FINITE ELEMENT METHOD FOR CHEMICAL ENGINEERING APPLICATIONS

Mr. Puchong Thipkhunthod

A Thesis Submitted in Partial Fulfilment of the Requirements
for the Degree of Master of Science
The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University
in Academic Partnership with
The University of Michigan, The University of Oklahoma,
and Case Western Reserve University
2002

ISBN 974-03-1585-2

Thesis Title	:	Finite Element Method for Chemical Engineering Applications
By	:	Mr. Puchong Thipkhunthod
Program	:	Petrochemical Technology
Thesis Advisors	:	Dr. Kitipat Siemanond
		Prof. James O. Wilkes

Accepted by the Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University, in partial fulfilment of the requirements for the Degree of Master of Science.

K. Bunyakiat
..... College Director

(Assoc. Prof. Kunchana Bunyakiat)

Thesis Committee:

Kitipat Siemanond
.....

(Dr. Kitipat Siemanond)

James O. Wilkes
.....

(Prof. James O. Wilkes)

Pramoch R.
.....

(Asst. Prof. Pramoch Rangsunvigit)

.....

(Dr. Pomthong Malakul)

ABSTRACT

4371018063: PETROCHEMICAL TECHNOLOGY PROGRAM
Puchong Thipkhunthod: Finite Element Method for Chemical Engineering Applications.
Thesis Advisors: Prof. James O. Wilkes and Dr. Kitipat Siemanond, 84 pp. ISBN 974-03-1585-2
Keywords: FEM/ Finite Element Method/ Numerical Method/ Partial Differential Equation/ Poisson's Equation/

The finite element method, or FEM, is one of numerical methods, which is used to solve many engineering problems efficiently. It provides better alternative that is suitable for systems with irregular geometry, unusual boundary conditions, or heterogeneous composition. It divides the domain into simply shaped regions, or "element". An approximate solution for partial differential equation (PDE) can be developed for each of these elements. The total solution is then generated by linking together, or "assembling". The PDE will eventually be in form of system of linear algebraic equation, which can be solved by a conventional method like iterative or Gauss elimination.

In this work, FEM was applied to a two-dimensional Poisson's equation, which covers many problems in chemical engineering applications. The FEM application program was developed via the Visual Basic programming language, using method of Galerkin weighted residual, and was then tested with four practical problems. The program is accurate, reliable, convenient and effective, and has a very useful graphical interface. The accuracy of numerical solution can be improved by using refined meshing as user alternative.

บทคัดย่อ

ภุชงค์ ทิพย์ขุนทด : ระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์สำหรับงานวิศวกรรมเคมี (Finite Element Method for Chemical Engineering Applications) อ.ที่ปรึกษา : ศ. เจมส์ โอ วิลส์ (Prof. James O. Wilkes) และ ดร. กิติพัฒน์ สีมานนท์ 84 หน้า ISBN 974-03-1585-2

ระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์เป็นหนึ่งในระเบียบวิธีเชิงตัวเลขซึ่งสามารถใช้แก้ปัญหาต่างๆ ทางวิศวกรรมได้อย่างมีประสิทธิภาพ วิธีไฟไนต์เอลิเมนต์นี้สามารถใช้แก้ปัญหากับระบบที่มีรูปร่างของระบบ หรือสภาวะขอบเขตที่ไม่ปกติ ตลอดจนระบบที่มีหลายองค์ประกอบได้ กระบวนการแก้ปัญหาเริ่มด้วยการแบ่งระบบออกเป็นส่วนย่อย ๆ เรียกว่า เอลิเมนต์ หลังจากนั้น คำตอบจะถูกสมมุติให้อยู่ในรูปของสมการอย่างง่าย และเมื่อประยุกต์รวมเข้ากับสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยในแต่ละเอลิเมนต์นั้นๆ สมการจะถูกแปลงให้อยู่ในรูปของระบบสมการพีชคณิตเชิงเส้น จากนั้นสมการของแต่ละเอลิเมนต์นี้จะถูกเชื่อมโยงกันด้วยกันเพื่อหาคำตอบของทั้งระบบ

การศึกษาครั้งนี้ เป็นการประยุกต์ใช้ระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์กับสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยของปัวซองในสองมิติ ซึ่งครอบคลุมปัญหาต่างๆ มากมาย โดยเฉพาะอย่างยิ่งในสาขาวิศวกรรมศาสตร์ โปรแกรมประยุกต์ได้ถูกสร้างขึ้นโดยใช้ภาษาวิชวลเบสิก และทดสอบใช้แก้ปัญหาต่าง ๆ ในทางวิศวกรรมเคมี โปรแกรมที่พัฒนาขึ้นนี้มีความแม่นยำสูง, เชื่อถือได้, ใช้งานได้สะดวก และสามารถแสดงผลในรูปแบบกราฟฟิก ซึ่งจะเป็นประโยชน์มากในการวิเคราะห์ปัญหานั้นๆ ต่อไป อย่างไรก็ตาม ความแม่นยำของโปรแกรมยังขึ้นอยู่กับรูปแบบการแบ่งเอลิเมนต์อีกด้วย

ACKNOWLEDGEMENTS

This thesis could not be successfully accomplished without the invaluable helps of the following individuals.

First of all, I would like to express my sincere gratitude to Prof. James O. Wilkes and Dr. Kitipat Siemanond, my thesis advisors, for their valuable guidance, and encouragement throughout the thesis work.

My gratitude is extended to all both Thai and US Professors and all PPC staff for contributed knowledge, assistance and cooperation.

I would like to give special thanks for all lovely friends for their friendship, hospitality, understanding, and always forgiving mistake I made.

Finally, my deepest gratitude is dedicated to my family, which is my starting point, and all everything of my life.

TABLE OF CONTENTS

		PAGE
	Title Page	i
	Acceptance page	ii
	Abstract (in English)	iii
	Abstract (in Thai)	iv
	Acknowledgements	v
	Table of Contents	vi
	List of Tables	ix
	List of Figures	x
CHAPTER		
I	**INTRODUCTION**	1
II	**LITERATURE SURVEY**	3
	2.1 Finite Element Procedure	3
	2.2 The Development of Finite Element Method	5
	2.3 Finite Element Method with Poisson's Equation	6
	2.4 Partial Differential Equation Solver	7
III	**PROBLEM SOLVING METHOD**	8
	3.1 Differential Equation	8
	3.2 Finite Element Analysis of Poisson's Equation	9
	3.2.1 Galerkin Residual Equation	9
	3.2.2 Linear Triangular Elements and Basis Functions	11
	3.2.3 Solution of Poisson's Equation in Cylindrical Coordinates	13
	3.2.4 Initial Value Problem	15

CHAPTER		PAGE
	3.3 Programming Strategy	16
	3.3.1 Program Description	16
	3.3.2 Calculation Procedure	19
	3.3.3 Data Input File Format	21
	3.3.4 User Instruction	23
IV	**PROGRAM TESTING**	24
	4.1 Problem TP1: Heat Conduction in Finite Slab	24
	4.1.1 Problem Definition	24
	4.1.2 Solution Strategy	26
	4.1.3 Results	27
	4.2 Problem TP2: Turbine Blade Analysis	30
	4.2.1 Problem Definition	30
	4.2.2 Solution Strategy	31
	4.2.3 Results	31
	4.3 Problem TP3: Slug Flow Analysis	34
	4.3.1 Problem Definition	34
	4.3.2 Solution Strategy	37
	4.3.3 Results	37
	4.4 Problem TP4: Aeration Pond Analysis	39
	4.3.1 Problem Definition	39
	4.3.2 Solution Strategy	40
	4.3.3 Results	40
V	**CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS**	42
	REFERENCES	43

CHAPTER **PAGE**

APPENDICES 45

Appendix A Green's Theorem 45

Appendix B All Program Interfaces 49

Appendix C Program Source Code for Each Form and Module 54

CURRICULUM VITAE 84

LIST OF TABLES

TABLE		PAGE
3.1	Integration formulas involving linear basis functions, for triangular elements and line boundary segments	13
3.2	Multiplying factors for obtaining element contributions in r/z coordinates from those in x/y coordinates	14
3.3	All forms, modules, and subprograms in "FEM"	17
4.1	Test problem descriptions	24
4.2	The numerical solutions to TP1 in rectangular coordinate	29
4.3	The numerical solutions to TP1 in cylindrical coordinate	29
4.4	The solutions to TP1 in rectangular coordinate with different mesh patterns	30
4.5	The temperature distribution in turbine blade	32
4.6	Rise velocity determined from approximation	38
4.7	Coordinates and velocities at all interface points of proper slug shape	38

LIST OF FIGURES

FIGURE		PAGE
2.1	The discretization of a system into finite elements	3
3.1	Coarse flow diagram of program "FEM"	20
4.1	The slab system in test problem TP1	26
4.2	Different mesh refinement pattern used in TP1 analysis	28
4.3	Turbine blade	31
4.4	Mesh generation for system TP2	32
4.5	Graphical solution to problem TP2	33
4.6	Temperature profile in turbine blade	34
4.7	Four regimes of two-phase flow in vertical tube	35
4.8	System meshing for the liquid around a gas slug	36
4.9	The proper shape of slug obtained from experiment and approximation via FEM program	39
4.10	Aeration pond system and mesh generation in TP4	40
4.11	Concentration profile of oxygen in aerated pond	41
B1	Form "frmMain"	49
B2	Form "frmInput"	50
B3	Form "frmFemWork"	51
B4	Form "frmResult"	52
B5	Form "SetPara"	53