

### سخن نخست

مدلسازی ریاضی در مهندسی شیمی از سه مرحله‌ی اصلی فرمول‌بندی قانون‌های فیزیکی، حل معادله‌های حاصل و بررسی اعتبار مدل تشکیل شده است. بخش فرمول‌بندی با استفاده از قانون‌های عمومی و اختصاصی در مباحث مختلف تبدیل، انتقال جرم، انتقال حرارت و انتقال اندازه حرکت انجام می‌شود و برحسب نوع فرمول‌بندی و نوع سیستم مورد مطالعه به سه بخش فرمول‌بندی توده‌ای، دیفرانسیلی و انتگرالی تقسیم می‌شود. برحسب فرض‌ها و شرایط حاکم بر مسئله، از این فرمول‌بندی‌ها معادله‌های جبری و/یا دیفرانسیل حاصل می‌شوند. در مرحله‌ی بعدی با حل این معادله‌ها توابع هدف و رفتار آن‌ها نسبت به متغیرهای مستقل فرایند تعیین می‌شوند. حل معادله‌های مدل به دو روش تحلیلی و عددی تقسیم‌بندی می‌شود که هر یک از این روش‌ها دارای نقاط قوت و ضعف می‌باشند. در مرحله‌ی سوم اعتبار و ارزش‌گذاری مدل مورد بررسی قرار می‌گیرد، که در این مرحله اطلاعات تجربی، در سطح آزمایشگاهی، بنچ<sup>۱</sup> یا پایلوت مورد نیاز است. در این صورت می‌توان از مدل ریاضی حاصل در طراحی، افزایش مقیاس، شبیه‌سازی و بهینه‌سازی فرایندهای مشابه استفاده کرد.

مبحث مدلسازی ریاضی در مهندسی شیمی و اهمیت آن جهت مطالعه و درک صحیح از رفتار متغیرها، اصلاح و توسعه‌ی فرایندها قبلاً در کتاب مدلسازی ریاضی در مهندسی شیمی [۱] مورد بررسی قرار گرفته است و فرمول‌بندی‌های ریاضی براساس قوانین بقای جرم، بقای انرژی و بقای اندازه حرکت و روش‌های تحلیلی جهت حل معادله‌های حاصل از فرمول‌بندی‌ها ارائه شده است. کتاب حاضر به روش‌های حل عددی معادله‌های حاصل از فرمول‌بندی‌های ریاضی اختصاص یافته است. بالطبع آشنایی با روش‌های عددی و استفاده از این روش‌ها در نرم‌افزارهای برنامه‌نویسی به محقق امکان می‌دهد که رفتار فازها و اجزای آن، تغییرات انرژی و حرکت سیال و اثر متقابل متغیرها بر یکدیگر در مسائل پیچیده‌تر مدلسازی شود.

در فصل حاضر ابتدا مرور مختصری بر فرمول‌بندی توده‌ای و دیفرانسیلی انجام می‌شود، سپس به حل معادله‌های حاصل به روش عددی تأکید می‌گردد و در نهایت توضیح مختصری در مورد فصل‌های مختلف کتاب ارائه می‌شود.

### ۱-۱ فرمول‌بندی توده‌ای<sup>۲</sup>

این فرمول‌بندی ساده‌ترین نوع فرمول‌بندی است و با فرض اختلاط کامل، تابع مورد مطالعه را به صورت یکنواخت و مستقل از مکان (یا ابعاد فرایند) در نظر می‌گیرد. در این نوع فرمول‌بندی، قوانین اساسی در حجم کنترل پیاده‌سازی می‌شوند. با فرض شرایط ناپایا این فرمول‌بندی به معادله یا معادله‌های

1-Bench

2-Lump Formulation

دیفرانسیل معمولی رتبه‌ی اول برحسب متغیر زمان منتهی می‌شود، (مانند یک واکنش‌گاه اختلاط کامل مداوم در شرایط شروع یا پایان فرایند) و چنانچه فرایند مورد نظر در شرایط پایا باشد، حاصل فرمول‌بندی به صورت معادله یا معادله‌های جبری خواهد بود. بنابراین می‌توان گفت حاصل فرمول‌بندی توده‌ای می‌تواند معادله‌های جبری یا معادله‌های دیفرانسیل معمولی رتبه‌ی اول باشد. لازم به ذکر است چنانچه تعداد معادله‌های حاصل از فرمول‌بندی با توجه به تعداد متغیرهای وابسته مسئله، بیش از یک معادله و به ویژه غیرخطی باشند، حل تحلیلی این معادله‌ها مشکل و یا ناممکن بوده و فقط در برخی از موارد با اعمال فرض‌های ساده کننده امکان‌پذیر خواهد بود. به این ترتیب حل دستگاه معادله‌های جبری (خطی یا غیرخطی) و حل دستگاه معادله‌های دیفرانسیل معمولی (خطی یا غیرخطی) توسط روش‌های عددی بیش از پیش اهمیت می‌یابد.

چنانچه معادله‌های جبری حاصل خطی باشند، روش‌های حذفی، روش معکوس ماتریس یا روش‌های حدسی را می‌توان برای حل عددی دستگاه معادله‌ها به کار گرفت. در روش‌های عددی چنانچه معادله‌های جبری حاصل غیرخطی باشند، روش‌های حل عددی پیچیده‌تر شده و تکنیک‌های متفاوتی جهت آماده‌سازی و حل عددی معادله‌ها مطرح می‌شوند.

در مورد حل دستگاه معادله‌های دیفرانسیل معمولی، در صورتی که از نوع مسائل شرط اولیه<sup>۱</sup> باشند، روش‌های عددی تک‌مرحله‌ای<sup>۲</sup> مانند بسط سری تیلور، روش‌های اولر، رانج-کاتا و غیره یا روش‌های عددی چندمرحله‌ای<sup>۳</sup> پیشنهاد می‌شوند.

## ۲-۱ فرمول‌بندی دیفرانسیلی<sup>۴</sup>

در فرمول‌بندی دیفرانسیلی، معادله‌های دیفرانسیل پیچیده‌تری به دست می‌آیند که از فرمول‌بندی متغیر مورد نظر در المانی از حجم کنترل حاصل می‌شوند. در این نوع فرمول‌بندی، تابع یا تابع‌های مورد مطالعه به ابعاد مکانی (حداکثر در سه جهت فضایی) وابسته می‌باشند؛ اگرچه در شرایط ناپایا، تابعیت زمانی نیز امکان‌پذیر است. در این حالت، معادله یا معادله‌های دیفرانسیل پاره‌ای حاصل می‌شوند که معمولاً از نوع شرایط مرزی<sup>۵</sup> بوده و روش‌های مختلف تحلیلی و عددی برای حل آن‌ها پیشنهاد می‌شود. ساده‌ترین حالت در این نوع فرمول‌بندی هنگامی حاصل می‌شود که فرایند مورد بررسی در شرایط پایا باشد و تابع مورد مطالعه نیز فقط وابسته به یک بعد فضایی باشد، در این صورت از فرمول‌بندی، معادله  $D$ -دیفرانسیل معمولی رتبه‌ی اول یا رتبه‌ی بالاتر حاصل خواهد شد. به عنوان مثال، معادله‌های

1-Initial Value Problem

2-Single-Step

3-Multi-Step

4-Differential Formulation

5-Boundary Value Problem

دیفرانسیل رتبه‌ی اول هنگامی حاصل می‌شوند که قرار باشد مدل حاکم بر واکنش‌گاه‌های لوله‌ای در شرایط ایده‌آل (جریان پیستونی) فرمول‌بندی شود، در حالی که معادله‌های دیفرانسیل رتبه‌ی دوم با شرایط مرزی در هنگام فرمول‌بندی واکنش‌گاه‌های لوله‌ای همراه با پراکنندگی محوری حاصل می‌شود. برای حل معادله‌های دیفرانسیل با شرایط مرزی با توجه به خطی یا غیرخطی بودن معادله‌ها، روش‌های متنوعی به کار گرفته می‌شود. لازم به ذکر است که تعدادی از مسائل مهندسی شیمی در زمینه‌ی لایه‌های مرزی و انتقال اندازه حرکت در این لایه‌ها می‌باشند که فرمول‌بندی آن‌ها به معادله‌های دیفرانسیل رتبه‌ی سوم غیرخطی منتهی می‌شود و معمولاً از نوع مسائل شرط مرزی بوده و حل آن‌ها به روش‌های عددی حائز اهمیت می‌باشد.

در شرایط پیچیده‌تر در مدل‌سازی‌های دیفرانسیلی هرگاه فرایند بیش از یک متغیر مستقل داشته باشد، معادله‌های دیفرانسیل پاره‌ای مطرح می‌شوند که در این معادله‌ها، متغیر وابسته تابع ابعاد فضایی و/یا زمانی است. به طور کلی معادله‌های دیفرانسیل پاره‌ای به سه دسته معادله‌های بیضی‌گون، سهمی‌گون و هذلولی‌گون طبقه‌بندی می‌شوند و براساس نوع معادله روش‌های مختلف عددی برای حل آن‌ها پیشنهاد می‌شود. همچنین تقسیم‌بندی دیگری در معادله‌های دیفرانسیل پاره‌ای مطرح است که آن‌ها را به معادله‌های دیفرانسیل خطی و غیرخطی تفکیک می‌کند.

به طور کلی، برای حل معادله‌های دیفرانسیلی دو روش کلی حل دقیق (روش‌های تحلیلی) و حل تقریبی (روش‌های عددی) وجود دارد که در بسیاری از موارد، حل تحلیلی به ویژه برای معادله‌های غیرخطی مشکل و یا غیرممکن است و امروزه با توجه به توسعه مدل‌ها، فرضیه‌های کامل‌تر و فرمول‌بندی‌های پیچیده‌تر جهت پیش‌بینی رفتار تابع‌های یک فرایند، نیاز به روش‌های عددی و کامپیوتری بیش از پیش نمایان می‌شود.

با توجه به مقدمه مذکور، در بخش‌های مختلف کتاب حاضر سعی شده است روش‌های عددی لازم جهت حل دستگاه معادله‌های جبری، معادله‌های دیفرانسیلی معمولی از نوع شرط اولیه و شرایط مرزی و معادله‌های دیفرانسیلی پاره‌ای با تأکید بر غیرخطی بودن آن‌ها ارائه و بررسی گردد. در هر مورد نیز مسائل کاربردی در بخش‌های مختلف تبدیل مواد به یکدیگر، انتقال جرم، انتقال حرارت و انتقال اندازه حرکت ارائه و به روش عددی حل شده است. برنامه‌نویسی کامپیوتری مسائل نیز براساس نرم‌افزار *MATLAB* اجرا شده و نتایج در پیوست کتاب ارائه شده است.

## ۳-۱ حل عددی معادله‌ها

مبنای حل عددی در کتاب حاضر، روش اختلاف‌های محدود<sup>۱</sup> است. در حل عددی معادله‌های حاصل از فرمول‌بندی قبل از برنامه‌نویسی می‌بایست، آماده‌سازی مسئله انجام شود. در این خصوص می‌بایست به روش زیر عمل کرد:

**مرحله‌ی اول:** ابتدا لازم است معادله یا معادله‌های اصلی از حالت پیوسته به شکل گسسته تبدیل شوند، به عبارت دیگر متغیرهای معادله در گره‌هایی از بازه‌ی مسئله کدگذاری شوند. بنابراین از یک معادله پیوسته چندین معادله گسسته حاصل می‌شود که با حل هم‌زمان معادله‌ها مقدار تابع مجهول در گره‌ها تعیین می‌گردد. از نظر روش عددی مسائل به دو دسته تقسیم می‌شوند: اول، مسائلی که از یک انتها باز هستند<sup>۲</sup>، این مسائل از یک نقطه شروع می‌شوند و از سوی دیگر به طور نامحدود ادامه می‌یابند. دوم، مسائلی که از دو طرف بسته می‌باشند<sup>۳</sup>؛ این مسائل به دو مرز انتهایی محدود می‌باشند و جواب‌ها باید در مرزهای ابتدا و انتها صدق کند.

به عنوان مثال می‌توان معادله‌های دیفرانسیل رتبه‌ی اول را به عنوان مسائل باز و معادله‌های دیفرانسیل رتبه‌ی دوم با شرط مرزی را به عنوان مسائل بسته نام برد.

**مرحله‌ی دوم:** در مرحله‌ی بعد، جهت حل معادله‌ها، روش‌های عددی مناسب که دارای پایداری و سرعت مناسب باشند انتخاب می‌شوند و مراحل حل عددی با الگوریتم مناسب طراحی می‌شود. در برخی از مسائل به یک شرط همگرایی جهت اطمینان از دستیابی به جواب قابل قبول نیاز است.

**مرحله‌ی سوم:** این مرحله شامل استفاده از نرم‌افزار کامپیوتری جهت برنامه‌نویسی براساس الگوریتم پیشنهادی و اجرای برنامه جهت حل هم‌زمان معادله‌ها و تعیین نتایج با سرعت مناسب و ارائه نتایج حاصل به صورت جدول یا نمودار می‌باشد.

در انتخاب روش عددی حل معادله‌ها، پایداری و دقت روش از اهمیت زیادی برخوردار است؛ به طوری که لازم است پیش از انتخاب روش، قبلاً آنالیزهای پایداری و خطا انجام شود. از سوی دیگر، سرعت روش نیز از اهمیت برخوردار است، اما در روش‌های عددی سرعت و دقت در تقابل هستند. یعنی روش‌های با دقت و/یا پایداری بالاتر دارای پیچیدگی بیشتر و سرعت کمتری هستند، در صورتی که روش‌های سریع‌تر دارای دقت کمتری می‌باشند. بنابراین لازم است در انتخاب روش مناسب عددی، میان سرعت و دقت، شرایط بهینه در نظر گرفته شود.

---

1-Finite Difference Method

2-Open-ended Problems

3-Close-ended Problems

قبل از معرفی فصل‌های کتاب حاضر ذکر این نکته حائز اهمیت است که هدف از کتاب حاضر ارائه کلیه بخش‌ها و مباحث محاسبه‌های عددی نبوده است، زیرا با مروری بر مراجع عددی منتشر شده در خارج و داخل کشور، ملاحظه می‌شود کتاب‌های بی‌شماری در این زمینه به چاپ رسیده است، در حالی که کتاب‌های بسیار کمی در موضوع کاربردهای خاص روش‌های عددی در زمینه‌ی مهندسی، خصوصاً مهندسی شیمی و فرایندهای مربوطه متمرکز شده است. بنابراین، هدف از این کتاب ارائه‌ی مباحث، روش‌ها و مثال‌هایی است که بیشتر در مهندسی شیمی کاربرد دارند.

با توجه به مقدمه مذکور و با هدف درک بیشتر و یافتن روش‌های مؤثر جهت حل معادله‌های حاصل از فرمول‌بندی فرایندهای مهندسی شیمی، کتاب حاضر در هشت فصل همراه با چهار پیوست تألیف شده است.

در این فصل مقدمه‌هایی در مورد انواع فرمول‌بندی در مهندسی شیمی ارائه گردیده است. فصل دوم کتاب به معرفی روش اختلاف محدود، عملگرها و چندجمله‌ای‌های درونی‌یابی ساخته شده بر مبنای اختلاف‌های محدود پرداخته است، همچنین مشتق‌گیری عددی و فرمول‌های مشتق عددی، روش به‌دست آوردن آن‌ها همراه با آنالیز خطا ارائه شده است. از نتایج این فصل در حل معادله‌های دیفرانسیل معمولی و پاره‌ای استفاده خواهد شد.

فصل سوم کتاب به روش‌های حل معادله‌های دیفرانسیل معمولی رتبه‌ی اول و بالاتر اختصاص یافته است. در معادله‌های دیفرانسیل رتبه‌ی اول روش‌های تک مرحله‌ای و چندمرحله‌ای مطرح، مقایسه و تجزیه و تحلیل شده‌اند. معادله‌های دیفرانسیل رتبه‌ی دوم و بالاتر، در دو دسته مسائل شرط اولیه و شرط مرزی ارائه شده‌اند و تکنیک‌های حل معادله‌های دیفرانسیل خطی و غیرخطی ارائه شده و مثال‌های کاربردی برای هر بخش به همراه الگوریتم و روش عددی ارائه شده است. در این فصل، مسائل شرط مرزی در سیستم‌های ترکیبی همراه با شرایط مرزی تماس حل گردیده است.

فصل چهارم کتاب به روش باقی‌مانده‌های وزنی به ویژه روش تلفیق متعامد جهت حل مسائل شرط مرزی اختصاص دارد. این روش با استفاده از تقریب یک چندجمله‌ای در نقاط صفر یک تابع متعامد، معادله‌های دیفرانسیل رتبه‌ی دوم (خطی یا غیرخطی) را به معادله‌های جبری تبدیل کرده و با روش‌های معمول حل می‌نماید و به جواب‌هایی با دقت بالا دست می‌یابد.

فصل پنجم به حل دستگاه معادله‌های جبری غیرخطی اختصاص دارد و سعی می‌کند روش‌های عددی مناسب جهت حل دستگاه معادله‌های غیرخطی‌ها را ارائه دهد. مثال‌های کاربردی زیادی در بخش فرایندهای تبدیل با سرعت‌های غیرخطی در واکنش‌گاه‌های مداوم همراه با اختلاط در این دسته از مسائل می‌گنجد.

فصل ششم به بخش رگرسیون خطی و غیرخطی اختصاص می‌یابد که مقدمه‌ای بر بهینه‌سازی پارامترها یا شرایط عملیاتی در فرایندهای مختلف است. در این بخش، ابتدا مبنای رگرسیون خطی که حداقل نمودن مربعات خطا می‌باشد، مطرح شده و سپس به ارائه روش رگرسیون غیرخطی همراه با مثال‌های کاربردی پرداخته می‌شود.

فصل هفتم به روش‌های حل معادله‌های دیفرانسیل پاره‌ای خطی و غیرخطی پرداخته است و برحسب نوع معادله‌ها شامل بیضی‌گون، سهمی‌گون و هذلولی‌گون، روش‌های صریح و غیرصریح را معرفی کرده و الگوریتم حل را ارائه داده است. جهت حل معادله‌های غیرخطی سهمی‌گون نیز روش تلفیق متعامد و کاربرد آن در مسائل مهندسی شیمی مطرح شده است.

فصل هشتم به آنالیز خطا و شرایط پایداری روش عددی در حل معادله‌های دیفرانسیل پاره‌ای پرداخته است و براساس روش‌های مختلف، در حل معادله‌های سهموی شرط پایداری را تحقیق کرده و از این نظر نقاط ضعف و قوت روش‌های اختلاف محدود را با یکدیگر مقایسه کرده است.

چهار پیوست برنامه‌نویسی در این کتاب تهیه شده است که شامل مسائل کاربردی براساس مثال‌های داخل تمرین‌های آخر هر فصل می‌باشد و به برنامه‌نویسی در محیط نرم‌افزاری *MATLAB* اختصاص دارد. اجرای برنامه منجر به تولید جواب‌ها به صورت نمودار تابع یا تابع‌های مسئله برحسب متغیرهای مستقل شده که در انتهای هر برنامه ارائه گردیده است.

پیوست (۱) به حل تمرین‌های کاربردی فصل سوم در مورد دستگاه معادله‌های دیفرانسیل رتبه‌ی اول اختصاص یافته است.

پیوست (۲) به حل تمرین‌های فصل چهارم شامل مسائل شرط مرزی در معادله‌های دیفرانسیل رتبه‌ی دوم و معادله‌های دیفرانسیل سهموی با روش تلفیق متعامد پرداخته است.

پیوست (۳) شامل حل تمرین‌های فصل پنجم و ششم می‌باشد و تمرین‌های کاربردی در حل دستگاه معادله‌های جبری غیرخطی و رگرسیون غیرخطی حل و نتایج ارائه شده است.

در پیوست (۴) به حل تمرین‌های فصل هفتم در زمینه انواع معادله‌های دیفرانسیل پاره‌ای پرداخته شده است. در این بخش به روش‌های اختلاف محدود، روش خط، روش تلفیق متعامد جهت حل مسائل خطی و غیرخطی پرداخته شده است.

پیوست (۵) کتاب به معرفی برخی از برنامه‌های آماده (ماژول‌ها) و استفاده شده در محیط *MATLAB* پرداخته است و در نهایت جدولی شامل معرفی فایل‌های موجود در پیوست‌های (۱) تا (۴) ارائه شده است.

هر برنامه‌ی کامپیوتری شامل فایل اصلی برنامه، فایل داده‌های ورودی و فایل‌های کمکی *MATLAB* می‌باشد. در برخی از مسائل که حل تحلیلی امکان‌پذیر بوده است، حل تحلیلی مسئله نیز انجام شده و با نتایج برنامه عددی مقایسه شده است و در هر مورد که حل تحلیلی امکان‌پذیر نبوده، مسئله با روش‌های مختلف عددی حل شده و نتایج با یکدیگر مقایسه شده است.

پیوست (۵) شامل مختصری در مورد برنامه‌های کمکی *MATLAB* و روش استفاده از آن‌ها می‌باشد.

به این ترتیب کتاب حاضر مجموعه‌ای از روش‌های عددی است که در حل معادله‌های حاصل از فرمول‌بندی مسائلی که امکان حل تحلیلی ندارند کاربرد مؤثری داشته و می‌تواند راهنمای مناسبی جهت مدل‌سازی، شبیه‌سازی، طراحی و بهینه‌سازی فرایندهای مهندسی شیمی باشد.

مرجع

۱. شهره فاطمی، "مدل‌سازی ریاضی در مهندسی شیمی"، انتشارات دانشگاه تهران، ویرایش دوم، ۱۳۸۹.