

به نام خدا

کاربرد ریاضیات در مهندسی شیمی

«پاسخ سری چهارم تمارین»

۱ - مسئله مقدار اولیه زیر را به روش رانگ-کوتای مرتبه چهارم حل کنید.

$$y' = 2xy \quad h = 0.1 \quad y(1) = 1 \quad y(1.5) = ?$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) + O(h^5)$$

$$K_1 = hf(x_i, y_i)$$

$$K_2 = hf\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}K_1\right)$$

$$K_3 = hf\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}K_2\right)$$

$$K_4 = hf(x_i + h, y_i + K_3)$$

گام اول:

$$k_1 = 0.1 f(x_0, y_0) = 0.1(2x_0y_0) = 0.1(2 \times 1 \times 1) = 0.2$$

$$k_2 = 0.1 f\left(x_0 + \frac{1}{2} \times 0.1, y_0 + \frac{1}{2} \times 0.2\right) = 0.1 \left(1 + \frac{0.1}{2}\right) \times \left(1 + \frac{0.2}{2}\right) = 0.231$$

$$k_3 = 0.1 f\left(x_0 + \frac{1}{2} \times 0.1, y_0 + \frac{1}{2} \times 0.231\right) = 0.234$$

$$k_4 = 0.1 f(x_0 + 0.1, y_0 + 0.234) = 0.272$$

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(0.2 + 2(0.231) + 2(0.234) + 0.272) = 1.234$$

x_n	y_n
1	1
1.1	1.234
1.2	1.553
1.3	1.994
1.4	2.612
1.5	3.490

۲ - دستگاه معادلات زیر را با استفاده از روش اویلر تا سه گام (h) حل کنید.

$$\frac{dx}{dt} = xy + t, x(0) = 1$$

$$\frac{dy}{dt} = ty + x, y(0) = -1$$

$$h = 0.2$$

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = xy + t \rightarrow x_{i+1} = x_i + h(x_i y_i + t_i) \\ \frac{dy}{dt} = ty + x \rightarrow y_{i+1} = y_i + h(t_i y_i + x_i) \end{cases}$$

$$\begin{cases} x(0.2) = 1 + 0.2(1 \times -1 + 0) = 0.8 \\ y(0.2) = -1 + 0.2(0 \times (-1) + 1) = -0.8 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x(0.4) = 0.8 + 0.2((0.8) \times (-0.8) + 0.2) = 0.712 \\ y(0.4) = -0.8 + 0.2(0.2 \times (-0.8) + 0.8) = -0.672 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x(0.6) = 0.712 + 0.2((0.712) \times (-0.672) + 0.4) = 0.6963 \\ y(0.6) = -0.672 + 0.2(0.4 \times (-0.672) + 0.712) = -0.5834 \end{cases}$$

۳- با استفاده از اویلر معادله زیر را تا سه گام (h) حل کنید.

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1 - x^2) \frac{dx}{dt} + x = 0, 0 < t < 1, h = 0.01$$

$$\mu = 1, \frac{dx}{dt}|_{t=0} = 1, x(0) = 0$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1 - x^2) \frac{dx}{dt} + x = 0, 0 < t < 1, h = 0.01$$

$$\mu = 1, \frac{dx}{dt}|_{t=0} = 1, x(0) = 0$$

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = y \\ \frac{dy}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2} = \mu(1 - x^2)y - x \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = y, & x(0) = 0 \\ \frac{dy}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2} = y(1 - x^2) - x, & y(0) = 1 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} = y &\rightarrow x_{i+1} = x_i + h(y_i) \\ \frac{dy}{dt} = y(1 - x^2) - x &\rightarrow y_{i+1} = y_i + h(y_i(1 - x_i^2) - x_i) \end{aligned}$$

$$\begin{cases} x(0.01) = 0 + 0.01(1) = 0.01 \\ y(0.01) = 1 + 0.01(1(1 - 0^2) - 0) = 1.01 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x(0.02) = 0.01 + 0.01(1.01) = 0.0201 \\ y(0.02) = 1.01 + 0.01(1.01(1 - 0.01^2) - 0.01) = 1.0199 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x(0.03) = 0.0201 + 0.01(1.0199) = 0.0302 \\ y(0.03) = 1.0199 + 0.01(1.0199(1 - 0.0201^2) - 0.0201) = 1.0298 \end{cases}$$

۴- با در نظر گرفتن معادله کلازیوس-کلاپیرون $\ln(p) = A - \frac{\Delta H}{RT}$ ، مقادیر A و $\frac{\Delta H}{R}$ را برای داده‌های زیر بر اساس هر دو روش ماتریسی و حداقل مربعات (سری‌ها) تعیین کنید.

T	P
۳۷۳	۱۰۰
۳۷۵	۱۱۰
۳۷۸	۱۲۰
۳۸۰	۱۳۰
۳۸۲	۱۴۰
۳۸۵	۱۵۰
۳۸۶	۱۶۰
۳۸۸	۱۷۰
۳۹۰	۱۸۰

روش اول:

T	P	$\frac{-1}{T}$	$\ln(P)$
۳۷۳	۱۰۰	-۰.۰۰۲۶۸۰۹۶۵	۴.۶۰۵۱۷۰۱۸۶
۳۷۵	۱۱۰	-۰.۰۰۲۶۶۶۶۶۷	۴.۷۰۰۴۸۰۳۶۶
۳۷۸	۱۲۰	-۰.۰۰۲۶۴۵۵۰۳	۴.۷۸۷۴۹۱۷۴۳
۳۸۰	۱۳۰	-۰.۰۰۲۶۳۱۵۷۹	۴.۸۶۷۵۳۴۴۵
۳۸۲	۱۴۰	-۰.۰۰۲۶۱۷۸۰۱	۴.۹۴۱۶۴۲۴۲۳
۳۸۵	۱۵۰	-۰.۰۰۲۵۹۷۴۰۳	۵.۰۱۰۶۳۵۲۹۴
۳۸۶	۱۶۰	-۰.۰۰۲۵۹۰۶۷۴	۵.۰۷۵۱۷۳۸۱۵
۳۸۸	۱۷۰	-۰.۰۰۲۵۷۷۳۲	۵.۱۳۵۷۹۸۴۳۷
۳۹۰	۱۸۰	-۰.۰۰۲۵۶۴۱۰۳	۵.۱۹۲۹۵۶۸۵۱

$$X = \begin{bmatrix} 1 & -0.002680965 \\ 1 & -0.002666667 \\ 1 & -0.002645503 \\ 1 & -0.002631579 \\ 1 & -0.002617801 \\ 1 & -0.002597403 \\ 1 & -0.002590674 \\ 1 & -0.00257732 \\ 1 & -0.002564103 \end{bmatrix}, y^* = \begin{bmatrix} 4.605170186 \\ 4.700480366 \\ 4.787491743 \\ 4.86753445 \\ 4.941642423 \\ 5.010635294 \\ 5.075173815 \\ 5.135798437 \\ 5.192956851 \end{bmatrix}$$

$$b = (X'X)^{-1}X'y^*$$

$$X'X = \begin{bmatrix} 9 & -0.0236 \\ -0.0236 & 6.1751 \times 10^{-5} \end{bmatrix}$$

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} 528.0498 & 2.0157 \times 10^5 \\ 2.0157 \times 10^5 & 7.6962 \times 10^7 \end{bmatrix}$$

$$b = (X'X)^{-1}X'y^* = \begin{bmatrix} 17.9267 \\ 4964.5 \end{bmatrix}$$

روش دوم:

$$y = A + Bx \rightarrow d^r = (y - A - Bx)^r$$

$$\sum d^r = \min$$

$$\frac{\partial}{\partial A} \sum d^r = 0 \rightarrow -\sum (y - A - Bx) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial B} \sum d^r = 0 \rightarrow -\sum (y - A - Bx)x = 0$$

$$\sum y - An - B \sum x = 0 \rightarrow An + B \sum x = \sum y$$

$$\sum yx - A \sum x - B \sum x^r = 0 \rightarrow A \sum x + B \sum x^r = \sum yx$$

T	P	$\frac{-1}{T} = x$	$\ln(P) = y$	$y \times x$	x^2
۳۷۳	۱۰۰	-۰.۰۰۲۶۸۰۹۶۵	۴.۶۰۵۱۷۰۱۸۶	-۰.۰۱۲۳۴۶۳۰۱	۷.۱۸۷۵۷E-۰۶
۳۷۵	۱۱۰	-۰.۰۰۲۶۶۶۶۶۷	۴.۷۰۰۴۸۰۳۶۶	-۰.۰۱۲۵۳۴۶۱۴	۷.۱۱۱۱۱E-۰۶
۳۷۸	۱۲۰	-۰.۰۰۲۶۴۵۵۰۳	۴.۷۸۷۴۹۱۷۴۳	-۰.۰۱۲۶۶۵۳۲۲	۶.۹۹۸۶۸E-۰۶
۳۸۰	۱۳۰	-۰.۰۰۲۶۳۱۵۷۹	۴.۸۶۷۵۳۴۴۵	-۰.۰۱۲۸۰۹۳۰۱	۶.۹۲۵۲۱E-۰۶
۳۸۲	۱۴۰	-۰.۰۰۲۶۱۷۸۰۱	۴.۹۴۱۶۴۲۴۲۳	-۰.۰۱۲۹۳۶۲۳۷	۶.۸۵۲۸۸E-۰۶
۳۸۵	۱۵۰	-۰.۰۰۲۵۹۷۴۰۳	۵.۰۱۰۶۳۵۲۹۴	-۰.۰۱۳۰۱۴۶۳۷	۶.۷۴۶۵E-۰۶
۳۸۶	۱۶۰	-۰.۰۰۲۵۹۰۶۷۴	۵.۰۷۵۱۷۳۸۱۵	-۰.۰۱۳۱۴۸۱۱۹	۶.۷۱۱۵۹E-۰۶
۳۸۸	۱۷۰	-۰.۰۰۲۵۷۷۳۲	۵.۱۳۵۷۹۸۴۳۷	-۰.۰۱۳۲۳۶۵۹۴	۶.۶۴۲۵۸E-۰۶
۳۹۰	۱۸۰	-۰.۰۰۲۵۶۴۱۰۳	۵.۱۹۲۹۵۶۸۵۱	-۰.۰۱۳۳۱۵۲۷۴	۶.۵۷۴۶۲E-۰۶
مجموع		-۰.۰۲۳۵۷۲۰۱۳	۴۴.۳۱۶۸۸۳۵۶	-۰.۱۱۶۰۰۶۳۹۹	۶.۱۷۵۰۷E-۰۵

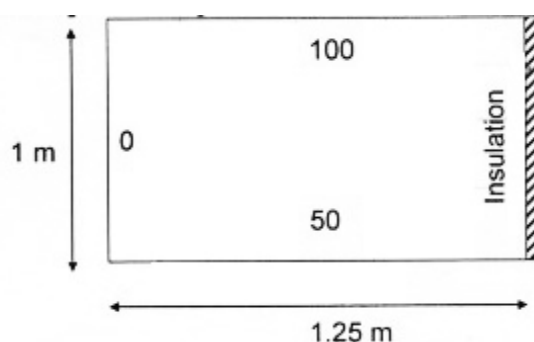
$$A n + B \sum x = \sum y \rightarrow 9 A - ۰.۰۲۳۵۷۲۰۱۳ B = ۴۴.۳۱۶۸۸۳۵۶$$

$$A \sum x + B \sum x^2 = \sum yx \rightarrow -۰.۰۲۳۵۷۲۰۱۳ A + ۶.۱۷۵۰۷ \times ۱۰^{-۵} B = -۰.۱۱۶۰۰۶۳۹۹$$

$$A = ۱۷.۹۷۵ \quad B = ۴۹۸۳.۲۵$$

۵-الف) با استفاده از موازنه انرژی، توزیع دما دوبعدی ناپایا را در یک صفحه تخت نازک به دست آورید. لازم به ذکر است که درون صفحه یک منبع حرارتی ثابت $\left(\frac{W}{m^3}\right) \dot{q}$ وجود دارد. فرض کنید رسانندگی حرارتی $k(W/mK)$ ، دانسیته $\rho (kg/m^3)$ و ظرفیت گرمایی $c_p (J/kg.K)$ ثابت می‌باشند.

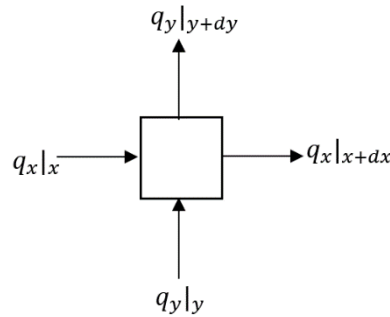
ب) با ساده‌سازی معادله بالا و استفاده از روش تفاضل محدود، توزیع دما پایا را در صفحه مستطیلی زیر به دست آورید. محاسبه دمای گره‌ها را تا دو مرتبه ادامه دهید.



اطلاعات مسئله:

$$\Delta x = \Delta y = 0.25 \text{ m}, \dot{q} = 50 \frac{W}{m^3}, k = 0.1 \frac{W}{mK}$$

(الف)



بر اساس موازنه انرژی:

$$q_x'' A_x|_x - q_x'' A_x|_{x+dx} + q_y'' A_y|_y - q_y'' A_y|_{y+dy} + \dot{q} dV = \frac{\partial \rho dV c_p T}{\partial t}$$

$$q_x'' A_x|_{x+dx} = q_x'' A_x|_x + \frac{\partial q_x'' A_x}{\partial x} dx, q_y'' A_y|_{y+dy} = q_y'' A_y|_y + \frac{\partial q_y'' A_y}{\partial y} dy$$

$$-\frac{\partial q_x'' A_x}{\partial x} dx - \frac{\partial q_y'' A_y}{\partial y} dy + \dot{q} dV = \frac{\partial \rho dV c_p T}{\partial t}, A_x = w dy, A_y = w dx, dV = dx \cdot dy \cdot w$$

$$-\frac{\partial (q_x'' w dy)}{\partial x} dx - \frac{\partial (q_y'' w dx)}{\partial y} dy + \dot{q} \cdot dx \cdot dy \cdot w = \rho \cdot dx \cdot dy \cdot w \cdot c_p \frac{\partial T}{\partial t}, q_x'' = -k \frac{dT}{dx}, q_y'' = -k \frac{dT}{dy},$$

$$k, \rho, c_p = cte$$

$$w \cdot dy \cdot k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dx + w dx k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} dy + \dot{q} \cdot dx \cdot dy \cdot w = \rho \cdot dx \cdot dy \cdot w \cdot c_p \frac{\partial T}{\partial t}, \alpha = \frac{k}{\rho c_p}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\dot{q}}{k} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t}$$

بر اساس ساده سازی معادله انرژی:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}, k_x = k_y = k_z = k$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\dot{q}}{k} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t}$$

ب) با توجه به اینکه سوال گفته است به صورت پایا حل شود، عبارت مربوط به تجمع حذف می گردد.

گره های داخلی (۱-۱۲):

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\Delta x^2} (T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j})$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{1}{\Delta y^2} (T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1})$$

$$\frac{1}{\Delta x^2} (T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}) + \frac{1}{\Delta y^2} (T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}) + \frac{q'}{k} = 0$$

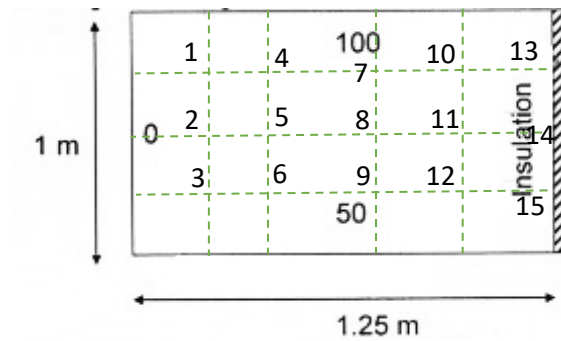
$$\frac{1}{\Delta x^2} (T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}) + \frac{1}{\Delta x^2} (T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}) + \frac{q'}{k} = 0$$

$$T_{i,j} = \frac{1}{4} (T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1}) + \frac{q' \Delta x^2}{4k}$$

$$T_{i,j} = \frac{1}{4} (T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1}) + 31.25$$

گره‌های روی عایق (۱۳-۱۵):

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{2\Delta x} (3T_{i,j} - 4T_{i-1,j} + T_{i-2,j}) = 0, O(h^2) \rightarrow T_{i,j} = \frac{4T_{i-1,j} - T_{i-2,j}}{3}$$



دمای حدس بر اساس میانگین دمای مرزها:

$$T_{Initial\ guess} = 50$$

$$T_1 = \frac{1}{4} (0 + 100 + T_4 + T_2) + 31.25 = \frac{1}{4} (0 + 100 + 50 + 50) + 31.25 = 81.25$$

$$T_2 = \frac{1}{4} (0 + T_1 + T_5 + T_3) + 31.25 = \frac{1}{4} (0 + 81.25 + 50 + 50) + 31.25 = 76.56$$

$$T_3 = \frac{1}{4} (0 + T_2 + T_6 + 50) + 31.25 = \frac{1}{4} (0 + 76.56 + 50 + 50) + 31.25 = 75.39$$

$$T_4 = \frac{1}{4} (T_1 + 100 + T_7 + T_5) + 31.25 = \frac{1}{4} (81.25 + 100 + 50 + 50) + 31.25 = 101.56$$

$$T_5 = \frac{1}{4} (T_2 + T_4 + T_8 + T_6) + 31.25 = \frac{1}{4} (76.56 + 101.56 + 50 + 50) + 31.25 = 100.78$$

$$T_6 = \frac{1}{4} (T_3 + T_5 + T_9 + 50) + 31.25 = \frac{1}{4} (75.39 + 100.78 + 50 + 50) + 31.25 = 100.29$$

$$T_7 = \frac{1}{4}(T_4 + 100 + T_{10} + T_8) + 31.25 = \frac{1}{4}(101.56 + 100 + 50 + 50) + 31.25 = 106.64$$

$$T_8 = \frac{1}{4}(T_5 + T_7 + T_{11} + T_9) + 31.25 = \frac{1}{4}(100.78 + 106.64 + 50 + 50) + 31.25 \\ = 108.10$$

$$T_9 = \frac{1}{4}(T_6 + T_8 + T_{12} + 50) + 31.25 = \frac{1}{4}(100.29 + 108.10 + 50 + 50) + 31.25 \\ = 108.34$$

$$T_{10} = \frac{1}{4}(T_7 + 100 + T_{13} + T_{11}) + 31.25 = \frac{1}{4}(106.64 + 100 + 50 + 50) + 31.25 \\ = 107.91$$

$$T_{11} = \frac{1}{4}(T_8 + T_{10} + T_{14} + T_{12}) + 31.25 = \frac{1}{4}(108.10 + 107.91 + 50 + 50) + 31.25 \\ = 110.25$$

$$T_{12} = \frac{1}{4}(T_9 + T_{11} + T_{15} + 50) + 31.25 = \frac{1}{4}(108.34 + 110.25 + 50 + 50) + 31.25 \\ = 110.89$$

$$T_{13} = \frac{4T_{10} - T_7}{3} = \frac{4 \times 107.91 - 106.64}{3} = 108.33$$

$$T_{14} = \frac{4T_{11} - T_8}{3} = \frac{4 \times 110.25 - 108.10}{3} = 110.96$$

$$T_{15} = \frac{4T_{12} - T_9}{3} = \frac{4 \times 110.89 - 108.34}{3} = 111.74$$