

مدل سازی ریاضی در مهندسی شیمی

تالیف

دکتر شهره فاطمی

عضو هیأت علمی دانشکده مهندسی شیمی دانشکده فنی

دانشگاه تهران



انتشارات دانشگاه تهران

شماره ۲۶۷۶

شماره مسلسل ۶۴۶۴

فاطمی، شهره، ۱۳۳۵ - مدل‌سازی ریاضی در مهندسی شیمی / شهره فاطمی، ویراست ۲. تهران: دانشگاه تهران. مؤسسه انتشارات، ۱۳۸۳. ۳۹۸ ص: جدول، نمودار. (انتشارات دانشگاه تهران: شماره ۲۶۷۶). ISBN 978-964-03-5983-9		
فهرست نویسی بر اساس اطلاعات فیبا. چاپ دوم. واژه‌نامه. مهندسی شیمی - - ریاضیات. ریاضیات - - مسائل، تمرین‌ها و غیره (عالی). دانشگاه تهران. مؤسسه انتشارات. ۲ ف ۹ ر ۵۵ / ۲ / TP شماره کتابشناسی ملی		
۱۳۸۹	۶۶۰/۰۱۵۱	
۱۹۵۸۱۳۱		

عنوان: مدل‌سازی ریاضی در مهندسی شیمی

تألیف: دکتر شهره فاطمی

نوبت چاپ: دوم با تجدید نظر و اضافات

تاریخ انتشار: ۱۳۸۹

شمارگان: ۱۰۰۰ نسخه

ناشر: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران

چاپ و صحافی: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران

شابک: ۹ - ۵۹۸۳ - ۰۳ - ۹۶۴ - ۹۷۸

ISBN 978-964-03-5983-9

«مسئولیت صحت مطالب کتاب با مؤلف است»

«کلیه حقوق برای ناشر محفوظ است»

بها: ۵۸۰۰۰ ریال

خیابان کارگر شمالی - خیابان شهید فرشی مقدم - مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران

پست الکترونیک: press@ut.ac.ir - سایت: www.press.ut.ac.ir

بخش و فروش: تلفکس ۸۸۰۱۲۰۷۸

فهرست مطالب

۱۱	پیشگفتار ویرایش اول
۱۳	پیشگفتار ویرایش دوم
	فصل اول
۱۵	اصول مدل‌سازی ریاضی
۱۷	۱-۱- تعریف مدل‌سازی ریاضی
۱۷	۲-۱- کاربرد مدل‌سازی ریاضی
۱۸	۳-۱- روش‌های مدل‌سازی
۱۸	۴-۱- اهداف مدل‌سازی ریاضی
۱۹	۵-۱- مراحل مدل‌سازی ریاضی
۱۹	۱-۵-۱- فرمول‌بندی
۲۰	۲-۵-۱- حل معادله‌های مدل
۲۱	۳-۵-۱- تحلیل نتایج
۲۲	۶-۱- مراحل فرمول‌بندی
	فصل دوم
۲۷	فرمول‌بندی توده‌ای
۲۹	۱-۲- مقدمه
۲۹	۲-۲- قضیه تبدیل رینولدز
۳۳	۳-۲- فرمول‌بندی توده‌ای قانون‌های عمومی
۳۳	۱-۳-۲- فرمول‌بندی قانون بقای جرم
۳۴	۲-۳-۲- فرمول‌بندی جزء جرمی
۴۴	۳-۳-۲- فرمول‌بندی قانون بقای انرژی
۴۷	۱-۳-۳-۲- معادله‌ی حرارت
۴۸	۲-۳-۳-۲- معادله‌ی برنولی
۵۲	۴-۳-۲- فرمول‌بندی قانون بقای اندازه‌ی حرکت

۶۱	مراجع
۶۲	پیوست (فرمول بندی انرژی حرارتی در واکنش گاه اختلاط کامل ناپایا بر اساس انتالپی اجزاء)
۶۵	تمرین ها

فصل سوم

۷۳	معادله های دیفرانسیل معمولی
۷۵	۱-۳- مقدمه
۷۵	۲-۳- ویژگی یک معادله ی دیفرانسیل
۷۶	۳-۳- معادله های دیفرانسیل خطی رتبه اول
۷۷	۱-۳-۳- روش جداسازی متغیرها
۷۷	۲-۳-۳- روش فاکتور انتگرال
۷۸	۳-۳-۳- روش تغییر متغیر
۷۸	۱-۳-۳-۳- معادله ی برنولی
۷۹	۲-۳-۳-۳- معادله ی ریکاتی
۸۰	۴-۳-۳- روش تبدیل لاپلاس
۸۶	۴-۳- معادله های دیفرانسیل خطی رتبه دوم
۸۷	۱-۴-۳- معادله های دیفرانسیل با ضرایب ثابت
۸۷	۱-۱-۴-۳- معادله ی همگن
۸۸	۲-۱-۴-۳- معادله ی ناهمگن
۹۰	۲-۴-۳- دستگاه معادله های دیفرانسیل خطی
۹۱	۳-۴-۳- معادله های دیفرانسیل خطی رتبه دوم با ضرایب متغیر
۹۲	۱-۳-۴-۳- معادله ی کوشی یا اولر
۹۳	۲-۳-۴-۳- معادله ی بسل
۹۸	۱-۲-۳-۴-۳- معادله ی بسل تغییر یافته
۱۰۱	۲-۲-۳-۴-۳- شکل کلی معادله های بسل
۱۰۵	۳-۲-۳-۴-۳- خواص توابع بسل
۱۰۸	۴-۲-۳-۴-۳- نمایش نمودار توابع بسل
۱۰۸	۳-۳-۴-۳- معادله ی لژاندر
۱۱۱	۱-۳-۳-۴-۳- چند جمله ای و سری لژاندر
۱۱۵	۲-۳-۳-۴-۳- خواص چند جمله ای لژاندر نوع اول
۱۱۸	۳-۳-۳-۴-۳- کاربرد معادله ی لژاندر
۱۱۸	مراجع
۱۱۹	پیوست (معادله دیفرانسیل رتبه دوم غیر همگن در مدل سازی یک واکنش گاه نیمه پیوسته)
۱۲۳	تمرین ها

فصل چهارم

فرمول بندی دیفرانسیلی	۱۲۹
۱-۱- مقدمه	۱۳۱
۲-۱- جزء حجم	۱۳۱
۱-۲-۱- جزء حجم در مختصات کارتزین	۱۳۲
۲-۲-۱- جزء حجم در مختصات استوانه‌ای	۱۳۳
۳-۲-۱- جزء حجم در مختصات کروی	۱۳۵
۳-۱- فرمول بندی قانون‌های عمومی	۱۳۷
۱-۳-۱- قانون بقای جرم	۱۳۸
۱-۱-۳-۱- مختصات کارتزین	۱۳۸
۲-۱-۳-۱- مختصات استوانه‌ای	۱۴۰
۳-۱-۳-۱- مختصات کروی	۱۴۲
۲-۳-۱- فرمول بندی جزء مولی	۱۴۸
۱-۲-۳-۱- مختصات کارتزین	۱۴۹
۲-۲-۳-۱- سیال تراکم‌ناپذیر با ضریب نفوذ مولکولی ثابت	۱۵۰
۳-۲-۳-۱- سیستم‌های نفوذی	۱۵۲
۳-۳-۱- قانون بقای انرژی	۱۶۵
۴-۳-۱- قانون بقای اندازه‌ی حرکت	۱۷۵
۴-۱- انواع شرایط مرزی	۱۹۰
۱-۴-۱- شرط مرزی نوع اول	۱۹۰
۲-۴-۱- شرط مرزی نوع دوم	۱۹۰
۳-۴-۱- شرط مرزی نوع سوم	۱۹۱
۴-۴-۱- شرط مرزی تماس	۱۹۱
مراجع	۲۰۰
تمرین‌ها	۲۰۱

فصل پنجم

کاربرد معادله‌های بسل	۲۰۹
۱-۱- مقدمه	۲۱۱
۲-۱- سطح‌های گسترش‌یافته	۲۱۱
۳-۱- مدل یک بعدی در مختصات استوانه‌ای	۲۲۰
۴-۱- مدل یک بعدی در مختصات کروی	۲۲۲
۵-۱- مدل ترکیبی در یک واکنش‌گاه کانالیزوری	۲۲۵
مراجع	۲۲۸
تمرین‌ها	۲۲۹

فصل ششم

۲۳۳	معادله‌های دیفرانسیل جزئی
۲۳۵	۱-۶- مقدمه
۲۳۵	۲-۶- انواع معادله‌های دیفرانسیل جزئی
۲۳۶	۳-۶- روش حل معادله‌های دیفرانسیل جزئی
۲۳۷	۴-۶- روش جداسازی متغیرها
۲۳۷	۱-۴-۶- خاصیت تعامد
۲۴۱	۱-۱-۴-۶- تابع‌های متعامد با فاکتور وزنی
۲۴۱	۲-۱-۴-۶- روش تشخیص تابع‌های متعامد
۲۴۶	۲-۴-۶- جداسازی متغیرها در معادله‌ی سهمی گون
۲۶۹	۳-۴-۶- جداسازی متغیرها در معادله‌ی بیضی گون
۲۸۰	۴-۴-۶- جداسازی متغیرها در معادله‌ی هذلولی گون
۲۸۱	۵-۶- معادله‌های دیفرانسیل ناهمگن
۲۸۱	۱-۵-۶- روش جمع آثار
۲۸۵	۱-۱-۵-۶- معادله‌ی ناهمگن با شرایط همگن
۲۹۲	۲-۱-۵-۶- معادله‌ی همگن با شرایط ناهمگن
۳۰۲	۳-۱-۵-۶- معادله‌ی ناهمگن با شرایط ناهمگن
۳۱۱	۶-۶- روش ترکیب متغیرها
۳۱۹	۷-۶- روش تبدیل لاپلاس
۳۲۸	مراجع
۳۲۹	پوست (جداسازی متغیرها در معادله دیفرانسیلی هذلولی گون)
۳۳۴	تمرین‌ها

فصل هفتم

۳۴۱	فرمول‌بندی انتگرالی
۳۴۳	۱-۷- مقدمه
۳۴۳	۲-۷- روش فرمول‌بندی
۳۴۴	۱-۲-۷- قضیه تبدیل ریتولدز
۳۴۵	۱-۱-۲-۷- قانون بقای جرم
۳۴۶	۲-۱-۲-۷- قانون بقای انرژی
۳۴۸	۳-۱-۲-۷- قانون بقای اندازه حرکت
۳۴۹	۲-۲-۷- موازنه کمیت در جزء حجم
۳۴۹	۱-۲-۲-۷- قانون بقای جرم
۳۵۰	۲-۲-۲-۷- قانون بقای انرژی
۳۵۱	۳-۷- روش حل معادله‌های انتگرالی
۳۵۱	۱-۳-۷- روش ریتز
۳۵۲	۲-۳-۷- روش کانتروپچ

۳۶۸		مراجع
۳۶۹		تمرین‌ها

فصل هشتم

۳۷۱		مقدمه‌ای بر شبیه سازی
۳۷۳		۱-۸- مقدمه
۳۷۴		۲-۸- دومخزن انتقال حرارت
۳۷۶		۳-۸- واکنش گاه اختلاط کامل با حجم متغیر
۳۷۸		۴-۸- واکنش گاه گازی تحت فشار
۳۸۰		۵-۸- تبخیرکننده‌ی یک جزئی
۳۸۴		۶-۸- تبخیرکننده‌ی ناگهانی چند جزئی
۳۸۸		۷-۸- واکنش گاه ناپیوسته غیرهم‌دما
۳۹۳		۸-۸- واکنش گاه با محدودیت انتقال جرم
۳۹۶		۹-۸- برج تقطیر دو جزئی
۴۰۱		۱۰-۸- تقطیر ناپیوسته‌ی چند جزئی
۴۰۵		۱۱-۸- جذب سطحی گاز در شرایط دینامیک
۴۱۰		۱۲-۸- واکنش گاه بستر ثابت، مداوم، غیر هم‌دما و ناپایا
۴۱۴		۱۳-۸- فرایند گوگردزدایی نفت در واکنش گاه بستر چکان
۴۱۹		۱۴-۸- واکنش گاه دوغابی با جریان پیوسته
۴۲۲		مراجع

پیشگفتار ویرایش اول

در یک فرایند شیمیایی یا فیزیکی، تغییرات زیادی روی می‌دهد. این تحولات به تولید محصولات و یا تغییرات فیزیکی جدیدی منجر می‌شود، که نوع و کیفیت آن به عوامل متعددی از جمله مکانیسم حاکم بر تحول، نحوه تماس مواد و فازهای مختلف، شرایط عملیاتی و شرایط ورودی، نوع فرایند و تجهیزات به کار رفته بستگی دارد. مدل‌سازی ریاضی فرایندها این امکان را فراهم می‌کند که کلیه تحولات و تغییرات انجام شده به زبان ریاضی بیان شود و اثر کلیه عوامل مؤثر به کمک معادله‌های ریاضی تعیین گردد.

در فرایندهای مهندسی شیمی سه نوع پدیده اصلی جرم، انرژی و مومنتوم به طور هم‌زمان، قابل فرمول‌بندی و مدل‌سازی است. یک مدل ریاضی قابل قبول مدلی است که بتواند با شرایط واقعی تحول تطبیق داشته و با دقت قابل قبولی تغییرات مورد نظر را تحلیل کند.

مدل‌سازی ریاضی مبنای شبیه‌سازی فرایندها و واحدهای پیشرفته در مقیاس صنعتی است و از اهمیت ویژه‌ای در گرایش‌های متنوع مهندسی شیمی برخوردار است.

کتاب حاضر با هدف آشنایی با مبانی و روش‌های مدل‌سازی و تکنیک‌های تحلیلی معمول در حل معادلات حاصل، تألیف و تدوین شده است. فصل اول کتاب مقدمه‌ای است در مورد اصول مدل‌سازی ریاضی که به معرفی مراحل مختلف مدل‌سازی و اهداف آن می‌پردازد.

مرحله اول در مدل‌سازی ریاضی فرمول‌بندی است. یک فرمول‌بندی صحیح با توجه به فرض‌های حاکم بر تحول، به یک مدل‌سازی قابل قبول منجر می‌شود. با توجه به فرض‌های حاکم بر تحول می‌توان از یکی از سه روش مختلف توده‌ای، دیفرانسیلی و انتگرالی استفاده کرد.

در فصل دوم کتاب فرمول‌بندی توده‌ای که ساده‌تر از انواع دیگر است بررسی شده است. فرمول‌بندی دیفرانسیلی و انتگرالی در فصل‌های چهارم و هفتم مطرح شده‌اند.

مرحله دوم در مدل‌سازی ریاضی حل معادله‌های حاصل از فرمول‌بندی است. در کتاب حاضر از روش‌های تحلیلی موجود در مباحث ریاضیات مهندسی و معادله‌های دیفرانسیل در مثال‌های کاربردی

استفاده شده است. در فصل‌های سوم، پنجم و ششم به معرفی و حل تحلیلی معادله‌های دیفرانسیلی حاصل از فرمول‌بندی پرداخته شده است.

یک مهندس شیمی قبل از فرمول‌بندی مسأله باید تشخیص دهد که فرمول‌بندی با اعمال یا حذف یک فرض تغییر می‌کند و راه حل مناسب برای آن کدام است. به این منظور در کتاب حاضر سعی شده پس از هر نوع فرمول‌بندی، روش حل معادله‌های حاصل به کمک مثال‌های کاربردی ارائه شود.

معادله‌های حاصل از فرمول‌بندی توده‌ای در شرایط ناپایا، معادله‌های دیفرانسیل معمولی است، از این-رو فصل سوم کتاب به حل این معادله‌ها اختصاص یافته است.

در فصل‌های پنجم و ششم به حل معادله‌هایی پرداخته شده است که از فرمول‌بندی دیفرانسیلی تحولات در شرایط مختلف حاصل می‌شود، بنابراین این دو فصل پس از فصل فرمول‌بندی دیفرانسیلی (فصل چهارم) ارائه شده‌اند. فصل پنجم در مورد کاربرد معادله‌های بسل است و فصل ششم به حل معادله‌های دیفرانسیل جزئی اختصاص یافته است.

فصل هفتم کتاب درباره فرمول‌بندی انتگرالی و روش حل معادله‌های حاصل است. نتایج حاصل از این نوع فرمول‌بندی به دلیل انتخاب یک تابع چندجمله‌ای به عنوان جواب مدل، تقریبی بوده و معمولاً در مواقعی که مدل‌سازی پیچیده است و روش‌های حل دقیق، مشکل یا ناممکن است، از این روش استفاده می‌شود.

فصل هشتم کتاب با عنوان مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی ارائه شده است که شیوه فرمول‌بندی فرایندهای پیچیده‌تر مهندسی را همراه با متغیرهای ورودی و قابل تغییر توسط کنترل‌گر نشان می‌دهد. در این فرایندها متغیرهای وابسته فرمول‌بندی شده و درجه آزادی سیستم بررسی می‌شود. هدف از این فصل توجه به عوامل و شرایط عملی و پیچیده‌ای است که در شبیه‌سازی فرایندهای واقعی با آنها مواجه می‌شویم.

کتاب حاضر به عنوان مرجع درسی برای دانشجویان مهندسی فرایند در مقطع‌های کارشناسی و کارشناسی ارشد، توصیه می‌شود. همچنین در درس پدیده‌های انتقال این کتاب مرجع مهمی برای مدل‌سازی پدیده‌های انتقال جرم، انتقال حرارت و انتقال اندازه حرکت می‌باشد.

پیشگفتار ویرایش دوم

کتاب حاضر، از کتاب‌های مرجع در زمینه مدل‌سازی ریاضی فرایندها و پدیده‌های انتقال جرم، حرارت و اندازه حرکت بوده و مورد نیاز در علوم مهندسی، شیمی و فیزیک کاربردی می‌باشد.

در ویرایش دوم کتاب «کاربرد ریاضیات و مدل‌سازی در مهندسی شیمی» که عنوان آن در چاپ جدید به «مدل‌سازی ریاضی در مهندسی شیمی» تغییر یافته است، فصل‌های مختلف مورد بررسی و تجدید نظر، همراه با طرح موارد جدید، قرار گرفته و انواع مدل‌سازی ریاضی، فرمول‌بندی و حل تحلیلی آنها با ارائه مثال‌های کاربردی و صنعتی از سطح پایه و فرمول‌بندی‌های ساده‌تر به سطح پیشرفته و فرمول‌بندی‌های پیچیده‌تر توسعه یافته است. در این کتاب، فرایندهای متنوعی در دو جنبه جداسازی و واکنشی همراه با متغیرهای چندگانه و به صورت مدل‌های ترکیبی در شرایط پایا و گذرا، مطرح، فرمول‌بندی و تجزیه و تحلیل شده است. معادله‌های حاصل از فرمول‌بندی قانون‌های عمومی و ویژه برحسب فرض‌های مدل به صورت مجموعه‌ای از معادله‌های دیفرانسیل و جبری پدید می‌آیند که لازم است جهت تعیین پاسخ، هم‌زمان حل شوند، و از آنجا که کتاب حاضر بر مبنای روش‌های تحلیلی استوار شده است، از این روش‌ها جهت حل فرمول‌های مدل استفاده شده است. لازم به ذکر است که در فرایندهای غیر ایده‌آل که معمولاً منجر به تولید معادله‌های متعدد و غیرخطی می‌شوند، امکان حل تحلیلی و هم‌زمان معادله‌ها وجود ندارد. در عوض با انجام فرض‌های منطقی متغیرهای تأثیرگذارتر مورد توجه قرار گرفته و ساده‌سازی‌های مهندسی در آنها به نحوی انجام می‌شود که هم مدل منطقی باشد و هم امکان حل معادله‌های حاصل میسر باشد. در عین حال ذکر این نکته ضروری است که علی‌رغم لحاظ فرض‌های ساده کننده در مدل‌های کاربردی نیاز به استفاده از روش‌های عددی و کامپیوتری، جهت حل معادله‌های مدل کاملاً چشم‌گیر است. امید است در جلد دوم کتاب «مدل-

سازی ریاضی در مهندسی شیمی، روش‌های عددی و کامپیوتری به منظور شبیه‌سازی فرایندهای مختلف کاربردی، ارائه گردد. در پایان از عزیزانی که در ویرایش جدید کتاب با اینجانب همکاری داشته‌اند، تشکر و قدردانی می‌شود.

مؤلف، زمستان ۸۸