

# مدل سازی ریاضی در مهندسی شیمی

تألیف

دکتر شهره فاطمی

عضوهیات علمی دانشکده مهندسی شیمی پردیس دانشکده‌های فنی دانشگاه تهران





## فهرست مطالب

|    |   |       |
|----|---|-------|
| ذ  | پیشگفتار ویرایش دوم                     | ..... |
| ر  | پیشگفتار ویرایش اول                     | ..... |
| ۱  | <b>فصل اول - اصول مدل سازی ریاضی</b>    | ..... |
| ۲  | ۱-۱ تعریف مدل سازی ریاضی                | ..... |
| ۲  | ۲-۱ کاربرد مدل سازی ریاضی               | ..... |
| ۲  | ۳-۱ روش های مدل سازی                    | ..... |
| ۳  | ۴-۱ اهداف مدل سازی ریاضی                | ..... |
| ۳  | ۵-۱ مراحل مدل سازی ریاضی                | ..... |
| ۳  | ۱-۵-۱ فرمول بندی                        | ..... |
| ۴  | ۲-۵-۱ حل معادله های مدل                 | ..... |
| ۵  | ۳-۵-۱ تحلیل نتایج                       | ..... |
| ۶  | ۶-۱ مراحل فرمول بندی                    | ..... |
| ۹  | <b>فصل دوم - فرمول بندی توده ای</b>     | ..... |
| ۱۰ | ۱-۲ مقدمه                               | ..... |
| ۱۰ | ۲-۲ قضیه تبدیل رینولدز                  | ..... |
| ۱۳ | ۳-۲ فرمول بندی توده ای قانون های عمومی  | ..... |
| ۱۳ | ۱-۳-۲ فرمول بندی قانون بقای جرم         | ..... |
| ۱۵ | ۲-۳-۲ فرمول بندی جزء مولی               | ..... |
| ۲۴ | ۳-۳-۲ فرمول بندی قانون بقای انرژی       | ..... |
| ۲۷ | ۱-۳-۳-۲ معادله حرارت                    | ..... |
| ۲۸ | ۲-۳-۳-۲ معادله برنولی                   | ..... |
| ۳۲ | ۴-۳-۲ فرمول بندی قانون بقای اندازه حرکت | ..... |

|    |   |
|----|---|
| ۴۱ | ..... مراجع   |
| ۴۲ | ..... پیوست (فرمول‌بندی انرژی حرارتی در واکنش‌گاه اختلاط کامل ناپایا بر اساس انتالپی اجزاء) |
| ۴۵ | ..... تمرین‌ها  |
| ۵۳ | ..... فصل سوم - معادله‌های دیفرانسیل معمولی   |
| ۵۴ | ..... ۱-۳ مقدمه   |
| ۵۴ | ..... ۲-۳ ویژگی یک معادله دیفرانسیل   |
| ۵۵ | ..... ۳-۳ معادله‌های دیفرانسیل خطی رتبه اول   |
| ۵۵ | ..... ۱-۳-۳ روش جداسازی متغیرها   |
| ۵۵ | ..... ۲-۳-۳ روش عامل انتگرال‌ساز  |
| ۵۶ | ..... ۳-۳-۳ روش تغییر متغیر   |
| ۵۷ | ..... ۱-۳-۳-۳ معادله برنولی   |
| ۵۷ | ..... ۲-۳-۳-۳ معادله ریکاتی   |
| ۵۸ | ..... ۴-۳-۳ روش تبدیل لاپلاس  |
| ۶۴ | ..... ۴-۳ معادله‌های دیفرانسیل خطی رتبه دوم   |
| ۶۵ | ..... ۱-۴-۳ معادله‌های دیفرانسیل با ضرایب ثابت  |
| ۶۵ | ..... ۱-۱-۴-۳ معادله همگن   |
| ۶۶ | ..... ۲-۱-۴-۳ معادله ناهمگن   |
| ۶۷ | ..... ۲-۴-۳ دستگاه معادله‌های دیفرانسیل خطی   |
| ۶۹ | ..... ۳-۴-۳ معادله‌های دیفرانسیل خطی رتبه دوم با ضرایب متغیر                                |
| ۶۹ | ..... ۱-۳-۴-۳ معادله کوشی یا اولر   |
| ۷۰ | ..... ۲-۳-۴-۳ معادله بسل  |
| ۷۵ | ..... ۱-۲-۳-۴-۳ معادله بسل تغییر یافته  |
| ۷۷ | ..... ۲-۲-۳-۴-۳ شکل کلی معادله‌های بسل  |
| ۸۱ | ..... ۳-۲-۳-۴-۳ خواص توابع بسل  |
| ۸۴ | ..... ۴-۲-۳-۴-۳ نمایش نمودار توابع بسل  |
| ۸۴ | ..... ۳-۳-۴-۳ معادله لژاندر   |
| ۸۴ | ..... ۱-۳-۳-۴-۳ چند جمله‌ای و سری لژاندر  |
| ۹۱ | ..... ۲-۳-۳-۴-۳ خواص چندجمله‌ای لژاندر نوع اول  |

|     |   |
|-----|---|
| ۹۴  | ..... کاربرد معادله لژاندر ۳-۳-۳-۴-۳  |
| ۹۵  | ..... مراجع   |
| ۹۶  | ..... پیوست (معادله دیفرانسیل رتبه دوم غیر همگن در مدل سازی یک واکنش گاه نیمه پیوسته) |
| ۱۰۰ | ..... تمرین ها  |
| ۱۰۵ | ..... فصل چهارم - فرمول بندی دیفرانسیلی   |
| ۱۰۶ | ..... ۱-۴ مقدمه   |
| ۱۰۶ | ..... ۲-۴ جزء حجم   |
| ۱۰۷ | ..... ۱-۲-۴ جزء حجم در مختصات کارتزین   |
| ۱۰۸ | ..... ۲-۲-۴ جزء حجم در مختصات استوانه ای  |
| ۱۱۰ | ..... ۳-۲-۴ جزء حجم در مختصات کروی  |
| ۱۱۲ | ..... ۳-۴ فرمول بندی قانون های عمومی  |
| ۱۱۳ | ..... ۱-۳-۴ قانون بقای جرم  |
| ۱۱۳ | ..... ۱-۱-۳-۴ مختصات کارتزین  |
| ۱۱۵ | ..... ۲-۱-۳-۴ مختصات استوانه ای   |
| ۱۱۷ | ..... ۳-۱-۳-۴ مختصات کروی   |
| ۱۲۲ | ..... ۲-۳-۴ فرمول بندی جزء مولی   |
| ۱۲۳ | ..... ۱-۲-۳-۴ مختصات کارتزین  |
| ۱۲۴ | ..... ۲-۲-۳-۴ سیال تراکم ناپذیر با ضریب نفوذ مولکولی ثابت                             |
| ۱۲۵ | ..... ۳-۲-۳-۴ سیستم های نفوذی   |
| ۱۳۸ | ..... ۳-۳-۴ قانون بقای انرژی  |
| ۱۴۸ | ..... ۴-۳-۴ قانون بقای اندازه حرکت  |
| ۱۶۱ | ..... ۴-۴ انواع شرایط مرزی  |
| ۱۶۱ | ..... ۱-۴-۴ شرط مرزی نوع اول  |
| ۱۶۲ | ..... ۲-۴-۴ شرط مرزی نوع دوم  |
| ۱۶۲ | ..... ۳-۴-۴ شرط مرزی نوع سوم  |
| ۱۶۲ | ..... ۴-۴-۴ شرط مرزی تماس   |

|     |  |
|-----|--|
| ۱۷۱ | ..... مراجع                                      |
| ۱۷۲ | ..... تمرین‌ها                                   |
| ۱۷۹ | ..... فصل پنجم - کاربرد معادله‌های بسل           |
| ۱۸۰ | ..... ۱-۵ مقدمه                                  |
| ۱۸۰ | ..... ۲-۵ سطح‌های گسترش یافته                    |
| ۱۸۹ | ..... ۳-۵ مدل یک بعدی در مختصات استوانه‌ای       |
| ۱۹۱ | ..... ۴-۵ مدل یک بعدی در مختصات کروی             |
| ۱۹۴ | ..... ۵-۵ مدل ترکیبی در یک واکنش گاه کاتالیزوری  |
| ۱۹۷ | ..... مراجع                                      |
| ۱۹۸ | ..... تمرین‌ها                                   |
| ۲۰۱ | ..... فصل ششم - معادله‌های دیفرانسیل جزئی        |
| ۲۰۲ | ..... ۱-۶ مقدمه                                  |
| ۲۰۲ | ..... ۲-۶ انواع معادله‌های دیفرانسیل جزئی        |
| ۲۰۳ | ..... ۳-۶ روش حل معادله‌های دیفرانسیل جزئی       |
| ۲۰۴ | ..... ۴-۶ روش جداسازی متغیرها                    |
| ۲۰۴ | ..... ۱-۴-۶ خاصیت تعامد                          |
| ۲۰۷ | ..... ۱-۱-۴-۶ تابع‌های متعامد با فاکتور وزنی     |
| ۲۰۸ | ..... ۲-۱-۴-۶ روش تشخیص تابع‌های متعامد          |
| ۲۱۳ | ..... ۲-۴-۶ جداسازی متغیرها در معادله سهمی‌گون   |
| ۲۳۳ | ..... ۳-۴-۶ جداسازی متغیرها در معادله بیضی‌گون   |
| ۲۴۵ | ..... ۴-۴-۶ جداسازی متغیرها در معادله هذلولی‌گون |
| ۲۴۵ | ..... ۵-۶ معادله‌های دیفرانسیل ناهمگن            |
| ۲۴۶ | ..... ۱-۵-۶ روش جمع آثار                         |
| ۲۴۹ | ..... ۱-۱-۵-۶ معادله ناهمگن با شرایط همگن        |
| ۲۵۷ | ..... ۲-۱-۵-۶ معادله همگن با شرایط ناهمگن        |
| ۲۶۶ | ..... ۳-۱-۵-۶ معادله ناهمگن با شرایط ناهمگن      |

فهرست □ خ

|     |     |   |
|-----|-----|---|
| ۲۷۴ | ۶-۶ | روش ترکیب متغیرها                                       |
| ۲۸۲ | ۷-۶ | روش تبدیل لاپلاس  |
| ۲۹۰ |     | مراجع   |
| ۲۹۱ |     | پیوست (جداسازی متغیرها در معادله دیفرانسیلی هذلولی گون) |
| ۲۹۵ |     | تمرین‌ها  |

**فصل هفتم - فرمول بندی انتگرالی** ..... ۳۰۳

|     |         |                            |
|-----|---------|----------------------------|
| ۳۰۴ | ۱-۷     | مقدمه                      |
| ۳۰۴ | ۲-۷     | روش فرمول بندی             |
| ۳۰۴ | ۱-۲-۷   | قضیه تبدیل رینولدز         |
| ۳۰۶ | ۱-۱-۲-۷ | قانون بقای جرم             |
| ۳۰۷ | ۲-۱-۲-۷ | قانون بقای انرژی           |
| ۳۰۸ | ۳-۱-۲-۷ | قانون بقای اندازه حرکت     |
| ۳۰۹ | ۲-۲-۷   | موازنه کمیت در جزء حجم     |
| ۳۰۹ | ۱-۲-۲-۷ | قانون بقای جرم             |
| ۳۱۰ | ۲-۲-۲-۷ | قانون بقای انرژی           |
| ۳۱۱ | ۳-۷     | روش حل معادله‌های انتگرالی |
| ۳۱۱ | ۱-۳-۷   | روش ریتز                   |
| ۳۱۱ | ۲-۳-۷   | روش کانترویچ               |
| ۳۲۶ |         | مراجع                      |
| ۳۲۷ |         | تمرین‌ها                   |

**فصل هشتم - مقدمه‌ای بر شبیه سازی** ..... ۳۲۹

|     |     |                                    |
|-----|-----|------------------------------------|
| ۳۳۰ | ۱-۸ | مقدمه                              |
| ۳۳۰ | ۲-۸ | دومخزن انتقال حرارت                |
| ۳۳۲ | ۳-۸ | واکنش گاه اختلاط کامل با حجم متغیر |
| ۳۳۵ | ۴-۸ | واکنش گاه گازی تحت فشار            |
| ۳۳۷ | ۵-۸ | تبخیرکننده یک جزئی                 |
| ۳۴۰ | ۶-۸ | تبخیرکننده ناگهانی چند جزئی        |

|     |   |      |
|-----|---|------|
| ۳۴۴ | ..... واکنش گاه ناپیوسته غیرهم‌دما                    | ۷-۸  |
| ۳۴۹ | ..... واکنش گاه با محدودیت انتقال جرم                 | ۸-۸  |
| ۳۵۱ | ..... برج تقطیر دو جزئی                               | ۹-۸  |
| ۳۵۶ | ..... تقطیر ناپیوسته چند جزئی                         | ۱۰-۸ |
| ۳۶۰ | ..... جذب سطحی گاز در شرایط دینامیک                   | ۱۱-۸ |
| ۳۶۴ | ..... واکنش گاه بستر ثابت، مداوم، غیر هم‌دما و ناپایا | ۱۲-۸ |
| ۳۶۸ | ..... فرایند گوگردزدایی نفت در واکنش گاه بستر چکان    | ۱۳-۸ |
| ۳۷۳ | ..... واکنش گاه دوغابی با جریان پیوسته                | ۱۴-۸ |
| ۳۷۷ | ..... مراجع   |      |
| ۳۷۹ | ..... پیوست - تمرین‌های تکمیلی                        |      |



## 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 ساده‌کننده در مدل‌های کاربردی نیاز به استفاده از روش‌های عددی و کامپیوتری، جهت حل معادله‌های مدل کاملاً چشم‌گیر است. امید است در جلد دوم کتاب «مدل‌سازی 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.

## 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 این‌رو 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 بسط 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.