

دانش اگر در ثریا هم باشد مردمانی از سرزمین پارس بر آن دست خواهند یافت.

پیامبر اعظم (ص)

شرح جامع

ریاضیات (کاربردی، عددی)

«مهندسی شیمی»

مولف: سعید هادی

انتشارات ارشد

پیشگفتار ناشر

خداوند بزرگ را شاکریم که فرصتی عنایت فرمود تا بتوانیم قدمی در جهت گسترش علم و فرهنگ کشور عزیزمان برداریم و مسیری هموار را در اختیار مخاطبان و داوطلبان علاقمند به ادامه تحصیل قرار دهیم. از آنجائی که درحوزه کتاب‌های درسی و کمک درسی کارشناسی ارشد کتاب‌های زیادی به رشته تحریر در آمده است با این حال وجود یک مجموعه جامع، دقیق، کامل و دارای رفرنس(منابع) مستند احساس می‌شود.

همیشه دغدغه داشتیم که ای کاش می‌شد تمامی منابع پراکنده و گاهاً دست نایافتنی کنکور در یک مجموعه به گونه‌ای جذاب و شیوا آماده می‌شد و همچنین سوالات دوره‌های قبل کنکور نیز به گونه‌ای تشریحی پاسخ داده می شدند، که خدشه‌ای بر آنها وارد نشود و خیال داوطلبان عزیز آنقدر آسوده باشد که اطلاعات مندرج در پاسخنامه‌ها را برای بهره‌گیری در آزمون خود بکار گیرند. این کار با یاری خداوند بزرگ و همکاری نخبه‌ترین دانشجویان و اساتید کشور در انتشارات ارشد هماهنگ گردید و در تمامی مقاطع تحصیلی از کاردانی به کارشناسی، کارشناسی ارشد و دکتری در حوزهٔ آزمون‌های سراسری – آزاد و پیام نور بسته‌های آموزشی شامل کتاب‌های بانک سوالات و کتاب‌های شرح جامع درس آماده گردید. در تهیه مجموعه‌های فوق‌الذکر از فارغ‌التحصیلان کارشناسی ارشد و دکتری که حائز رتبه‌های تک رقمی کنکور می‌باشند، استفاده کرده‌ایم، تا شما عزیزان بتوانید در راستای افزایش توان علمی خود در جهت نیل به مقصود خویش نایل آیید. بدون تردید می‌توان گفت که برای اولین بار در نظام آموزشی کشور مجموعه‌ای به این سبک عرضه می‌شود که در کیفیت و کمیت بی‌نظیر بوده و تمامی نیازهای دانشجویان و داوطلبان عزیز را پوشش می‌دهد. امید است که استفاده از این مجموعه عزیزان را در جهت موفقیت در آزمون یاری رسانده باشد. در پایان لازم به ذکر است که بی نقصی محض از آن خداوند متعال می‌باشد، بنا براین از تمامی خوانندگان و داوطلبان عزیز خواهشمندیم نظرات سازنده خود را در مورد این کتاب به سایت انتشارات ارشد اعلام نمایند تا ما را در جهت هر چه بهتر آماده کردن این محصولات یاری رسانند.

با تشکر

ناشـــــر

www.arshadbook. ir

پیشگفتار مولف

با توجه به رشد روزافزون داوطلبان کنکور کارشناسی ارشد و فشرده شدن رقابت بین داوطلبان لزوم تألیف کتاب‌هایی مشتمل بر شرح درس و نکات مهم کنکوری بیش از پیش حس می‌شود. کتاب حاضر مشتمل بر شرح درس، نکات مهم و نمونه سوالات درس کاربرد ریاضیات در مهندسی شیمی به داوطلبان محترم تقدیم می‌گردد.

در تألیف کتاب سعی بر آن بوده است که با ارائه مثال‌های متعدد و شرح و بسط قوانین ریاضی، خواننده از مراجعه به کتاب‌های دیگر بی‌نیاز گردد. نکات تستی در لابلای شرح درس و نمونه سوالات کنکور در پایان هر فصل گنجانده شده است. در انتخاب نمونه سوالات سعی بر آن بوده که سوالات نکته‌دار انتخاب گردد، از این‌رو مطالعه کامل سوالات و پاسخ‌های هر فصل توصیه می‌شود.

در پایان ضمن آرزوی موفقیت برای دانشجویان و داوطلبان گرامی بر خود لازم می‌دانم از تایپیست، ویراستار، صفحه‌آرا و تمام کسانی که به نحوی در تهیه کتاب همکاری داشته‌اند، تشکر و قدردانی نمایم.

با سپاس

سعید هادی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: فرمول‌بندی و مدل سازی مسائل مهندسی شیمی

فرمول بندی و مدل سازی مسائل مهندسی شیمی ۱۱
قوانین کلی ۱۱
۱ ـ مدل سازی متمرکز ۱۱
۲ ـ مدل سازی توزیع یافته ۱۱
قضیه تبدیل رینولدز ۱۲
۱- قانون بقای جرم ۱۷
۲- قانون بقای مومنتم ۱۸
مدل سازی راکتورهای شیمیایی ۱۸
مدل سازی راکتور Plug ۱۸
فرمول بندی راکتور Mixed ۱۹

فصل دوم: معادلات دیفرانسیلی معمولی

معادلات دیفرانسیلی معمولی ۲۵
مرتبه و درجه معادله دیفرانسیل ۲۵
معادلات همگن و ناهمگن ۲۵
روش‌های حل معادلات دیفرانسیل ۲۶
حل معادلات دیفرانسیل خطی مرتبه بالاتر ۳۴
اپراتورهای دیفرانسیل و مشتق ۳۴
معادلات دیفرانسیل خطی با ضرایب ثابت ۳۴
جواب ناهمگن معادله دیفرانسیل (y_p) ۳۵
حل معادلات دیفرانسیل به روش سری توانی ۳۹
دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی ۴۳

فصل سوم: تعامد، معادلات بسل و سری‌های فوریه

تعامد ۶۵
تابع وزنی ۶۵
مسائل مقدار اولیه (IVP) و مقدار مرزی (BVP) ۶۶
مسائل اشتورم- لیوویل ۶۶
توابع بسل ۶۸
توابع بسل تغییریافته ۶۹
شکل کلی معادله های بسل ۷۳
توابع لژاندر ۷۴

عنوان **صفحه**

تابع متناوب ۷۶
توابع زوج و فرد ۷۶
سریهای فوریه توابع زوج و فرد ۷۷
بسط نیم سریهای فوریه ۷۹
توابع خاص ۸۰

فصل چهارم: تبدیل لاپلاس

تابع ضربان ایده آل واحد یا تابع دلتای دیراک ۹۴
قضیه مقدار اولیه ۹۴
قضیه مقدار نهائی ۹۴
قضیه پیچش (Convolution) ۹۴
حل معادلات دیفرانسیل معمولی با روش تبدیل لاپلاس ۹۵

فصل پنجم: فرمول‌بندی دیفرانسیلی

فرم کلی فرمول‌بندی دیفرانسیلی شیمی در مهندسی شیمی: ۱۰۹
عمل $\nabla^2 S$: (لاپلاسین) ۱۰۹

فصل ششم: معادلات دیفرانسیل جزئی

درجه و مرتبه معادله ۱۲۷
معادلات خطی ۱۲۷
انواع معادلات دیفرانسیل جزئی ۱۲۸
انواع شرایط مرزی ۱۲۸
روشهای حل معادلات دیفرانسیل جزئی: ۱۲۹
۱- روش جداسازی متغیرها ۱۲۹
اعمال شرایط مرزی ۱۳۰
معادله‌های ناهمگن ۱۳۲
۱- معادله دیفرانسیل ناهمگن با شرایط همگن ۱۳۲
۲- معادله همگن با شرایط ناهمگن ۱۳۳
۳) معادله ناهمگن با شرایط ناهمگن ۱۳۵
روش ترکیب متغیرها ۱۳۷
روش تبدیل لاپلاس ۱۴۰

فصل هفتم: روش‌های عددی

خطای مطلق و نسبی ۱۶۳
۱- حل معادلات جبری ۱۶۳
شرط همگرایی ۱۶۴
سرعت همگرایی ۱۶۴
تفاضل‌های محدود(Finite differences) ۱۶۸
۱- درون یابی ۱۶۹
۱-۱ درون یابی داده‌های متساوی الفاصله ۱۶۹

عنوان **صفحه**

مشتق گیری عددی ۱۷۵
محاسبه‌ی خطا ۱۷۶
انتگرال گیری عددی ۱۷۶
انتگرال دو گانه ۱۷۹
روش‌های عددی حل معادلات دیفرانسیل معمولی ۱۸۱
۱- مسائل مقدار اولیه ۱۸۱
۲- مسائل مقدار مرزی ۱۸۴
روش‌های حل عددی معادلات دیفرانسیل جزئی ۱۸۶
روش کرنک ـ نیکلسون ۱۹۱
- روش‌های عددی برای حل دستگاه معادلات خطی ۱۹۱
روش LU (چولسکی) ۱۹۳
روش ژاکوبی ۱۹۵
شرط همگرائی ۱۹۶
روش گاوس سیدل ۱۹۶

ضمیمه ۲۱۷

فصل اول

فرمول‌بندی و مدل‌سازی مسائل مهندسی شیمی

عناوین اصلی

- فرمول‌بندی متمرکز مسائل انتقال
- مدل‌سازی راکتورهای شیمیایی

فصل اول

فرمول‌بندی و مدل سازی مسائل مهندسی شیمی

فرمول بندی و مدل سازی مسائل مهندسی شیمی

مدل سازی در مهندسی شیمی، در سه بخش عمده ی انتقال جرم، حرارت و مومنتم انجام می‌شود. برای فرمولاسیون مسائل، از دو نوع قانون فرموله شده استفاده می‌شود: قوانین کلی که برای تمام مواد و در تمامی محیط‌ها بکار می‌رود و قوانین ویژه که برای هر کدام از پدیده‌های فوق جداگانه بیان شده‌اند.

قوانین کلی

این قوانین به محیطی که از آن‌ها استفاده می‌شود بستگی ندارند و در همه جا قابل استفاده می‌باشند، مانند: قانون بقای جرم، قانون بقای انرژی (قانون اول ترمودینامیک)، قانون دوم ترمودینامیک، قوانین حرکت نیوتن و...

قوانین ویژه

این قوانین در محیط‌های خاص و برای پدیده‌های خاص استفاده می‌شوند مانند: قانون هوک، قانون ویسکوزیته نیوتن، قانون هدایت فوریه، قانون فیک و.....

در حل مسائل مهندسی شیمی از دو نوع مدل سازی استفاده می‌شود:

- متمرکز (lumped)
- توزیع یافته (distributed)

۱ ـ مدل سازی متمرکز

در مدل سازی متمرکز، خاصیت ماده فقط تابعی از زمان در نظر گرفته می‌شود و تابعی از مکان نیست به طور مثال در فرمولاسیون حرارتی یک گوی، فرض می‌کنیم دما در تمام نقاط آن یکسان است ولی با زمان تغییر می‌کند.

۲ ـ مدل سازی توزیع یافته

در این مدل، تغییرات خواص در جسم نسبت به مکان در نظر گرفته می‌شود. قوانین کلی و ویژه برای یک المان (طول، سطح یا حجمی کوچک از جسم) نوشته شده و سپس با روش‌های حل معادلات دیفرانسیل حل می‌شوند.

در این فصل به بررسی مدل سازی متمرکز می‌پردازیم و مدل سازی دیفرانسیلی در فصلی جداگانه بررسی خواهد شد.

مدل سازی متمرکز به دلیل تک متغیره بودن (متغیر زمان) به معادلات دیفرانسیل معمولی و مدل سازی توزیع یافته به دلیل چند متغیره بودن (زمان و مکان) به معادلات دیفرانسیل جزئی منجر می‌شوند. بنابراین در حل معادلات مدل سازی توده ای (متمرکز) باید شرایط اولیه و در مدل سازی دیفرانسیلی، شرایط اولیه و شرایط مرزی را داشته باشیم. در مورد مدل‌سازی و حل مسائل دیفرانسیل جزئی در فصل‌های ۵ و ۶ توضیحات کامل آمده است.

مدل سازی متمرکز

اولین مرحله مدل سازی، تعیین سیستم یا حجم کنترل مورد بررسی است. انواع سیستم‌ها در مدل سازی به شرح زیر است:

- سیستم منفرد (isolated): سیستمی که ورودی و خروجی جرم و انرژی ندارد.
- سیستم بسته (closed system): سیستمی است که ورود و خروج جرم ندارد، اما ممکن است ورود و خروج انرژی داشته باشد.
- حجم کنترل (control volume): سیستمی که ورود و خروج جرم و انرژی دارد. اگر جریان جرم ورودی و خروجی به حجم کنترل قطع شود، به سیستم بسته تبدیل می‌شود.
- جزء حجم: بخش کوچک (دیفرانسیلی) از حجم کنترل است که ورودی و خروجی جرم و انرژی دارد.

قضیه تبدیل رینولدز

قوانین کلی که شامل قانون بقای جرم، قوانین نیوتن، قوانین اول و دوم ترمودینامیک و.... می‌باشد، برای سیستم‌های بسته فرمولبندی شده اند. برای بکار بردن این قوانین در حجم کنترل باید فرمول‌های مربوط به سیتم بسته را به فرمول حجم کنترلی تبدیل کرد. این کار با قضیه تبدیل رینولدز انجام می‌شود:

اگر B کمیت کلی (مربوط به کل جسم) و b کمیت ویژه (مربوط به واحد جرم) باشند که $B = b\,m$، تغییرات کمیت B در حجم کنترل و سیستم با فرمول زیر به هم مرتبط می‌شوند:

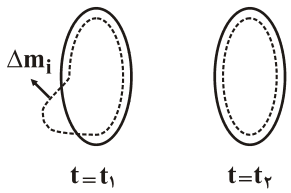
$$\left(\frac{dB}{dt}\right)_{sys} = \left(\frac{dB}{dt}\right)_{c.v.} - \sum_{i=1}^{N} b_i w_i \qquad (1)$$

که در آن $w_i = \frac{dm_i}{dt}$ و نرخ ورودی جرم به حجم کنترل در مکان i ام است. اگر تعداد M خروجی نیز داشته باشیم، قضیه رینولدز به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\left(\frac{dB}{dt}\right)_{sys} = \left(\frac{dB}{dt}\right)_{c.v.} - \sum_{i=1}^{N} b_i w_i + \sum_{e=1}^{M} b_e w_e \qquad (2)$$

برای حفظ فرمول بالا می‌توان این مسئله را بخاطر سپرد که حجم کنترل شامل ورودی و خروجی است. اگر از حجم کنترل مواد ورودی را کم کرده و مواد خروجی را به آن اضافه کنیم، به سیستم بسته تبدیل می‌شود.

در شکل زیر، ارتباط سیستم و حجم کنترل در زمان‌های t_1 و t_2 نشان داده شده اند. در زمان t_1، مقدار جرم Δm_i در خارج حجم کنترل بوده که در زمان t_2 به حجم کنترل وارد شده است. سیستم با خط چین و حجم کنترل با خط ممتد نشان داده شده است. در زمان t_2، سیستم و حجم کنترل بر هم منطبق هستند.



نکته ۱: در سیستم هائی که در آن‌ها ورود و خروج جرم داریم و فرمول (۲) را برای آن به کار می‌بریم، چون زمان بسیار کم و در حد dt است، ورودی dw i و خروجی dw e کوچکی داریم و در محاسبه ی $\left(\frac{dB}{dt}\right)_{sys}$، سیستم و حجم کنترل را بر هم منطبق فرض می‌کنیم و بجز کمیت‌هائی که بر اثر ورود و خروج ماده به حجم کنترل در نظر گرفته می‌شود، تغییرات کمیت‌های سیستم و حجم کنترل برابر در نظر گرفته می‌شود.

مثال هائی از فرمول بندی قوانین برای حجم کنترل با استفاده از قضیه رینولدز

۱ ـ قانون بقای جرم

در این جا، $B = m$ و $b = \frac{m}{m} = ۱$ است، بنابراین فرمول (۲) به فرمول زیر تبدیل می‌شود:

$$(\frac{dm}{dt})_{sys.} = (\frac{dm}{dt})_{c.v.} - \sum_{i=۱}^{N} w_i + \sum_{e=۱}^{M} w_e \qquad (۳)$$

با توجه به این که $(\frac{dm}{dt})_{sys.} = ۰$، (این معادله قانون بقای جرم در یک سیستم است) داریم:

$$(\frac{dm}{dt})_{c.v.} = \sum_{i=۱}^{N} w_i - \sum_{e=۱}^{M} w_e \qquad (۴)$$

یعنی تغییرات جرم داخل حجم کنترل برابر ورودی جرم منهای خروجی جرم است.

$$m = \rho V$$

$$W_i = \frac{dm_i}{dt} = \frac{d(\rho_i V_i)}{dt}$$

اگر چگالی ماده را ثابت فرض کنیم (سیال تراکم ناپذیر) $w_i = \frac{\rho_i dv_i}{dt} = \rho_i v_i$ که در آن v دبی حجمی است، معادله (۴) به شکل زیر در می‌آید:

$$w_i = \rho_i \upsilon_i \qquad (۵)$$

$$\frac{dv}{dt} = \sum_{i=۱}^{N} \upsilon_i - \sum_{e=۱}^{M} \upsilon_e \qquad (۶)$$

که در آن υ دبی حجمی است.

۲ ـ فرمول بندی جزء مولی:

در اینجا B کمیّت کل و b را کمیّت در واحد مول تعریف می‌کنیم:

$$B = n_A \qquad b = \frac{B}{n_A} = ۱$$

$$w = \frac{d\, n_A}{dt} = \frac{d(c_A v_A)}{dt} = c_A \upsilon_A$$

با استفاده از قضیه رینولدز (فرمول ۲):

$$(\frac{d\,n_A}{dt})_{sys.} = (\frac{d\,n_A}{dt})_{c.v.} - \sum_{i=1}^{N} c_{A_i}\,\upsilon_i + \sum_{e=1}^{M} c_{A_e}\,\upsilon_e \qquad (۷)$$

در اینجا $(\frac{d\,n_A}{dt})_{sys.}$ بر حسب موقعیت یکی از اشکال زیر را پیدا می‌کند:

- **در فرآیند مورد بررسی واکنش داشته باشیم:**

از معادله‌ی سرعت واکنش برای سیستم بسته استفاده می‌شود:

$$r_A = \frac{1}{V}(\frac{d\,n_A}{dt})_{sys.} \quad \rightarrow \quad (\frac{d\,n_A}{dt})_{sys.} = V\,r_A \qquad (۸)$$

- **در فرآیند مورد بررسی، انتقال جرم به محیط داشته باشیم:**

(دقّت شود با توجه به نکته بیان شده، سیستم و حجم کنترل تقریباً یکی هستند و غیر از آن را محیط می‌نامیم).

در اینجا از فرمول مقابل استفاده می‌کنیم:

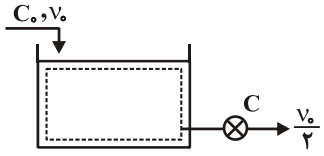
$$(\frac{d\,n_A}{dt})_{sys.} = k_c S\ \triangle\ c_A \qquad (۹)$$

اگر هردو فرآیند بالا انجام شوند، از جمع دو جمله بجای $(\frac{d\,n_A}{dt})_{sys.}$ استفاده می‌شود و اگر هیچ کدام اتّفاق نیفتد، تغییرات تعداد مول‌های ماده A صفر خواهد بود.

📖 **نکته ۲:** در سیستمی شامل n جزء شیمیایی، معادله‌ی (۳) برای جرم کل سیستم و (n-۱) معادله به فرم معادله (۷) برای (n-۱) جزء داخل سیستم نوشته می‌شود. معادله (۳) را معادله پیوستگی کل می‌گویند.

مثال

در مخزنی، تا نیمه آب خالص ریخته شده است. اگر در زمان t=۰، محلول آب و نمک به غلظت c_0 و دبی حجمی v_0 به ظرف وارد شده و با دبی $\frac{v_0}{2}$ خارج شود، فرمول بندی‌های لازم برای بدست آوردن تغییرات حجم و غلظت با زمان را بدست آورید. (حجم ظرف را v_0 فرض کنید.)



حل: از آنجا که غلظت برای ما مهمّ است، از معادله‌ی (۷) استفاده می‌کنیم. چون واکنش و انتقال جرم نداریم:

$$(\frac{d\,n_A}{dt})_{sys.} = 0$$

بنابراین:

معادله پیوستگی کلّی: با فرض $\rho = cte$ معادله (۳) به معادله (۶) تبدیل می‌شود:

$$\frac{dv}{dt} = v_{.} - \frac{v_{.}}{۲} = \frac{v_{.}}{۲}$$

$$\frac{d(c_A v)}{dt} = c_{A.} v_{.} - c_A \frac{v_{.}}{۲} \quad \rightarrow \quad c_A \frac{dv}{dt} + v \frac{d\, c_A}{dt} = c_{A.} v_{.} - c_A \frac{v_{.}}{۲} \qquad (۱۰)$$

با بدست آوردن تغییرات حجم محلول (v) نسبت به زمان از معادله اول و قرار دادن آن در معادله‌ی دوم، می‌توان تغییرات محلول (c_A) نسبت به زمان را بدست آورد.

۳- قانون بقای انرژی

در اینجا B=E و b=e، بنابراین:

$$(\frac{dE}{dt})_{sys.} = (\frac{dE}{dt})_{c.v.} - \sum_{i=۱}^{M} e_i w_i + \sum_{e=۱}^{M} e_e w_e \qquad (۱۱)$$

تغییرات انرژی در سیستم از قانون اوّل ترمودینامیک بدست می‌آید:

$$(\frac{dE}{dt})_{sys.} = \dot{Q} - \dot{W} \qquad (۱۲)$$

و انرژی یک سیّال، شامل انرژی‌های داخلی، جنبشی و پتانسیل است. یعنی:

$$E = mg + \frac{mv^{۲}}{۲} + mu \qquad (۱۳)$$

$$\rightarrow \ (\frac{dE}{dt})_{c.v.} = (\dot{Q} - \dot{W})_{sys.} + \sum_{i=۱}^{N} e_i w_i - \sum_{e=۱}^{M} e_e w_e \qquad (۱۴)$$

طبق نکته ۱، حرارت داده شده و کار انجام شده روی سیستم $(\dot{Q} - \dot{W})_{sys.}$، همان حرارت و کار عبوری از مرزهای حجم کنترل است، بجز کار ورودی و خروجی به دلیل ورود و خروج جرم که آنها را جداگانه در نظر گرفته و $\dot{w}_{s\dot{y}s.}$ را بصورت زیر بیان می‌کنیم:

$$\dot{w}_{sys.} = \dot{w}_{c.v.} - \sum_{i=۱}^{N} p_i v_i + \sum_{e=۱}^{M} p_e v_e \qquad , \qquad \dot{Q}_{sys.} = \dot{Q}_{c.v.} \qquad (۱۵)$$

با جایگذاری معادله(۱۵) در معادله (۱۴) معادله زیر برای تغییرات انرژی حجم کنترل بدست می‌آید.

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{c.v.} = (\dot{Q} - \dot{W})_{c.v.} + \sum_{i=۱}^{N} h_i w_i - \sum_{i=۱}^{M} h_e w_e \qquad (۱۶)$$

از آنجا که معادله (۱۶) در ترمودینامیک نیز کاربرد دارد، توصیه می‌شود آن را بخاطر بسپارید. (w_i و w_e به ترتیب معادل $\dot{m}_i$ و $\dot{m}_e$ در ترمودینامیک هستند.)

دقّت شود که در صورت انجام واکنش، ΔH_{rx_n}، جزء $(\dot{Q}_{c.v.} = \dot{Q}_{sys.})$ در نظر گرفته می‌شود.

دو معادله ای که از معادله (۱۴)نتیجه می‌شوند، در زیر ارائه می‌گردند:

الف- معادله‌ی حرارت:

در تحولاتی که تبادل حرارت مؤثّرتر از انرژی‌های جنبشی و پتانسیل است، فرض می‌کنیم انرژی کل برابر با انرژی درونی باشد و از جملات انرژی جنبشی و پتانسیل صرفنظر می‌کنیم:

$$E = mu = \rho u c_p T$$

با فرض اینکه کاری روی سیستم انجام نمی شود، $\dot{W}_{sys.} = ۰$ و معادله (۱۴) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{d(\rho v c_p T)}{dt} = \dot{Q} + \sum_{i=۱}^{N} \rho_i u_i c_{p_i} T_i - \sum_{i=۱}^{M} \rho_e u_e c_{p_e} T_e \qquad (۱۷)$$

که در آن u_i و u_e سرعت جریانهای ورودی و خروجی به حجم کنترل است.

مثال

ترموکوپلی که در دمای محیط $(T_.)$ قرار دارد را ناگهان وارد سیّال به دمای T_f و ضریب انتقال حرارت h می‌شود. سر انتهایی ترموکوپل دارای جرم m و گرمای ویژه‌ی c و مساحت A است. با فرض بالا بودن ضریب هدایت حرارتی ترموکوپل، فرمول بندی دیفرانسیلی ترموکوپل را بیابید.

حلّ: تنها پدیده‌ی مهم در اینجا انتقال حرارت می‌باشد، بنابراین از معادله(۱۷) استفاده می‌کنیم، با توجّه به اینکه $\dot{Q} = hA(T - T_f)$ داریم:

$$\rho c v \frac{dt}{dt} = hA(T - T_f)$$

ب- معادله برنولی

در انتقال سیّالات، معمولاً با فرضیات زیر معادله‌ی برنولی را بدست می‌آورند:

- فرآیند پایا است. بنابراین تجمّع جرم و انرژی نداریم و

$$(\frac{dE}{dt})_{c.v.} = (\frac{dE}{dt})_{sys.} = ۰ \qquad \rho_i \upsilon_i = \rho_e \upsilon_e \qquad (۱۸)$$

- تبادل کار و گرما نداریم و تنها کار انجام شده روی حجم کنترل، حاصل ورود و خروج سیّال است.

$$\dot{Q}_{sys.} = \dot{Q}_{C.V.} = \dot{W}_{C.V.} = ۰ \qquad (۱۹)$$

$$-\dot{W}_{sys.} = \sum P_i \upsilon_i - \sum P_e \upsilon_e \qquad (۲۰)$$

- تغییرات دمای سیّال ناچیز است و بنابراین تغییرات انرژی درونی نداریم:

$$e_e = \frac{۱}{۲} V_e^{۲} + g h_e + u_e \qquad e_i = \frac{۱}{۲} v_i^{۲} + g h_i + u_i$$

$u_e - u_i = ۰$ با اعمال این فرضیّات در معادله‌ی (۱۴) و با توجّه به فرمول (۱۵)، و معادلات (۱۳) و (۵)، معادله برنولی بدست می‌آید:

$$\frac{۱}{۲} v_i^{۲} + g h_i + \frac{p_i}{\rho_i} = \frac{۱}{۲} v_e^{۲} + g h_e + \frac{p_e}{\rho_e} \qquad (۲۱)$$

قانون بقای انرژی به پدیده‌ی حرارت مربوط می‌شود و در سیّالات، قانون بقای اندازه حرکت بکار می‌رود:

۴- قانون بقای اندازه حرکت

قانون بقای اندازه حرکت برای سیستم، همان قانون دوم نیوتن است، یعنی:

$$\frac{d(m\vec{u})_{sys.}}{dt} = \sum_i \vec{F}_i \qquad (۲۲)$$

که $\sum_i \vec{F}_i$ مجموع تمام نیروهای وارد بر سیستم است.

با استفاده از قضیه رینولدز و با فرض $B = m\vec{u}$ و $b = \vec{u}$ داریم:

$$[\frac{d(m\vec{u})}{dt}]_{c.v.} = \sum \vec{F}_i + \sum_{i=1}^{N} \vec{u}_i w_i - \sum_{e=1}^{M} \vec{u}_e w_e \qquad (۲۳)$$

توجّه به این نکته ضروری است که نیروهای وارد بر سیستم، $(\sum_i \vec{F}_i)$، شامل نیروهای وزنی، اصطکاک و فشاری می‌شود:

$$\sum \vec{F}_i = m\vec{g} + \vec{B}_f + \sum_{i=1}^{N} \overrightarrow{P_i A_i} \qquad (۲۴)$$

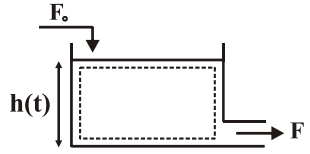
با جایگذاری معادله (۲۴) در معادله (۲۳) معادله‌ی حرکت بدست می‌آید:

$$\frac{d(\rho v \vec{u})_{c.v.}}{dt} = \rho v\vec{g} + \vec{B}_f + \sum_{i=1}^{N} \overrightarrow{P_i A_i} + \sum(\rho_i u_i A_i)\vec{u}_i - \sum(\rho_e u_e A_e)\vec{u}_e \qquad (۲۵)$$

دقّت شود که این قانون برداری است و در بکار بردن آن باید جهت نوشتن معادله مشخّص شود.

مثال

در شکل مقابل سطح مقطع خروجی A_P و سطح مقطع مخزن A_t است. شدّت جریان حجمی سیّال ورودی $F_.$ و ارتفاع اولیّه سیّال در مخزن $H_.$ و سرعت اولیّه خروج سیّال $U_.$ است. اگر مقاومت در مقابل خروج سیّال $B_f = R_f u^2$ باشد، معادله‌های دیفرانسیل لازم برای بدست آوردن ارتفاع سیّال در مخزن و سرعت خروجی سیّال نسبت به زمان را بدست آورید.



در اینجا از میان سه پدیده‌ی انتقال جرم، انرژی و مومنتم، تجمع جرم و تغییرات سرعت (اعمال نیرو) داریم و از معادلات مربوط به انتقال جرم و مومنتم استفاده می‌کنیم. به دلیل مهم نبودن اثرات حرارتی، از نوشتن معادلات بقای انرژی صرفنظر می‌شود.

۱- قانون بقای جرم

از آنجا که سیّال داخل ظرف خالص است، تنها یک معادله پیوستگی کلّی لازم است. با فرض چگالی ثابت:

$$\frac{dv}{dt} = F_. - F \qquad (۲۶)$$

(F_O, F به ترتیب دبی جریانهای خروجی و ورودی به حجم کنترل هستند.)

معادله (۲۶) را به شکلی تبدیل می‌کنیم که شامل ثابت‌ها و متغیّرهای مسئله (uوh) باشد:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_{\cdot}}{A_t} - \frac{u\,A_P}{A_t} \qquad (۲۷)$$

۲- قانون بقای مومنتم

قانون بقای مومنتم را در جهت x (در جهت خروج سیّال می‌نویسیم).

در این جهت نیروی وزن نداریم:

$$\frac{d(\rho v u)_{c.v.}}{dt} = -R_f u^{۲} + \rho g h \times A_P - \rho A u^{۲} \qquad (۲۸)$$

$V = A_t h$ و بنابراین:

$$\rho A_t \frac{d(uh)}{dt} = -R_f u^{۲} + \rho g h\, A_p - \rho A u^{۲} \qquad (۲۹)$$

با حل همزمان معادلات (۲۷) و (۲۹) تغییرات u و h نسبت به زمان بدست می‌آید.

مدل سازی راکتورهای شیمیایی

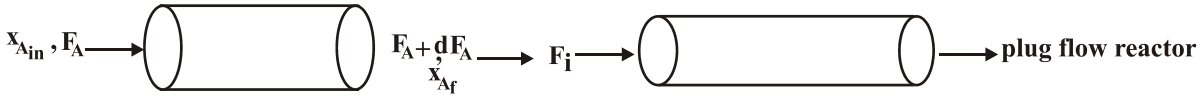
راکتورهای شیمیایی پیوسته را معمولاً به دو نوع تقسیم می‌کنند:

- Plug که راکتور دیفرانسیلی پیوسته می‌باشد و از فرمول نویسی دیفرانسیلی برای مدل سازی آن استفاده می‌شود.
- Mixed یا راکتور اختلاط کامل که در آن تغییرات غلظت تنها تابع زمان است و از فرمول نویسی متمرکز برای مدل سازی آن استفاده می‌شود.

نمادهای مورد استفاده:

- دبی مولی = F_A
- غلظت مولی = c_A
- دبی حجمی = υ
- حجم =v

مدل سازی راکتور Plug



یک المان dx از راکتور Plug انتخاب کرده و آن را فرمول بندی می‌کنیم:

(۳۰) مصرف − تولید + خروجی − ورودی = تجمع جرم (برخسب مول)

در راکتور Plug، اگر F_A دبی مولی ورودی باشد:

$(-r_A)dv$ =مصرف ۰= تولید خروجی $= F_A + dF_A$ ورودی $= \dot{n}_{in} = F_A$ ۰= تجمع

بنابراین معادله (۳۰) نتیجه می‌دهند:

$$F_A - (F_A + dF_A) - (-r_A dv) = ۰$$

x_A درصد تبدیل جزء A است، بنابراین $(۱-x_A)$، درصد A باقیمانده می‌باشد:

$$F_A = F_{A.}(۱-x_A) \qquad dF_A = -F_{A.}\,dx_A$$

$$F_{A.}\,dx_A = (-r_A)dv \qquad (F_{A.} = C_{A.}\,\upsilon \ ,\ \tau = \frac{V}{\upsilon})$$

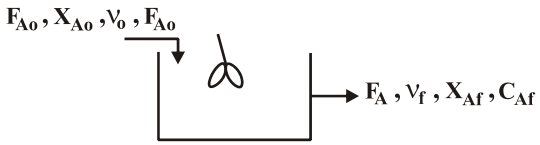
$$\rightarrow \int_{.}^{V} \frac{dv}{F_{A.}} = \int_{X_{A_{in}}}^{X_{Af}} \frac{d\,x_A}{-r_A} \quad \rightarrow \quad \frac{v}{F_{A.}} = \frac{\tau}{c_{A.}} = \int_{X_{Ain}}^{X_{Af}} \frac{d\,x_A}{-r_A}$$

مثال

برای واکنش درجه اوّل: $-r_A = K\,C_A = K\,C_{A.}(۱-x_A)$ با $X_{A_{in}} = ۰$:

$$\frac{\tau}{C_{A.}} = \frac{-۱}{K\,C_{A.}} \ln(۱-x_{A_f}) \quad \rightarrow \quad K\,\tau = \ln\frac{۱}{۱-x_{A_F}}$$

فرمول بندی راکتور Mixed



در راکتور Mixed، غلظت C_A داریم که تنها تابعی از زمان t است و فرض می‌شود اختلاط چنان کامل است که غلظت در تمام نقاط راکتور یکسان است.

(۳۱) (برحسب مول) (مصرف جرم- تولید جرم + خروجی جرم – ورودی جرم = تجمع جرم)

(۳۲) خروجی جرم $= F_{A.}(۱-x_A)$ ورودی جرم $= F_{A.}$ تجمع جرم $= ۰$

مصرف جرم $= (-r_A)v$ تولید جرم $= ۰$

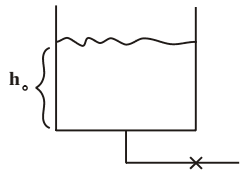
از معادلات (۳۱) و (۳۲) نتیجه می‌شود که:

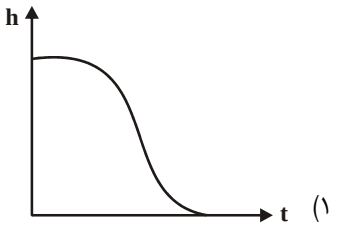
$$(\tau = \frac{v}{\nu}, F_{A.} = C_{A.}\,\upsilon)$$

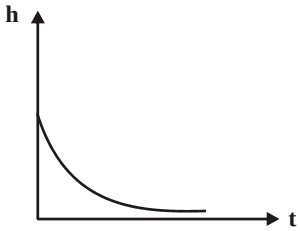
$$F_{A.}\,x_A = (-r_A)v \quad \rightarrow \quad \tau = \frac{C_{A.}\,x_A}{-r_A}$$ (۳۱) و (۳۲)

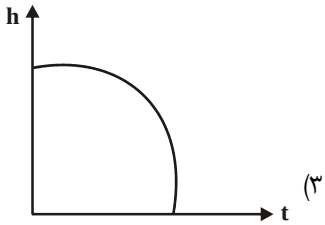
تست‌های آخر فصل

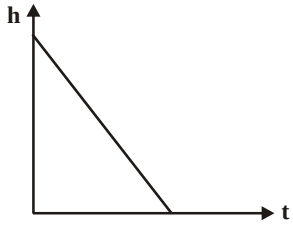
۱- اگر شیر خروجی یک مخزن حاوی آب به ارتفاع $h_\circ$ باز شود، تغییرات ارتفاع آب داخل مخزن بازمان چگونه است؟ (دبی جریان خروجی متناسب با ارتفاع آب داخل مخزن است). (سراسری ۸۸)



۱) 

۲) 

۳) 

۴) 

۲- یک راکتور Batch (ناپیوسته) با حجم ثابت تحت یک واکنش سری قرار می‌گیرد $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$ غلظت اولیه A را با $C_{A\circ}$ بیان نموده و غلظت‌های اولیه C و B برابر صفر می‌باشند. سرعت واکنش نیز چنین بیان گردیده است. (سراسری ۸۷)

$R_B = k_1 C_A^n - k_2 C_B^m$ و $-R_A = k_1 C_A^n$ در صورتی که $n = 1$ و $m = 2$ باشند، معادلهٔ دیفرانسیلی که $C_B(t)$ را نشان دهد به کدام صورت خواهد بود؟

۱) $\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_{A\circ} \exp(-k_2 t) - k_1 C_B^2$

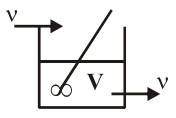
۲) $\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_{A_\circ} \exp(-k_1 t) - k_2 C_B^2$

۳) $\frac{dC_B}{dt} = k_2 C_{A\circ} \exp(k_1 t) - k_2 C_B^2$

۴) $\frac{dC_B}{dt} = k_2 C_{A\circ} \exp(-k_2 t) - k_1 C_B^2$

۳- گاز A وارد یک راکتور اختلاط کامل با حجم ثابت (V) شده و با تبدیل به محصول B $\left(A \xrightarrow{k} 2B\right)$ در شرایط پایا با دبی ثابت ν راکتور خارج می‌شود. اگر ناگهان و رودی قطع شود مدل تغییرات غلظت با کدام معادله تطبیق می‌کند؟ $\left(\tau = \frac{V}{\nu}\right)$

(سراسری ۸۶)



۱) $\frac{dC_B}{dt} = kC_B - \frac{C_B}{\tau}$

۲) $\frac{dC_A}{dt} = \frac{C_{B_\circ} - C_B}{\tau} - 2kC_A$

۳) $\frac{dC_B}{dt} = 2kC_A - \frac{C_B}{\tau}$

۴) $\frac{dC_A}{dt} = \frac{C_{A_\circ} - C_A}{\tau} - kC_A$