

به نام آنکه جان را فکرت آموخت

کاملترین مرجع مدل سازی سیستم های مهندسی شیمی به کمک نرم افزار **MATLAB**

قابل استفاده کلیه دانشجویان رشته های مهندسی شیمی،
مهندسی پلیمر، مهندسی نفت، بیوتکنولوژی،
بیوشیمی، شیمی و سایر رشته های مهندسی مرتبط

تالیف:

رضا احمدی پویا



سرشناسه	:	احمدی پویا، رضا، ۱۳۶۶ -
عنوان و نام پدیدآور	:	کاملترین مرجع مدل سازی سیستم های مهندسی شیمی به کمک نرم افزار MATLAB / تالیف رضا احمدی پویا.
مشخصات نشر	:	تهران: دایره دانش، ۱۳۹۳.
مشخصات ظاهری	:	۴۷۰ ص: مصور، جدول، نمودار.
شابک	:	۲۲۰۰۰۰ ریال 978-600-7111-05-5
وضعیت فهرست نویسی	:	فیبا
موضوع	:	مطلب (برنامه کامپیوتر)
موضوع	:	مهندسی شیمی -- برنامه های کامپیوتری
رده بندی کنگره	:	۱۳۹۳ ۲-ک۳ ۷۹۷Q۸
رده بندی دیویی	:	۵۱۸/۰۲۸۵۵۳۶
شماره کتابشناسی ملی	:	۳۴۵۶۹۳۳

کاملترین مرجع مدل سازی سیستم های

مهندسی شیمی به کمک نرم افزار

MATLAB



مؤلف	:	رضا احمدی پویا
مدیر نشر	:	حامد جمالی نسب
صفحه آرای	:	هانی توانایان فرد
نوبت چاپ	:	اول - ۱۳۹۳
تیراز	:	۵۰۰
چاپ و صحافی	:	گنج شایگان
قیمت به همراه CD	:	۲۲۰۰۰۰ ریال
شابک	:	۹۷۸-۶۰۰-۷۱۱۱-۰۵-۵

دفتر فروش : تهران - خیابان انقلاب - روبروی تربیت بدنی دانشگاه تهران - جنب بانک صادرات - کتابفروشی محسن
تلفن: ۶۶۴۹۲۶۶۲ - ۹۱۲۳۷۷۶۸۸۰

کلیه حقوق و حق چاپ من و عنوان کتاب که به ثبت رسیده است؛ مطابق با قانون حقوق مولفان و مصنفان مصوب ۱۳۴۸ محفوظ و متعلق به انتشارات دایره دانش می باشد. هرگونه برداشت، تکثیر، گسی برداری به هر شکل (چاپ، فتوکپی، انتشار الکترونیکی) بدون اجازه کتبی از ناشر ممنوع بوده و متخلفین تحت پیگرد قانونی قرار خواهند گرفت.

فهرست مطالب

فصل اول: مبانی و مفاهیم اصلی مرتبط با مدلسازی فرایندهای مهندسی ۱

۱-۱- مقدمه ۳

۱-۲- مفهوم سیستم ۳

۱-۳- حالت پایا، ناپایا و تعادل ترمودینامیکی ۴

۱-۴- اصول اساسی مدلسازی سیستم‌های مهندسی شیمی و بیوشیمی ۶

۱-۴-۱- توسعه مدل سیستم ۶

۱-۴-۲- حل معادلات مدل ۷

۱-۵- دسته‌بندی سیستم‌های مهندسی شیمی و بیوشیمی ۷

۱-۵-۱- دسته‌بندی براساس تغییر و یا عدم تغییر متغیرهای حالت مدل با

زمان ۸

۱-۵-۲- دسته‌بندی براساس نوسان فضایی متغیرهای حالت مدل ۸

۱-۵-۳- دسته‌بندی براساس وابستگی تابعی روابط سرعت حاکم بر متغیرهای

حالت مدل ۸

۱-۵-۴- دسته‌بندی براساس نوع فرایندهای موجود در امتداد مرزهای سیستم ۹

۱-۵-۵- دسته‌بندی براساس تعداد فازهای موجود در سیستم ۹

۱-۵-۶- دسته‌بندی براساس تعداد مراحل موجود در سیستم ۹

۱-۵-۷- دسته‌بندی براساس شیوه عملیات سیستم ۹

۱-۵-۸- دسته‌بندی براساس نوع تبادل حرارتی سیستم با محیط اطراف ۱۰

۱-۵-۹- دسته‌بندی براساس ویژگی‌های حرارتی سیستم ۱۰

۱-۶- برنامه‌های ریاضی ۱۱

۱-۷- علل فیزیکی- شیمیایی ایجاد حالت غیرخطی در سیستم‌های مهندسی ۱۱

۱-۸- پدیده انشعاب و چندگانگی در سیستم‌های مهندسی شیمی ۱۵

فصل دوم: تحلیل سیستم‌های مهندسی شیمی همراه با معادلات عددی ۳۵

۱-۲- مقدمه ۳۷

- ۲-۲-۲- سیستم راکتور مخزنی همزن دار پیوسته؛ حالت آدیاباتیک: ۴۰
- ۲-۲-۱- حل عددی مسئله راکتور CSTR آدیاباتیک ۴۵
- ۲-۲-۲- بحث و نتیجه گیری ۶۶
- ۲-۳- سیستم راکتور مخزنی همزن دار پیوسته؛ حالت غیر آدیاباتیک ۷۱
- ۲-۳-۱- حل عددی مسئله راکتور CSTR غیر آدیاباتیک ۷۴
- ۲-۲-۲- بحث و نتیجه گیری ۱۰۶
- ۲-۴- سیستم راکتور آنزیمی بیوزیستی ۱۰۷
- ۲-۵- بررسی سیستم ها با معادلات استاتیک عددی بدون پدیده انشعاب ۱۱۵
- ۲-۵-۱- مثال هایی از سیستم های واکنشی بدون پاسخ های حالت پایا با رفتار چندگانه: ۱۱۵
- ۲-۵-۲- حل مثال هایی از سیستم های مهندسی شیمی با معادلات جبری و غیر جبری ۱۱۷
- ۲-۵-۳- بحث و نتیجه گیری ۱۲۵

فصل سوم: تحلیل سیستم های مهندسی شیمی همراه با معادلات

- دیفرانسیل مقدار اولیه (IVPs) ۱۲۷
- ۳-۱- مقدمه ۱۲۹
- ۳-۲- مسایل مقدار اولیه (TVP) ۱۲۹
- ۳-۳- مثال: بررسی یک سیستم توزیع شده غیرهمدم ۱۳۰
- ۳-۳-۱- مثال: فرایند کراکینگ فاز بخار استون ۱۳۳
- ۳-۳-۲- مقدمه ای بر حل مسئله ۱۳۵
- ۳-۳-۳- معادله موازنه مواد راکتور بر حسب حجم ۱۳۷
- ۳-۳-۴- معادله موازنه حرارت راکتور بر حسب حجم: ۱۳۹
- ۳-۳-۵- حل عددی مسئله مقدار اولیه به دست آمده: ۱۴۰
- ۳-۳-۴- بحث و نتیجه گیری ۱۵۶
- ۳-۴- فرایند تصفیه فاضلاب به وسیله عوامل جذب (دایجستر) بی هوازی ۱۵۷
- ۳-۴-۱- شرح فرایند و توصیف معادلات سرعت واکنش ۱۵۷

۱۵۹	۲-۴-۳- مدل سازی ریاضی سیستم دایجستر بی هواری پیوسته
۱۶۰	۳-۴-۳- حل معادلات حالت پایایی سیستم
۱۶۱	۴-۴-۳- بیان رابطه حجم حالت پایا به صورت تابعی از شدت جریان خوراک
	۳-۴-۵- بیان رابطه درصد تبدیل حالت پایا به صورت تابعی از غلظت جریان
۱۶۴	خوراک میکروارگانیزم:
	۳-۴-۶- رفتار حالت ناپایای دایجستر و حل معادلات دیفرانسیل مقدار اولیه
۱۷۲	مربوطه:
۱۷۷	۳-۴-۷- بحث و نتیجه گیری
۱۷۷	۳-۵-۵- راکتورهای کاتالیستی بستر سیال حباب دار (سیستم دوفازی ناهمگن)
۱۷۷	۳-۵-۱- شبیه سازی و مدل سازی ریاضی راکتورهای بستر سیال
۱۸۳	۳-۵-۲- حل عددی معادلات انتگرالی- دیفرانسیلی
۱۸۹	۳-۵-۳- بررسی رفتار دینامیک و انشعابی راکتورهای کاتالیستی بستر سیال
۱۹۴	۳-۵-۴- راکتور کاتالیستی بستر سیال همراه با واکنش های متوالی (سری)
	۳-۵-۵- حل عددی مدل های حالت پایا و دینامیک راکتور کاتالیستی بستر
۲۰۱	سیال همراه با واکنش های سری
۲۲۴	۳-۵-۶- بحث و نتیجه گیری

فصل چهارم: تحلیل سیستم های مهندسی شیمی همراه با معادلات

۲۲۵	دیفرانسیل مقدار مرزی (BVPS)
۲۲۷	۴-۱- مقدمه
۲۲۷	۴-۲- مسایل مقدار مرزی (BVP)
۲۲۸	۴-۳- تحلیل مسایل مقدار مرزی بر مبنای پدیده انشعاب
۲۲۹	۴-۴- سیستم با مدل پراکندگی محوری
۲۳۲	۴-۴-۱- فرمولاسیون مدل پراکندگی محوری
	۴-۴-۲- مثالی از مدل پراکندگی محوری : تحلیل مسایل مقدار مرزی
۲۳۹	دو نقطه ای در حالت خطی و غیر خطی
۵۶	۴-۴-۳- حل عددی مسئله مقدار مرزی غیر خطی در حالت غیرهم دما

۲۷۳	۴-۴-۴- بحث و نتیجه گیری
۲۷۳	۵-۴- مسئله مقدار مرزی؛ گلوله کاتالیستی متخلخل
۲۷۳	۴-۵-۱- پدیده نفوذ و واکنش در سا ختار گلوله های کاتالیستی متخلخل
	۴-۵-۲- حل عددی مسئله گلوله کاتالیستی با معادلات دیفرانسیل مقدار
۲۸۱	مرزی
۳۰۰	۴-۵-۳- بحث و نتیجه گیری

فصل پنجم: تحلیل سیستم های مهندسی شیمی در حالت ناهمگن و

۳۰۱	چندمرحله ای
۳۰۳	۵-۱- مقدمه
۳۰۳	۵-۲- سیستم های ناهمگن
۳۰۴	۵-۲-۱- معادلات طراحی و موازنه مواد برای سیستم های ناهمگن
	۵-۲-۲- تعیین معادلات طراحی (مدل های حالت پایا) برای سیستم های
۳۲۱	متمرکز ناهمگن غیرهمدم
	۵-۲-۳- معادلات طراحی حالت پایای سیستم های توزیع شده غیرهمدم و
۳۲۶	ناهمگن
۳۲۹	۵-۲-۴- سیستم های ناهمگن غیرهمدم
	۵-۳- سیستم های همدمای چندمرحله ای غیرواکنشی و سیستم های غیرخطی و
۳۳۵	خطی با ابعاد بالا
	۵-۳-۱- برج های جذب یا مدل های متراکم ابعاد بالا، سیستم های مرحله
۳۳۵	تعادلی و حالت پایا
	۵-۳-۲- سیستم های جذب چندمرحله ای غیرتعادلی همراه با روابط تعادلی
۳۵۹	غیرخطی
۳۶۶	۵-۴- برج های جذب پرشده همدم
۳۶۷	۵-۴-۱- مدل سازی برج جذب پرشده در حالت همدم
۳۶۹	۵-۴-۲- تحلیل معادلات مدل
۳۷۰	۵-۴-۳- بحث و بررسی نتایج حاصل از تحلیل برج جذب پرشده همدم

۳۸۱	۵-۵-۵ مجموعه سری راکتورهای مخزنی همزن دار پیوسته CSTR در حالت غیرهم‌دما
۳۸۲	۵-۵-۱-۱ بسط مدل
۳۸۵	۵-۵-۲-۲ حل عددی سیستم راکتورهای CSTR پشت سرهم
۴۰۲	۵-۵-۳-۳ معادلات حالت پایای سیستم
۴۰۳	۵-۵-۴-۴ بحث و نتیجه‌گیری
۴۰۵	پیوست

مقدمه

به طور کلی در تحلیل معادلات حاصل از مدل سازی تمامی سیستم های مهندسی همچون فرایندهای مهندسی شیمی، دو رویکرد اصلی را می توان دنبال نمود:

- رویکرد استفاده از روش های حل تحلیلی یا Analytical Methods
- رویکرد استفاده از روش های حل عددی یا Numerical Methods

از آن جایی که در چنین مسایل اغلب با تعداد زیادی از پارامترها و متغیرهای حالت مواجه هستیم، دستیابی به یک جواب ضمنی مشخص به کمک روش های حل تحلیلی، مشکل و در برخی موارد غیرممکن می باشد. بر این اساس تحلیل سیستم های فوق از طریق روش های حل عددی، راه کار مناسب تری خواهد بود. در این زمینه می توان از نرم افزارهای مهندسی مبتنی بر الگوریتم های حل عددی بهره گرفت. که یکی از کارآمدترین آنها، نرم افزار MATLAB می باشد.

در کتاب حاضر با تکیه بر نرم افزار فوق، شرایط عملیاتی فرایندهای مختلف مهندسی شیمی را در دو حالت پایا و غیرپایا مدل سازی و نتایج در قالب پروفایل تغییر پارامترهای مسئله ارایه گشته اند.

بطور خلاصه اهداف کلی کتاب حاضر از جمله:

- آشنایی با اصول مدل سازی ریاضی فرایندهای مهندسی شیمی
- آشنایی با نحوه کاربرد و استفاده از نرم افزار MATLAB در حل عددی مسایل مهندسی شیمی
- آشنایی با مبانی برنامه نویسی ریاضی در نرم افزار MATLAB (Mathematical Programming)

از طریق ارایه مثال های کاربردی و در قالب پنج فصل اصلی مورد توجه قرار گرفته اند.

در فصل اول، مبانی و مفاهیم اصلی مرتبط با مدل سازی فرایندهای مهندسی مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

بر پایه تحلیل ریاضی رفتار متغیرهای حالت سیستم در فرایندهای مختلف مهندسی در قالب سه دسته معادلات مدل به صورت معادلات عددی (Scalar Equations)، معادلات دیفرانسیل مقدار اولیه (Initial Value Problems) و معادلات دیفرانسیل مقدار مرزی (Boundary Value Problems)؛ محتوای اصلی فصول دوم، سوم و چهارم به تحلیل مسایل مهندسی شیمی از طریق حل معادلات عددی (فصل دوم)، حل معادلات دیفرانسیل مقدار اولیه (فصل سوم) و حل معادلات دیفرانسیل مقدار مرزی (فصل چهارم) اختصاص یافته اند.

در فصل پنجم نیز تحلیل رفتار سایر سیستم های مهندسی شیمی از قبیل سیستم های ناهمگن و تعادلی - چند مرحله ای بعنوان موضوع اصلی مطرح شده است.

پیوست ضمیمه کتاب فوق نیز در برگیرنده مجموعه ای از کد برنامه ها و توابع حل سودمند و پر کاربرد در حل مسائل مختلف می باشد.

در تالیف این کتاب در مقایسه با سایر کتاب های موجود، سعی شده در حقیقت با آرایه مثال های عملیاتی گوناگون تا حدود زیادی مفهوم «کاربرد MATLAB در مهندسی شیمی» را پوشش داده و به نوعی به درک بهتر و روشن تری از مسائل مهندسی شیمی و چگونگی حل آنها دست یافت.

در اینجا بر خود فرض می دانم از زحمات بی شائبه مدیریت محترم انتشارات دایره دانش جناب آقای بیگی و جمالی نسب و سایر دوستان عزیز در بخش فنی و آماده سازی کتاب (تایپ، صفحه آرایی، طراحی جلد و چاپ) کمال تشکر و قدردانی را بنمایم. بی شک بدون لطف و مساعدت ایشان، تالیف این کتاب سخت می نمود.

در پایان از کلیه اساتید، دانشجویان و دوستان عزیز خواهشمندم با ابراز نظرات و پیشنهادهای سازنده خود، ما را در هر چه پربارتر کردن این مجموعه یاری رسانند¹.

و من الله التوفیق

رضا احمدی پویا

کارشناس ارشد مهندسی شیمی