



# روش های عددی برای مهندسين شيمه

مؤلفان:

دکتر حسين بکي

(عضو هیأت علمی دانشگاه مهندسی فناوری های نوین قوچان)

مهندس مروتضي اسفندياري

(دانشجوی دکتری دانشگاه فردوسی مشهد)

سرشناسه: بیکی، حسین

عنوان و نام پدیدآور: روش‌های عددی برای مهندسين شيمي  
تأليف: حسين بيكي و مرتضى اسفندياري  
مشخصات نشر: قوچان: انتشارات دانشگاه مهندسي فناوری‌های نوين قوچان، ۱۳۹۴.  
مشخصات ظاهري: ۱۳۹ ص: مصور، جدول، نمودار  
شابک: 978-600-95516-3-7

وضعيت فهرست‌نويسی: فپا  
شناسه افزوده: دانشگاه مهندسي فناوری‌های نوين قوچان  
موضوع: روش‌های عددی  
موضوع: رياضيات  
رده‌بندی کنگره: QA۳۷۱/ب۹ر۸ ۱۳۹۴  
رده‌بندی دیویی: ۰۱۵۱/۰۰۴  
شماره کتابشناسی ملی: ۳۹۲۱۷۸۱



انتشارات دانشگاه مهندسي فناوری‌های نوين قوچان

قوچان - دانشگاه مهندسي فناوری‌های نوين قوچان - (۴۷۳۴۴۰۰۱ - ۰۵۱)

روش‌های عددی برای مهندسين شيمي

تأليف: دکتر حسين بيكي، مهندس مرتضى اسفندياري

(عضو هیأت علمی دانشگاه مهندسي فناوری‌های نوين قوچان)

چاپ اول: ۱۳۹۴

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۹۵۵۱۶-۳-۷

شمارگان: ۱۰۰۰ جلد

## فهرست مطالب

### فصل ۱: مقدمه‌ای بر انواع خطا و محاسبات مورد نیاز..... ۱

- ۱-۱. مقدمه..... ۱
- ۲-۱. منابع یا منشأ خطا..... ۱
- ۱-۱-۱. خطای مدلسازی..... ۲
- ۲-۱-۱. خطای عددی..... ۲
- ۳-۱-۱. خرابی محاسباتی..... ۲
- ۱-۳-۱-۱. خطای رگرسی..... ۲
- ۲-۳-۱-۱. خطای گرد کردن..... ۲
- ۳-۱. انواع خطا در محاسبات..... ۳
- ۴-۱. تعداد ارقام با معنی..... ۳
- ۵-۱. خطای اعمال محاسباتی..... ۴
- ۶-۱. انتشار خطا..... ۴
- ۱-۶-۱. خطای جمع و تفریق..... ۴
- ۲-۶-۱. خطای حاصل ضرب..... ۵
- ۳-۶-۱. خطای تقسیم..... ۵
- ۴-۶-۱. خطای توان..... ۵
- ۷-۱. خطای محاسبه توابع..... ۵
- ۱-۷-۱. خطای محاسبه توابع با استفاده از بسط مکلورن..... ۷
- ۸-۱. گذری بر MATLAB..... ۸
- ۹-۱. مسائل..... ۸

### فصل ۲: حل عددی معادلات غیر خطی..... ۹

- ۱-۲. مقدمه..... ۹
- ۲-۲. روش تکرار ساده (جاگذاری متوالی)..... ۹
- ۳-۲. روش ویجستین..... ۱۳
- ۴-۲. روش نابجایی..... ۱۳
- ۵-۲. روش نیوتن-رافسون..... ۱۷

|    |                    |
|----|--------------------|
| ۲۱ | ۶-۲. روش وترى..... |
| ۲۴ | ۷-۲. مسائل.....    |

### فصل ۳: میان‌یابی و برازش منحنى.....

|    |                                                   |
|----|---------------------------------------------------|
| ۲۷ | ۱-۳. مقدمه.....                                   |
| ۲۷ | ۲-۳. درون‌یابی.....                               |
| ۲۸ | ۳-۳. درون‌یابی داده‌های با فاصله‌های متفاوت.....  |
| ۲۸ | ۱-۳-۳. روش لاگرانژ.....                           |
| ۳۱ | ۲-۳-۳. روش تفاضلات تقسیم شده نیوتن.....           |
| ۳۳ | ۳-۳. درون‌یابی داده‌های متساوی‌فاصله.....         |
| ۳۳ | ۱-۴-۳. روش اضلاع بيشرو نیوتن (نیوتن-گریگورى)..... |
| ۳۵ | ۲-۴-۳. روش تفاضل پسر نیوتن (نیوتن-گریگورى).....   |
| ۳۶ | ۳-۴-۳. تفاضلات مرکزى.....                         |
| ۳۷ | ۵-۳. برازش منحنى با روش گرسىون كمترین مربعات..... |
| ۴۲ | ۶-۳. گذرى بر MATLAB.....                          |
| ۴۵ | ۷-۳. مسائل.....                                   |

### فصل ۴: مشتق‌گیرى و انتگرال‌گیرى عددى.....

|    |                                                                      |
|----|----------------------------------------------------------------------|
| ۴۹ | ۱-۴. مقدمه.....                                                      |
| ۴۹ | ۲-۴. محاسبه مشتق با استفاده از چندجمله‌ای درون‌یابی بيشرو نیوتن..... |
| ۵۳ | ۳-۴. محاسبه مشتق با استفاده از چندجمله‌ای درون‌یابی پسر نیوتن.....   |
| ۵۵ | ۴-۴. محاسبه مشتق با استفاده از سري تیلور.....                        |
| ۵۸ | ۵-۴. انتگرال‌گیرى دوزنقه‌ای.....                                     |
| ۵۹ | ۶-۴. انتگرال‌گیرى سیمپسون.....                                       |
| ۶۲ | ۷-۴. روش نقطه میانی.....                                             |
| ۶۳ | ۸-۴. روش نیوتن - کاتس.....                                           |
| ۶۵ | ۹-۴. روش گاوسى.....                                                  |
| ۶۶ | ۱۰-۴. روش رامبرگ.....                                                |
| ۶۸ | ۱۱-۴. مسائل.....                                                     |

### فصل ۵: دستگاه معادلات.....

|    |                               |
|----|-------------------------------|
| ۷۱ | ۱-۵. مقدمه‌ای بر جبر خطى..... |
| ۷۲ | ۲-۵. روش‌های مستقیم.....      |

|    |                                               |
|----|-----------------------------------------------|
| ۷۲ | ۱-۲-۵. روش حذفی گاوس                          |
| ۷۸ | ۲-۲-۵. روش گاوس - جردن                        |
| ۷۸ | ۳-۲-۵. روش تجزیه LU                           |
| ۸۰ | ۳-۲-۵. روش‌های تکراری                         |
| ۸۰ | ۱-۳-۵. روش ژاکوبی                             |
| ۸۱ | ۲-۳-۵. روش گاوس سایدل                         |
| ۸۸ | ۴-۵. روش تیلور برای حل دستگاه معادلات غیر خطی |
| ۹۱ | ۵-۵. مسائل                                    |

### فصل ۳: حل عددی معادلات دیفرانسیل معمولی

|     |                                  |
|-----|----------------------------------|
| ۹۵  | ۱-۶. مقدمه                       |
| ۹۶  | ۲-۶. روش تیر                     |
| ۹۷  | ۳-۶. روش اویلر و اویلر اصلاح شده |
| ۱۰۴ | ۴-۶. روش‌های رانگ-کوتا           |
| ۱۰۶ | ۵-۶. روش تیراندازی (پرتابی)      |
| ۱۰۷ | ۶-۶. روش تفاضل محدود             |
| ۱۰۹ | ۷-۶. مسائل                       |

### فصل ۷: حل عددی معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی

|     |                                                 |
|-----|-------------------------------------------------|
| ۱۱۳ | ۱-۷. مقدمه                                      |
| ۱۱۳ | ۲-۷. طبقه‌بندی معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی |
| ۱۱۴ | ۳-۷. روش تفاضل محدود                            |
| ۱۱۶ | ۴-۷. حل عددی معادلات جزئی سهمی گون              |
| ۱۱۶ | ۱-۴-۷. روش صریح                                 |
| ۱۱۸ | ۲-۴-۷. روش ضمنی                                 |
| ۱۱۹ | ۵-۷. معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی بیضی گون  |
| ۱۲۱ | ۶-۷. انواع شرایط مرزی                           |
| ۱۲۳ | ۷-۷. مسائل                                      |

### مراجع

## پیشگفتار

این کتاب به بررسی مسائل عددی در علوم و مسائل مهندسی شیمی می‌پردازد. مباحث مهندسی شیمی مورد بررسی در این کتاب عبارتند از: مکانیک سیالات، انتقال حرارت، انتقال جرم، سینتیک و مازاحی راکتور. با توجه به اهمیت استفاده از حل کامپیوتری در روش‌های عددی، برای اکثر مثال‌های موجود در متن کتاب، برنامه مربوطه با استفاده از نرم‌افزار MATLAB ارائه شده است. با توجه به این امر که پیاده‌سازی الگوریتم‌های حل عددی به صورت برنامه کامپیوتری یکی از مشکلات اصلی دانشجویان می‌باشد، برنامه‌های نوشته شده در این کتاب به صورت جزء به جزء و خط به خط توضیح داده شده‌اند تا طرز نوشتن برنامه کامپیوتری برای مخاطبان قابل فهم و استفاده باشد. در پایان هر فصل مسائلی برای دانشجویان ارائه شده است که حل آن‌ها توصیه می‌شود.

از آنجا که حل مسائل به روش‌های عددی توأم با پذیرش برخی چشم‌پوشی‌هایی است که منجر به تولید خطا می‌شود، در فصل اول کتاب به بررسی منابع پیدایش انواع خطا و راه‌های کنترل آن‌ها پرداخته شده است.

در فصل دوم کتاب حل عددی معادلات غیرخطی مورد بررسی قرار گرفته است. بسیاری از مسائل که در مهندسی و علوم با آن‌ها سروکار داریم، نیازمند به حل معادلات غیرخطی می‌باشند. در این فصل پنج روش پرکاربرد برای حل معادلات جبری غیرخطی مورد بررسی قرار گرفته است.

در فصل سوم کتاب، میان‌یابی و برازش منحنی بر داده‌های آزمایشگاهی و اندازه‌گیری شده مطرح می‌شود. در این فصل نه مثال متنوع در رابطه با میان‌یابی و برازش منحنی همراه با برنامه‌نویسی ارائه شده است.

انتگرال‌گیری و مشتق‌گیری که یکی از اعمال ریاضی پرکاربرد در مسائل مهندسی، به ویژه مهندسی شیمی می‌باشد که در فصل چهارم مورد بررسی قرار گرفته است. در این فصل شش نوع انتگرال‌گیری و سه نوع مشتق‌گیری معرفی شده است. در فصل پنجم کتاب روش‌های عددی حل دستگاه معادلات خطی با استفاده از مثال‌هایی در زمینه مهندسی شیمی مورد بررسی قرار گرفته است. در دو فصل پایانی کتاب روش‌های حل عددی معادلات دیفرانسیل معمولی (فصل ششم) و معادلات دیفرانسیل پاره‌ای (فصل هفتم) معرفی شده است. این کتاب جهت تدریس در سطح کارشناسی رشته‌های مهندسی شیمی، مهندسی نفت و مهندسی مکانیک قابل استفاده است. مطالب فصل‌ها به گونه‌ای تدوین شده است که می‌توان هر فصل را به صورت جداگانه مورد مطالعه قرار داد. تلاش مؤلفان بر آن بوده تا کتاب عاری از اشتباه باشد. رفع ایرادات و کاستی‌های احتمالی موجود در کتاب نیازمند نظرات دانشجویان، اساتید و صاحب‌نظران می‌باشد. برای بیان نظرات خود با آدرس [hbeiki@qnet.ac.ir](mailto:hbeiki@qnet.ac.ir) می‌توانید مکاتبه نمایید.

دکتر حسین بیکی  
مهندس مرتضی اسفندیاری