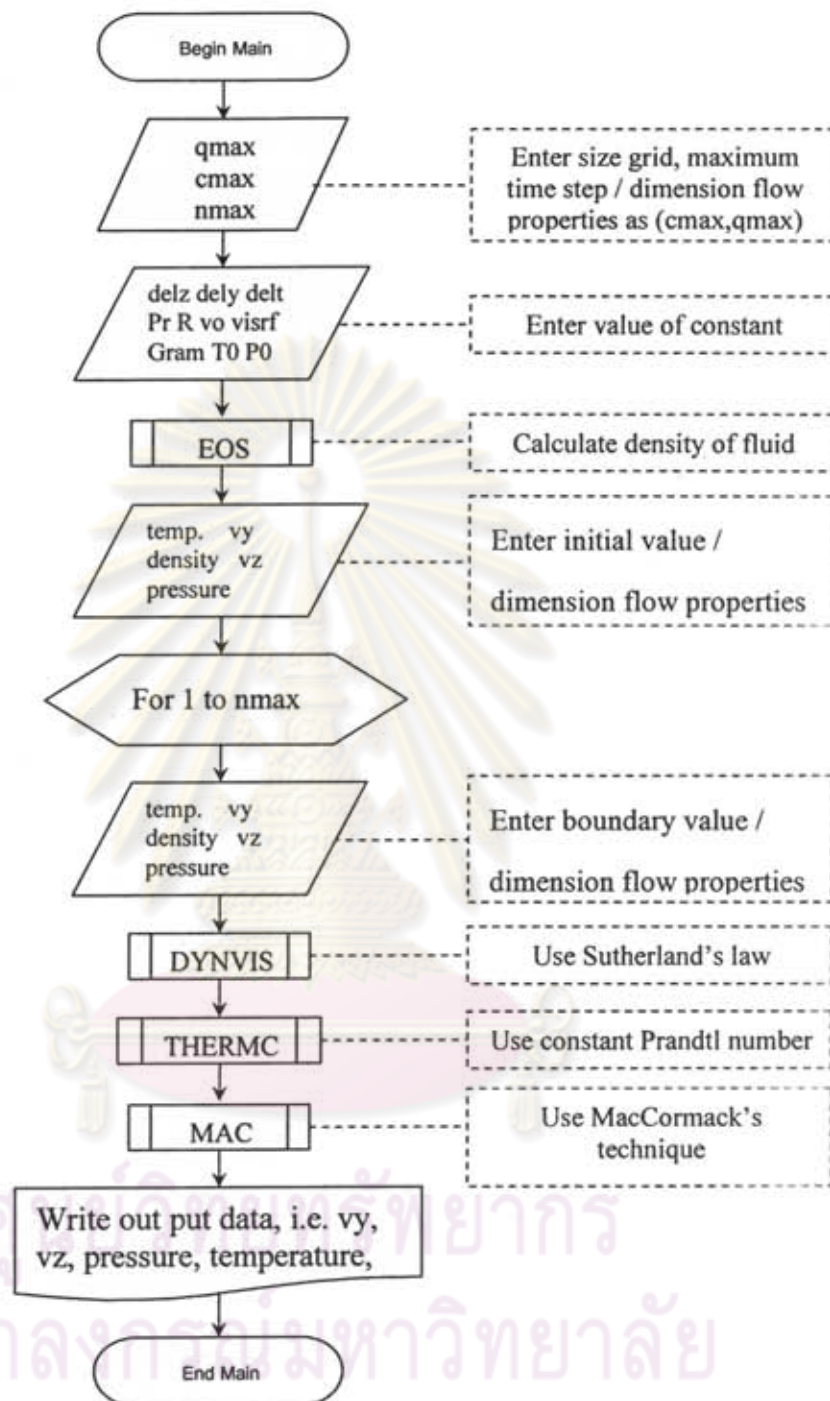
ง) ขั้นตอนในการคำนวณของโปรแกรมที่ใช้เทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน

ในส่วนนี้จะเป็นการอธิบายถึงขั้นตอนในการคำนวณของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้พัฒนาขึ้นมาโดยใช้เทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน ดังนี้

1. ค่า grid size, ค่า maximum time step และค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณจะถูกป้อนเข้าสู่โปรแกรม
2. คำนวณที่ความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์โดยใช้สมการสถานะ
3. ป้อนค่าอุณหภูมิ ค่าความดันและค่าความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์ที่ตำแหน่งใดๆ ที่เวลา 't'
4. ในการคำนวณรอบแรก ค่าความเร็ว ค่าอุณหภูมิ ค่าความดันและค่าความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์ที่ขอบของระบบจะถูกป้อน
5. คำนวณค่าความหนืดของคาร์บอนไดออกไซด์ที่ตำแหน่งใดๆ ด้วย Sutherland's law.
6. คำนวณหาค่าความจุความร้อนของคาร์บอนไดออกไซด์ที่ตำแหน่งใดๆ ด้วย Prandtl number
7. ที่ subroutine MAC คำนวณหาค่าความเร็ว ค่าอุณหภูมิ ค่าความดันและค่าความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์ที่ตำแหน่งๆ ใดๆ โดยใช้ชุดสมการอนุพันธ์มวลอนุพันธ์โมเมนตัมและสมการอนุพันธ์พลังงาน ที่เวลา $t+\Delta t$
8. ทำการคำนวณจนกระทั่งถึงค่าเวลา 't' ที่ต้องการ แล้วจึงบันทึกค่า



 ศูนย์วิทยทรัพยากร
 จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

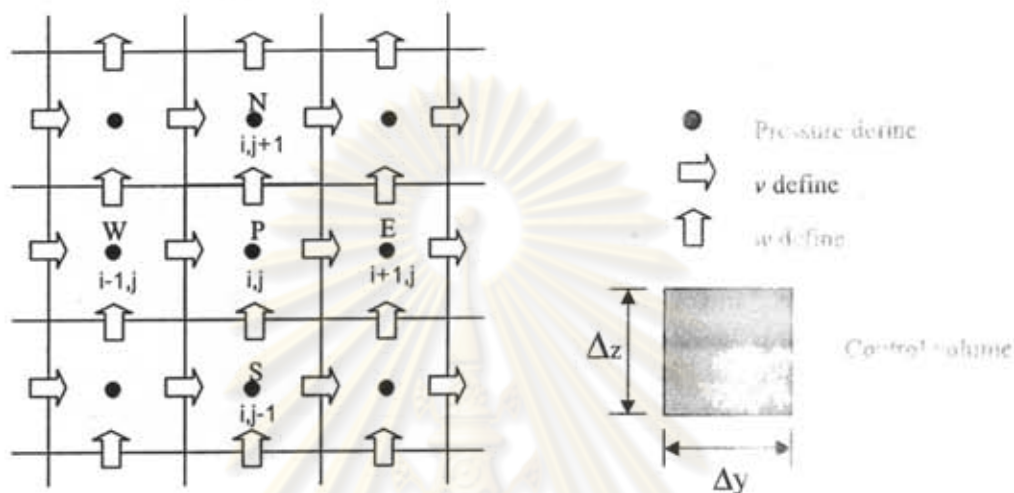


รูป 2.3 Block diagram ของขั้นตอนการจำลองกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ โดยใช้เทคนิค explicit finite difference

2.3.1.2 ระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique)

ก) สมการอนุกรม (Continuity Equation)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0$$



รูปที่ 2.4 หลักการของ Control volume ที่ใช้กับ continuity equation

เมื่อทำการอินทิเกรตสมการอนุรักษ์มวลรอบปริมาตรควบคุมจะได้

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \rho}{\partial t} dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_s^e \int_w^s \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} dy dz dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^s \int_s^e \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} dz dy dt = 0 \quad (2.25)$$

$$\frac{\Delta y \Delta z}{\Delta t} (\rho_{i,j} - \rho_{i,j}^0) + \frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i+1,j})}{2} v_{i,j} \Delta z - \frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i-1,j})}{2} v_{i-1,j} \Delta z + \frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i,j+1})}{2} w_{i,j} \Delta y - \frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i,j-1})}{2} w_{i,j-1} \Delta y = 0$$

$$\frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i+1,j})}{2} v_{i,j} \Delta z = F_e$$

$$\frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i-1,j})}{2} v_{i-1,j} \Delta z = F_w$$

$$\frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i,j+1})}{2} w_{i,j} \Delta y = F_n$$

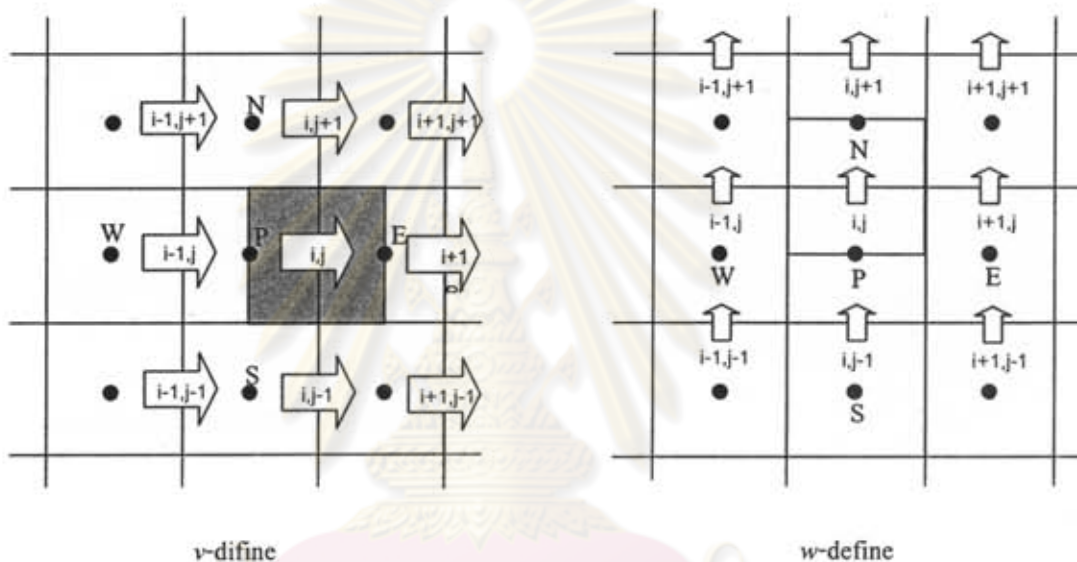
$$\frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i,j-1})}{2} w_{i,j-1} \Delta y = F_s$$

ดังนั้น
$$\frac{(\rho_p - \rho_p^0)}{\Delta t} \Delta z \Delta y + F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \tag{2.26}$$

ข) สมการดุลโมเมนตัม (Momentum Equation)

y-direction:
$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v w) = 0$$

z-direction:
$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v w) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w^2 + p) = 0$$



รูปที่ 2.5 หลักการ Control volume ที่ใช้กับ momentum equations

อินทิเกรตสมการอนุรักษ์โมเมนตัมรอบปริมาตรควบคุม

y-direction:

$$\int \int \int \frac{\partial \rho v}{\partial t} dt dz dy + \int \int \int \frac{\partial(\rho v^2 + p)}{\partial y} dy dz dt + \int \int \int \frac{\partial(\rho v w)}{\partial z} dz dy dt = 0 \tag{2.27}$$

z-direction:

$$\int \int \int \frac{\partial \rho w}{\partial t} dt dz dy + \int \int \int \frac{\partial(\rho v w)}{\partial y} dy dz dt + \int \int \int \frac{\partial(\rho w^2 + p)}{\partial z} dz dy dt = 0 \tag{2.28}$$

จากสมการ (2.27)

$$\begin{aligned} \int_{w_s}^{e_n} \int_{i_t}^{i+\Delta t} \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} dt dz dy &= ((\rho v)_p - (\rho v)_p^0) \Delta y \Delta z \\ \int_{i_s}^{i+\Delta t} \int_{s_w}^{e_n} \frac{\partial(\rho v^2)}{\partial y} dy dz dt &= (\rho v^2)_e \Delta z \Delta t - (\rho v^2)_w \Delta z \Delta t \\ \int_{i_w}^{i+\Delta t} \int_{w_s}^{e_n} \frac{\partial(\rho v w)}{\partial z} dz dy dt &= (\rho v w)_n \Delta y \Delta t - (\rho v w)_s \Delta y \Delta t \\ \int_{i_s}^{i+\Delta t} \int_{s_w}^{e_n} \frac{\partial(p)}{\partial y} dy dz dt &= (p_e - p_w) \Delta z \Delta t = (p_E - p_P) \Delta z \Delta t \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\rho v^2)_e \Delta z \Delta t &= J_e \Delta t = F_e v_e \Delta t \\ (\rho v^2)_w \Delta z \Delta t &= J_w \Delta t = F_w v_w \Delta t \\ (\rho v w)_n \Delta y \Delta t &= J_n \Delta t = F_n v_n \Delta t \\ (\rho v w)_s \Delta y \Delta t &= J_s \Delta t = F_s v_s \Delta t \end{aligned}$$

ดังนั้น
$$\frac{((\rho v)_p - (\rho v)_p^0)}{\Delta t} \Delta y \Delta z + J_e - J_w + J_n - J_s = -(p_E - p_P) \Delta z \quad (2.29)$$

คูณสมการ (2.26) ด้วย v_p (y-direction velocity at i,j)

$$\frac{(v_p \rho_p - v_p \rho_p^0)}{\Delta t} \Delta z \Delta y + v_p F_e - v_p F_w + v_p F_n - v_p F_s = 0 \quad (2.30)$$

แทนค่าสมการ (2.29) ด้วยสมการ (2.30):

$$\begin{aligned} \frac{(v_p - v_p^0) \rho_p^0}{\Delta t} \Delta y \Delta z + (J_e - v_p F_e) - (J_w - v_p F_w) + (J_n - v_p F_n) \\ - (J_s - v_p F_s) = -(p_E - p_P) \Delta z \end{aligned} \quad (2.31)$$

เมื่อ F_e is flow rate through e-surface

$$F_e > 0, \quad v_e = v_{ij}$$

$$F_e < 0, \quad v_e = v_{i+1j}$$

ดังนั้น $J_e = F_e v_e = v_{ij} \max [F_e, 0] - v_{i+1j} \max [-F_e, 0]$

$$F_e v_p = v_{ij} \max [F_e, 0] - v_{i+1j} \max [-F_e, 0]$$

$$J_e - F_e v_p = \max [-F_e, 0] (v_{ij} - v_{i+1j})$$

ในทำนองเดียวกัน

$$J_w - F_w v_p = \max [F_w, 0] (v_{i,j} - v_{i,j})$$

$$J_n - F_n v_p = \max [-F_n, 0] (v_{i,j} - v_{i,j})$$

$$J_s - F_s v_p = \max [F_s, 0] (v_{i,j} - v_{i,j})$$

เมื่อ

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

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

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

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

ดังนั้น

$$a_p v_p = a_e v_e + a_w v_w + a_n v_n + a_s v_s + (J_p - p_0) \Delta z \quad (2.32)$$

โดย

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + \frac{(\rho_p^0 + \rho_e^0) \Delta y \Delta z}{2 \Delta t}$$

$$b_y = \frac{(\rho_p^0 + \rho_e^0) v_p^0 \Delta y \Delta z}{2 \Delta t}$$

ในทำนองเดียวกัน จากสมการ (2.28)

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} dt dz dy = ((\rho w)_p - (\rho w)^0) \Delta y \Delta z$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho v w)}{\partial y} dy dz dt = (\rho v w)_e \Delta z \Delta t - (\rho v w)_w \Delta z \Delta t$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial(\rho w^2)}{\partial z} dz dy dt = (\rho w^2)_n \Delta y \Delta t - (\rho w^2)_s \Delta y \Delta t$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial(p)}{\partial z} dz dy dt = (p_n - p_s) \Delta y \Delta t = (p_n - p_p) \Delta y \Delta t$$

เมื่อ

$$(\rho v w)_e \Delta z \Delta t = J_e \Delta t = F_e v_e \Delta t$$

$$(\rho v w)_w \Delta z \Delta t = J_w \Delta t = F_w v_w \Delta t$$

$$(\rho w w)_n \Delta y \Delta t = J_n \Delta t = F_n v_n \Delta t$$

$$(\rho w w)_s \Delta y \Delta t = J_s \Delta t = F_s v_s \Delta t$$

ดังนั้น

$$\frac{((\rho w)_p - (\rho w)_p^0)}{\Delta t} \Delta y \Delta z + J_e - J_w + J_n - J_s = -(p_n - p_p) \Delta y \quad (2.33)$$

เมื่อคูณสมการ (2.26) ด้วย w_p (y-direction velocity at i,j)

$$\frac{(w_p \rho_p - w_p^0 \rho_p^0)}{\Delta t} \Delta z \Delta y + w_p F_e - w_p F_w + w_p F_n - w_p F_s = 0 \quad (2.34)$$

แทนค่าสมการ (2.33) ด้วยสมการ (2.34)

$$\begin{aligned} & \frac{(w_p - w_p^0) \rho_p^0}{\Delta t} \Delta y \Delta z + (J_e - w_p F_e) - (J_w - w_p F_w) + (J_n - w_p F_n) \\ & - (J_s - w_p F_s) = -(p_N - p_P) \Delta y \end{aligned} \quad (2.35)$$

โดยที่

$$\begin{aligned} J_e - F_e w_p &= \max [-F_e, 0] (w_{ij} - w_{i+1,j}) \\ J_w - F_w w_p &= \max [F_w, 0] (w_{i,j} - w_{ij}) \\ J_n - F_n w_p &= \max [-F_n, 0] (w_{ij} - w_{i,j+1}) \\ J_s - F_s w_p &= \max [F_s, 0] (w_{i,j} - w_{ij}) \end{aligned}$$

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

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

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

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

ดังนั้น

$$a_{pz} v_p = a_e v_e + a_w v_w + a_n v_n + a_s v_s + bz + (p_P - p_N) \Delta y \quad (2.36)$$

โดยที่

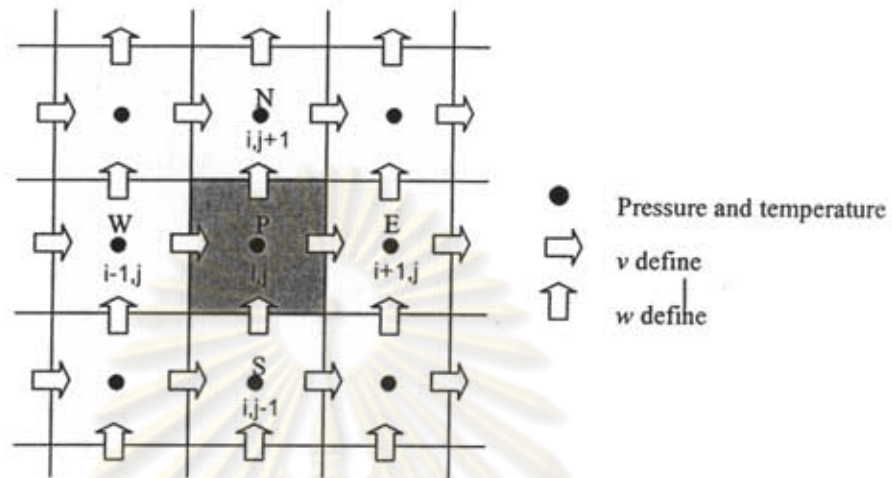
$$a_{pz} = a_e + a_w + a_n + a_s + \frac{(\rho_p^0 + \rho_n^0) \Delta y \Delta z}{2 \Delta t}$$

$$bz = \frac{(\rho_p^0 + \rho_n^0) v_p^0 \Delta y \Delta z}{2 \Delta t}$$

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ก) สมการดุลพลังงาน (Energy Equation)

$$\frac{\partial E_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} [(E_t + p)v + q_y] + \frac{\partial}{\partial z} [(E_t + p)w + q_z] = 0$$



รูปที่ 2.6 หลักการ Control volume ที่ใช้กับ energy equations

อินทิเกรตสมการอนุรักษ์พลังงานรอบปริมาตรควบคุม

$$\int_{w-s}^{e-n} \int_{i-t}^{i+\Delta t} \frac{\partial E_t}{\partial t} dt dz dy + \int_{i-t}^{i+\Delta t} \int_{s-w}^{e-n} \frac{\partial [(E_t + p)v + q_y]}{\partial y} dy dz dt + \int_{i-t}^{i+\Delta t} \int_{w-s}^{e-n} \frac{\partial [(E_t + p)w + q_z]}{\partial z} dz dy dt = 0 \quad (2.37)$$

จากสมการ (2.37)

$$\int_{w-s}^{e-n} \int_{i-t}^{i+\Delta t} \frac{\partial E_t}{\partial t} dt dz dy = \left[\left(\rho C_v T + \frac{\rho v^2}{2} + \frac{\rho w^2}{2} \right)_p - \left(\rho C_v T + \frac{\rho v^2}{2} + \frac{\rho w^2}{2} \right)_p^0 \right] \Delta z \Delta y$$

$$\int_{i-t}^{i+\Delta t} \int_{s-w}^{e-n} \frac{\partial [(E_t + p)v + q_y]}{\partial y} dy dz dt = \left[\left(\rho C_v T v + \frac{\rho w^2 v}{2} + \frac{\rho v^3}{2} + p v + q_y \right)_{e-w} \right] \Delta z \Delta t$$

$$\int_{i-t}^{i+\Delta t} \int_{w-s}^{e-n} \frac{\partial [(E_t + p)w + q_z]}{\partial z} dz dy dt = \left[\left(\rho C_v T w + \frac{\rho v^2 w}{2} + \frac{\rho w^3}{2} + p w + q_z \right)_{n-s} \right] \Delta y \Delta t$$

โดยที่

$$\begin{aligned}
 ap &= \rho_{i,j} C_{v,i,j} \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i+1,j}}{2} \right) \left(\frac{C_{v,i,j} + C_{v,i+1,j}}{2} \right) v_{i,j} \Delta z \\
 &- \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i-1,j}}{2} \right) \left(\frac{C_{v,i,j} + C_{v,i-1,j}}{2} \right) v_{i-1,j} \Delta z + \frac{(k_{i+1,j} - k_{i-1,j}) \Delta z}{2 \Delta y} \\
 &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i,j+1}}{2} \right) \left(\frac{C_{v,i,j} + C_{v,i,j+1}}{2} \right) w_{i,j} \Delta y - \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i,j-1}}{2} \right) \left(\frac{C_{v,i,j} + C_{v,i,j-1}}{2} \right) w_{i,j-1} \Delta y \\
 &+ \frac{(k_{i,j+1} - k_{i,j-1}) \Delta y}{2 \Delta z}
 \end{aligned}$$

$$F_e = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i+1,j}}{2} \right) \left(\frac{C_{v,i,j} + C_{v,i+1,j}}{2} \right) v_{i,j} - \left(\frac{k_{i,j} + k_{i+1,j}}{2 \Delta y} \right) \right] T_{i+1,j} \Delta z$$

$$F_w = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i-1,j}}{2} \right) \left(\frac{C_{v,i,j} + C_{v,i-1,j}}{2} \right) v_{i-1,j} - \left(\frac{k_{i,j} + k_{i-1,j}}{2 \Delta y} \right) \right] T_{i-1,j} \Delta z$$

$$F_n = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i,j+1}}{2} \right) \left(\frac{C_{v,i,j} + C_{v,i,j+1}}{2} \right) w_{i,j} - \left(\frac{k_{i,j} + k_{i,j+1}}{2 \Delta z} \right) \right] T_{i,j+1} \Delta y$$

$$F_s = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i,j-1}}{2} \right) \left(\frac{C_{v,i,j} + C_{v,i,j-1}}{2} \right) w_{i,j-1} - \left(\frac{k_{i,j} + k_{i,j-1}}{2 \Delta z} \right) \right] T_{i,j-1} \Delta y$$

$$ba = \left(\rho_{i,j} C_{v,i,j} T_{i,j} + \frac{\rho_{i,j} v_{i,j}^2}{2} + \frac{\rho_{i,j} w_{i,j}^2}{2} \right) \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta t}$$

$$bb = -\frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i+1,j}}{2} \right) v_{i,j}^2 w_{i,j} \Delta z + \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i-1,j}}{2} \right) v_{i-1,j}^2 w_{i-1,j} \Delta z$$

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i+1,j}}{2} \right) v_{i,j}^3 \Delta z + \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i-1,j}}{2} \right) v_{i-1,j}^3 \Delta z$$

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i,j+1}}{2} \right) v_{i,j} w_{i,j}^2 \Delta y + \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i,j-1}}{2} \right) v_{i,j-1} w_{i,j-1}^2 \Delta y$$

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i,j+1}}{2} \right) w_{i,j}^3 \Delta y + \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{i,j} + \rho_{i,j-1}}{2} \right) w_{i,j-1}^3 \Delta y$$

$$-\frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i+1,j})}{2} v_{i,j} \Delta z + \frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i-1,j})}{2} v_{i-1,j} \Delta z$$

$$-\frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i,j+1})}{2} w_{i,j} \Delta y + \frac{(\rho_{i,j} + \rho_{i,j-1})}{2} w_{i,j-1} \Delta y$$

$$\begin{aligned}
 \text{เมื่อ} \quad & a_e = \max [-F_e, 0] \\
 & a_w = \max [F_w, 0] \\
 & a_n = \max [-F_n, 0] \\
 & a_s = \max [F_s, 0] \\
 \text{ดังนั้น} \quad & apT_{i,j} = a_e + a_w + a_n + a_s + ba + bb \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

Thomas algorithm or the tri-diagonal matrix algorithm (TDMA) เป็นเทคนิควิธีที่ใช้ในการแก้สมการในระบบ 2 มิติ โดย TDMA เป็นเทคนิคที่ถูกใช้อย่างแพร่หลายในการศึกษาระบบการเคลื่อนที่ของของไหลด้วย CFD

ง) The tri-diagonal matrix algorithm

พิจารณาสมการสามการ ในรูปแบบของ tri-diagonal

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

จากจุดสมการด้านบน ϕ_i and ϕ_{n+1} เป็นค่าที่ทราบค่าเนื่องจากเป็นสภาวะขอบเขต โดยรูปแบบทั่วไปของสมการจะเป็นดังนี้

$$-\beta_j \phi_{j-1} + D_j \phi_j - \alpha_j \phi_{j+1} = C_j \quad (2.39)$$

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สามารถเขียนจุดสมการใหม่ได้ดังนี้

$$\phi_2 = \frac{\alpha_2}{D_2} \phi_3 + \frac{\beta_2}{D_2} \phi_1 + \frac{C_2}{D_2} \quad (2.40a)$$

$$\phi_3 = \frac{\alpha_3}{D_3} \phi_4 + \frac{\beta_3}{D_3} \phi_2 + \frac{C_3}{D_3} \quad (2.40b)$$

$$\phi_4 = \frac{\alpha_4}{D_4} \phi_5 + \frac{\beta_4}{D_4} \phi_3 + \frac{C_4}{D_4} \quad (3.40c)$$

$$\dots\dots\dots$$

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

สามารถแก้สมการเหล่านี้ได้โดยการนำค่า ϕ_2 จากสมการ (2.40b) ไปแทนค่าลงไปในสมการ (2.40a) จะได้

$$\phi_3 = \left(\frac{\alpha_3}{D_3 - \beta_3 \frac{\alpha_2}{D_2}} \right) \phi_4 + \left(\frac{\beta_3 \left(\frac{\beta_2}{D_2} \phi_1 + \frac{C_2}{D_2} \right) + C_3}{D_3 - \beta_3 \frac{\alpha_2}{D_2}} \right) \quad (2.41a)$$

โดย $A_2 = \frac{\alpha_2}{D_2}$ และ $C'_2 = \frac{\beta_2}{D_2} \phi_1 + \frac{C_2}{D_2}$ (2.41b)

จากสมการ (2.41a)

$$\phi_3 = \left(\frac{\alpha_3}{D_3 - \beta_3 A_2} \right) \phi_4 + \left(\frac{\beta_3 C'_2 + C_3}{D_3 - \beta_3 A_2} \right) \quad (2.41c)$$

ถ้า $A_3 = \left(\frac{\alpha_3}{D_3 - \beta_3 A_2} \right)$ และ $C'_3 = \left(\frac{\beta_3 C'_2 + C_3}{D_3 - \beta_3 A_2} \right)$

สามารถเขียนสมการ (2.41c) ใหม่ได้เป็น

$$\phi_3 = A_3 \phi_4 + C'_3 \quad (2.42)$$

จากสมการ (2.42) สามารถแทนค่า ϕ_3 จากสมการ (2.40c) จากนั้นแทนค่ากลับจะได้รูปสมการใหม่ของสมการ (2.42) เป็น

$$\phi_j = A_j \phi_{j+1} + C'_j \quad (2.43a)$$

$$\text{โดยที่} \quad A_j = \left(\frac{\alpha_j}{D_j - \beta_j A_{j-1}} \right) \quad \text{และ} \quad C'_j = \left(\frac{\beta_j C'_{j-1} + C_j}{D_j - \beta_j A_{j-1}} \right)$$

(2.43b, 2.43c)

แทนค่าที่ตำแหน่งขอบเขต $j = 1$ and $j = n+1$ ลงในค่า A and C' จะได้

$$A_1 = 0 \quad \text{and} \quad C'_1 = \phi_1$$

$$A_{n+1} = 0 \quad \text{and} \quad C'_{n+1} = \phi_{n+1}$$

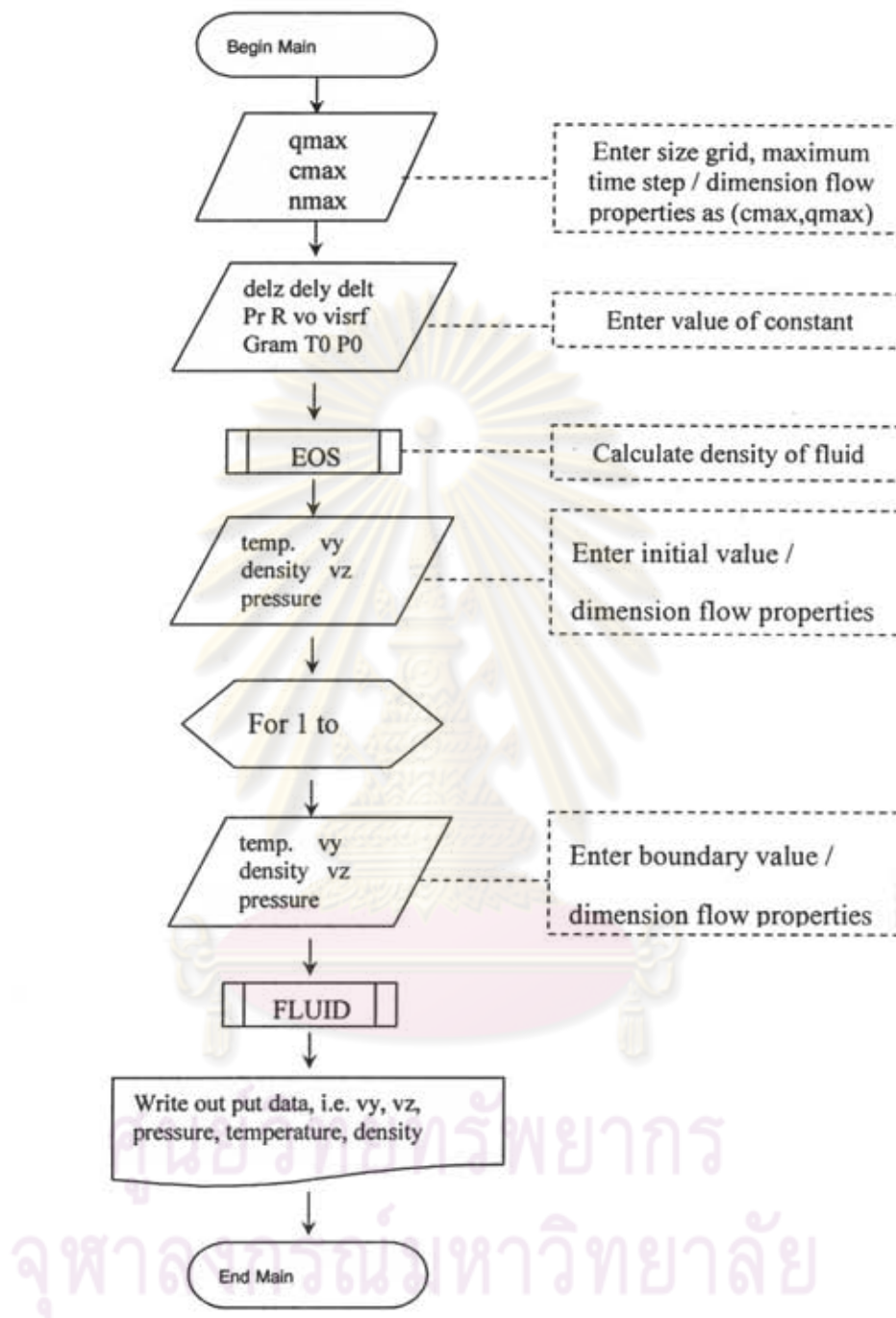
จ) สมมติฐานที่ใช้กับเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย

1. ไม่มีปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นในระบบ
2. ของไหลความเร็วสูงถูกฉีดออกจากหัวฉีดบริเวณกึ่งกลางเบค
3. สภาวะเริ่มต้น เบคมีความดันคงที่ที่ 1 บรรยากาศ
4. ของไหลสามารถบีบอัดได้
5. พิจารณาผลกระทบของค่าอุณหภูมิ ความดัน และ ความเร็วขาเข้าที่มีต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอน ไดออกไซด์เฉพาะบริเวณใกล้หัวฉีดเท่านั้น
6. พิจารณาระบบในแกนมุมฉาก 2 มิติ

ฉ) ขั้นตอนในการคำนวณของโปรแกรมที่ใช้เทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง

ในส่วนนี้จะเป็นการอธิบายถึงขั้นตอนในการคำนวณของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้พัฒนาขึ้นมา โดยใช้เทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย ดังนี้

1. ค่า grid size, ค่า maximum time step และค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณจะถูกป้อนเข้าสู่โปรแกรม
2. คำนวณที่ความหนาแน่นของคาร์บอน ไดออกไซด์โดยใช้สมการสภาวะ
3. ป้อนค่าอุณหภูมิ ค่าความดันและค่าความหนาแน่นของคาร์บอน ไดออกไซด์ที่ตำแหน่งใดๆ ที่เวลา 't'
4. ในการคำนวณรอบแรก ค่าความเร็ว ค่าอุณหภูมิ ค่าความดันและค่าความหนาแน่นของคาร์บอน ไดออกไซด์ที่ขอบของระบบจะถูกป้อน
5. ที่ subroutine FLUID คำนวณหา ค่าความเร็ว ค่าอุณหภูมิ ค่าความดันและค่าความหนาแน่นของคาร์บอน ไดออกไซด์ที่ตำแหน่งๆ ใดๆ โดยใช้ชุดสมการอนุพันธ์มวล อนุพันธ์โมเมนตัมและสมการอนุพันธ์พลังงาน ที่เวลา $t+\Delta t$
6. ทำการคำนวณจนกระทั่งถึงค่าเวลา 't' ที่ต้องการ แล้วจึงบันทึกค่า



รูป 2.7 Block diagram ของขั้นตอนการจำลองกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอน ไดออกไซด์ โดยใช้เทคนิค implicit finite difference

2.4 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

นอกเหนือจากการศึกษาข้อมูลความรู้พื้นฐานทางทฤษฎีที่เกี่ยวกับการขยายตัวอย่างรวดเร็วของของไหลเหนือวิกฤต และการแก้ปัญหาคณิตศาสตร์ด้วยเทคนิคเชิงตัวเลขแล้ว คณะวิจัยยังได้ทำการสำรวจเอกสารอ้างอิงที่เป็นบทความวิจัยที่มีส่วนเกี่ยวข้องกับงานวิจัยนี้ โดยสามารถสรุปได้ดังต่อไปนี้

Tom และ Debenedetti (1991) ได้เสนอทฤษฎีพื้นฐานของกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต รวมไปถึงขั้นตอนในการทำการทดลอง การประยุกต์ใช้งาน และผลที่น่าจะได้รับจากกระบวนการดังกล่าว

ต่อมาในปี 1993 Debenedetti ได้เสนอทฤษฎีพื้นฐานของกระบวนการต่างๆ ที่เกิดขึ้นในปรากฏการณ์ขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต อาทิเช่น กระบวนการก่อตัวกับตกผลึกของอนุภาค การเปลี่ยนแปลงสถานะของตัวถูกละลายเมื่อถูกฉีดออกจากหัวฉีดแล้ว รวมไปถึงขนาดของอนุภาคที่ได้จากกระบวนการดังกล่าว

จากนั้นในปี 1995 Tsutsumi และคณะ ได้ทำการทดลองการเคลือบผิวอนุภาคด้วยกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤตในฟลูอิดไดซ์เบด คาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตถูกนำมาใช้เป็นตัวทำละลายพาราฟิน จากนั้นสารละลายเหนือวิกฤตจะถูกฉีดออกจากหัวฉีดเข้าสู่คอลัมน์ โดยศึกษาถึงอิทธิพลของความเข้มข้นของสารละลายที่มีต่ออัตราการเคลือบผิวและประสิทธิภาพในการเคลือบผิว

ในปี 1996 Reverchon และ Pallado ได้เสนอแบบจำลองกลไกของกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤตออกจากหัวฉีด โดยคำนวณหาผลที่ได้จากการจำลองสอดคล้องกับงานผลที่ได้จากการวัดจากการทดลอง นอกจากนี้ Ksibi และคณะได้เสนอแบบจำลองใน 2 มิติ ซึ่งพิจารณาการเป็นคลื่นกระแทกในระบบด้วย

นอกจากนี้ Tsutsumi และคณะ (2001) ยังได้ทำการศึกษากลไกของการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต (rapid expansion of supercritical solution, RESS) ในกระบวนการเคลือบผิวอนุภาคภายในฟลูอิดไดซ์เบด พบว่าอุณหภูมิของสารละลายเหนือวิกฤตส่งผลกระทบต่อกระบวนการเคลือบผิวอนุภาคมากโดยเมื่ออุณหภูมิเพิ่มมากขึ้นจะทำให้ประสิทธิภาพในการเคลือบผิวอนุภาคลดน้อยลง

ในปี 2002 Debenedetti ได้ศึกษาการกระจายขนาดของอนุภาคที่ได้จากกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต โดยการพิจารณากลไกการเคลื่อนที่ของละอองของไหลที่เกิดขึ้นในกระบวนการดังกล่าว พบว่าการกระจายขนาดของอนุภาคจะทำให้กลไกการเคลื่อนที่ของมันแตกต่างกันไปอย่างเห็นได้ชัด โดยในกรณีของอนุภาคขนาดเล็ก ความปั่นป่วน

เนื่องจากการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤตจะทำให้เกิดการฟุ้งกระจาย และหลุดลอยออกไปได้มาก

ดังนั้นจึงสามารถสรุปในเบื้องต้นว่า ปัจจุบันได้มีการศึกษา และทำวิจัยเกี่ยวกับการนำเทคนิคการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤตมาใช้อย่างกว้างขวางพอสมควร อย่างไรก็ตาม สำหรับในประเทศไทย แม้จะมีอุตสาหกรรมหลากหลายสาขาเช่น อุตสาหกรรมเภสัชหรืออาหาร ที่มีส่วนเกี่ยวข้องกับการนำเทคนิคนี้ไปประยุกต์ใช้ แต่การค้นคว้าวิจัยยังมีอยู่ในวงจำกัด เนื่องจากอุปสรรคของความจำเป็นต้องใช้เงินลงทุนกับอุปกรณ์ต่างๆที่มีราคาสูง ดังนั้นจึงมีความจำเป็นที่จะนำประเด็นนี้มาศึกษาโดยอาศัยทางเลือกอื่นที่มีค่าใช้จ่ายต่ำกว่า และสามารถดำเนินการได้ในประเทศไทย



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 3

การตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรมคอมพิวเตอร์

3.1 การทดสอบสมการสถานะที่เลือกใช้

การศึกษาเปรียบเทียบสมการสถานะ Peng-Robinson และสมการสถานะ Soave-Redlich-Kwong ในการทำนายคุณสมบัติของคาร์บอนไดออกไซด์ กับค่าที่ได้งานวิจัยที่ผ่านมาของ Wilmington, DE (1993) นั้น พบว่าเมื่อใช้โปรแกรมที่พัฒนาขึ้นมาคำนวณโดยอาศัยเงื่อนไขและค่าพารามิเตอร์ตามที่มีการรายงาน (อ้างอิงตารางที่ 3.1) จะทำให้ได้ผลการคำนวณที่แตกต่างกัน ทั้งนี้ ผลของการคำนวณจะได้ชี้แจงในรายละเอียดต่อไป

อนึ่ง ค่า Compressibility factor ที่ใช้ในการคำนวณจะมีทั้งหมด 3 ค่าคือ ค่า Compressibility factor ของ Peng-Robinson เท่ากับ 0.307 ค่า Compressibility factor ของ Soave-Redlich-Kwong เท่ากับ 0.333 และ ค่า Compressibility factor ของ carbon dioxide เท่ากับ 0.274

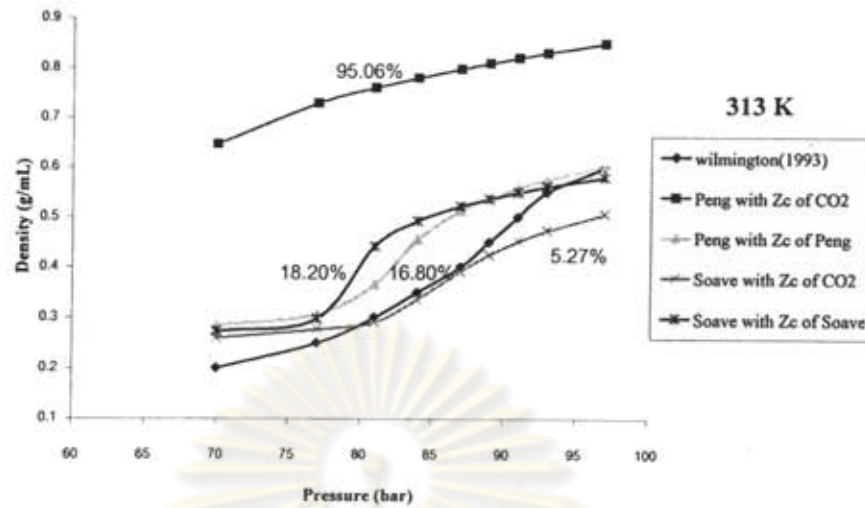
จากการศึกษาเปรียบเทียบผลการทำนายค่าความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์จากสมการสถานะ Peng-Robinson สมการสถานะ Soave-Redlich-Kwong และงานวิจัยที่ผ่านมาของ Wilmington, DE (1993) แสดงผลในกราฟดังต่อไปนี้

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

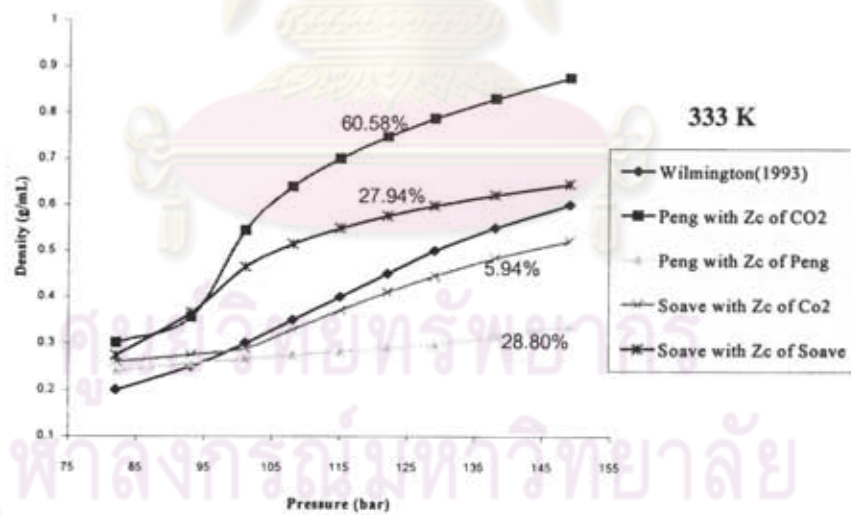
ตาราง 3.1 ค่าตัวแปรที่ใช้ในการคำนวณ

Case	Temp (K) Pressure (bar)	Equation of State	Compressibility factor, Z_c
1.1	313 K 70 – 97 bar	Peng-Robinson	Zc of the Peng-Robinson
1.2			Zc of carbon dioxide
1.3		Soave Redlich-Kwong	Zc of the Soave Redlich-Kwong
1.4			Zc of carbon dioxide
2.1	333 K 82 – 149 bar	Peng-Robinson	Zc of the Peng-Robinson
2.2			Zc of carbon dioxide
2.3		Soave Redlich-Kwong	Zc of the Soave Redlich-Kwong
2.4			Zc of carbon dioxide
3.1	353 K 94 – 203 bar	Peng-Robinson	Zc of the Peng-Robinson
3.2			Zc of carbon dioxide
3.3		Soave Redlich-Kwong	Zc of the Soave Redlich-Kwong
3.4			Zc of carbon dioxide
4.1	373 K 105 – 256 bar	Peng-Robinson	Zc of the Peng-Robinson
4.2			Zc of carbon dioxide
4.3		Soave Redlich-Kwong	Zc of the Soave Redlich-Kwong
4.4			Zc of carbon dioxide

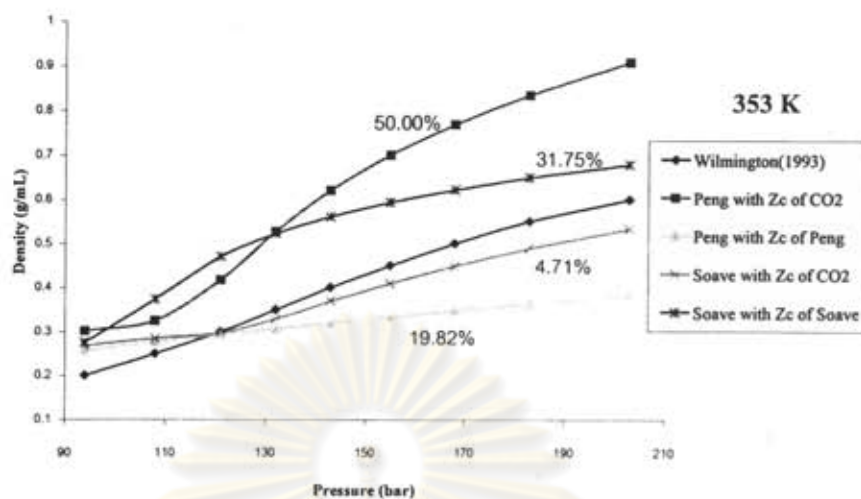
ศูนย์วิทยพัชกร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



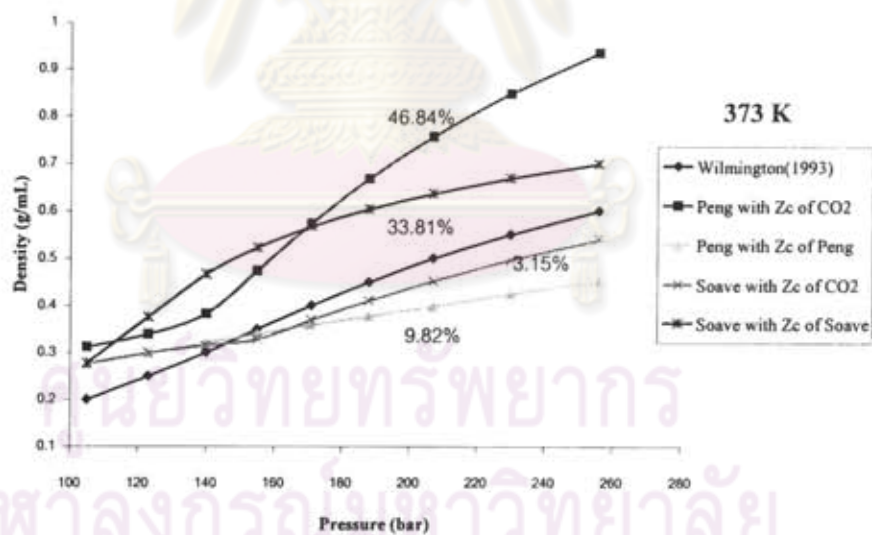
รูปที่ 3.1 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์ที่อุณหภูมิ 313 K



รูปที่ 3.2 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์ที่อุณหภูมิ 333 K



รูปที่ 3.3 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์ที่อุณหภูมิ 353 K



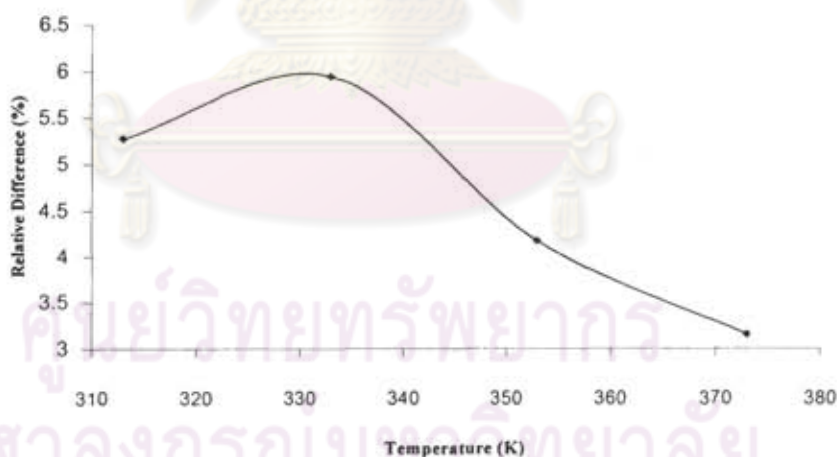
รูปที่ 3.4 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์ที่อุณหภูมิ 373 K

สำหรับการคำนวณค่าความแตกต่างคิดเป็นเปอร์เซ็นต์เมื่อเปรียบเทียบกับงานวิจัย Wilmington (1993) ได้ดำเนินการโดยใช้สมการดังต่อไปนี้

$$\text{ค่าความแตกต่าง} = \left[\frac{\sum (\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\sum \rho_{\text{exp}}} \right] * 100 \quad (3.1)$$

จากรูปที่ 3.1 พบว่าสมการสถานะ Peng-Robinson ที่ใช้ค่า compressibility factor ของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.274 ให้ค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างมากที่สุด 95.06% ส่วนสมการสถานะ Soave Redlich-Kwong ที่ใช้ค่า compressibility factor ของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.274 ให้ค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างน้อยที่สุดคือ 5.27% สำหรับสมการสถานะ Peng-Robinson ที่ใช้ค่า compressibility factor ของสมการ คือ 0.307 และสมการสถานะ Soave Redlich-Kwong ที่ใช้ค่า compressibility factor ของสมการ คือ 0.333 ให้ค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างเป็น 16.80% และ 18.20% ตามลำดับ

ในทำนองเดียวกัน จากรูปที่ 3.2 – 3.4 พบว่าสมการ Soave Redlich-Kwong ที่ใช้ค่า compressibility factor ของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.274 ให้ค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างน้อยที่สุดเมื่อเปรียบเทียบกับค่าที่ได้จากกรณีอื่นๆ นอกจากนี้ยังพบว่าเมื่อค่าอุณหภูมิเพิ่มมากขึ้นค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างที่ได้จากการคำนวณจะมีแนวโน้มลดลงดังแสดงในรูปที่ 3.5



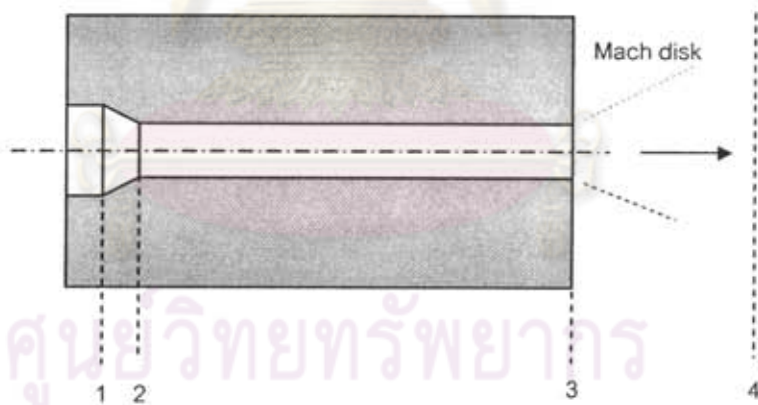
รูปที่ 3.5 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างจากสมการสถานะ Soave Redlich-Kwong ที่ใช้ค่า compressibility factor ของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.274

จากการค่าที่ทำนายได้ พบว่าการเพิ่มขึ้นของอุณหภูมิมีผลทำให้ค่าความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์เพิ่มขึ้นตามไปด้วย และพบว่าค่าความดันมีอิทธิพลอย่างมากต่อค่าความหนาแน่นและคุณสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกของคาร์บอนไดออกไซด์ ซึ่งเมื่อคาร์บอนไดออกไซด์มีความดันเพิ่มมากขึ้นจะส่งผลทำให้มีค่าความหนาแน่นเพิ่มมากขึ้นอีกด้วย

3.2 โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่พัฒนาขึ้นเพื่อจำลองกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต

เป้าหมายของงานในส่วนนี้คือการศึกษาสมการการเคลื่อนที่ของของไหลที่เหมาะสมในการพิจารณาหลักของกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตในระบบแกนมุมฉาก 2 มิติ โดยพิจารณาสมการสถานะ Soave Redlich-Kwong ร่วมด้วย งานวิจัยของ Reverchon and Pallado (1996) ถูกนำมาใช้เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่พัฒนาขึ้น

รูปที่ 3.6 แสดงกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตเมื่อถูกฉีดออกจากหัวฉีดในงานวิจัยของ Reverchon and Pallado (1996)



รูปที่ 3.6 Simplified scheme of the expansion nozzle:

Capillary inlet (1-2)

Capillary duct (2-3)

Expansion chamber (3-4)

ในงานวิจัยของ Reverchon and Pallado (1996) ได้ศึกษากระบวนการขยายตัวของรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตโดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ โดยพิจารณา ระบบเป็นการไหลแบบอิสระของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต และได้ศึกษาอิทธิพลของความดันและอุณหภูมิขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ที่มีต่อกระบวนการดังกล่าว โดยแบ่งออกเป็น 6 กรณีศึกษาดังแสดงในตาราง 3.2

ตาราง 3.2 สภาวะที่ใช้ในการคำนวณในงานวิจัยของ Reverchon and Pallado (1996)

Cases	Upstream boundary	
	Pressure (bar)	Temperature (K)
1	200	333
2	200	353
3	200	373
4	260	333
5	260	353
6	260	373

สภาวะเริ่มต้น

- Temperature = 298 K
- Pressure = 1 bar
- X-direction velocity = 0.0 m/s
- Y-direction velocity = 0.0 m/s
- ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของหัวฉีด = 40×10^{-3} mm

สภาวะขอบเขต

- การไหลที่ปลายหัวฉีดเป็นแบบ no slip คือไม่เกิดความเร็วสัมผัสของก๊าซที่บริเวณติดผนังท่อหัวฉีด
- หัวฉีดถูกรักษาให้อยู่ในสภาพที่มีอุณหภูมิคงที่ตลอดเวลา โดยในทางปฏิบัติสามารถทำได้โดยการติดตั้ง heated

- ภายในภาชนะถือว่ามีกาห่อหุ้มด้วยฉนวนอย่างสมบูรณ์ จึงสามารถพิจารณาเงื่อนไขแบบ Adiabatic ได้

ส่วนสภาวะที่ใช้ในการจำลองกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตด้วยโปรแกรมที่พัฒนาขึ้นจากเทคนิควิธีทั้ง 2 คือระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit finite difference technique) และระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) แสดงอยู่ในตารางที่ 3.3 และ 3.4 ตามลำดับ

ตาราง 3.3 สภาวะที่ใช้ในการคำนวณด้วยเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน

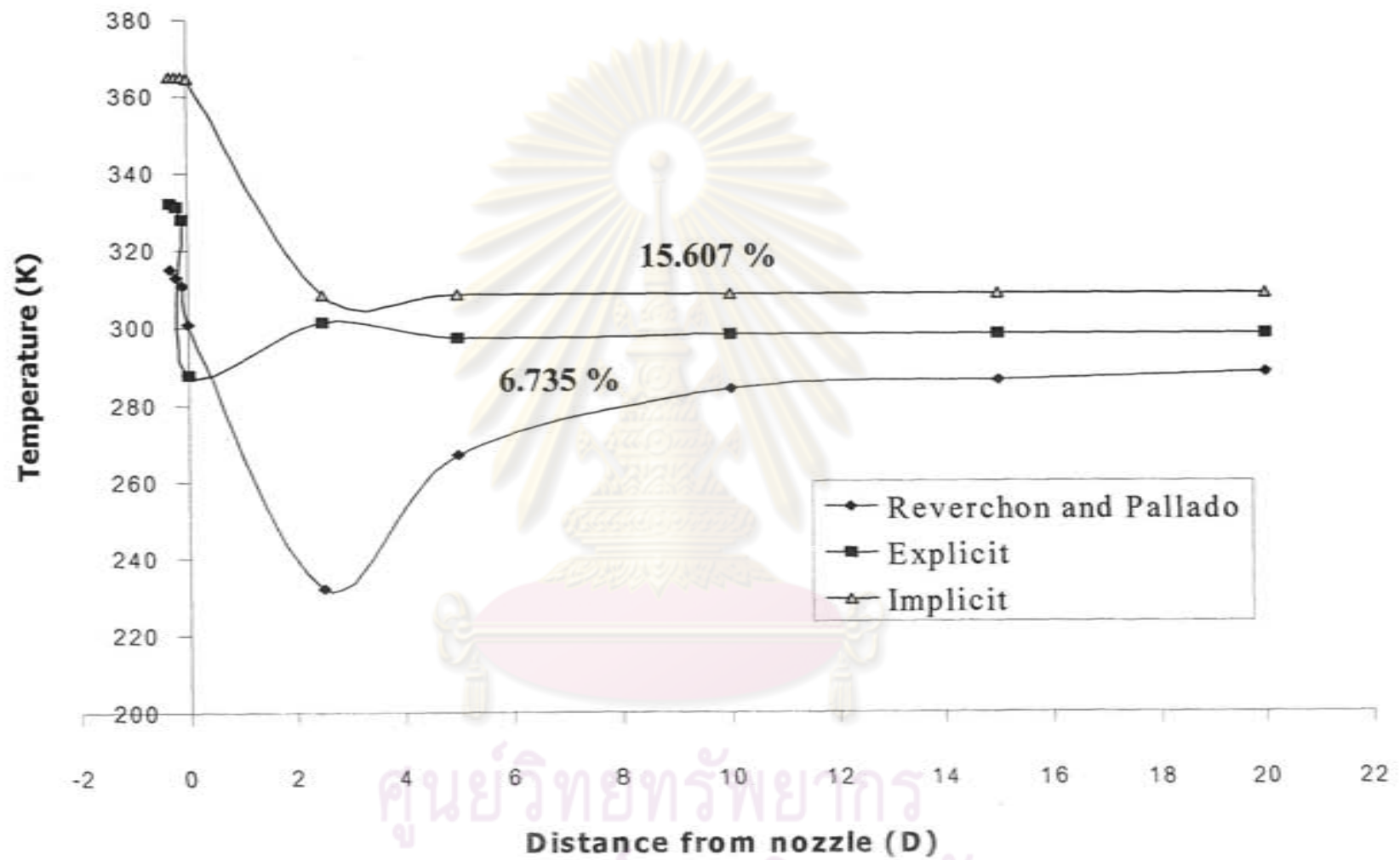
Simulation conditions	
Number of grid points in the y, z directions	24 x 521
Grid size ($\Delta y, \Delta z$)	1d-5, 4d-5 m
Interval time	5000000
Integration step size (Δt)	1.0d-14 sec.
Specific gas constant of CO ₂	8.314*1000/44.01
Ratio of specific heat of CO ₂	1.304
Prandtl number	0.710
Bed pressure of fluid	1.0 bar
Bed temperature of fluid	298.0 K
Bed density of fluid	5.30778d-3 kg/m ³
Reference Temperature	293.0 K
Reference viscosity of CO ₂ at Trf	1.463d-4 kg/(m*s)

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

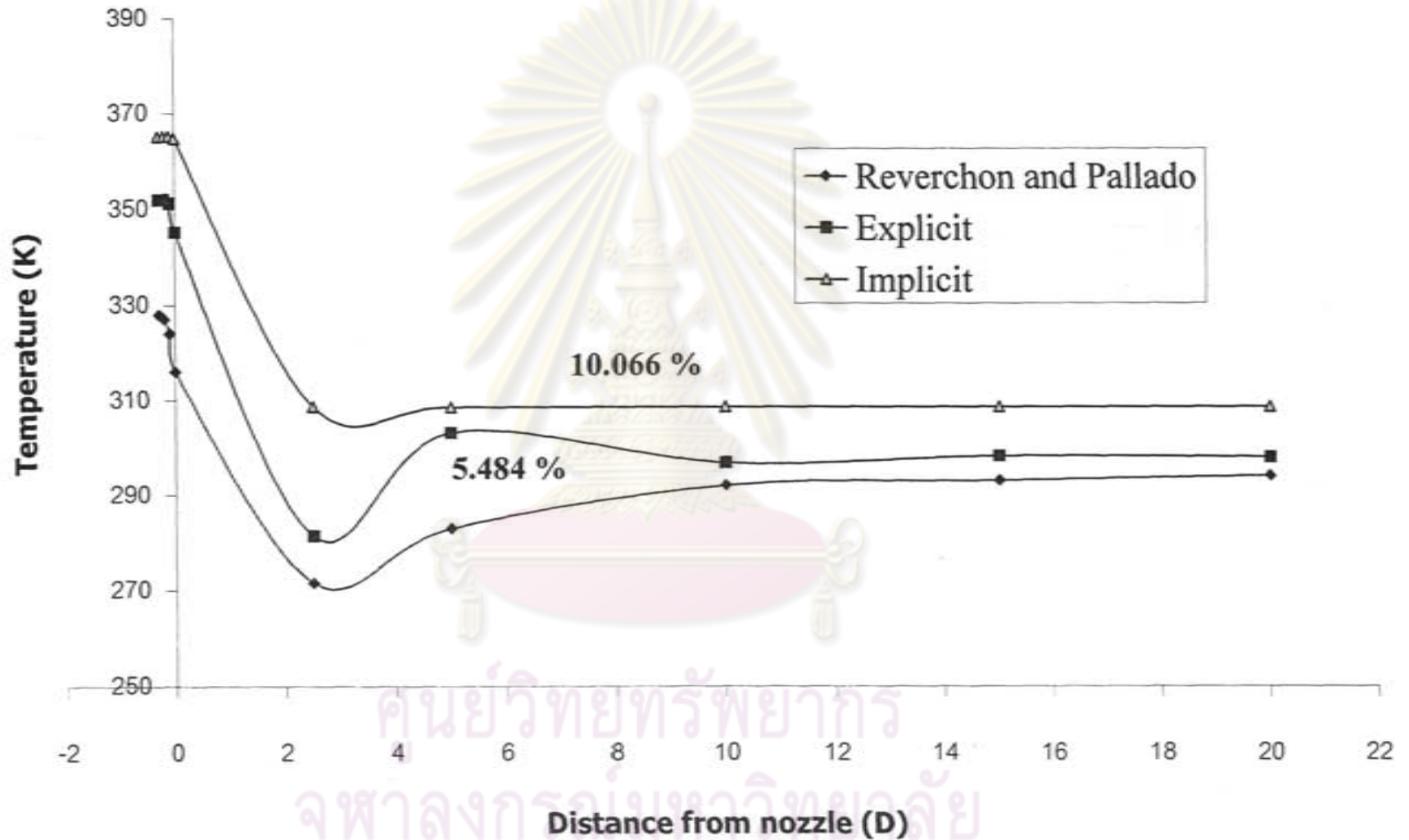
ตาราง 3.4 สภาวะที่ใช้ในการคำนวณด้วยเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย

Simulation conditions	
Number of grid points in the y, z directions	24 x 521
Grid size ($\Delta y, \Delta z$)	1d-5, 4d-5 m
Interval time	250000
Integration step size(Δt)	2.0d-13 sec.
Specific gas constant of CO ₂	8.314*1000/44.01
Ratio of specific heat of CO ₂	1.304
Prandtl number	0.710
Bed pressure of fluid	1.0 bar
Bed temperature of fluid	298.0 K
Bed density of fluid	5.30778d-3 kg/m ³
Reference Temperature	293.0 K
Reference viscosity of CO ₂ at Trf	1.463d-4 kg/(m*s)

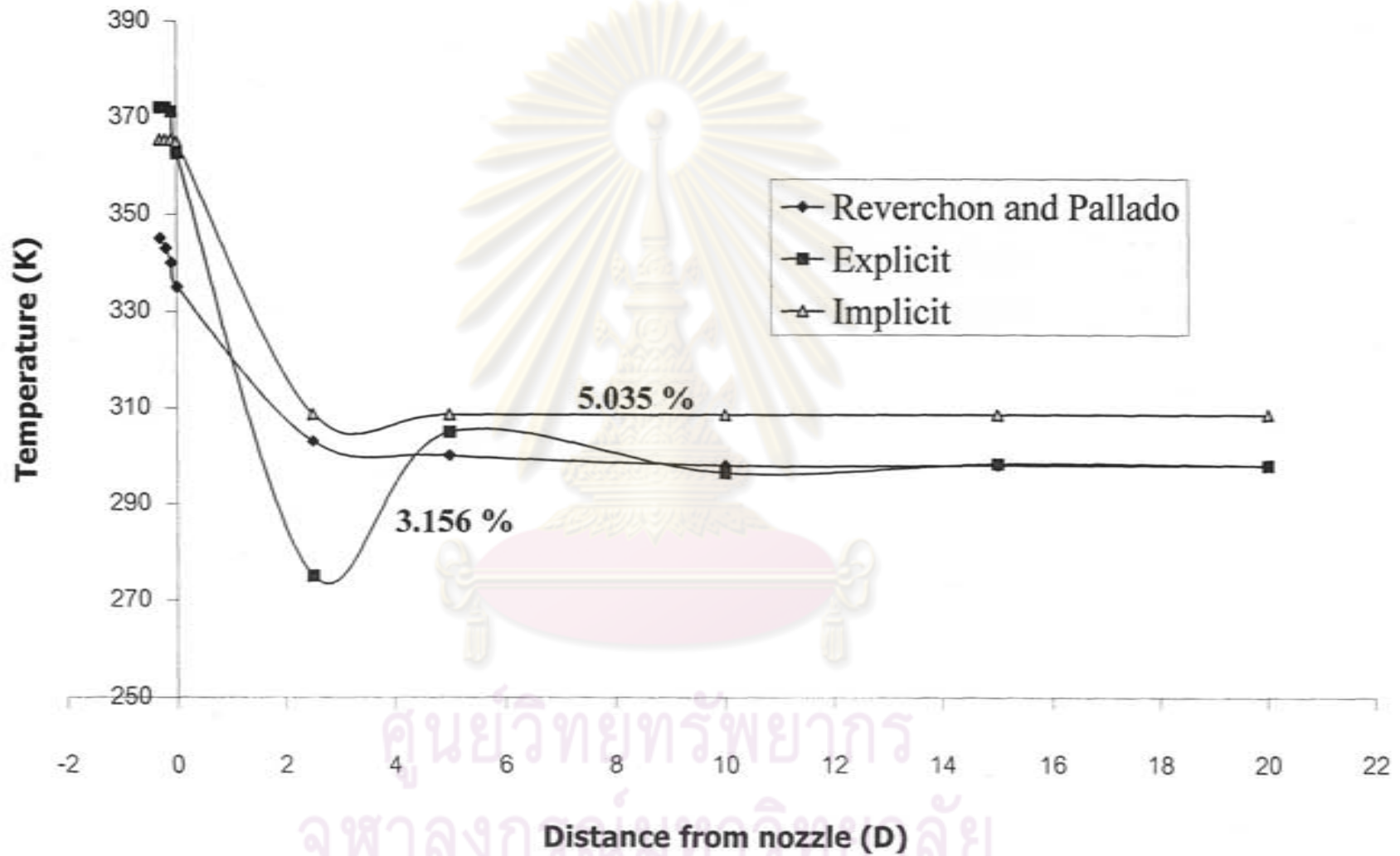
ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



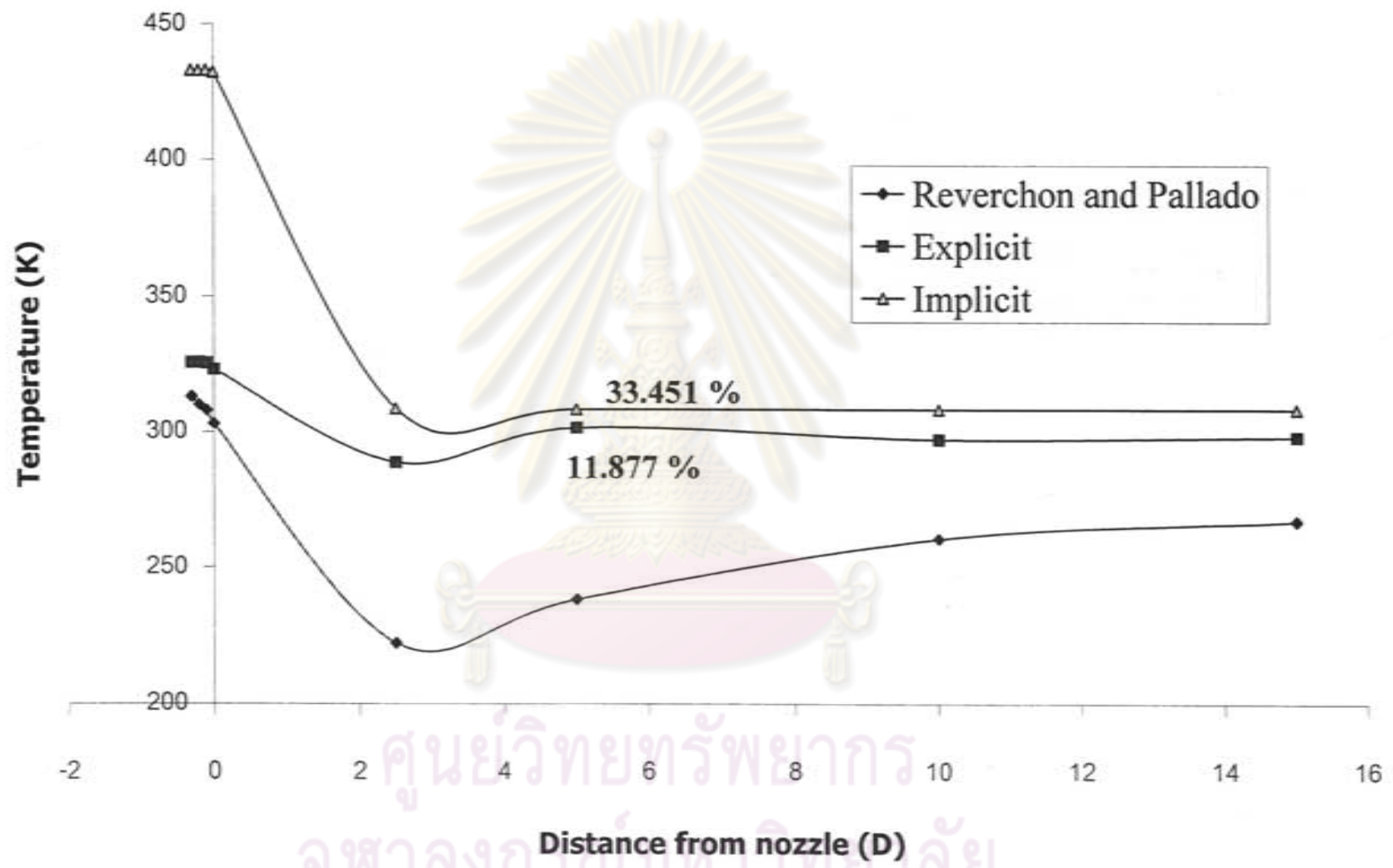
รูปที่ 3.7 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันเข้า 200 bar และอุณหภูมิขาเข้า 333 K



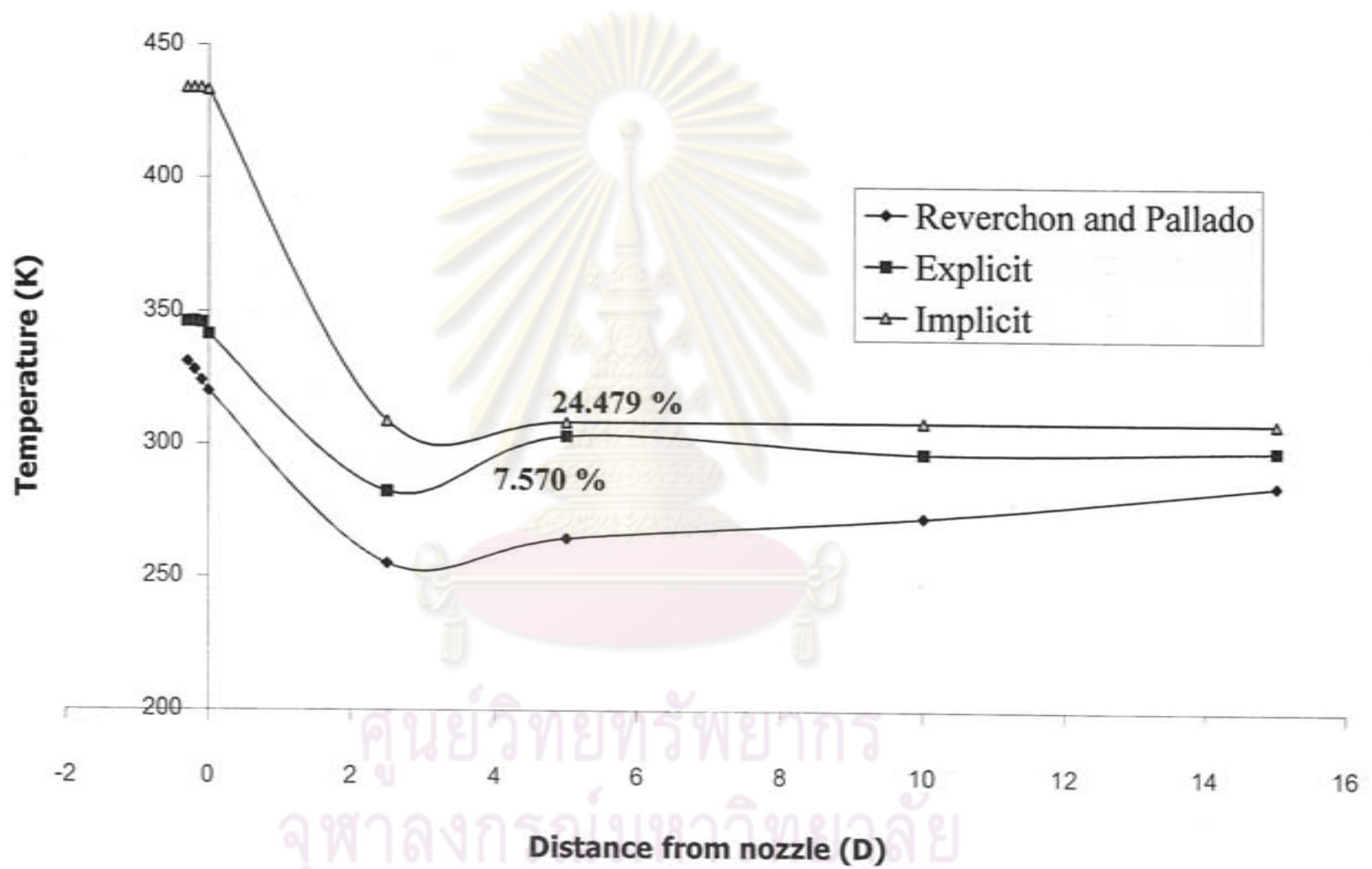
รูปที่ 3.8 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 200 bar และอุณหภูมิขาเข้า 353 K



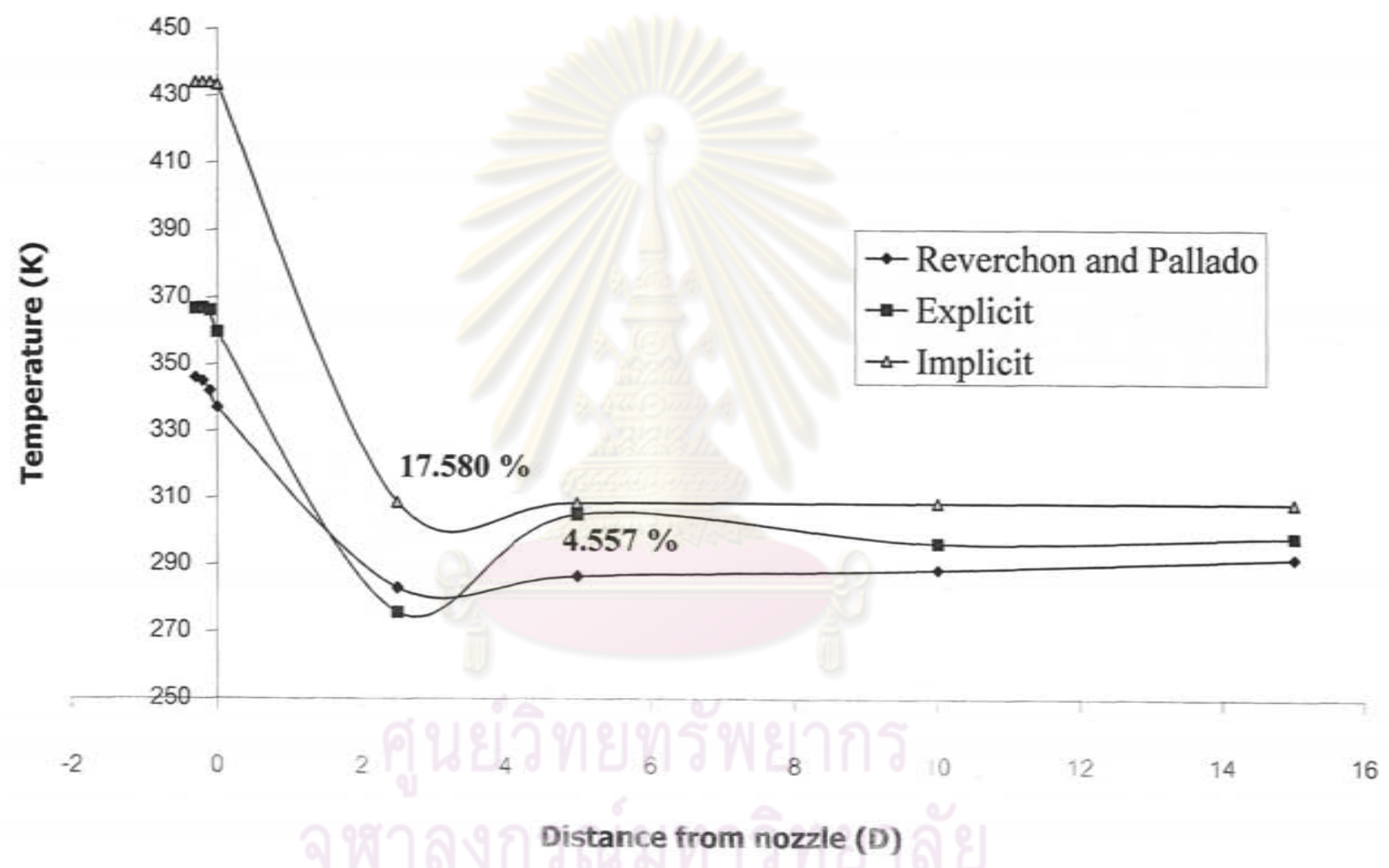
รูปที่ 3.9 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 200 bar และอุณหภูมิขาเข้า 373 K



รูปที่ 3.10 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 260 bar และอุณหภูมิขาเข้า 333 K



รูปที่ 3.11 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 200 bar และอุณหภูมิขาเข้า 353 K



รูปที่ 3.12 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ 1 เมตตันขาเข้า 200 bar และอุณหภูมิขาเข้า 373 K

เมื่อพิจารณาผลการจำลองข้างต้น (รูปที่ 3.7-3.12) โดยเปรียบเทียบกับงานวิจัยอื่นๆ จากงานวิจัยของ Reverchon and Pallado (1996) พบว่าอุณหภูมิของของไหลจะลดลงอย่างรวดเร็วเมื่อของไหลถูกฉีดออกจากหัวฉีด และเมื่อของไหลถูกฉีดเข้าสู่สิ่งแวดล้อมไปได้ระยะหนึ่งและมีการถ่ายเทความร้อนกับสิ่งแวดล้อม อุณหภูมิของของไหลจะมีค่าเข้าสู่ค่าอุณหภูมิของสิ่งแวดล้อม และค่าอุณหภูมิขาเข้าของของไหล จะมีอิทธิพลต่อการลดลงของอุณหภูมิของของไหลถูกฉีดออกจากหัวฉีด ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่า แนวโน้มของการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิของของไหลที่เกิดการขยายตัวอย่างรวดเร็วที่สามารถจำลองได้ในที่นี้ มีความสอดคล้องกับผลการศึกษานักวิจัยกลุ่มอื่นที่ได้มีการรายงานดังกล่าวข้างต้น

การเพิ่มขึ้นของค่าความดันขาเข้าของของไหลมีอิทธิพลต่อค่าอุณหภูมิของของไหลที่คำนวณได้ด้วย โดยเมื่อความดันขาเข้าเพิ่มมากขึ้นจะส่งผลทำให้การลดลงของอุณหภูมิมิมีค่าเพิ่มมากขึ้นตามไปด้วย โดยเฉพาะอย่างยิ่งในกรณีของค่าอุณหภูมิขาเข้าต่ำๆ

ค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างของค่าที่คำนวณได้จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่พัฒนาขึ้นจากทั้ง 2 เทคนิควิธีกับงานวิจัยของ Reverchon and Pallado (1996) สามารถคำนวณได้ดังนี้

$$\text{Relative difference} = [\sum (\rho_{\text{sim}} - \rho_{\text{cal}}) / \sum \rho_{\text{sim}}] * 100 \quad (3.2)$$

ตาราง 3.5 ค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างที่ได้จากการทดสอบระเบียบวิธีที่ใช้

Cases	Upstream boundary		Explicit (%)	Implicit (%)
	Pressure (bar)	Temperature (K)		
1	200	333	6.73539	15.60728
2	200	353	5.48423	10.06599
3	200	373	3.15620	5.03538
4	260	333	11.87683	33.45141
5	260	353	7.57030	24.74887
6	260	373	4.55736	17.85016

ต่อมาเมื่อพิจารณาจากรูปที่ 3.7 – 3.12 อีกครั้ง พบว่าค่าที่ได้จากการคำนวณด้วยเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง (explicit finite difference technique) และระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) ให้ค่าที่สอดคล้องกับงานวิจัยของ Reverchon and Pallado (1996) โดยพบว่าเมื่อของไหลถูกฉีดออกจากหัวฉีดเข้าสู่สิ่งแวดล้อมที่มีค่าความดันและอุณหภูมิค่า อุณหภูมิของของไหลจะลดลงอย่างรวดเร็วและเมื่อมีการถ่ายเทความร้อนกับสิ่งแวดล้อม ค่าอุณหภูมิของของไหลจะมีค่าเข้าสู่ค่าอุณหภูมิของสิ่งแวดล้อม ปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นนี้เป็นผลอันเนื่องมาจาก Joule-Thompson effect

ต่อมาเมื่อพิจารณาเปรียบเทียบผลการคำนวณที่ได้จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่พัฒนาขึ้น ด้วยเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง (explicit finite difference technique) กับเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) พบว่าค่าที่ได้จากเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง (explicit finite difference technique) และค่าที่ได้จากเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) ให้ค่าที่สอดคล้องกับงานวิจัยของ Reverchon and Pallado (1996) แต่ค่าที่ได้จากเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) นั้น ไม่สามารถแสดงให้เห็นถึงอิทธิพลของอุณหภูมิจำของของไหลที่มีต่ออุณหภูมิของของไหลเมื่อถูกฉีดออกจากหัวฉีดได้อย่างชัดเจนเหมือนค่าที่ได้จากเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง (explicit finite difference technique)

โดยพื้นฐานแล้วเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) ควรจะให้ค่าที่สอดคล้องและใกล้เคียงกับที่ค่าที่คำนวณได้จากเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง (explicit finite difference technique) แต่อาจจะเนื่องมาจากปัจจัยหลายอย่าง ทำให้ค่าที่คำนวณได้มีความแตกต่างกันพอสมควร ซึ่งปัญหาเหล่านี้ยังไม่สามารถแก้ไขให้หมดไปได้ในขณะนี้ ดังนั้นจึงมีความจำเป็นที่จะต้องเลือกใช้เทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง (explicit finite difference technique) ในการศึกษาถึงอิทธิพลของความดัน อุณหภูมิ และความเร็วขาเข้าที่มีต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอน ไดออกไซด์ เหนือวิกฤต

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 4

การศึกษาอิทธิพลของปัจจัยดำเนินการ

เพื่อศึกษาอิทธิพลของปัจจัยดำเนินการที่ภาวะเริ่มต้นก่อนทำการพ่นคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตให้เกิดการขยายตัวอย่างรวดเร็ว ที่ส่งผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวนั้น ปัจจัยดำเนินการที่นำมาพิจารณา คือค่าอุณหภูมิขาเข้าของของไหล ค่าความดันขาเข้าของของไหลและค่าความเร็วขาเข้าของของไหล ซึ่งในงานวิจัยนี้จะจำกัดขอบเขตการพิจารณาผลกระทบที่เกิดขึ้นกับกระบวนการดังกล่าว บริเวณใกล้ๆ หัวฉีดเท่านั้น ในการนี้ สภาวะที่ใช้ในการศึกษาได้แสดงอยู่ในตารางที่ 4.1 และ 4.2

ตาราง 4.1 สภาวะที่ใช้ในการศึกษาอิทธิพลของปัจจัยต่างๆ

Case	Inlet velocity (m/s)	Inlet temperature (K)	Inlet pressure (bar)
A	0.0	300, 340, 380	60, 70, 80, 90
B	10.0	300, 340, 380	60, 70, 80, 90
C	100.0	300, 340, 380	60, 70, 80, 90

4.1 อิทธิพลของอุณหภูมิขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์

ดังที่ได้กล่าวมาแล้ว เพื่อศึกษาอิทธิพลของอุณหภูมิขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ กระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ คณะวิจัยได้ทำการจำลองปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นภายใต้เงื่อนไขค่าความดันขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์คงที่เท่ากับ 80 bar และค่าความเร็วขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์คงที่เป็น 100.0 m/s จากรูปที่ 4.2 – 4.4 พบว่าการปรับอุณหภูมิขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตในช่วง 300-380 องศาเซลเซียส ส่งผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตพอสมควร กล่าวคือ จากการคำนวณพบว่าอุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์จะลดลงอย่างรวดเร็ว เมื่อคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตถูกฉีดออกจากหัวฉีดในระยะห่างวัดจากหัวฉีดเท่ากับ 1 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางหัวฉีด และเมื่อคาร์บอนไดออกไซด์ไหลออกจากหัวฉีดไปถึงระยะ 2 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางหัวฉีด ค่าอุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์

จะเพิ่มมากขึ้นเล็กน้อย จนกระทั่งมีค่าเข้าสู่อุณหภูมิของสิ่งแวดล้อม ซึ่งในที่นี้อธิบายได้ว่าบริเวณนี้ คาร์บอนไดออกไซด์มีการถ่ายเทความร้อนกับสิ่งแวดล้อม แสดงว่าการขยายตัวของคาร์บอนไดออกไซด์จะเกิดการเปลี่ยนแปลงสถานะกลายเป็นก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ได้อย่างรวดเร็วหลังจากจุดติดผ่านหัวฉีด ดังนั้นทำให้สามารถคาดการณ์ได้ว่าการละลายของตัวถูกละลายในคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตจะลดลงอย่างรวดเร็วเป็นเหตุให้ ตัวถูกละลายดังกล่าวจะเกิดการแตกตัวออกมา ผลการจำลองนี้สามารถอธิบายผลการทดลองที่รายงานไว้ในผลงานวิจัยที่เกี่ยวข้องซึ่งได้กล่าวถึงในบทที่ 1

ตาราง 4.2 สภาวะที่ใช้ในการคำนวณ

Simulation conditions	
Number of grid points in the y, z directions	24 x 521
Grid size ($\Delta y, \Delta z$)	1d-5, 4d-5 m
Interval time	70000
Integration step size(Δt)	1.0d-12 sec.
Specific gas constant of CO ₂	8.314*1000/44.01
Ratio of specific heat of CO ₂	1.304
Prandtl number	0.710
Bed pressure of fluid	1.0 bar
Bed temperature of fluid	298.0 K
Bed density of fluid	5.30778d-3 kg/m ³
Reference Temperature	293.0 K
Reference viscosity of CO ₂ at Trf	1.463d-4 kg/(m·s)

4.2 อิทธิพลของความเร็วขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์

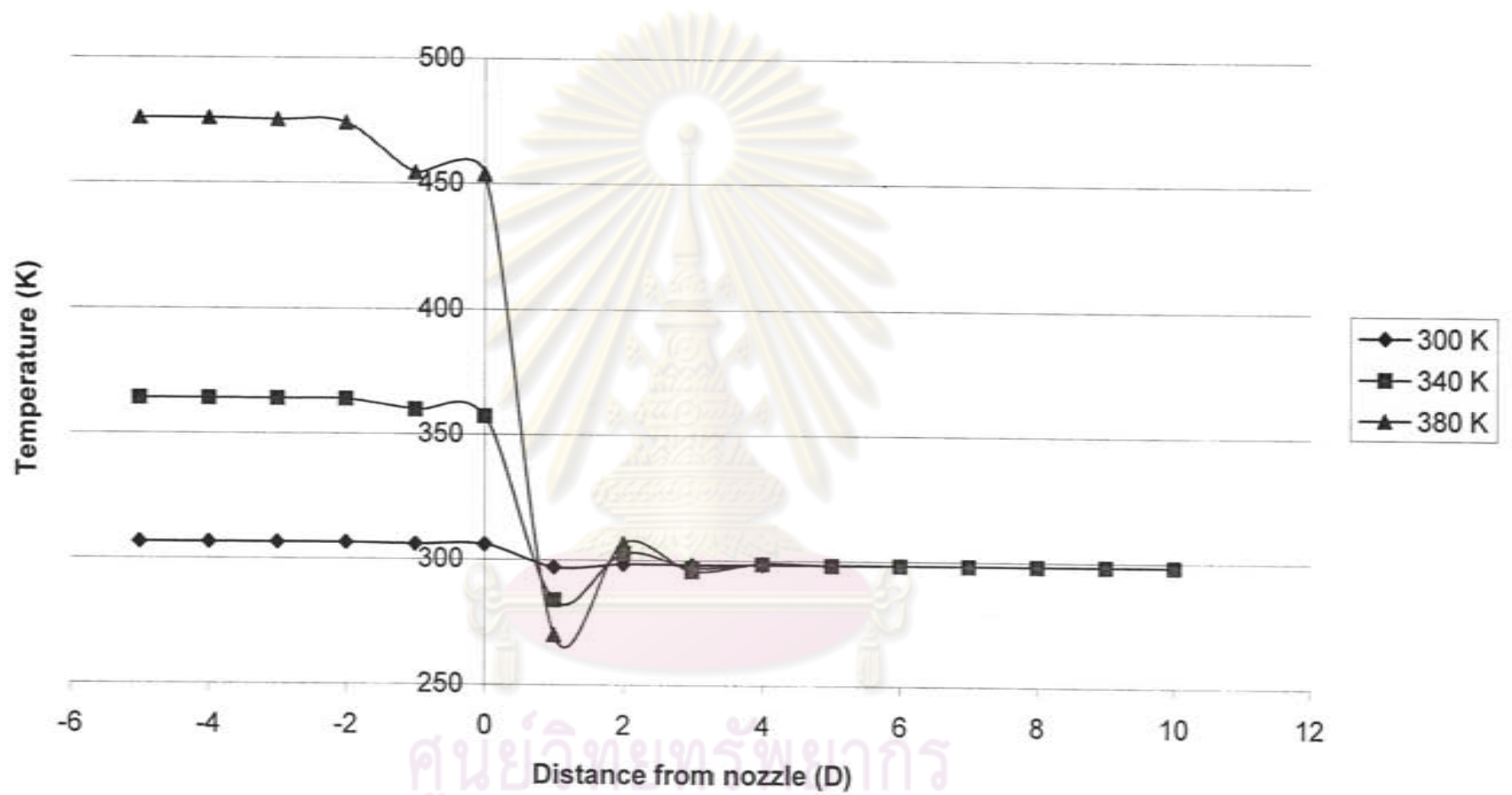
ในทำนองเดียวกัน เพื่อศึกษาอิทธิพลของความเร็วขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ กระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ที่จำลองภายใต้เงื่อนไขค่าความดันขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์คงที่เท่ากับ 80 bar และค่าอุณหภูมิขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ในช่วงเป็น 300, 340 and

380 องศาเซลเซียส จากรูปที่ 4.5 – 4.7 พบว่า การปรับค่าความเร็วขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ให้สูงขึ้น จาก 0.0 ถึง 100.0 m/s ส่งผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตน้อยมาก โดยจะเห็นได้จากกราฟว่าอุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์หลังจากขยายตัวอย่างรวดเร็วมีค่าใกล้เคียงกันมาก โดยอุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์จะลดลงอย่างรวดเร็ว เมื่อถูกฉีดออกจากหัวฉีดในระยะห่างจากหัวฉีด 1 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางหัวฉีด และเมื่อคาร์บอนไดออกไซด์ไหลออกจากหัวฉีดไปถึงระยะ 2 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางหัวฉีด ค่าอุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์จะเพิ่มมากขึ้นเล็กน้อยจนกระทั่งมีค่าเข้าสู่อุณหภูมิของสิ่งแวดล้อม ซึ่งอธิบายได้ว่าบริเวณนี้คาร์บอนไดออกไซด์มีการถ่ายเทความร้อนกับสิ่งแวดล้อมเช่นเดียวกัน

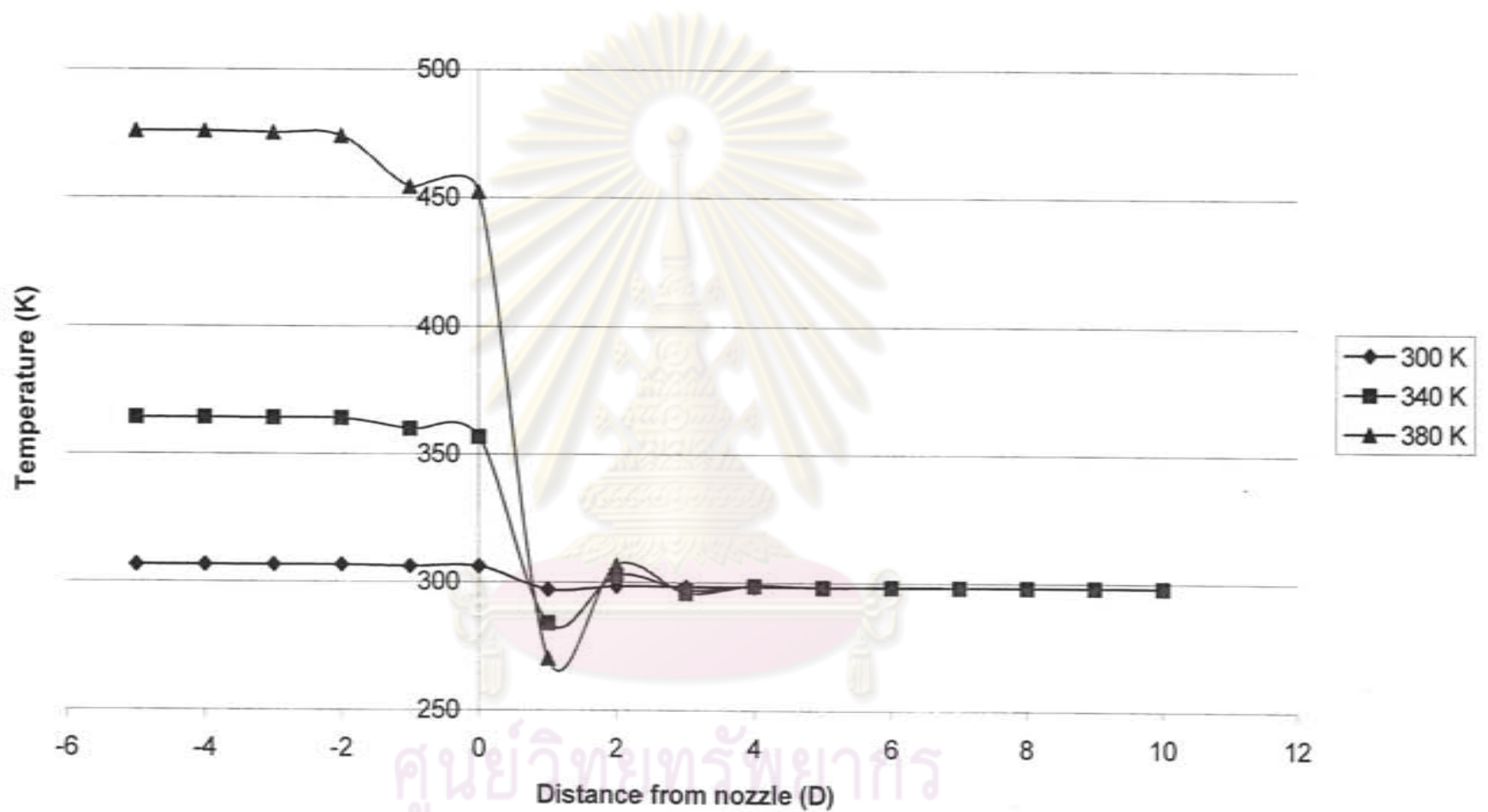
4.3 อิทธิพลของความดันขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์

ดังนั้น เพื่อทำการศึกษาอิทธิพลของความดันขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ ที่มีผลต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต คณะวิจัยได้จำลองปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นเมื่อค่าความเร็วขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์เป็น 0.0, 10.0 และ 100.0 m/s และค่าอุณหภูมิขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์เป็น 300, 340 and 380 K ดังแสดงในรูปที่ 4.8 – 4.16 ตามลำดับ ในการจำลองแต่ละเงื่อนไขทำโดยปรับให้ค่าความเร็วขาเข้า และอุณหภูมิขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตคงที่ แต่ปรับค่าความดันขาเข้าให้เพิ่มขึ้น โดยอยู่ในช่วง 60 – 90 Bar พบว่าค่าความดันขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตส่งผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตเป็นอย่างมาก โดยมีลักษณะใกล้เคียงกับอิทธิพลของอุณหภูมิ ทั้งนี้จากการจำลองจะเห็นว่า การเพิ่มความดันขาเข้าจะทำให้อุณหภูมิหลังจากที่ปล่อยให้คาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตไหลออกจากแหล่งป้อนเปลี่ยนแปลงด้วย ดังนั้นจะเห็นได้จากกราฟว่าอุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์จะลดลงอย่างรวดเร็วเมื่อถูกฉีดออกจากหัวฉีดจากหัวฉีด ในทำนองเดียวกันเมื่อคาร์บอนไดออกไซด์ขยายตัวไปถึงระยะทางประมาณ 2 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางหัวฉีด อุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์จะกลับเพิ่มมากขึ้นเล็กน้อยจนกระทั่งมีค่าเข้าสู่อุณหภูมิของสิ่งแวดล้อม ปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นสอดคล้องกับเงื่อนไขที่เป็นผลเนื่องมาจาก Joule – Thompson effect นั่นเอง

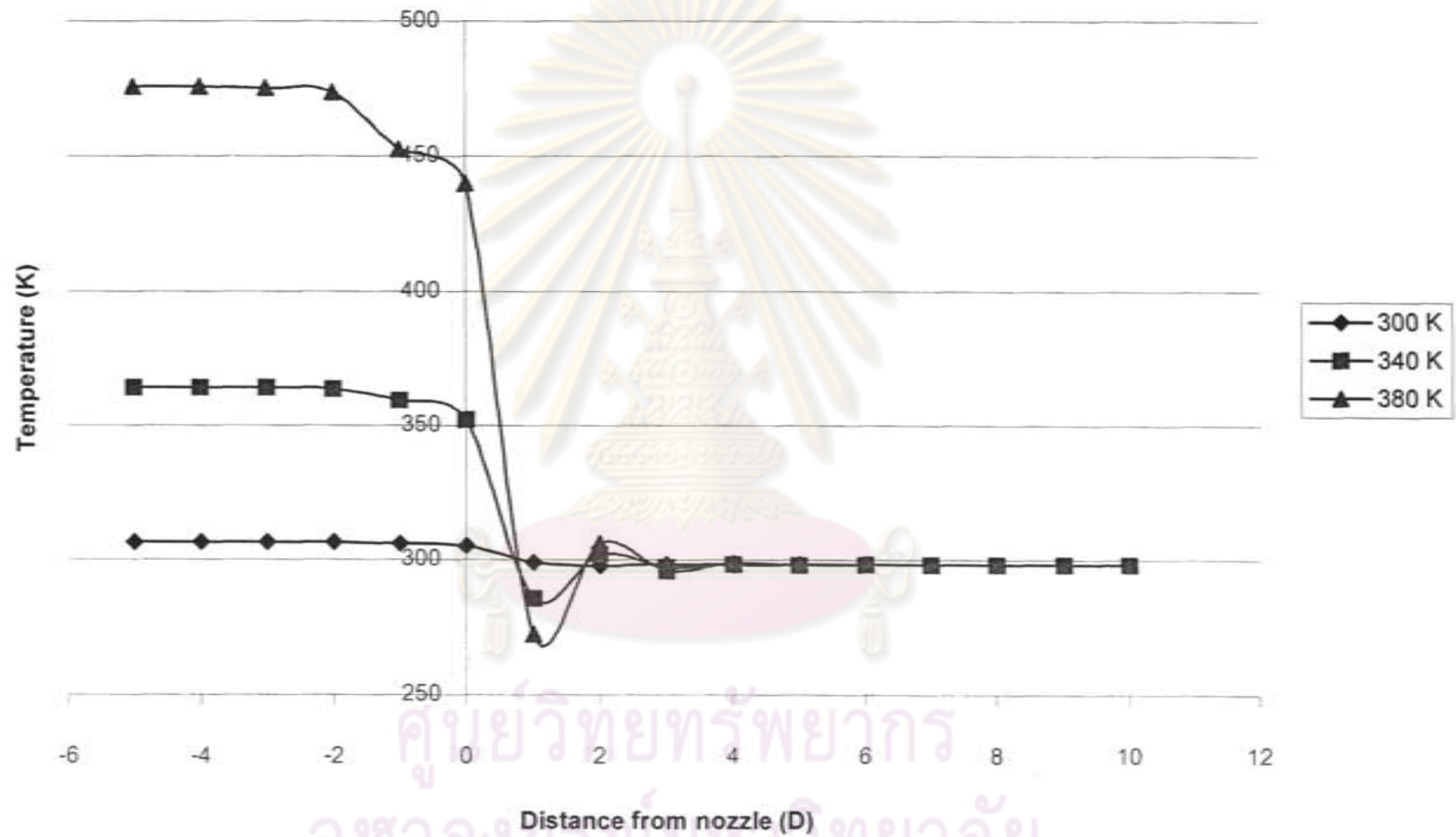
นอกจากนี้ยังพบว่า ค่าความดันขาเข้าส่งผลกระทบต่ออุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์ภายในหัวฉีดด้วยเช่นกัน โดยเมื่อความดันขาเข้าเพิ่มมากขึ้นจะทำให้อุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์ภายในหัวฉีดลดลง ซึ่งสอดคล้องกับทฤษฎีของ throttling process ซึ่งอธิบายได้ด้วยกราฟในรูปที่ 4.16 นั่นเอง



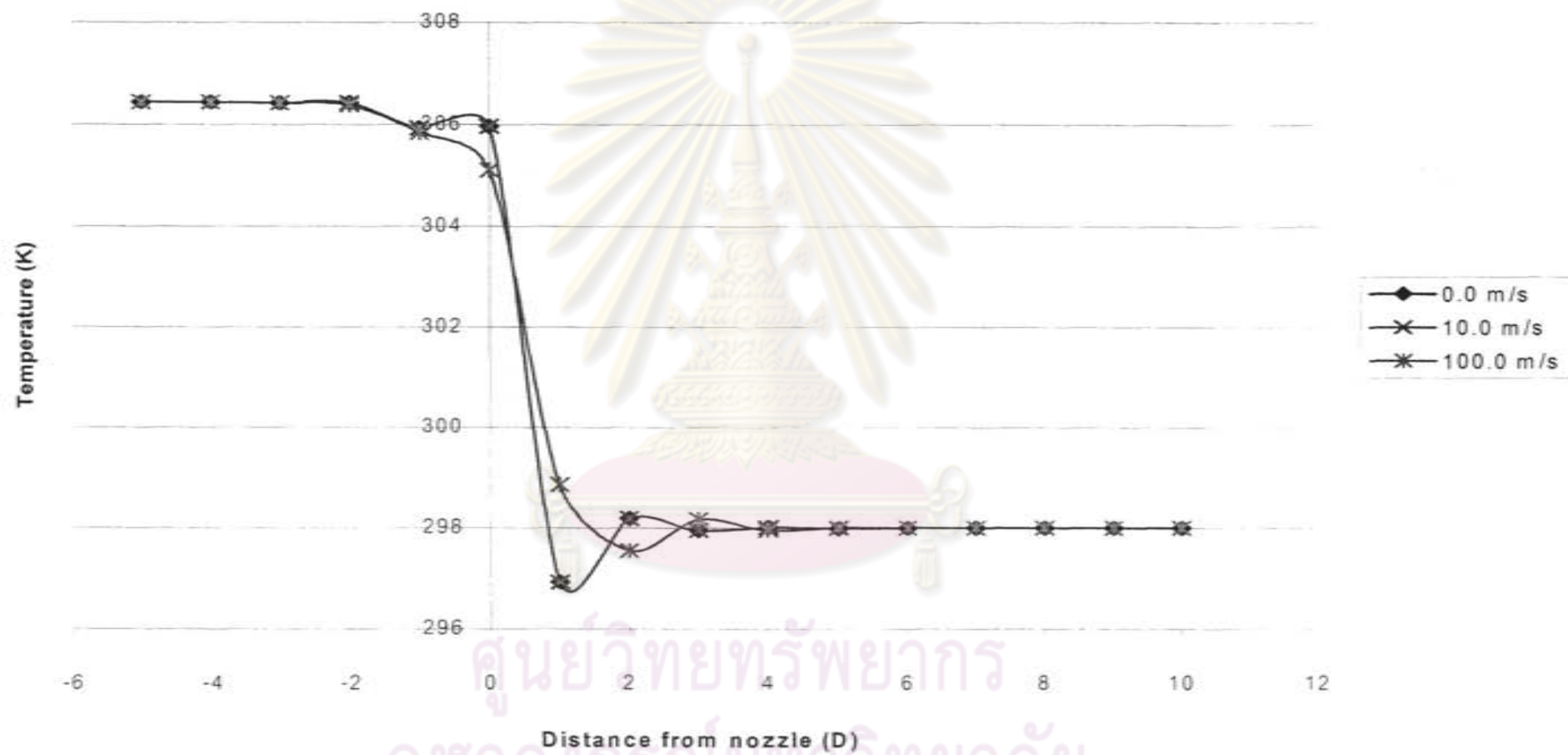
รูปที่ 4.1 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 80 bar และความเร็วขาเข้า 10.0 m/s



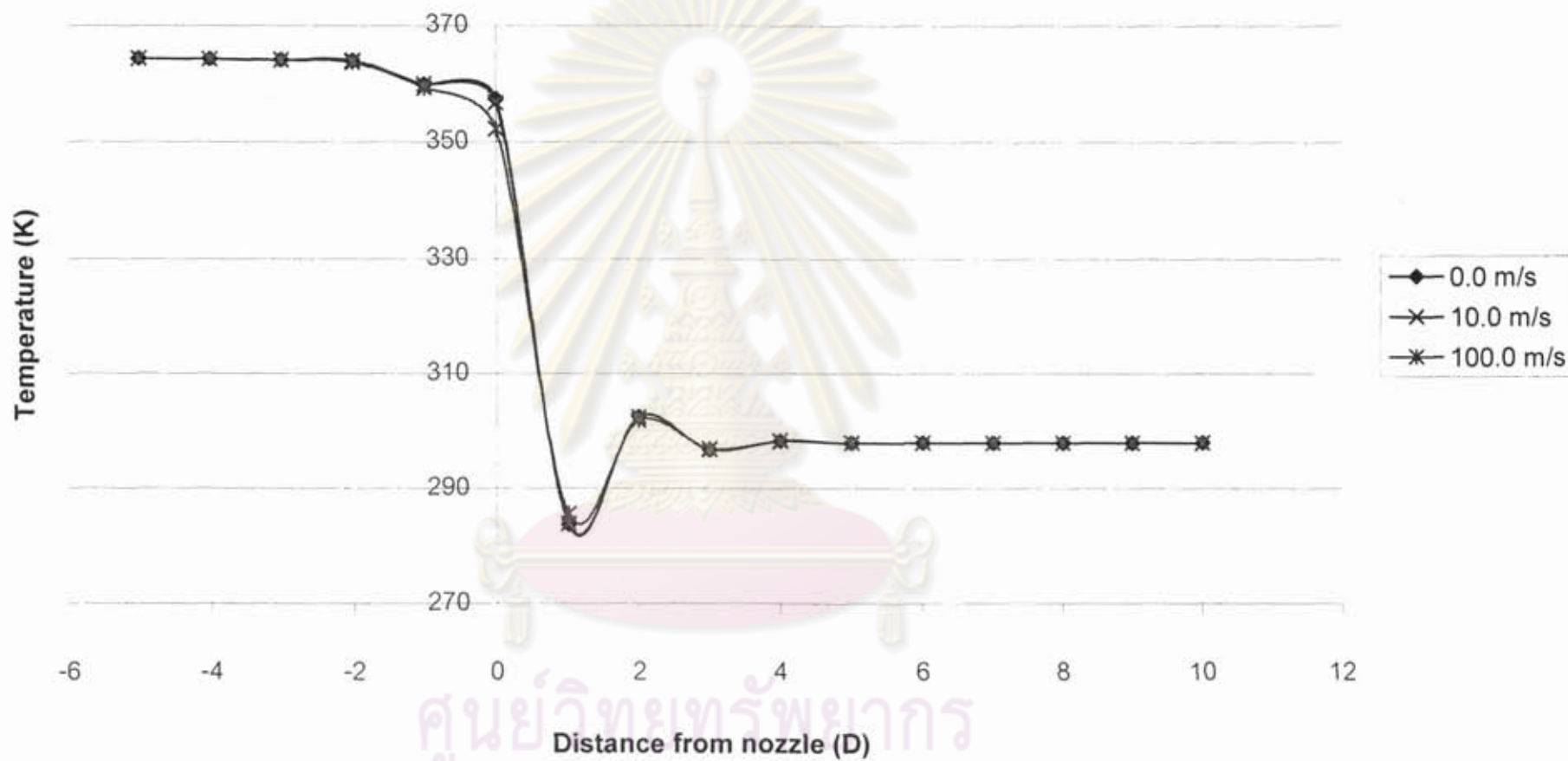
รูปที่ 4.2 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 80 bar และความเร็วขาเข้า 10.0 m/s



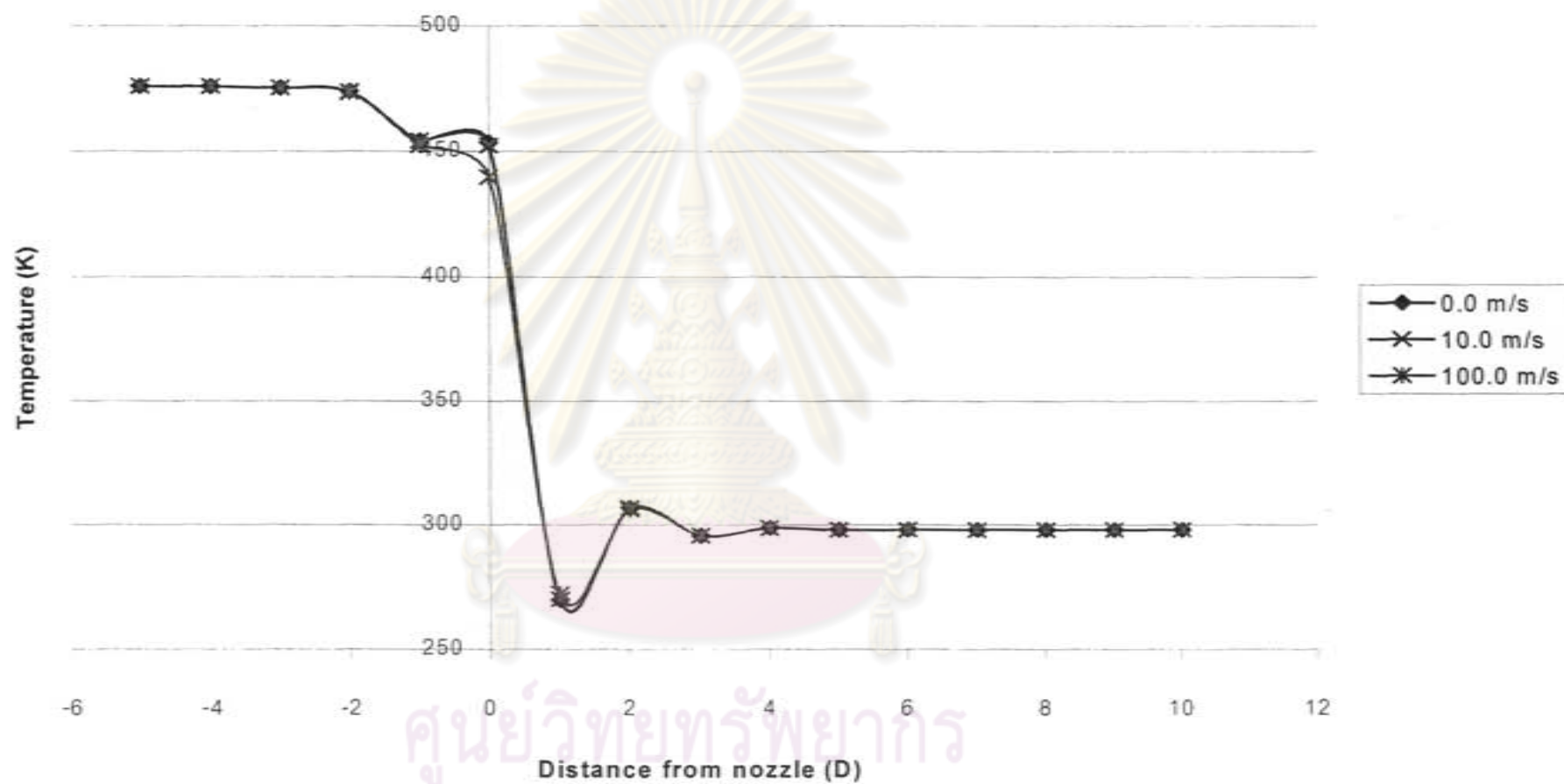
รูปที่ 4.3 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 80 bar และความเร็วขาเข้า 100.0 m/s



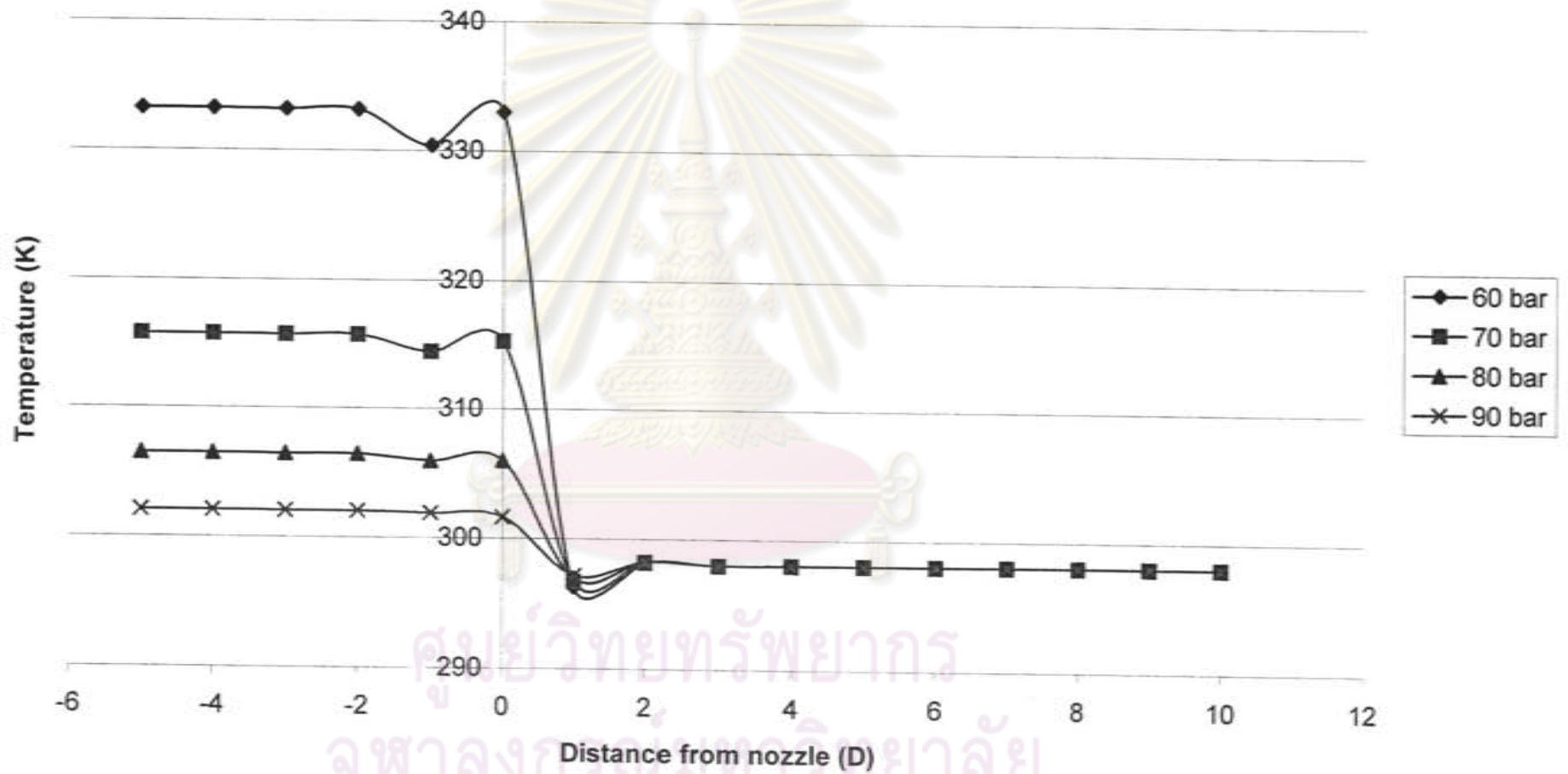
รูปที่ 4.4 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 80 bar และอุณหภูมิต่อขาเข้า 300 K.



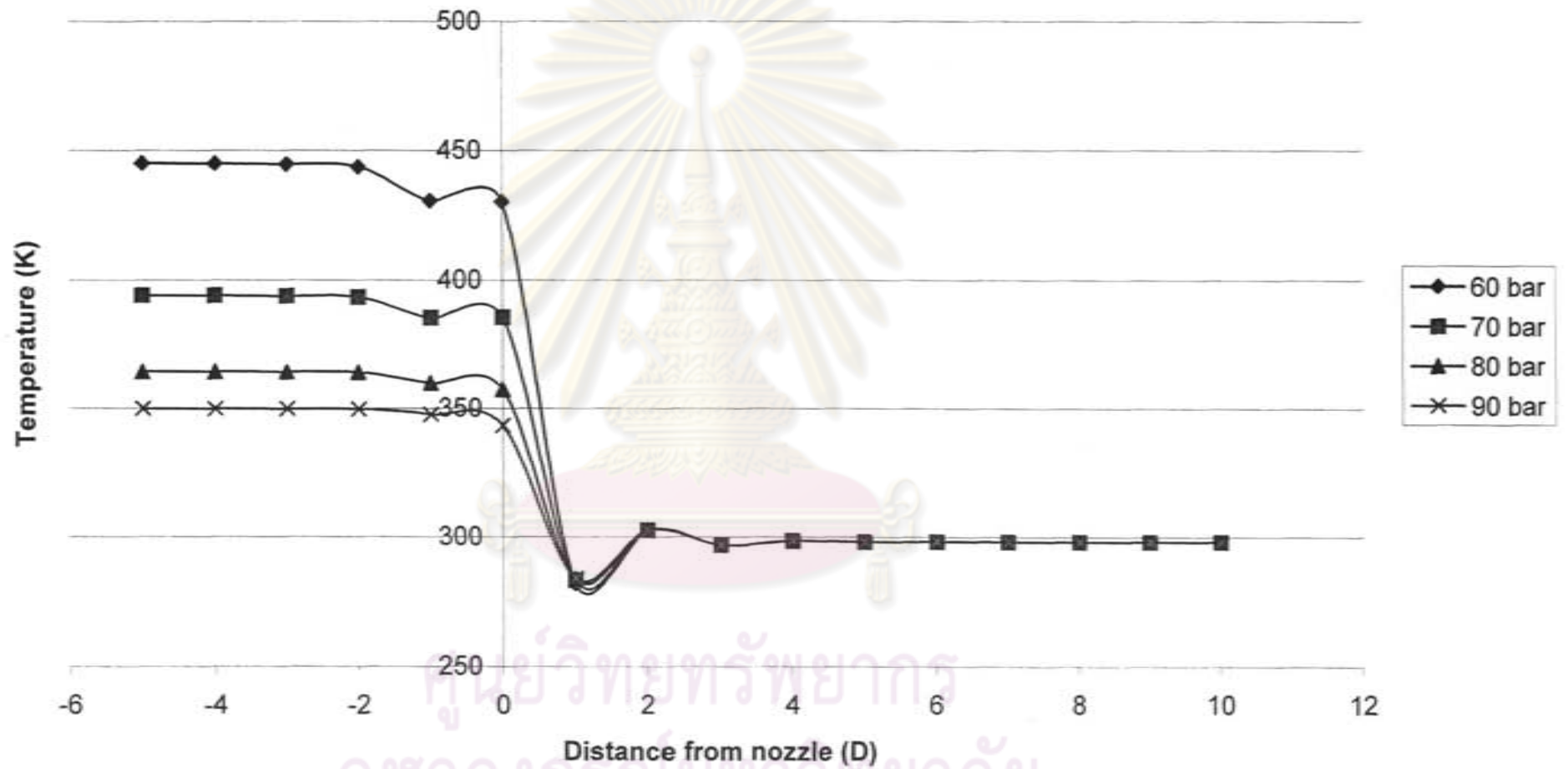
รูปที่ 4.5 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 80 bar และอุณหภูมิตั้งต้น 340 K



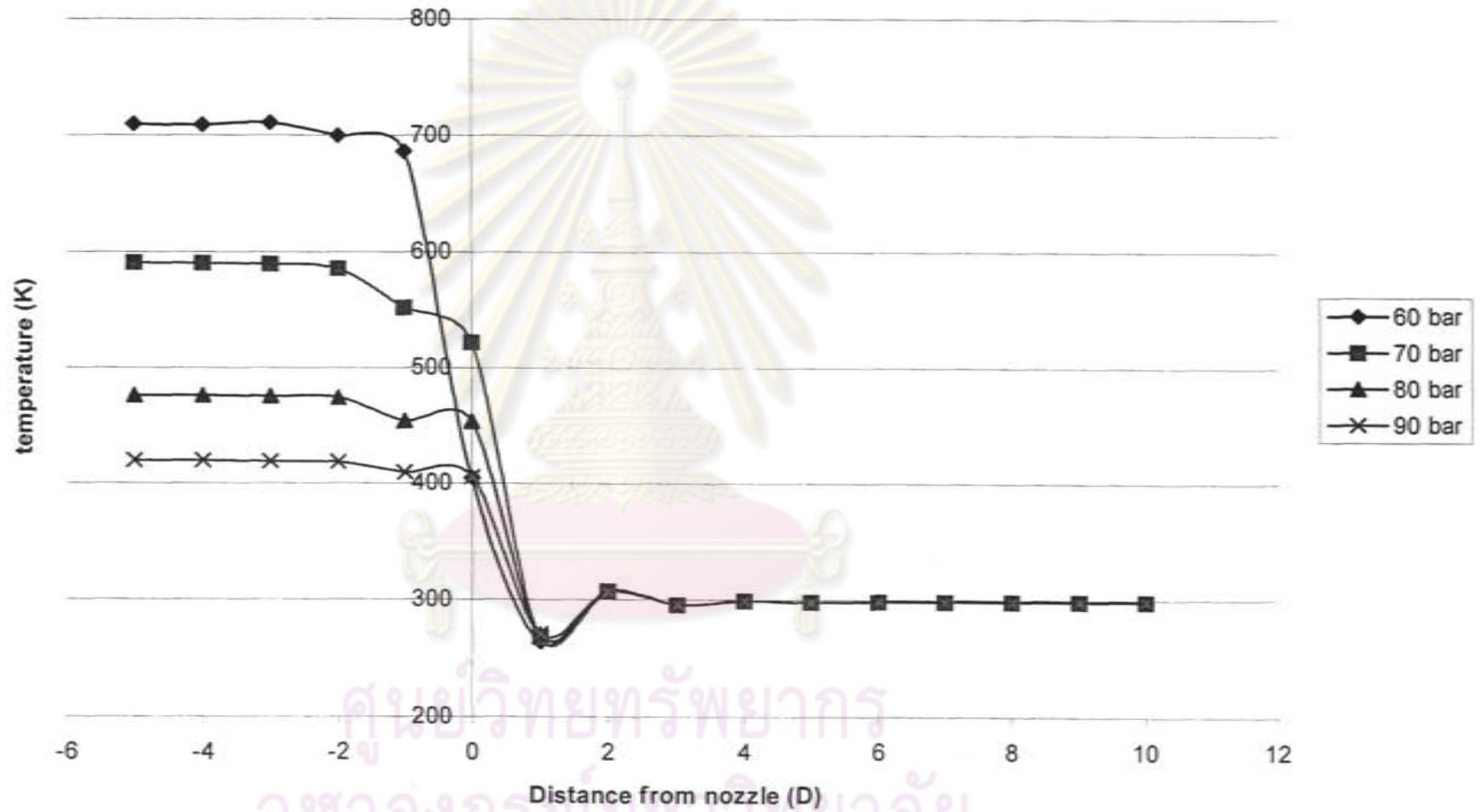
รูปที่ 4.6 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความดันขาเข้า 80 bar และอุณหภูมิขาเข้า 380 K



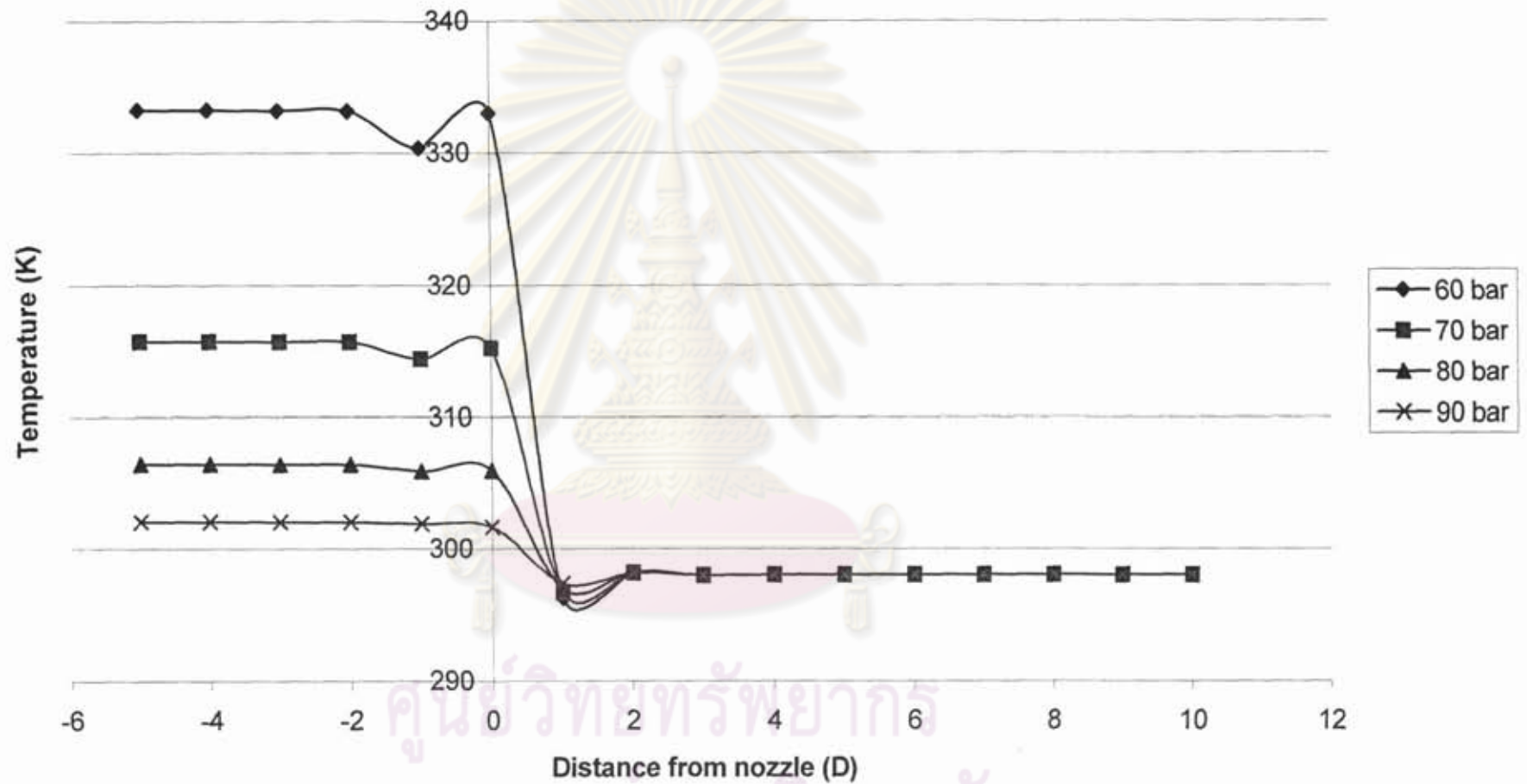
รูปที่ 4.7 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความเร็วขาเข้า 0.0 m/s และอุณหภูมิกขาเข้า 300 K



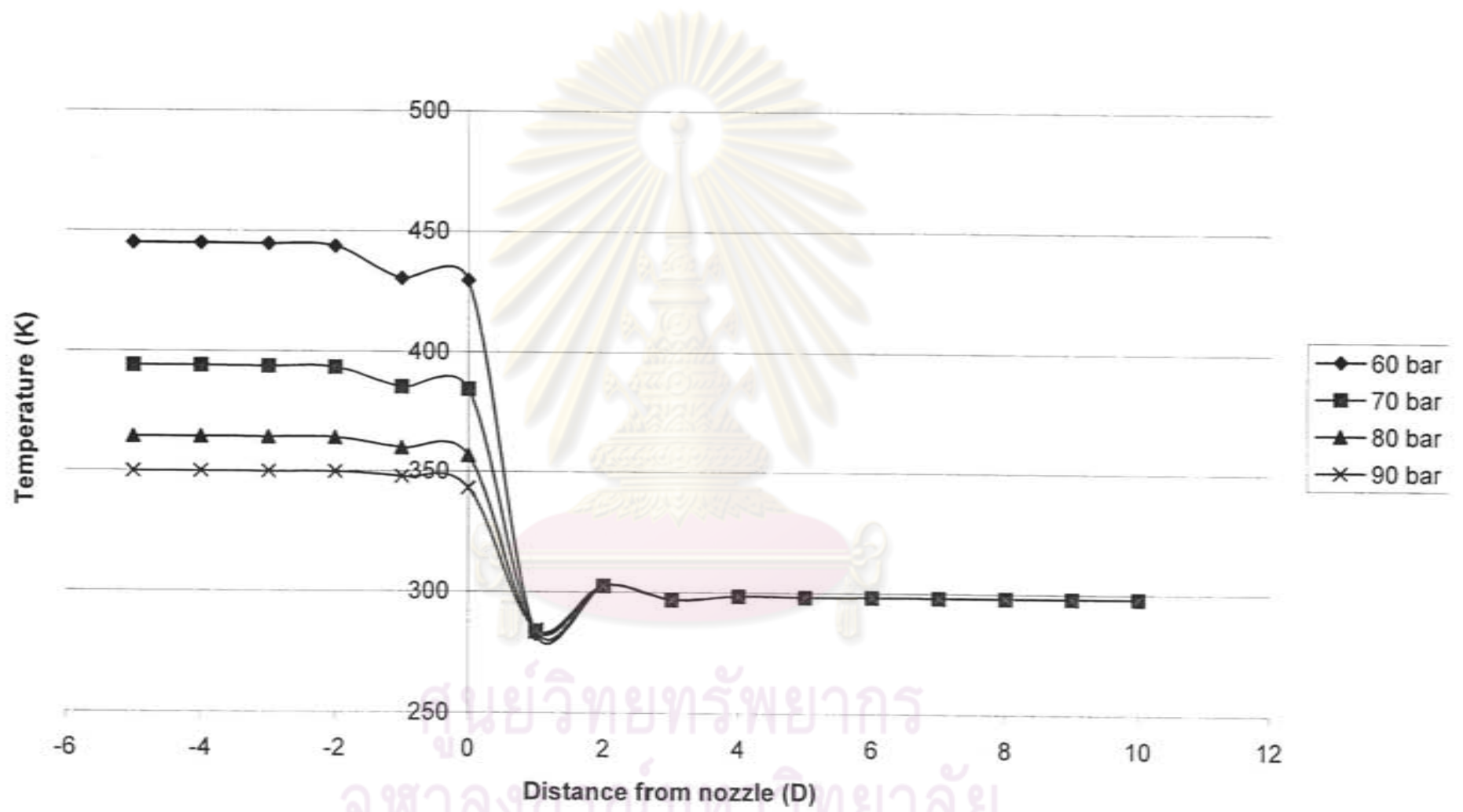
รูปที่ 4.8 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความเร็วขาเข้า 0.0 m/s และอุณหภูมิขาเข้า 340 K



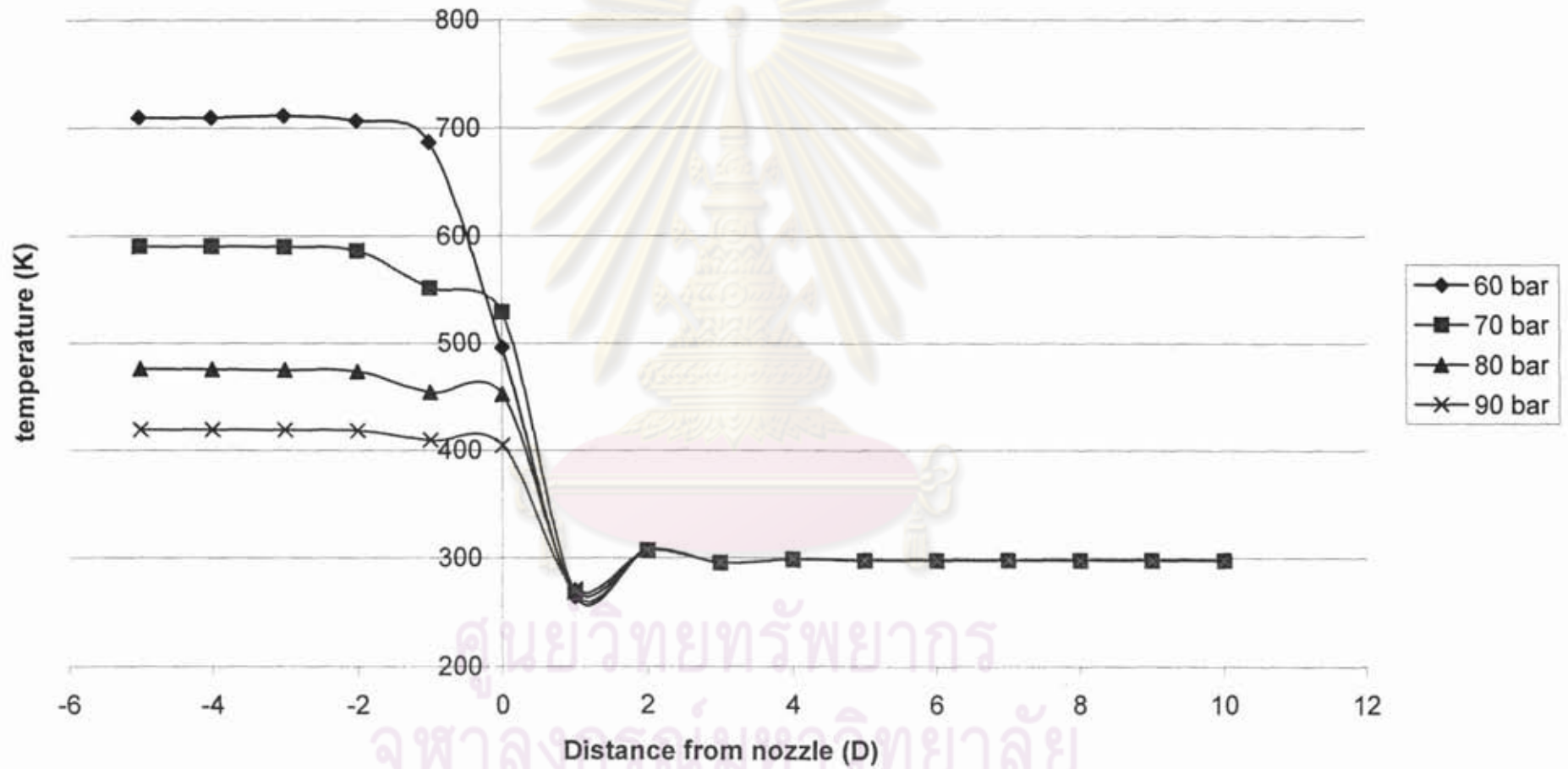
รูปที่ 4.9 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความเร็วขาเข้า 0.0 m/s และอุณหภูมิขาเข้า 380 K



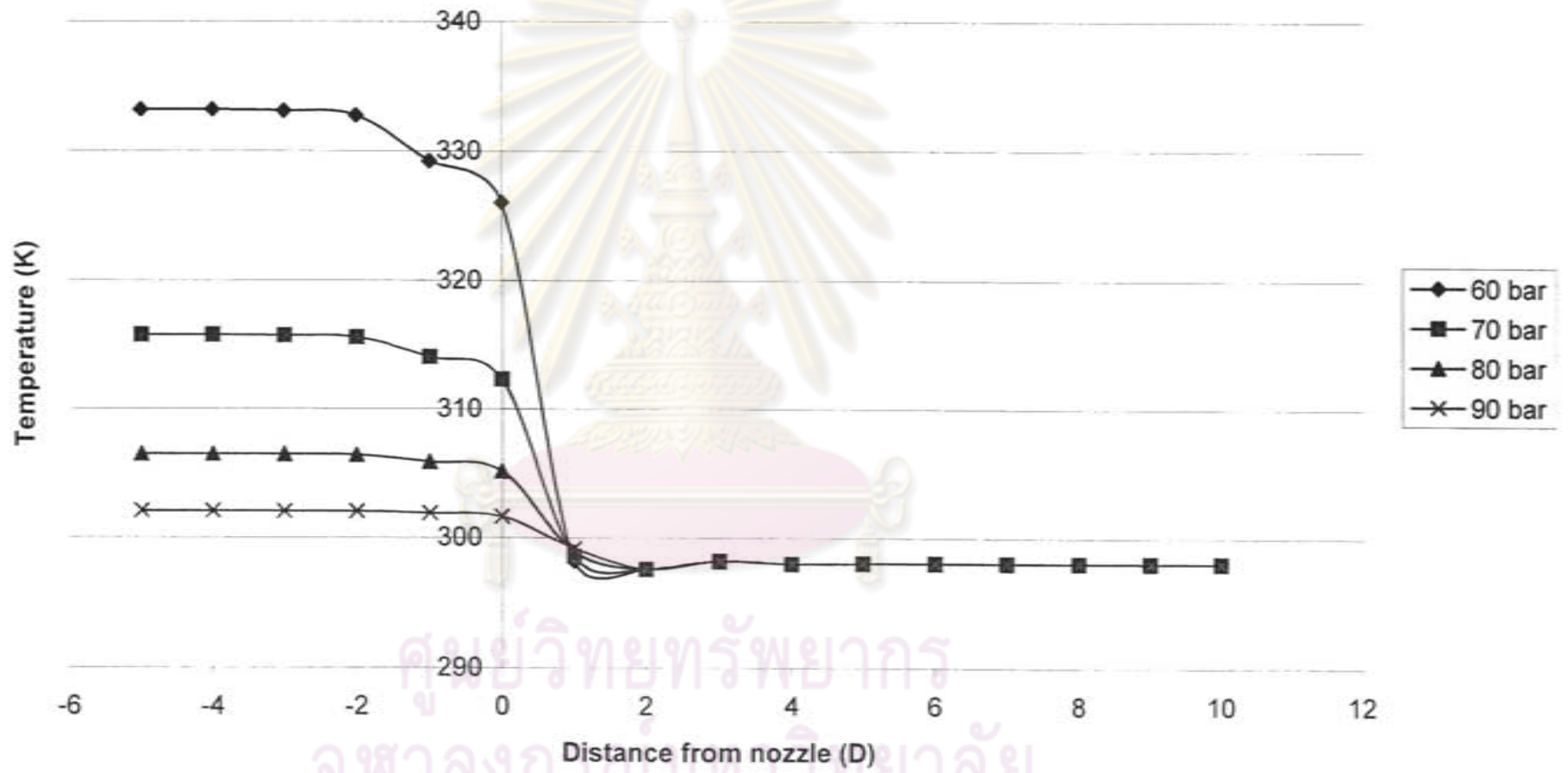
รูปที่ 4.10 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความเร็วขาเข้า 10.0 m/s และอุณหภูมิขาเข้า 300 K.



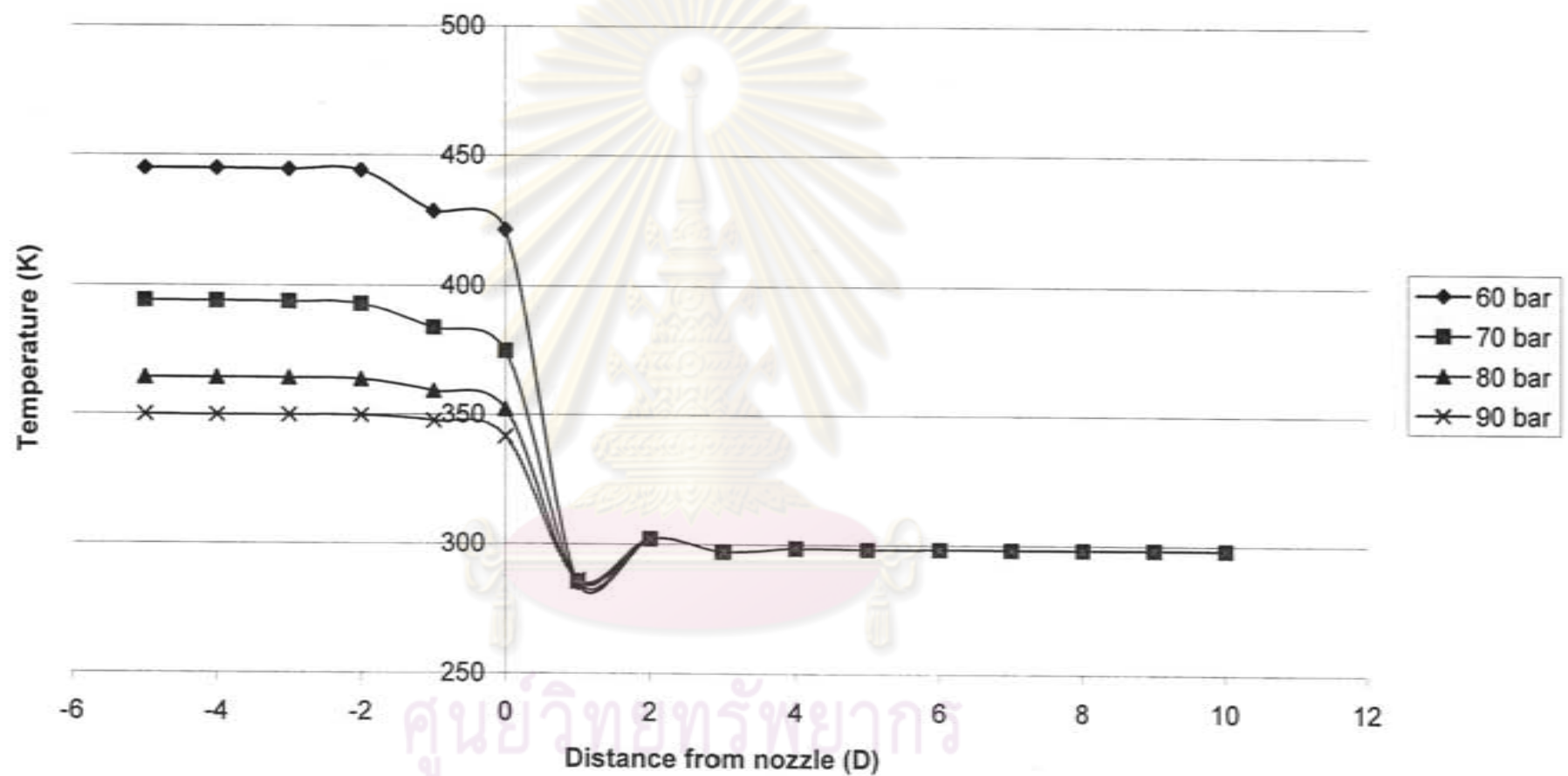
รูปที่ 4.11 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความเร็วขาเข้า 10.0 m/s และอุณหภูมิขาเข้า 340 K K



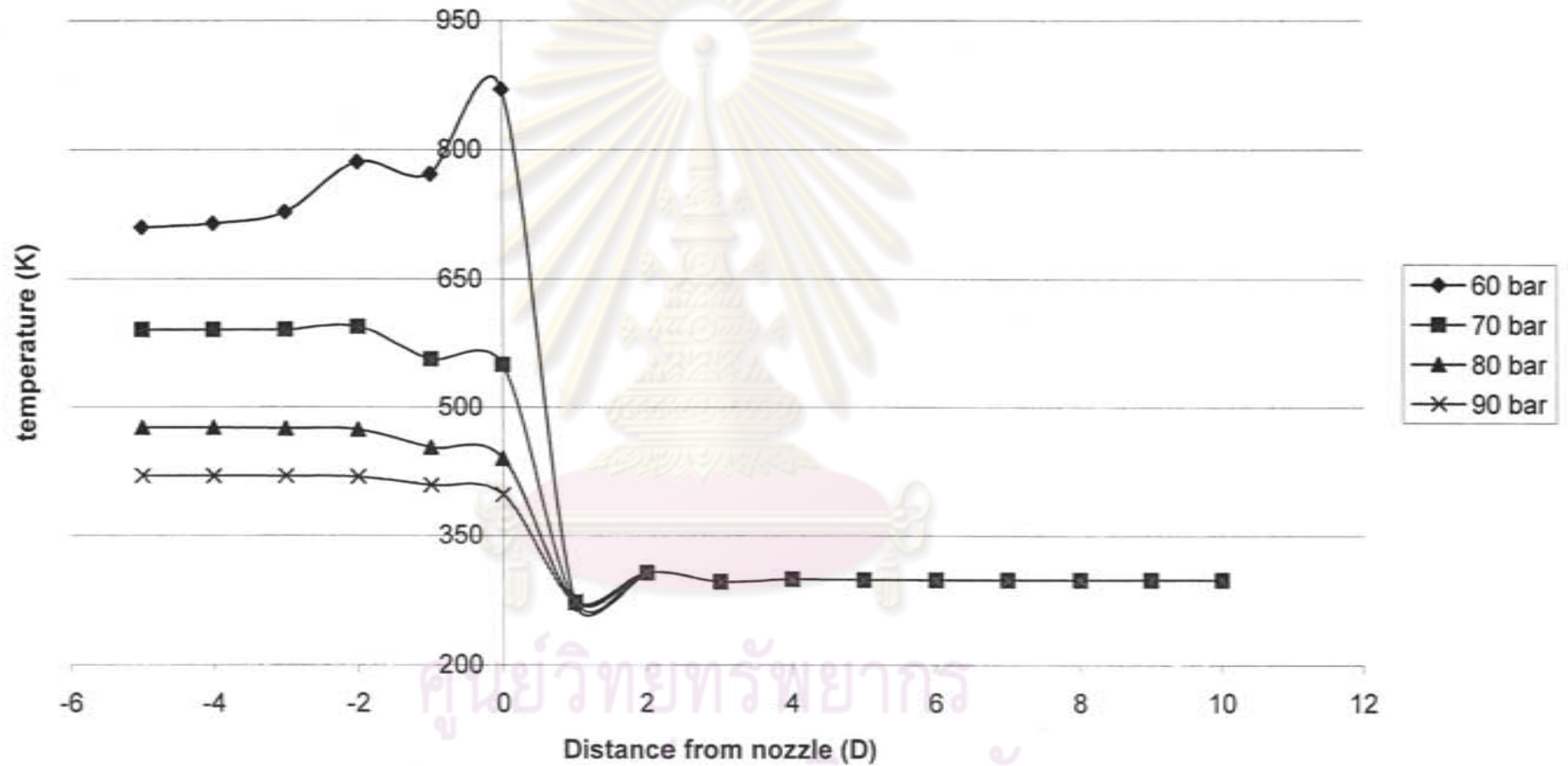
รูปที่ 4.12 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความเร็วขาเข้า 10.0 m/s และอุณหภูมิขาเข้า 380 K



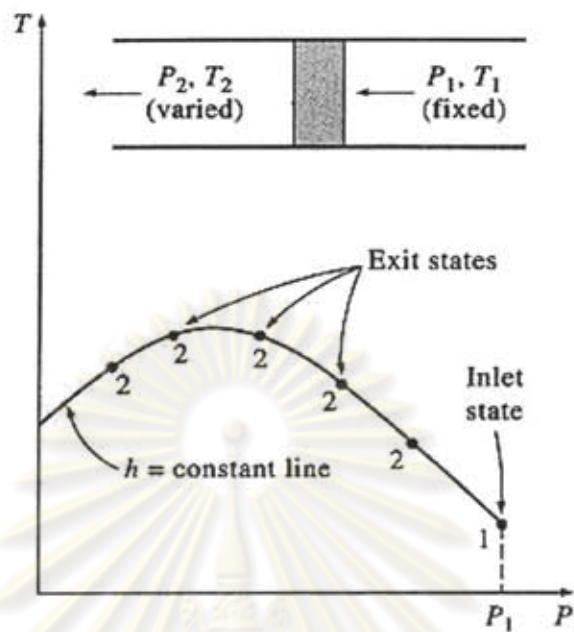
รูปที่ 4.13 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความเร็วขาเข้า 100.0 m/s และอุณหภูมิขาเข้า 300 K



รูปที่ 4.14 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความเร็วเข้า 100.0 m/s และอุณหภูมิเข้า 340 K



รูปที่ 4.15 กราฟแสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิของของไหลและระยะห่างจากหัวฉีดที่ความเร็วเข้า 100.0 m/s และอุณหภูมิเข้า 380 K



รูปที่ 4.16 PT diagram for throttling process

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 5

ข้อสรุปและข้อเสนอแนะ

5.1 ข้อสรุป

ในโครงการวิจัยนี้ เบื้องต้นได้เริ่มจากการศึกษาเปรียบเทียบผลการทำนายค่าความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์จากสมการสถานะ Peng-Robinson สมการสถานะ Soave Redlich-Kwong และงานวิจัยที่ผ่านมาของ Wilmington, DE (1993) เพื่อหาสมการสถานะที่เหมาะสมในการทำนายคุณสมบัติของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต พบว่าสมการ Soave Redlich-Kwong ที่ใช้ค่า compressibility factor ของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.274 ให้ค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างจากงานวิจัยของ Wilmington, DE (1993) น้อยที่สุดเมื่อเปรียบเทียบกับค่าที่ได้จากกรณีอื่นๆ นอกจากนี้ยังพบว่าเมื่อค่าอุณหภูมิเพิ่มมากขึ้นค่าเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างที่ได้จากการคำนวณจะมีแนวโน้มลดลง

เมื่อพิจารณาเปรียบเทียบผลการคำนวณที่ได้จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่พัฒนาขึ้น ด้วยเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit finite difference technique) กับเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) พบว่าค่าที่ได้จากเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit finite difference technique) และค่าที่ได้จากเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) ให้ค่าที่สอดคล้องกับงานวิจัยของ Reverchon and Pallado (1996) แต่เนื่องจากโดยค่าที่ได้จากเทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) ไม่สามารถแสดงให้เห็นถึงอิทธิพลของอุณหภูมิเข้าของของไหลที่มีต่ออุณหภูมิของของไหลเมื่อถูกฉีดออกจากหัวฉีดได้อย่างชัดเจนเหมือนค่าที่ได้จากเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit finite difference technique) ดังนั้นจึงมีความจำเป็นที่จะต้องเลือกใช้เทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit finite difference technique) ในการศึกษาถึงอิทธิพลของความดัน อุณหภูมิ และความเร็วขาเข้าที่มีต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต

จากผลการศึกษาอิทธิพลของอุณหภูมิขาเข้า ความเร็วขาเข้า และความดันขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ที่มีต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ พบว่าอุณหภูมิขาเข้าของของคาร์บอนไดออกไซด์ส่งผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตพอสมควร ส่วนค่าความเร็วขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ส่ง

ผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตน้อยมาก และพบว่าค่าความดันขาเข้าของคาร์บอนไดออกไซด์ส่งผลกระทบต่อกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตมากที่สุด ในบรรดาตัวแปรทั้งสามที่ทำการศึกษาในโครงการนี้ โดยปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในกระบวนการดังกล่าวจะมีลักษณะคล้ายคลึงกันคือ อุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์จะลดลงอย่างรวดเร็วเมื่อถูกฉีดออกจากหัวฉีดในระยะห่างจากหัวฉีด 1 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางหัวฉีด และเมื่อคาร์บอนไดออกไซด์ไหลออกจากหัวฉีดไปถึงระยะ 2 เท่าของเส้นผ่านศูนย์กลางหัวฉีด ค่าอุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์จะเพิ่มมากขึ้นเล็กน้อยจนกระทั่งมีค่าเข้าสู่อุณหภูมิของสิ่งแวดล้อม จากปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นนี้สามารถอธิบายได้ว่าเป็นผลเนื่องมาจาก Joule – Thompson effect โดยบริเวณนี้คาร์บอนไดออกไซด์จะมีการถ่ายเทความร้อนกับสิ่งแวดล้อม นอกจากนี้ยังพบว่าค่าความดันขาเข้าส่งผลกระทบต่ออุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์ภายในหัวฉีดด้วย โดยเมื่อความดันขาเข้าเพิ่มมากขึ้นจะทำให้อุณหภูมิของคาร์บอนไดออกไซด์ภายในหัวฉีดลดลง ซึ่งสอดคล้องกับทฤษฎีของ throttling process

5.2 ข้อเสนอแนะ

เมื่อพิจารณาจากผลการจำลองกระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของสารละลายเหนือวิกฤต พบว่าโปรแกรมแบบจำลองที่พัฒนาขึ้น โดยใช้เทคนิคระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit finite difference technique) สามารถแสดงให้เห็นถึงอิทธิพลของอุณหภูมิขาเข้าของของไหลที่มีต่ออุณหภูมิของของไหลเมื่อถูกฉีดออกจากหัวฉีดได้อย่างชัดเจนในระดับหนึ่ง ในขณะที่โปรแกรมแบบจำลองที่พัฒนาขึ้น โดยใช้เทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit finite difference technique) จะให้ผลที่สอดคล้องกับผลการทดลองที่รายงานในเอกสารอ้างอิงได้เป็นอย่างดี ซึ่งสาเหตุอาจจะเป็นผลเนื่องมาจากประสิทธิภาพของโปรแกรมที่พัฒนาขึ้น เพราะโดยพื้นฐานแล้วค่าที่ได้จากทั้ง 2 เทคนิควิธีควรจะมีค่าที่ใกล้เคียงกัน ดังนั้นจึงไม่สามารถสรุปได้ว่าเทคนิคระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit finite difference technique) เป็นเทคนิควิธีที่ดีและเหมาะสมในการพิจารณากระบวนการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต และควรจะมีการพัฒนาและปรับปรุงโปรแกรมคอมพิวเตอร์ทั้ง 2 โปรแกรมที่ถูกพัฒนาขึ้นให้มีประสิทธิภาพในการจำลองกระบวนการดังกล่าวมากยิ่งขึ้นอีกด้วย

เอกสารอ้างอิง

1. Anderson, J.J. Computational Fluid Dynamics. International Ed, McGraw-Hill, 1995.
2. Bird, R.B., Stewart, W.E., and Lightfoot, E.N. Transport Phenomena. Wiley International Ed., 1960.
3. Cengel, A.Y. and Boles, M.A. Thermodynamics An Engineering Approach. Fourth Ed. McGraw-Hill, 2002.
4. Crowe C., Sommerfeld M., and Tsuji, Y. Multiphase Flows with Droplets and Particles. Florida: CRC Press, 1998.
5. Daizo Kunii and Octave Levenspiel. Fluidization Engineering-2nd ed. USA: Butterworth & Heinemann. a division of Reed Publishing, 1991.
6. Debenedetti, P.G. and Tom, J.W. Rapid Expansion of Supercritical Solutions (RESS): Fundamentals and applications. Fluid Phase Equilibria. 82(1993): 311-321.
7. Ferziger, J.H. and Peric M. Computational Methods for Fluid Dynamics. Second Revised Ed. Springer, 1999.
8. Imrie, B. W. Compressible Fluid Flow. London: Butterworths, 1973.
9. Ksibi, H. and Tenaud, C. Numerical simulation of rapid expansion of supercritical fluid. Eur. J. Mech. B/Fluids. 15(1996): 569-596.
10. Miquel F. Llop, Joaquim Casal and Josep Arnaldos. Expansion of gas-solid fluidized beds at pressure and high temperature. Powder Technology. 107(2000): 212-225.
11. Pallado, P. and Reverchon, E. Hydrodynamic Modeling of RESS Process. The Journal of Supercritical Fluids. 9(1996): 216-221.
- Patankar, S.V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
12. Rhodes M. Introduction to Particle Technology. England. Chichester: John Wiley & Sons, 1998.
13. Salatino, P., Poletto, M. and Massimilla, L. Fluidization of solids with CO₂ at pressures and temperatures ranging from ambient to nearly critical conditions. Chemical Engineering Science. 48(1993): 617-621.
14. Salatino, P. and Marzocchella, A. Fluidization of solids with CO₂ at pressures from ambient to supercritical. AIChE Journal. 46(5)(2000): 901-910.

15. Tsutsumi, A., Hasegawa, H., and Mineo, T. Mechanism of particle coating granulation with RESS process in a fluidized bed. *Powder Technology*. 118(2001): 229-235.
16. Versteeg, H.K. and Malalasekera, W. An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method. Longman Scientific & Technical, 1998.
17. Walas, Stanley M. Phase equilibria in chemical engineering. USA. Butterworth Publishing, 1985.
18. Welty, James R., Wicks, Charles E. and Wilson, Robert E. Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer. 3th ed. England. Chichester: John Willey & Sons, 1984.



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

เอกสารแนบ 1



THE COMPUTER PROGRAM
BY EXPLICIT FINITE DIFFERENCE TECHNIQUE

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

The Computer Program by Explicit Finite Difference Technique

The computer program, which use explicit finite difference technique, for determination of the velocity profiles, the temperature and pressure profiles of rapid expansion of supercritical solution process, especially near the nozzle area, are presented.

Table A.1 Objective of Subroutines

Subroutines	Objective
MAIN PROGRAM	Open files, Close files, Call Subroutines
CONST	Input all essential constant values, the grid size, maximum time step, iteration number and basic properties of the flow
IC	Input initial condition of system in the first interval time
IC_DATA	Input initial condition of system from the last interval
BC	Input boundary condition of system
DYNVIS	Evaluate the viscosity of the fluid in every single location at time 't' according to the Sutherland's law
THERMC	Evaluate thermal conductivity of the fluid in every single location at time 't' from the Prandtl number
MAC	Calculate various properties of the fluid : velocity, pressure, temperature and density of the fluid in every single location at time 't'
EOS	Calculate the density of fluid with the Equation of State
SORT	Sort the values of parameter

Table A.2 Description of Parameters

Parameters	Description
keizoku	Running status : continue running(1) or first time(0)
nmax	Maximum time steps of calculation
delz	Grid size in z-direction
dely	Grid size in y-direction
delt	Value of time step
R	Gas constant
vo	Inlet velocity of fluid
Gram	Ratio of specific heat
T0	Inlet temperature of fluid
P0	Inlet pressure of fluid
Visrf	Reference viscosity of fluid at reference temperature
Trf	Reference temperature fluid
Pr	Prandtl number
rho	Density of fluid
T	Temperature of fluid
Pre	Pressure of fluid
vy	Y-direction velocity of fluid
vz	Z-direction velocity of fluid
visco	Viscosity of fluid
k	Thermal conductivity of fluid

Table A.2 Description of Parameters (continue)

Parameters	Description
Tc	Critical temperature of CO ₂
Pc	Critical pressure of CO ₂
Zc	Critical compressible factor of CO ₂
Cv	Heat capacity of fluid at constant volume
Cp	Heat capacity of fluid at constant pressure

THIS PART IS THE MAIN PROGRAM FOR RESS SIMULATION
 CENTER OF EXCELLENCE IN PARTICLE TECHNOLOGY
 FACULTY OF ENGINEERING
 CHULALONGKORN UNIVERSITY

PROGRAM FOR RESS PROCESS USING EXPLICITFINITE DIFFERENCE

*---+---10---+---20---+---30---+---40---+---50---+---60---+---70-

MAIN PROGRAM
 IMPLICIT NONE
 integer nmax,n,keizoku
 common/timest/n,nmax


```

common/running/keizoku
open(unit=1,file='E:\ress\ress01.txt',status='unknown')
open(unit=2,file='E:\ress\ress02.txt',status='unknown')
open(unit=3,file='E:\ress\ress03.txt',status='unknown')
open(unit=4,file='E:\ress\ress04.txt',status='unknown')
open(unit=5,file='E:\ress\rs01.txt',status='unknown')
open(unit=6,file='E:\ress\rs02.txt',status='unknown')
open(unit=7,file='E:\ress\rs03.txt',status='unknown')
open(unit=8,file='E:\ress\rs04.txt',status='unknown')
open(unit=13,file='E:\ress\checktemp.txt',status='unknown')
open(unit=14,file='E:\ress\checkpre.txt',status='unknown')
open(unit=15,file='E:\ress\checkrho.txt',status='unknown')
call CONST
call EOS
if (keizoku.eq.0) then
    call IC
else
    call IC_DATA
end if
DO 10 n=1,nmax
    if (mod(n,10).eq.0) then
        write(*,*) 'itime=',n
    end if
    call BC
    call DYNVIS
    call THERMC
    call MAC
10 continue
close(unit=1)

```

```

close(unit=2)
close(unit=3)
close(unit=4)
close(unit=5)
close(unit=6)
close(unit=7)
close(unit=8)
close(unit=13)
close(unit=14)
close(unit=15)
stop
end

```

Subroutine CONST

IMPLICIT NONE

integer cmax,qmax,nmax,n,keizoku

parameter(cmax=25,qmax=101)

double precision delt,dely,delz,vo,T0,P0,rho0,V0,Pr,

& R,visrf,Trf,Gram

common/CELLSIZE/dely,delz

common/TIME_STEP/delt

common/CO2_CONST/Pr,visrf,Trf,Gram

common/SUPERFICIAL/vo

common/CO2_IN/T0,P0,rho0,V0

common/CO2/R

common/timest/n,nmax

common/running/keizoku

```

keizoku=0           ! continue running(1) or first time(0)
nmax=7000          ! maximum time steps of calculation
delz=0.40d-4       ! Grid size in z-direction
dely=0.10d-4       ! Grid size in y-direction
delt=1.0d-11       ! value of time step
R=8.314*1000.0/44.01 ! specific gas constant of CO2
vo=10              ! inlet velocity of CO2
Gram=1.304         ! ratio of specific heat
T0=300.0           ! inlet temperature of CO2
P0=90.0d+5         ! inlet pressure of CO2
visrf=1.463d-4     ! reference viscosity of CO2 at Trf
Trf=293.0          ! reference Temperature
Pr=0.710           ! prandtl number
return
end

```

```

Subroutine IC
IMPLICIT NONE
integer cmax,qmax,p,q
double precision vy,vz,T,rho,pre
parameter(cmax=25,qmax=101)
common/CO2_DENSITY/rho(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_TEMP/T(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_VEL/vy(0:cmax,0:qmax),vz(0:cmax,0:qmax)
common/PRESS/pre(0:cmax,0:qmax)
DO 20 q=0,qmax
DO 20 p=0,cmax

```

```

rho(p,q)= 5.30778d-3
T(p,q)= 298.0
pre(p,q)= 1.0d+5
vy(p,q)= 0.0
vz(p,q)= 0.0
20 continue
return
end
Subroutine IC_DATA
IMPLICIT NONE
integer cmax,qmax,p,q
double precision vy,vz,T,rho,pre
parameter(cmax=25,qmax=101)

common/CO2_DENSITY/rho(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_TEMP/T(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_VEI/vy(0:cmax,0:qmax),vz(0:cmax,0:qmax)
common/PRESS/pre(0:cmax,0:qmax)
open(unit=9,file='E:\ress\rss01.txt',status='unknown')
open(unit=10,file='E:\ress\rss02.txt',status='unknown')
open(unit=11,file='E:\ress\rss03.txt',status='unknown')
open(unit=12,file='E:\ress\rss04.txt',status='unknown')
DO 30 q=1,qmax-1
DO 40 p=1,cmax-1
    read(9,*) T(p,q)
    read(10,*) pre(p,q)
    read(11,*) rho(p,q)
    read(12,*) vy(p,q),vz(p,q)
40 continue
40 continue

```

```

30 continue
close(unit=9)
close(unit=10)
close(unit=11)
close(unit=12)

return
end
Subroutine BC
IMPLICIT NONE
integer cmax,p,q,qmax
double precision pre,vo,vy,vz,P0,T0,rho0,rho,T,V0
parameter(cmax=25,qmax=101)
common/SUPERFICIAL/vo
common/CO2_VEI/vy(0:cmax,0:qmax),vz(0:cmax,0:qmax)
common/PRESS/pre(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_IN/T0,P0,rho0,V0
common/CO2_DENSITY/rho(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_TEMP/T(0:cmax,0:qmax)
DO 50 q=21,qmax
    T(0,q)=T(1,q)
    pre(0,q)=pre(1,q)
    vy(0,q)=vy(1,q)
    vz(0,q)=vz(1,q)
    rho(0,q)=rho(1,q)
    T(cmax,q)=T(cmax-1,q)
    pre(cmax,q)=pre(cmax-1,q)
    vy(cmax,q)=vy(cmax-1,q)
    vz(cmax,q)=vz(cmax-1,q)

```


$$\rho(c_{\max}, q) = \rho(c_{\max} - 1, q)$$

50 continue

DO 90 $p=0, c_{\max}$

$$T(p, q_{\max}) = T(p, q_{\max} - 1)$$

$$pre(p, q_{\max}) = pre(p, q_{\max} - 1)$$

$$v_y(p, q_{\max}) = v_y(p, q_{\max} - 1)$$

$$v_z(p, q_{\max}) = v_z(p, q_{\max} - 1)$$

$$\rho(p, q_{\max}) = \rho(p, q_{\max} - 1)$$

90 continue

DO 100 $q=0, 20$

DO 110 $p=0, 10$

$$T(p, q) = T_0$$

$$pre(p, q) = P_0$$

$$v_y(p, q) = 0.0$$

$$v_z(p, q) = 0.0$$

$$\rho(p, q) = \rho_0$$

110 continue

DO 120 $p=15, c_{\max}$

$$T(p, q) = T_0$$

$$pre(p, q) = P_0$$

$$v_y(p, q) = 0.0$$

$$v_z(p, q) = v_0$$

$$\rho(p, q) = \rho_0$$

120 continue

100 continue

DO 130 $p=11, 14$

$$T(p, 0) = T_0$$

$$pre(p, 0) = P_0$$

$$v_y(p, 0) = 0.0$$



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

```

      vz(p,0)=0.0
      rho(p,0)=rho0

```

```

130 continue

```

```

return

```

```

end

```

```

Subroutine DYNVIS

```

```

IMPLICIT NONE

```

```

double precision visco,T,visrf,Trf,Gram,Pr

```

```

integer cmax,p,q,qmax

```

```

parameter(cmax=25,qmax=101)

```

```

common/CO2_VIS/visco(0:cmax,0:qmax)

```

```

common/CO2_CONST/Pr,visrf,Trf,Gram

```

```

common/CO2_TEMP/T(0:cmax,0:qmax)

```

```

DO 110 p=0,cmax

```

```

DO 110 q=0,qmax

```

```

      visco(p,q)=visrf*((T(p,q)/Trf)**1.5)*((Trf+110.0)/(T(p,q)+110.0))

```

```

110 continue

```

```

return

```

```

end

```

```

*****

```

```

Subroutine THERMC

```

```

IMPLICIT NONE

```

```

double precision T,Cp,Cv,Gram,a,b,c,d,k,visrf,Trf,Pr,visco

```

```

integer cmax,p,q,qmax

```

```

parameter(cmax=25,qmax=101)
common/CO2_TEMP/T(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_THER/k(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_CONST/Pr,visrf,Trf,Gram
common/CO2_VIS/visco(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_HEAT/Cv(0:cmax,0:qmax),Cp(0:cmax,0:qmax)
a=22.26
b=5.981d-2
c=-3.501d-5
d=7.469d-9
DO 120 p=0,cmax
DO 120 q=0,qmax
      Cp(p,q)=(a+(b*T(p,q)))+(c*T(p,q)**2.0)+(d*T(p,q)**3.0)/44.01*1000
      Cv(p,q)=Cp(p,q)/Gram
      k(p,q)=visco(p,q)*Cp(p,q)/Pr
120 continue

return
end

```

Subroutine MAC

IMPLICIT NONE

integer cmax,qmax,p,q,nmax,n

parameter(cmax=25,qmax=101)

dimension A1(0:cmax,0:qmax),A2(0:cmax,0:qmax)

dimension A3(0:cmax,0:qmax),A5(0:cmax,0:qmax)

dimension B1(0:cmax,0:qmax),B2(0:cmax,0:qmax)

dimension B3(0:cmax,0:qmax),B5(0:cmax,0:qmax)

```

dimension C1(0:cmax,0:qmax),C2(0:cmax,0:qmax)
dimension C3(0:cmax,0:qmax),C5(0:cmax,0:qmax)
dimension U1(0:cmax,0:qmax),U2(0:cmax,0:qmax)
dimension U3(0:cmax,0:qmax),U5(0:cmax,0:qmax)
dimension dU1(0:cmax,0:qmax),dU2(0:cmax,0:qmax)
dimension dU3(0:cmax,0:qmax),dU5(0:cmax,0:qmax)
double precision delt,dely,delz,rho,R,vy,vz,T,Cv,Cp,k,pre,vo,
&          A1,A2,A3,A5,B1,B2,B3,B5,U1,U2,U3,U5,
&          C1,C2,C3,C5,dU1,dU2,dU3,dU5
common/timest/n,nmax
common/CELLSIZE/dely,delz
common/CO2_THER/k(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_DENSITY/rho(0:cmax,0:qmax)
common/PRESS/pre(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_VEI/vy(0:cmax,0:qmax),vz(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_TEMP/T(0:cmax,0:qmax)
common/CO2_HEAT/Cv(0:cmax,0:qmax),Cp(0:cmax,0:qmax)
common/TIME_STEP/delt
common/CO2/R
common/SUPERFICIAL/vo
DO 130 q=1,qmax-1
DO 140 p=1,cmax-1

***** Predicted *****
      U1(p,q)=rho(p,q)
      U2(p,q)=vy(p,q)*rho(p,q)
      U3(p,q)=vz(p,q)*rho(p,q)
      U5(p,q)=(rho(p,q)*T(p,q)*Cv(p,q))+(rho(p,q)
&          *(vy(p,q)**2.0+vz(p,q)**2.0)/2.0)

```


$$\begin{aligned}
& A1(p,q) = -(\rho(p,q) * (v_y(p+1,q) - v_y(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (v_y(p,q) * (\rho(p+1,q) - \rho(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (\rho(p,q) * (v_z(p,q+1) - v_z(p,q)) / \text{delz}) \\
& \& \quad - (v_z(p,q) * (\rho(p,q+1) - \rho(p,q)) / \text{delz}) \\
& A2(p,q) = -(2.0 * \rho(p,q) * v_y(p,q) * (v_y(p+1,q) - v_y(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - ((v_y(p,q) ** 2.0) * (\rho(p+1,q) - \rho(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (\rho(p,q) * R * (T(p+1,q) - T(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (T(p,q) * R * (\rho(p+1,q) - \rho(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (\rho(p,q) * v_z(p,q) * (v_y(p,q+1) - v_y(p,q)) / \text{delz}) \\
& \& \quad - (\rho(p,q) * v_y(p,q) * (v_z(p,q+1) - v_z(p,q)) / \text{delz}) \\
& \& \quad - (v_y(p,q) * v_z(p,q) * (\rho(p,q+1) - \rho(p,q)) / \text{delz}) \\
& A3(p,q) = -(\rho(p,q) * v_y(p,q) * (v_z(p+1,q) - v_z(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (\rho(p,q) * v_z(p,q) * (v_y(p+1,q) - v_y(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (v_y(p,q) * v_z(p,q) * (\rho(p+1,q) - \rho(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (2.0 * \rho(p,q) * v_z(p,q) * (v_z(p,q+1) - v_z(p,q)) / \text{delz}) \\
& \& \quad - ((v_z(p,q) ** 2.0) * (\rho(p,q+1) - \rho(p,q)) / \text{delz}) \\
& \& \quad - (\rho(p,q) * R * (T(p,q+1) - T(p,q)) / \text{delz}) \\
& \& \quad - (T(p,q) * R * (\rho(p,q+1) - \rho(p,q)) / \text{delz}) \\
& A5(p,q) = -(\rho(p,q) * v_y(p,q) * T(p,q) * (C_v(p+1,q) - C_v(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (\rho(p,q) * v_y(p,q) * C_v(p,q) * (T(p+1,q) - T(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (\rho(p,q) * T(p,q) * C_v(p,q) * (v_y(p+1,q) - v_y(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - (v_y(p,q) * C_v(p,q) * T(p,q) * (\rho(p+1,q) - \rho(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - ((1.5) * \rho(p,q) * (v_y(p,q) ** 2.0) * (v_y(p+1,q) - v_y(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - ((0.5) * (v_y(p,q) ** 3.0) * (\rho(p+1,q) - \rho(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - ((0.5) * \rho(p,q) * (v_z(p,q) ** 2.0) * (v_y(p+1,q) - v_y(p,q)) / \text{dely}) \\
& \& \quad - ((0.5) * v_y(p,q) * (v_z(p,q) ** 2.0) * (\rho(p+1,q) - \rho(p,q)) / \text{dely})
\end{aligned}$$


```

&      -(rho(p,q)*vy(p,q)*vz(p,q)*(vz(p+1,q)-vz(p,q))/dely)
&      -(rho(p,q)*vy(p,q)*R*(T(p+1,q)-T(p,q))/dely)
&      -(rho(p,q)*T(p,q)*R*(vy(p+1,q)-vy(p,q))/dely)
&      -(vy(p,q)*T(p,q)*R*(rho(p+1,q)-rho(p,q))/dely)
&      +(k(p,q)*(T(p+1,q)-T(p,q))/(dely**2.0))
&      -(rho(p,q)*vz(p,q)*T(p,q)*(Cv(p,q+1)-Cv(p,q))/delz)
&      -(rho(p,q)*vz(p,q)*Cv(p,q)*(T(p,q+1)-T(p,q))/delz)
&      -(rho(p,q)*T(p,q)*Cv(p,q)*(vz(p,q+1)-vz(p,q))/delz)
&      -(vz(p,q)*Cv(p,q)*T(p,q)*(rho(p,q+1)-rho(p,q))/delz)
&      -((0.5)*vz(p,q)*(vy(p,q)**2.0)*(rho(p,q+1)-rho(p,q))/delz)
&      -((0.5)*rho(p,q)*(vy(p,q)**2.0)*(vz(p,q+1)-vz(p,q))/delz)
&      -(vz(p,q)*vy(p,q)*rho(p,q)*(vy(p,q+1)-vy(p,q))/delz)
&      -((0.5)*(vz(p,q)**3.0)*(rho(p,q+1)-rho(p,q))/delz)
&      -((1.5)*rho(p,q)*(vz(p,q)**2.0)*(vz(p,q+1)-vz(p,q))/delz)
&      -(rho(p,q)*vz(p,q)*R*(T(p,q+1)-T(p,q))/delz)
&      -(rho(p,q)*T(p,q)*R*(vz(p,q+1)-vz(p,q))/delz)
&      -(vz(p,q)*T(p,q)*R*(rho(p,q+1)-rho(p,q))/delz)
&      +(k(p,q)*(T(p,q+1)-T(p,q))/(delz**2.0))

```

***** U' at t + dt *****

$$U1(p,q)=U1(p,q)+(A1(p,q)*delt)$$

$$U2(p,q)=U2(p,q)+(A2(p,q)*delt)$$

$$U3(p,q)=U3(p,q)+(A3(p,q)*delt)$$

$$U5(p,q)=U5(p,q)+(A5(p,q)*delt)$$

$$\rho(p,q)=U1(p,q)$$

$$vy(p,q)=U2(p,q)/U1(p,q)$$

$$vz(p,q)=U3(p,q)/U1(p,q)$$

$$T(p,q)=((U5(p,q)/U1(p,q))-(0.5*(vy(p,q)**2$$

```

&      +vz(p,q)**2)))/Cv(p,q)

```

$$\text{pre}(p,q)=\text{rho}(p,q)*R*T(p,q)$$

***** Rearward Difference *****

$$C1(p,q)=-(\text{rho}(p,q)*(\text{vy}(p,q)-\text{vy}(p-1,q))/\text{dely})$$

$$\begin{aligned} & \& -(\text{vy}(p,q)*(\text{rho}(p,q)-\text{rho}(p-1,q))/\text{dely}) \\ & \& -(\text{rho}(p,q)*(\text{vz}(p,q)-\text{vz}(p,q-1))/\text{delz}) \\ & \& -(\text{vz}(p,q)*(\text{rho}(p,q)-\text{rho}(p,q-1))/\text{delz}) \end{aligned}$$

$$C2(p,q)=-(\text{2.0}*\text{rho}(p,q)*\text{vy}(p,q)*(\text{vy}(p,q)-\text{vy}(p-1,q))/\text{dely})$$

$$\begin{aligned} & \& -((\text{vy}(p,q)**\text{2.0})*(\text{rho}(p,q)-\text{rho}(p-1,q))/\text{dely}) \\ & \& -(\text{rho}(p,q)*R*(T(p,q)-T(p-1,q))/\text{dely}) \\ & \& -(T(p,q)*R*(\text{rho}(p,q)-\text{rho}(p-1,q))/\text{dely}) \\ & \& -(\text{rho}(p,q)*\text{vz}(p,q)*(\text{vy}(p,q)-\text{vy}(p,q-1))/\text{delz}) \\ & \& -(\text{rho}(p,q)*\text{vy}(p,q)*(\text{vz}(p,q)-\text{vz}(p,q-1))/\text{delz}) \\ & \& -(\text{vy}(p,q)*\text{vz}(p,q)*(\text{rho}(p,q)-\text{rho}(p,q-1))/\text{delz}) \end{aligned}$$

$$C3(p,q)=-(\text{rho}(p,q)*\text{vy}(p,q)*(\text{vz}(p,q)-\text{vz}(p-1,q))/\text{dely})$$

$$\begin{aligned} & \& -(\text{rho}(p,q)*\text{vz}(p,q)*(\text{vy}(p,q)-\text{vy}(p-1,q))/\text{dely}) \\ & \& -(\text{vy}(p,q)*\text{vz}(p,q)*(\text{rho}(p,q)-\text{rho}(p-1,q))/\text{dely}) \\ & \& -(\text{2.0}*\text{rho}(p,q)*\text{vz}(p,q)*(\text{vz}(p,q)-\text{vz}(p,q-1))/\text{delz}) \\ & \& -((\text{vz}(p,q)**\text{2.0})*(\text{rho}(p,q)-\text{rho}(p,q-1))/\text{delz}) \\ & \& -(\text{rho}(p,q)*R*(T(p,q)-T(p,q-1))/\text{delz}) \\ & \& -(T(p,q)*R*(\text{rho}(p,q)-\text{rho}(p,q-1))/\text{delz}) \end{aligned}$$

$$C5(p,q)=-(\text{rho}(p,q)*\text{vy}(p,q)*T(p,q)*(Cv(p,q)-Cv(p-1,q))/\text{dely})$$

$$\begin{aligned} & \& -(\text{rho}(p,q)*\text{vy}(p,q)*Cv(p,q)*(T(p,q)-T(p-1,q))/\text{dely}) \\ & \& -(\text{rho}(p,q)*T(p,q)*Cv(p,q)*(\text{vy}(p,q)-\text{vy}(p-1,q))/\text{dely}) \\ & \& -(\text{vy}(p,q)*Cv(p,q)*T(p,q)*(\text{rho}(p,q)-\text{rho}(p-1,q))/\text{dely}) \\ & \& -((\text{1.5})*\text{rho}(p,q)*(\text{vy}(p,q)**\text{2.0})*(\text{vy}(p,q)-\text{vy}(p-1,q))/\text{dely}) \end{aligned}$$

& $-\left(0.5\right) \cdot\left(v_y(p, q)\right)^{3.0} \cdot\left(\rho(p, q)-\rho(p-1, q)\right) / d e l y$
 & $-\left(0.5\right) \cdot \rho(p, q) \cdot\left(v_z(p, q)\right)^{2.0} \cdot\left(v_y(p, q)-v_y(p-1, q)\right) / d e l y$
 & $-\left(0.5\right) \cdot v_y(p, q) \cdot\left(v_z(p, q)\right)^{2.0} \cdot\left(\rho(p, q)-\rho(p-1, q)\right) / d e l y$
 & $-\left(\rho(p, q) \cdot v_y(p, q) \cdot v_z(p, q) \cdot\left(v_z(p, q)-v_z(p-1, q)\right)\right) / d e l y$
 & $-\left(\rho(p, q) \cdot v_y(p, q) \cdot R \cdot\left(T(p, q)-T(p-1, q)\right)\right) / d e l y$
 & $-\left(\rho(p, q) \cdot T(p, q) \cdot R \cdot\left(v_y(p, q)-v_y(p-1, q)\right)\right) / d e l y$
 & $-\left(v_y(p, q) \cdot T(p, q) \cdot R \cdot\left(\rho(p, q)-\rho(p-1, q)\right)\right) / d e l y$
 & $+ \left(k(p, q) \cdot\left(T(p, q)-T(p-1, q)\right)\right) / \left(d e l y^{2.0}\right)$
 & $-\left(\rho(p, q) \cdot v_z(p, q) \cdot T(p, q) \cdot\left(C_v(p, q)-C_v(p, q-1)\right)\right) / d e l z$
 & $-\left(\rho(p, q) \cdot v_z(p, q) \cdot C_v(p, q) \cdot\left(T(p, q)-T(p, q-1)\right)\right) / d e l z$
 & $-\left(\rho(p, q) \cdot T(p, q) \cdot C_v(p, q) \cdot\left(v_z(p, q)-v_z(p, q-1)\right)\right) / d e l z$
 & $-\left(v_z(p, q) \cdot C_v(p, q) \cdot T(p, q) \cdot\left(\rho(p, q)-\rho(p, q-1)\right)\right) / d e l z$
 & $-\left(0.5\right) \cdot v_z(p, q) \cdot\left(v_y(p, q)\right)^{2.0} \cdot\left(\rho(p, q)-\rho(p, q-1)\right) / d e l z$
 & $-\left(0.5\right) \cdot \rho(p, q) \cdot\left(v_y(p, q)\right)^{2.0} \cdot\left(v_z(p, q)-v_z(p, q-1)\right) / d e l z$
 & $-\left(v_z(p, q) \cdot v_y(p, q) \cdot \rho(p, q) \cdot\left(v_y(p, q)-v_y(p, q-1)\right)\right) / d e l z$
 & $-\left(0.5\right) \cdot\left(v_z(p, q)\right)^{3.0} \cdot\left(\rho(p, q)-\rho(p, q-1)\right) / d e l z$
 & $-\left(1.5\right) \cdot \rho(p, q) \cdot\left(v_z(p, q)\right)^{2.0} \cdot\left(v_z(p, q)-v_z(p, q-1)\right) / d e l z$
 & $-\left(\rho(p, q) \cdot v_z(p, q) \cdot R \cdot\left(T(p, q)-T(p, q-1)\right)\right) / d e l z$
 & $-\left(\rho(p, q) \cdot T(p, q) \cdot R \cdot\left(v_z(p, q)-v_z(p, q-1)\right)\right) / d e l z$
 & $-\left(v_z(p, q) \cdot T(p, q) \cdot R \cdot\left(\rho(p, q)-\rho(p, q-1)\right)\right) / d e l z$
 & $+ \left(k(p, q) \cdot\left(T(p, q)-T(p, q-1)\right)\right) / \left(d e l z^{2.0}\right)$

***** (dU/dt)av *****

$$dU1(p, q) = (A1(p, q) + C1(p, q)) / 2.0$$

$$dU2(p, q) = (A2(p, q) + C2(p, q)) / 2.0$$

$$dU3(p, q) = (A3(p, q) + C3(p, q)) / 2.0$$

$$dU5(p, q) = (A5(p, q) + C5(p, q)) / 2.0$$

***** Corrected *****

```

    U1(p,q)=U1(p,q)+(dU1(p,q)*delt)
    U2(p,q)=U2(p,q)+(dU2(p,q)*delt)
    U3(p,q)=U3(p,q)+(dU3(p,q)*delt)
    U5(p,q)=U5(p,q)+(dU5(p,q)*delt)
    rho(p,q)=U1(p,q)
    vy(p,q)=U2(p,q)/U1(p,q)
    vz(p,q)=U3(p,q)/U1(p,q)
    T(p,q)=((U5(p,q)/U1(p,q))-(0.5*(vy(p,q)**2.0
&          +vz(p,q)**2.0)))/Cv(p,q)
if (mod(n,500).eq.0) then
    write(*,*) T(p,q)
end if
if (mod(n,1000).eq.0) then
    write(1,*) T(p,q),p,q
    write(2,*) pre(p,q),p,q
    write(3,*) rho(p,q),p,q
    write(4,*) vy(p,q),vz(p,q),p,q
end if
if (n.EQ.nmax) then
    write(5,*) T(p,q),p,q
    write(6,*) pre(p,q),p,q
    write(7,*) rho(p,q),p,q
    write(8,*) vy(p,q),vz(p,q),p,q
end if
140 continue
130 continue
DO 300 q=1,qmax-1
DO 400 p=12,12

```

```

    if (mod(n,500).eq.0) then
        write(13,*) T(p,q),p,q
        write(14,*) pre(p,q),p,q
        write(15,*) rho(p,q),p,q
    end if
400 continue
300 continue
return
end
Subroutine EOS
IMPLICIT NONE
double precision aa,bb,cc,dd,f,g,h,pp,qq,ppp,qqq,rr,rrr,
&          v3,z,ss,sss,y,u,V,w,v1,v2,X,R,Tc,Pc,V0,
&          Zc,rho0,T0,P0,M,lpa,lpo,A,B,xx,P
common/CO2_IN/T0,P0,rho0,V0
common/VOL_fluid/v1,v2,v3,V
R=8.3144          ! Gas constant
Tc=304.2          ! Critical temperature of CO2
Pc=72.9d+5        ! Critical pressure of CO2
Zc=0.277          ! Critical compressible of CO2
lpa=3.996
lpo=1.1717
M=44.01/1000.0
xx=1.0/3.0
P=P0/1.0d+5
W=(0.2905-Zc)/0.085
X=(1.0+(0.48508+(1.5517*W)-(0.15613*W**2))*(1-(T0/Tc)**0.5))**2.0
A=0.42747*(R**2.0)*(Tc**2.0)/Pc
B=0.08664*R*Tc/Pc

```



```

aa=P
bb=-(R*T0)
cc=-(P*B**2.0)-(B*R*T0)+(A*X)
dd=-(A*X*B)
f=((3.0*cc/aa)-(bb**2.0/aa**2.0))/3.0
g=((2.0*bb**3.0/aa**3.0)-(9.0*bb*cc/aa**2.0)+(27.0*dd/aa))/27.0
h=((g**2.0/4.0)+(f**3.0/27.0))
if (h.LT.0) then
    pp=(((g**2.0)/4.0)-h)**0.5
    qq=pp**xx
    z=-(g/(2.0*pp))
    rr=acos(z)
    ss=qq*(-1.0)
    y=cos(rr/3.0)
    u=(3**0.5)*sin(rr/3.0)
    w=(bb/(3.0*aa))*(-1.0)
    v1=(2.0*qq*cos(rr/3.0))-(bb/(3.0*aa))
    v2=(ss*(y+u))+w
    v3=(ss*(y-u))+w
    call SORT
else if (h.GT.0) then
    ppp=(h**0.5)-(g/2.0)
    qqq=ppp**xx
    rrr=(h**0.5)+(g/2.0)
    if (rrr.GT.0) then
        sss=rrr**xx
        V=qqq-sss-(bb/(3.0*aa))
    else
        sss=(-rrr)**xx

```

```

        V=qqq-sss-(bb/(3.0*aa))
    end if
else
    V=-(dd/aa)**xx
end if
V0=V
rho0=M/V
return
end
Subroutine SORT
IMPLICIT NONE
double precision v1,v2,v3,V
common/VOL_fluid/v1,v2,v3,V
if (v1.LT.0.0) go to 150
    V=v1
    if (v2.LT.V) then
        V=v2
    end if
    if (v3.LT.V) then
        V=v3
    end if
150 if (v2.GT.0.0) then
    if (v3.GT.0.0) then
        V=v2
        if (v3.LT.V) then
            V=v3
        end if
    end if
end if
else if (v3.GT.0.0) then

```

```
V=v3  
else  
    write(1,*) ' Error .. have no positive root'  
end if  
return  
end
```



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

เอกสารแนบ 2



THE COMPUTER PROGRAM

BY IMPLICIT FINITE DIFFERENCE TECHNIQUE

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

The Computer Program by Implicit Finite Difference Technique

The computer program, which use implicit finite difference technique, for determination of the velocity profiles, the temperature and pressure profiles of rapid expansion of supercritical solution process, especially near the nozzle area, are presented.

Table B.1 Objective of Subroutines

Subroutines	Objective
MAIN PROGRAM	Call Subroutines
O_FILE	Open files
C_FLIE	Close files
CONST	Input all essential constant values, the grid size, maximum time step, iteration number and basic properties of the flow
INITIAL	Input initial condition of system in the first interval time
INITIAL_SAVE	Input initial condition of system from the last interval
FLUID	Call subroutines for calculating the fluid flow
BC	Input boundary condition of system
MEM	Storage the value of fluid properties: temperature, pressure, density and velocity
MEM_PRE	Storing Previous Pressure values for next loop
EOS	Calculate the density of fluid with the Equation of State
SORT	Sort the values of parameter

Table B.1 Objective of Subroutines (continue)

Subroutines	Objective
AP_BC	Calculation of Coefficient (ap) on Boundary
MOMENTUM	Calculation of fluid velocity
CON_DEN	Calculation of fluid density
HEAT	Evaluate the heat capacity and thermal conductivity of the fluid in every single location at time 't'
ENERGY	Calculation of fluid temperature
PRESSURE	Calculation of fluid pressure
ERROR	Checking the conservation of mass in each cell
TDMA	TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm)
SAVEDATA	Saving the calculated fluid properties

Table B.2 Description of Parameters

Parameters	Description
keizoku	Running status : continue running(1) or first time(0)
interval	Maximum time steps of calculation
delx	Grid size in x-direction
dely	Grid size in y-direction
delt	Value of time step
R	Gas constant

Table B.2 Description of Parameters (continue)

Parameters	Description
vo	Inlet velocity of fluid
Gram	Ratio of specific heat
Tin	Inlet temperature of fluid
prein	Inlet pressure of fluid
rhoin	Inlet density of fluid
Visrf	Reference viscosity of fluid at reference temperature
Trf	Reference temperature fluid
Pr	Prandtl number
alpha	
rho	Density of fluid
T	Temperature of fluid
Pre	Pressure of fluid
vy	Y-direction velocity of fluid
vx	X-direction velocity of fluid
visco	Viscosity of fluid
k	Thermal conductivity of fluid
Tc	Critical temperature of CO ₂
Pc	Critical pressure of CO ₂
Zc	Critical compressible factor of CO ₂

Table B.2 Description of Parameters (continue)

Parameters	Description
Cv	Heat capacity of fluid at constant volume
Cp	Heat capacity of fluid at constant pressure

```

*****
PROGRAM FOR RESS PROCESS USING IMPLICITFINITE DIFFERENCE
*****
---+---10---+---20---+---30---+---40---+---50---+---60---+---70-
*****

Main Program
implicit none
integer n,interval,keizoku
common/running/keizoku
common/timest/n,interval
call CONSTANT
call O_FILE
if (keizoku.eq.0) then
    call INITIAL
else
    call INITIAL_SAVE
end if
do 100 n=1,interval
    if (mod(n,5).eq.0) then
        write (*,*) 'interval time =',n
    
```



```
        end if
        call FLUID
        call SAVEDATA
100  continue
call C_FILE
```

```
stop
end
```

```
*****
```

```
Subroutine O_FILE
```

```
implicit none
```

```
open(unit=1,file='E:\ress\ress01.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=2,file='E:\ress\ress02.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=3,file='E:\ress\ress03.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=4,file='E:\ress\ress04.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=5,file='E:\ress\rs01.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=6,file='E:\ress\rs02.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=7,file='E:\ress\rs03.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=8,file='E:\ress\rs04.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=13,file='E:\ress\checktemp.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=14,file='E:\ress\checkpre.txt',status='unknown')
```

```
open(unit=15,file='E:\ress\checkrho.txt',status='unknown')
```

```
return
```

```
end
```


Subroutine C_FILE

implicit none

close(unit=1)

close(unit=2)

close(unit=3)

close(unit=4)

close(unit=5)

close(unit=6)

close(unit=7)

close(unit=8)

close(unit=13)

close(unit=14)

close(unit=15)

return

end

Subroutine CONSTANT

implicit none

integer xmax,ymax,interval,keizoku,n

parameter(xmax=25,ymax=521)

double precision delt,delx,dely,vo,Tin,prein,alpha,

& R,Pr,visrf,Trf,Gram,rhoIn

common/CELLSIZE/delx,dely

common/TIME_STEP/delt

common/SUPERFICIAL/vo

```
common/CO2_IN/Tin,prein,rhoin
common/CO2/R
common/timest/n,interval
common/running/keizoku
common/ALPHA/alpha
common/CO2_CONST/Pr,visrf,Trf,Gram
interval=15000
keizoku=0
delt=1.0d-13
delx=0.10d-4
dely=0.40d-4
Tin=413.0
prein=260.0d+5
rhoin=0.460395
R=8.314*1000.0/44.01
alpha=0.05
Pr=0.710
visrf=1.463d-4
Trf=293.0
Gram=1.3040
vo=0

return
end
```



ศูนย์วิทยทรัพยากร

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

```

Subroutine INITIAL
implicit none
integer xmax,ymax,x,y
double precision vx,vy,T,rho,pre
parameter(xmax=25,ymax=521)
common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_TEMP/T(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_VEL/vx(0:xmax,0:ymax),vy(0:xmax,0:ymax)
common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)
DO 100 y=1,ymax-1
DO 200 x=1,xmax-1
    rho(x,y)= 5.30778d-3
    T(x,y)= 298.0
    pre(x,y)= 1.0d+5
    vx(x,y)= 0.0
    vy(x,y)= 0.0
200 continue
100 continue
return
end

```

```

Subroutine INITIAL_SAVE
implicit none
integer xmax,ymax,x,y
double precision vx,vy,T,rho,pre
parameter(xmax=25,ymax=521)
common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)

```

```

common/CO2_TEMP/T(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_VEI/vx(0:xmax,0:ymax),vy(0:xmax,0:ymax)
common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)
open(unit=9,file='E:\ress\rss01.txt',status='unknown')
open(unit=10,file='E:\ress\rss02.txt',status='unknown')
open(unit=11,file='E:\ress\rss03.txt',status='unknown')
open(unit=12,file='E:\ress\rss04.txt',status='unknown')
DO 100 y=1,ymax-1
DO 200 x=1,xmax-1
    read(9,*) T(x,y)
    read(10,*) pre(x,y)
    read(11,*) rho(x,y)
    read(12,*) vx(x,y),vy(x,y)
200 continue
100 continue
close(unit=9)
close(unit=10)
close(unit=11)
close(unit=12)
return
end

```

Subroutine FLUID

implicit none

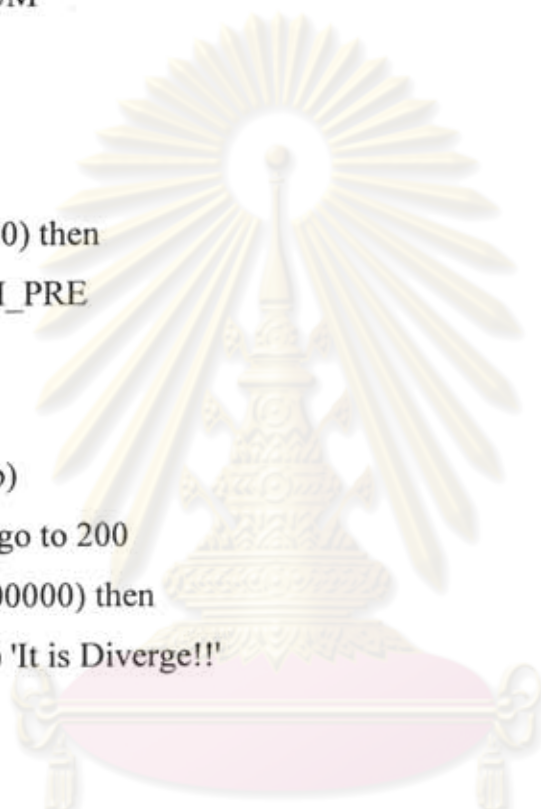
integer iteration

double precision bbb

common/iterate/iteration

```
call BC
call HEAT
call MEM
iteration=0
100 iteration=iteration+1
call AP_BC
call MOMENTUM
call CON_DEN
call HEAT
call ENERGY
if (iteration.eq.1.0) then
    call MEM_PRE
end if
call PRESSURE
call ERROR(bbb)
if (bbb.lt.100.0) go to 200
if (iteration.gt.100000) then
    write(*,*) 'It is Diverge!!'
    stop
end if
call MEM_PRE
call BC
go to 100
200 continue

return
end
```



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Subroutine BC

implicit none

integer xmax,ymax,x,y

double precision vx,vy,T,rho,pre,vo,Tin,prein,rhoIn,dely,dely,delt

parameter(xmax=25,ymax=521)

common/CELLSIZE/delx,dely

common/TIME_STEP/delt

common/SUPERFICIAL/vo

common/CO2_IN/Tin,prein,rhoIn

common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_TEMP/T(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_VEI/vx(0:xmax,0:ymax),vy(0:xmax,0:ymax)

common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)

DO 50 y=21,ymax

 T(0,y)=T(1,y)

 pre(0,y)=pre(1,y)

 vx(0,y)=vx(1,y)

 vy(0,y)=vy(1,y)

 rho(0,y)=rho(1,y)

 T(xmax,y)=T(xmax-1,y)

 pre(xmax,y)=pre(xmax-1,y)

 vx(xmax,y)=vx(xmax-1,y)

 vy(xmax,y)=vy(xmax-1,y)

 rho(xmax,y)=rho(xmax-1,y)

50 continue

DO 90 x=0,xmax

 T(x,ymax)=T(x,ymax-1)

 pre(x,ymax)=pre(x,ymax-1)

 vx(x,ymax)=vx(x,ymax-1)

```
vy(x,ymax)=vy(x,ymax-1)  
rho(x,ymax)=rho(x,ymax-1)
```

```
90 continue
```

```
DO 100 y=0,20
```

```
DO 110 x=0,10
```

```
    T(x,y)=Tin
```

```
    pre(x,y)=prein
```

```
    vx(x,y)=0.0
```

```
    vy(x,y)=0.0
```

```
    rho(x,y)=rhoin
```

```
110 continue
```

```
DO 120 x=15,xmax
```

```
    T(x,y)=Tin
```

```
    pre(x,y)=prein
```

```
    vx(x,y)=0.0
```

```
    vy(x,y)=0.0
```

```
    rho(x,y)=rhoin
```

```
120 continue
```

```
100 continue
```

```
DO 130 x=11,14
```

```
    T(x,0)=Tin
```

```
    pre(x,0)=prein
```

```
    vx(x,0)=0.0
```

```
    vy(x,0)=0.0
```

```
    rho(x,0)=rhoin
```

```
130 continue
```

```
return
```

```
end
```

Subroutine MEM

implicit none

integer xmax,ymax,x,y

double precision vx,vy,T,rho,pre,vx0,vy0,T0,pre0,rho0,

& Cv,Cv0,Cp,Cp0

parameter(xmax=25,ymax=521)

common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_TEMP/T(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_VEI/vx(0:xmax,0:ymax),vy(0:xmax,0:ymax)

common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_HEAT/Cv(0:xmax,0:ymax),Cp(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_DENSITY0/rho0(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_TEMP0/T0(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_VEI0/vx0(0:xmax,0:ymax),vy0(0:xmax,0:ymax)

common/PRESS0/pre0(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_HEAT0/Cv0(0:xmax,0:ymax),Cp0(0:xmax,0:ymax)

do 100 y=0,ymax

do 200 x=0,xmax

T0(x,y)=T(x,y)

pre0(x,y)=pre(x,y)

rho0(x,y)=rho(x,y)

vx0(x,y)=vx(x,y)

vy0(x,y)=vy(x,y)

Cv0(x,y)=Cv(x,y)

200 continue

100 continue

return

end

Subroutine MEM_PRE

implicit none

integer xmax,ymax,x,y

double precision prelp,pre

parameter(xmax=25,ymax=521)

common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)

common/PRESSLOOP/prelp(0:xmax,0:ymax)

do 100 y=0,ymax

do 200 x=0,xmax

 prelp(x,y)=pre(x,y)

200 continue

100 continue

return

end

Subroutine EOS

implicit none

integer xmax,ymax,x,y

parameter(xmax=25,ymax=521)

double precision aa,bb,cc,dd,f,g,h,pp,qq,ppp,qqq,rr,rrr,

& v3,z,ss,sss,yy,u,V,ww,v1,v2,xxx,R,Tc,Pc,

& Zc,rho,T,pre,M,A,B,xx,P,W

common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)

common/CO2_TEMP/T(0:xmax,0:ymax)

common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)

common/VOL_fluid/v1,v2,v3,V

```

do 100 y=1,ymax-1
do 200 x=1,xmax-1
R=83.144           ! Gas constant
Tc=304.2          ! Critical temperature of CO2
Pc=72.9           ! Critical pressure of CO2
Zc=0.277          ! Critical compressible of CO2
M=44.01
xx=1.0/3.0
P=pre(x,y)/1.0d+5
W=(0.2905-Zc)/0.085
xxx=(1.0+(0.48508+(1.5517*W)-(0.15613*W**2))*(1-(T(x,y)
&          /Tc)**0.5))**2.0
A=0.42748*(R**2.0)*(Tc**2.0)/Pc
B=0.08664*R*Tc/Pc
aa=P
bb=-(R*T(x,y))
cc=-(P*B**2.0)-(B*R*T(x,y))+(A*xxx)
dd=-(A*xxx*B)
f=((3.0*cc/aa)-(bb**2.0/aa**2.0))/3.0
g=((2.0*bb**3.0/aa**3.0)-(9.0*bb*cc/aa**2.0)+(27.0*dd/aa))/27.0
h=((g**2.0/4.0)+(f**3.0/27.0))
if (h.LT.0) then
    pp=(((g**2.0)/4.0)-h)**0.5
    qq=pp**xx
    z=-(g/(2.0*pp))
    rr=dacos(z)
    ss=qq*(-1.0)
    yy=dcos(rr/3.0)
    u=(3**0.5)*dsin(rr/3.0)

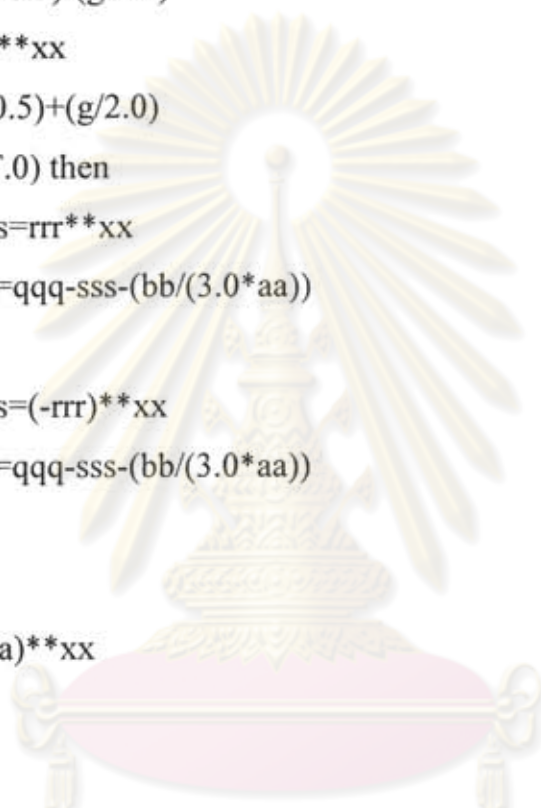
```



```

ww=(bb/(3.0*aa))*(-1.0)
v1=(2.0*qq*dcos(rr/3.0))-(bb/(3.0*aa))
v2=(ss*(y+u))+ww
v3=(ss*(y-u))+ww
call SORT
else if (h.GT.0) then
  ppp=(h**0.5)-(g/2.0)
  qq=ppp**xx
  rrr=(h**0.5)+(g/2.0)
  if (rrr.GT.0) then
    sss=rrr**xx
    V=qqq-sss-(bb/(3.0*aa))
  else
    sss=(-rrr)**xx
    V=qqq-sss-(bb/(3.0*aa))
  end if
else
  V=-((dd/aa)**xx)
end if
rho(x,y)=M/V
200 continue
100 continue
return
end

```



 ศูนย์วิทยทรัพยากร
 จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

```
Subroutine SORT
implicit none
double precision v1,v2,v3,V
common/VOL_fluid/v1,v2,v3,V
if (v1.LT.0.0) go to 100
    V=v1
if (v2.LT.V) then
    V=v2
end if
if (v3.LT.V) then
    V=v3
end if
100 if (v2.GT.0.0) then
    if (v3.GT.0.0) then
        V=v2
        if (v3.LT.V) then
            V=v3
        end if
    end if
else if (v3.GT.0.0) then
    V=v3
else
    write(1,*) ' Error .. have no positive root'
end if

return
end
```

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

```

Subroutine AP_BC
implicit none
integer x,y,xmax,ymax
parameter(xmax=25,ymax=521)
double precision an,ae,aw,as,apx,apy,fe,fw,fn,fs,
&          vx,vy,dely,delx,delt,rho
common/COEF/apx(0:xmax,0:ymax),apy(0:xmax,0:ymax)
common/CELLSIZE/delx,dely
common/TIME_STEP/delt
common/CO2_VEI/vx(0:xmax,0:ymax),vy(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)

***** Coefficient(ap) of left and right hand side *****
do 100 y=1,ymax-1
  fe=0.0
  fw=0.0
  fn=rho(1,y)*(vy(0,y)+vy(1,y))*0.5*delx
  fs=rho(1,y-1)*(vy(1,y-1)+vy(2,y-1))*0.5*delx
  ae=dmax1(-fe,0.0d+0)
  aw=dmax1(fw,0.0d+0)
  an=dmax1(-fn,0.0d+0)
  as=dmax1(fs,0.0d+0)
  apx(1,y)=ae+aw+an+as+delx*dely/delt
  fe=rho(xmax,y)*(vx(xmax-1,y)+vx(xmax,y))*0.5*dely
  fw=rho(xmax-1,y)*(vx(xmax-2,y)+vx(xmax-1,y))*0.5*dely
  fn=rho(xmax,y)*(vy(xmax-1,y)+vy(xmax,y))*0.5*delx
  fs=rho(xmax,y-1)*(vy(xmax-1,y-1)+vy(xmax,y-1))*0.5*delx
  ae=dmax1(-fe,0.0d+0)
  aw=dmax1(fw,0.0d+0)

```

```

an=dmax1(-fn,0.0d+0)
as=dmax1(fs,0.0d+0)
apx(xmax-1,y)=ae+aw+an+as+delx*dely/delt
100 continue

*****Coefficient (ap) of lower boundary *****
do 200 x=1,xmax-1
  fe=rho(x,1)*(vx(x,0)+vx(x,1))*0.5*dely
  fw=rho(x-1,1)*(vx(x-1,0)+vx(x-1,1))*0.5*dely
  fn=0.0
  fs=0.0
  ae=dmax1(-fe,0.0d+0)
  aw=dmax1(fw,0.0d+0)
  an=dmax1(-fn,0.0d+0)
  as=dmax1(fs,0.0d+0)
  apy(x,1)=ae+aw+an+as+delx*dely/delt
200 continue
return
end

```

Subroutine MOMENTUM

implicit none

integer x,y,xmax,ymax,i,j

parameter(xmax=25,ymax=521)

double precision apx,apy,ae,aw,an,as,bb,aa(4,0:xmax),

& alpha,delx,dely,delt,vy0,rho,rho0,

& fe,fw,fn,fs,pre,vx,vx0,vy

```

common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_DENSITY0/rho0(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_VEL/vx(0:xmax,0:ymax),vy(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_VEL0/vx0(0:xmax,0:ymax),vy0(0:xmax,0:ymax)
common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)
common/COEF/apx(0:xmax,0:ymax),apy(0:xmax,0:ymax)
common/CELLSIZE/delx,dely
common/TIME_STEP/delt
common/ALPHA/alpha
do 100 y=1,ymax-1
do 200 x=1,xmax-2
    fe=rho(x+1,y)*(vx(x,y)+vx(x+1,y))*0.5*dely
    fw=rho(x,y)*(vx(x,y)+vx(x-1,y))*0.5*dely
    fn=(rho(x,y)+rho(x+1,y)+rho(x,y+1)+rho(x+1,y+1))*0.25
&                *(vy(x,y)+vy(x+1,y))*0.5*delx
    fs=(rho(x,y)+rho(x+1,y)+rho(x,y-1)+rho(x+1,y-1))*0.25
&                *(vy(x,y-1)+vy(x+1,y-1))*0.5*delx
    ae=dmax1(-fe,0.0d+0)
    aw=dmax1(fw,0.0d+0)
    an=dmax1(-fn,0.0d+0)
    as=dmax1(fs,0.0d+0)
    apx(x,y)=ae+aw+an+as+((rho0(x,y)+rho0(x+1,y))
&                *0.5*delx*dely/delt)
    bb=vx0(x,y)*(rho0(x,y)+rho0(x+1,y))*0.5*delx*dely/delt
    aa(1,x)=-aw
    aa(2,x)=apx(x,y)
    aa(3,x)=-ae
    aa(4,x)=an*vx(x,y+1)+as*vx(x,y-1)+bb+
&                dely*(pre(x,y)-pre(x+1,y))

```



```

200 continue
    aa(1,0)=0.0
    aa(2,0)=1.0
    aa(3,0)=0.0
    aa(4,0)=vx(1,y)
    aa(1,xmax-1)=0.0
    aa(2,xmax-1)=1.0
    aa(3,xmax-1)=0.0
    aa(4,xmax-1)=vx(xmax-1,y)
    call TDMA(0,xmax-1,aa)
do 300 x=1,xmax-2
    vx(x,y)=(1-alpha)*vx(x,y)+alpha*aa(4,x)
300 continue
do 400 x=1,xmax-1
    fe=(rho(x,y)+rho(x+1,y)+rho(x,y+1)+rho(x+1,y+1))*0.25
&          *(vx(x,y)+vx(x+1,y))*0.5*dely
    fw=(rho(x,y)+rho(x-1,y)+rho(x,y+1)+rho(x-1,y+1))*0.25
&          *(vx(x-1,y)+vx(x-1,y+1))*0.5*dely
    fn=rho(x,y+1)*(vy(x,y)+vy(x,y+1))*0.5*delx
    fs=rho(x,y)*(vy(x,y)+vy(x,y-1))*0.5*delx
    ae=dmax1(-fe,0.0d+0)
    aw=dmax1(fw,0.0d+0)
    an=dmax1(-fn,0.0d+0)
    as=dmax1(fs,0.0d+0)
    apy(x,y)=ae+aw+an+as+((rho0(x,y)+rho0(x,y+1))*0.5
&          *delx*dely/delt)
    bb=vy0(x,y)*(rho0(x,y)+rho0(x,y+1))*0.5*delx*dely/delt
    aa(1,x)=-aw
    aa(2,x)=apy(x,y)

```

```

aa(3,x)=-ae
aa(4,x)=an*vy(x,y+1)+as*vy(x,y-1)+bb+
&          delx*(pre(x,y)-pre(x,y+1))
400 continue
aa(1,0)=0.0
aa(2,0)=1.0
aa(3,0)=0.0
aa(4,0)=vy(1,y)
aa(1,xmax)=0.0
aa(2,xmax)=1.0
aa(3,xmax)=0.0
aa(4,xmax)=vy(xmax,y)
call TDMA(0,xmax,aa)
do 500 x=1,xmax-1
    vy(x,y)=(1-alpha)*vy(x,y)+alpha*aa(4,x)
500 continue
100 continue
return
end

*****

Subroutine CON_DEN
implicit none
integer x,y,xmax,ymax,i,j
parameter(xmax=25,ymax=521)
double precision ap(0:xmax,0:ymax),ae,aw,an,as,bb,aa(4,0:xmax),
&          rho0,delx,dely,rho,fe,fw,fn,fs,vx,vy,delt
common/CO2_VEL/vx(0:xmax,0:ymax),vy(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_DENSITY0/rho0(0:xmax,0:ymax)

```

```

common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)
common/CELLSIZE/delx,dely
common/TIME_STEP/delt
do 100 y=1,ymax-1
do 200 x=1,xmax-1
    fe=vx(x,y)*0.5*dely
    fw=vx(x-1,y)*0.5*dely
    fn=vy(x,y)*0.5*delx
    fs=vy(x,y-1)*0.5*delx
    ae=dmax1(-fe,0.0d+0)
    aw=dmax1(fw,0.0d+0)
    an=dmax1(-fn,0.0d+0)
    as=dmax1(fs,0.0d+0)
    ap(x,y)=vx(x,y)*0.5*dely-vx(x-1,y)*0.5*dely+vy(x,y)
&          *0.5*delx-vy(x,y-1)*0.5*delx+(delx*dely/delt)
    bb=rho0(x,y)*delx*dely/delt
    aa(1,x)=-aw
    aa(2,x)=ap(x,y)
    aa(3,x)=-ae
    aa(4,x)=an+as+bb
200 continue
aa(1,0)=0.0
aa(2,0)=1.0
aa(3,0)=0.0
aa(4,0)=rho(1,y)
aa(1,xmax)=0.0
aa(2,xmax)=1.0
aa(3,xmax)=0.0
aa(4,xmax)=rho(xmax,y)

```

```

        call TDMA(0,xmax-1,aa)
do 300 x=1,xmax-2
        rho(x,y)=aa(4,x)
300 continue
100 continue
return
end

```

```

Subroutine HEAT
implicit none
integer x,y,xmax,ymax
parameter(xmax=25,ymax=521)
double precision T,Cp,Cv,Gram,a,b,c,d,k,visrf,
&          Trf,Pr,visco(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_TEMP/T(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_CONST/Pr,visrf,Trf,Gram
common/CO2_HEAT/Cv(0:xmax,0:ymax),Cp(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_THER/k(0:xmax,0:ymax)
a=22.26
b=5.981d-2
c=-3.501d-5
d=7.469d-9
DO 100 x=0,xmax
DO 100 y=0,ymax
        visco(x,y)=visrf*((T(x,y)/Trf)**1.5)*((Trf+110.0)/(T(x,y)+110.0))
        Cp(x,y)=(a+(b*T(x,y)))+(c*T(x,y)**2.0)+(d*T(x,y)**3.0)/44.01*1000
        Cv(x,y)=Cp(x,y)/Gram

```



```

      k(x,y)=visco(x,y)*Cp(x,y)/Pr
100  continue

return
end

*****

Subroutine ENERGY
implicit none
integer x,y,xmax,ymax,i,j
parameter(xmax=25,ymax=521)
double precision ap(0:xmax,0:ymax),ae,aw,an,as,bb,aa(4,0:xmax),
&          rho0,delx,dely,rho,T,fe,fw,fn,fs,vx,vy,delt,T0,
&          vx0,vy0,k,Cv,Cp,Cp0,Cv0,pre
common/CELLSIZE/delx,dely
common/TIME_STEP/delt
common/CO2_VEI/vx(0:xmax,0:ymax),vy(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_TEMP/T(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_DENSITY0/rho0(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_TEMP0/T0(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_VEI0/vx0(0:xmax,0:ymax),vy0(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_HEAT/Cv(0:xmax,0:ymax),Cp(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_HEAT0/Cv0(0:xmax,0:ymax),Cp0(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_THER/k(0:xmax,0:ymax)
common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)
do 100 y=1,ymax-1
do 200 x=1,xmax-2

```



```

fe=((rho(x,y)+rho(x+1,y))*0.5*(Cv(x,y)+Cv(x+1,y))*0.5*vx(x,y)
&
    *0.5*dely)+((k(x,y)+k(x+1,y))*0.25*dely/delx)
fw=((rho(x,y)+rho(x-1,y))*0.5*(Cv(x,y)+Cv(x-1,y))*0.5
&
    *vx(x-1,y)*0.5*dely)+((k(x,y)+k(x-1,y))*0.25*dely/delx)
fn=((rho(x,y)+rho(x,y+1))*0.5*(Cv(x,y)+Cv(x,y+1))*0.5*vy(x,y)
&
    *0.5*delx)+((k(x,y)+k(x,y+1))*0.25*delx/dely)
fs=((rho(x,y)+rho(x,y-1))*0.5*(Cv(x,y)+Cv(x,y-1))*0.5
&
    *vy(x,y-1)*0.5*delx)+((k(x,y)+k(x,y-1))*0.25*delx/dely)
ae=dmax1(-fe,0.0d+0)
aw=dmax1(fw,0.0d+0)
an=dmax1(-fn,0.0d+0)
as=dmax1(fs,0.0d+0)
ap(x,y)=(rho(x,y)*Cv(x,y)*delx*dely/delt)+((rho(x,y)
&
    +rho(x+1,y))*0.5*(Cv(x,y)+Cv(x+1,y))*0.5*vx(x,y)*0.5
&
    *dely)-((rho(x,y)+rho(x-1,y))*0.5*(Cv(x,y)+Cv(x-1,y))
&
    *0.5*vx(x-1,y)*0.5*dely)+((k(x,y)+k(x+1,y))*0.25*dely
&
    /delx)-((k(x,y)+k(x-1,y))*0.25*dely/delx)+((rho(x,y)
&
    +rho(x,y+1))*0.5*(Cv(x,y)+Cv(x,y+1))*0.5*vy(x,y)*0.5
&
    *delx)-((rho(x,y)+rho(x,y-1))*0.5*(Cv(x,y)+Cv(x,y-1))
&
    *0.5*vy(x,y-1)*0.5*delx)+((k(x,y)+k(x,y+1))*0.25*delx
&
    /dely)-((k(x,y)+k(x,y-1))*0.25*delx/dely)
bb=((rho0(x,y)*Cv0(x,y)*T0(x,y))+0.5*rho0(x,y)
&
    *((vx0(x,y)**2.0)+(vy0(x,y)**2.0)))*delx*dely/delt
aa(1,x)=-aw
aa(2,x)=ap(x,y)
aa(3,x)=-ae
aa(4,x)=an+as+bb-(rho(x,y)*((vx(x,y)**2.0)+(vy(x,y)**2.0))
&
    *0.5*delx*dely/delt)-((rho(x,y)+rho(x+1,y))*0.5
&
    *(vx(x,y)**3.0)*0.5*dely)+((rho(x,y)+rho(x-1,y))

```

```

&      *0.5*(vx(x-1,y)**3.0)*0.5*dely)-((rho(x,y)+rho(x+1,y))
&      *0.5*(vy(x,y)**2.0)*0.5*vx(x,y)*dely)+((rho(x,y)
&      +rho(x-1,y))*0.5*(vy(x-1,y)**2.0)*0.5*vx(x-1,y)*dely)
&      -((pre(x,y)+pre(x+1,y))*0.5*vx(x,y)*dely)+((pre(x,y)
&      +pre(x-1,y))*0.5*vx(x-1,y)*dely)-((rho(x,y)
&      +rho(x,y+1))*0.5*(vx(x,y)**2.0)*0.5*vy(x,y)*delx)
&      +((rho(x,y)+rho(x,y-1))*0.5*(vx(x,y-1)**2.0)*0.5
&      *vy(x,y-1)*delx)-((rho(x,y)+rho(x,y+1))*0.5*(vy(x,y)
&      **3.0)*0.5*delx)+((rho(x,y)+rho(x,y-1))*0.5*(vy(x,y-1)
&      **3.0)*0.5*delx)-((pre(x,y)+pre(x,y+1))*0.5*vy(x,y)
&      *delx)+((pre(x,y)+pre(x,y-1))*0.5*vy(x,y-1)*delx)
&      -(pre(x,y)+pre(x+1,y))*0.5*vx(x,y)*dely
&      +(pre(x,y)+pre(x-1,y))*0.5*vx(x-1,y)*dely
&      -(pre(x,y)+pre(x,y+1))*0.5*vy(x,y)*delx
&      +(pre(x,y)+pre(x,y-1))*0.5*vy(x,y-1)*delx
200  continue
      aa(1,0)=0.0
      aa(2,0)=1.0
      aa(3,0)=0.0
      aa(4,0)=T(1,y)
      aa(1,xmax-1)=0.0
      aa(2,xmax-1)=1.0
      aa(3,xmax-1)=0.0
      aa(4,xmax-1)=T(xmax-1,y)
      call TDMA(0,xmax-1,aa)
do 300 x=1,xmax-2
      T(x,y)=aa(4,x)
300  continue
100  continue

```

```
return
```

```
end
```

```
*****
```

```
Subroutine PRESSURE
```

```
implicit none
```

```
integer x,y,xmax,ymax
```

```
parameter(xmax=25,ymax=521)
```

```
double precision V(0:xmax,0:ymax),W,xxx,R,Tc,Pc,Zc,rho,T,
```

```
& pre,M,A,B,xx
```

```
common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)
```

```
common/CO2_TEMP/T(0:xmax,0:ymax)
```

```
common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)
```

```
do 100 y=0,ymax
```

```
do 200 x=0,xmax
```

```
R=83.144 ! Gas constant
```

```
Tc=304.2 ! Critical temperature of CO2
```

```
Pc=72.9 ! Critical pressure of CO2
```

```
Zc=0.274 ! Critical compressible factor of CO2
```

```
M=44.01
```

```
xx=1.0/3.0
```

```
W=(0.2905-Zc)/0.085
```

```
xxx=(1.0+(0.48508+(1.5517*W)-(0.15613*W**2.0))
```

```
& *(1-(T(x,y)/Tc)**0.5))**2.0
```

```
A=0.42748*xxx*(R**2.0)*(Tc**2.0)/Pc
```

```
B=0.08664*R*Tc/Pc
```

```
V(x,y)=M/rho(x,y)
```

```

pre(x,y)=((R*T(x,y)/(V(x,y)-B))-(A/(V(x,y)*(V(x,y)+B))))*1.0d+5
pre(x,0)=pre(x,1)
200  continue
100  continue
return
end

```

```

Subroutine ERROR(bbb)
implicit none
integer xmax,ymax,x,y
double precision bbb,prelp,pre,sum
parameter(xmax=25,ymax=521)
common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)
common/PRESSLOOP/prelp(0:xmax,0:ymax)
sum=0.0d+0
do 100 x=1,xmax-1
do 100 y=1,ymax-1
    sum=sum+(prelp(x,y)-pre(x,y))
100  continue
    bbb=dabs(sum)/(xmax*ymax)
return
end

```

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย


```

Subroutine TDMA(jj,ii,aa)
implicit none
integer ii,jj,k,xmax
parameter (xmax=25)
double precision w,aa(4,0:xmax)
do 100 k=jj,ii
    w=aa(2,k)
    aa(4,k)=aa(4,k)/w
    if (k.lt.ii) then
        aa(3,k)=aa(3,k)/w
        aa(2,k+1)=aa(2,k+1)-aa(1,k+1)*aa(3,k)
        aa(4,k+1)=aa(4,k+1)-aa(1,k+1)*aa(4,k)
    end if
100 continue
do 200 k=ii,jj+1,-1
    aa(4,k-1)=aa(4,k-1)-aa(3,k-1)*aa(4,k)
200 continue
return
end

```

```

Subroutine SAVEDATA
implicit none
integer xmax,ymax,interval,n,x,y
parameter(xmax=25,ymax=521)
double precision rho,T,vx,vy,pre

common/timest/n,interval

```



```

common/CO2_DENSITY/rho(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_TEMP/T(0:xmax,0:ymax)
common/CO2_VEI/vx(0:xmax,0:ymax),vy(0:xmax,0:ymax)
common/PRESS/pre(0:xmax,0:ymax)
do 100 y=1,ymax-1
do 200 x=1,xmax-1
    if (mod(n,2000).eq.0) then
        write(*,*) T(x,y)
    end if
    if (mod(n,10000).eq.0) then
        write(1,*) T(x,y),x,y
        write(2,*) pre(x,y),x,y
        write(3,*) rho(x,y),x,y
        write(4,*) vx(x,y),vy(x,y),x,y
    end if
    if (n.EQ.interval) then
        write(5,*) T(x,y),x,y
        write(6,*) pre(x,y),x,y
        write(7,*) rho(x,y),x,y
        write(8,*) vx(x,y),vy(x,y),x,y
    end if
200 continue
100 continue
do 300 y=1,ymax-1
do 400 x=1,xmax-1
    if (mod(n,2000).eq.0) then
        write(13,*) T(x,y),x,y
        write(14,*) pre(x,y),x,y
        write(15,*) rho(x,y),x,y

```

```
        end if  
400  continue  
300  continue  
return  
end
```



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย