การจำลองแบบสองมิติของการขยายตัวอย่างรวดเร็วของ คาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต

นางสาว กนกวรรณ กรรโณ

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2546

ISBN 974-17-4497-8

TWO DIMENSIONAL SIMULATION OF RAPID EXPANSION OF SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE

Ms. Kanokwan Kanno

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering in Chemical Engineering

Department of Chemical Engineering
Faculty of Engineering
Chulalongkorn University

Academic Year 2003
ISBN 974-17-4497-8

Thesis Title	Two dimensional simulation of rapid expansion of supercritical carbon dioxide
By	Miss Kanokwan Kanno
Field of Study	Chemical Engineering
Thesis Advisor	Associate Professor Tawatchai Charinpanitkul, D.Eng

---

Accepted by the Faculty of Engineering, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master 's Degree

.... Dean of Faculty of Engineering
(Professor Direk La vansiri, Ph.D.)

THESIS COMMITTEE

.... Chairman
(Associate Professor Suttichai Assabumrungrat, Ph.D.)

.... Thesis Advisor
(Associate Professor Tawatchai Charinpanitkul, D.Eng.)

.... Thesis Co-Advisor
(Professor Wiwut Tanthapanichakoon, Ph.D.)

.... Member
(Varong Pavarajarn, Ph.D.)

.... Member
(Nattaporn Tonanon, M.Sc.)

กนกวรรณ กรรโณ: การจำลองแบบสองมิติของการขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต(TWO DIMENSIONAL SIMULATION OF RAPID EXPANSION OF SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE) อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์: รศ. ดร. ธวัชชัย ชรินพาณิชกุล 148 หน้า ISBN 974-17-4497-8

การขยายตัวของของไหลเหนือวิกฤตผ่านหัวฉีดเป็นกระบวนการที่สามารถนำมาประยุกต์ใช้ในการผลิตอนุภาคขนาดเล็กมากๆ โดยอาศัยการเปลี่ยนแปลงค่าความหนาแน่นสารละลายของของไหลที่เกิดจากการขยายตัวของของไหลจากสภาวะเหนือวิกฤตไปสู่สภาวะก๊าซ การจำลองปรากฏการณ์การขยายตัวอย่างรวดเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตโดยอาศัยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ต้องคำนึงถึงการประมวลผลชุดสมการที่นำมาใช้ในการพิจารณากลไกการไหลของของไหล รวมถึงชุดสมการสภาวะที่ใช้ในการประมาณค่าคุณสมบัติของคาร์บอนไดออกไซด์ด้วย

จากการทดสอบพบว่าสมการสภาวะ Soave-Redlich-Kwong EOS ที่ใช้ค่า compressibility of CO_2 เป็นชุดสมการสภาวะที่เหมาะสมสำหรับการประมาณค่าคุณสมบัติของคาร์บอนไดออกไซด์

สำหรับเทคนิคที่นำมาใช้ในการพิจารณากลไกการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ที่เลือกใช้ในงานวิจัยนี้มี 2 เทคนิคคือวิธีผลต่างสืบแบบเอ็กซ์พลิสิทและแบบอิมพลิสิท พบว่าผลที่ได้ให้ค่าที่สอดคล้องกับงานวิจัยที่ผ่านมา จากการศึกษาปัจจัยที่มีผลกระทบต่อการขยายตัวของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตผ่านหัวฉีด พบว่าอุณหภูมิและความดันของคาร์บอนไดออกไซด์ก่อนออกจากหัวฉีดมีผลกระทบต่อกระบวนการค่อนข้างมาก ส่วนความเร็วของคาร์บอนไดออกไซด์ที่ถูกฉีดออกจากหัวฉีดพบว่ามีผลกระทบต่อการขยายตัวน้อยมาก

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต กนกวรรณ กรรโณ

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

ปีการศึกษา 2546 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

4370203021 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING
KEY WORD: RESS / COMPRESSIBLE FLOW / CFD / CARBON DIOXIDE
KANOKWAN KANNO: TWO DIMENSIONAL SIMULATION OF RAPID EXPANSION OF SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE. THESIS ADVISOR : ASSOCIATE PROFESSOR TAWATCHAI CHARINPANITKUL, D. ENG, 148 pp. ISBN 974-17-4497-8

The expansion of supercritical fluid solution through a nozzle is a key step for producing fine particles. It makes use of the density change of a fluid from its supercritical state to its gaseous state due to expansion to a lower pressure environment. Simulation of rapid expansion of supercritical carbon dioxide requires a set of basic equations of fluid flow field and thermodynamic properties of carbon dioxide from suitable equation of state (EOS).

From investigation, it was found that Soave-Redlich-Kwong EOS incorporated with the compressibility factor of carbon dioxide is suitable for estimating of the carbon dioxide thermodynamic properties. The explicit finite-difference and implicit finite-different methods are employed to solve two-dimensional Euler equations for fluid flow field. The calculation results shown that the inlet temperature and inlet pressure gave impact effects on the predicted temperature of flowing fluid passed through the nozzle and for inlet velocity, it could be seen that it rarely gave effect on the predicted temperature of fluid.

Department Chemical Engineering Student's signature....................

Field of study Chemical Engineering Advisor's signature....................

Academic year 2003 Co-advisor's signature....................

ACKNOWLEDGEMENT

I wish to sincerely express my gratitude to my advisor, Associate Professor Tawatchai Charinpanitkul, for his immense support and encouragement. This also extends to my thesis co-advisor, Professor Wiwut Tanthapanichakoon, who advises me with useful and comments suggestions. In addition to them, Dr. Somprasong Srichai is another one that I am very grateful for his kindness of guiding me through various difficult situations.

I also would like to gratefully acknowledge my thesis committee, for their kind evaluation of my work and valuable suggestions that could be beneficially used to improve my working behavior.

Special thanks to members of the Particle Technology and Material Processing (PTMP) Laboratory, we share our thoughts, ideas, and suggestions together. They provide me many good experiences, and good friends. It 's a memorable period of time in my life.

Thanks are due the Graduate School, Chulalongkorn University and Matching Fund (Senior Research Project of Associate Professor Tawatchai Charinpanitkul) for their research assistantship and their financial support, respectively.

Most importantly, my parents and my family are the greatest who supported me not only financially but also with their love, care, understanding and morale support.

CONTENTS

CONTENTS (continue)

LIST OF FIGURES

LIST OF FIGURES (continue)

LIST OF FIGURES (continue)

Page

LIST OF FIGURES (continue)

LIST OF TABLES

NOMENCLATURE

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)