

مقدمه‌ای بر روش اجزای محدود

در مهندسی شیمی و پلیمر

میرحمید رضا قریشی

استاد پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران

سرسامه	:	قریشی، حمیدرضا؛ ۱۳۴۳ -
عنوان و نام پدیدآور	:	مقدمه‌ای بر روش اجزای محدود در مهندسی شیمی و پلیمر / میرحمیدرضا قریشی.
مشخصات نشر	:	تهران: پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، ۱۳۹۲.
مشخصات ظاهری	:	۲۴۴ ص.
شابک	:	۹۷۸-۶۰۰-۹۳۹۳۱-۷-۶
وضعیت فهرست نویسی:	:	فیبا
موضوع	:	روش المان‌های محدود
موضوع	:	روش المان‌های محدود -- برنامه‌های کامپیوتری
موضوع	:	مهندسی شیمی
موضوع	:	مهندسی پلیمر
شناسه فزو	:	پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران
رده بندی کنگره	:	۱۳۹۲ م ۷۴۳ ق/ ۴۳۴۷ TA
رده بندی دیوید	:	۶۲۰/۰۰۱۵۱۵۳۵
شماره کتابشناسی	:	۳۳۷۴۱۳

نام کتاب: مقدمه‌ای بر روش اجزای محدود در مهندسی شیمی و پلیمر

مؤلف: دکتر میرحمیدرضا قریشی

ویراستار: مهرداد سلوی فرهنگزاده

ناشر: پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران

طراحی و صفحه‌آرایی: ایمن‌پردازان فن هنر

تاریخ انتشار: ۱۳۹۲

تیراژ: ۱۰۰۰ جلد

قطع: وزیری

قیمت: ۱۰۰,۰۰۰ ریال

چاپ اول

ISBN: 978-600-93931-7-6

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۹۳۹۳۱-۷-۶

نشانی ناشر: پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، صندوق پستی ۱۴۹۷۵-۱۱۲

info@ippi.ac.ir

www.ippi.ac.ir

صحت مطالب بر عهده نویسنده است.

پیش گفتار نویسنده

دنیای مهندسی شیمی و پلیمر مملو از مدل‌های ریاضی است که برای بیان فیزیک حاکم بر مسائل موجود در آن ایجاد شده‌اند. سرمنشأ همه این مدل‌ها اصول مربوط به بقای جرم، انرژی و اندازه حرکت است. در حقیقت، با به‌کارگیری این اصول و قرار دادن آنها در قالب معادلات ریاضی می‌توان به مدل‌هایی دست یافت که بیان‌کننده رفتار سامانه مورد مطالعه باشند. بزرگ‌ترین اتفاق این مدل‌های ریاضی به شکل یک یا چند معادله دیفرانسیل هم‌زمان است که در حل آنها می‌توان پاسخ سامانه را در برابر ورودی‌های مورد نظر به دست آورد. مثال‌ها متعددی از این دست را می‌توان برشمرد. توزیع دما در یک قطعه پلاستیکی در حال سرد شدن پس از تسلیب‌گیری، پیش‌بینی توزیع دما و پیشرفت واکنش شبکه‌ای شدن در یک قطعه پلیمری، فرایند اکستروژن و توزیع دما و پیشرفت واکنش شیمیایی در یک راکتور پیوسته یا غیر پیوسته تنها بخشی از کاربردهای مدل‌سازی ریاضی هستند. دانشجویان و مهندسان رشته‌های مهندسی شیمی و پلیمر با چگونگی مدل‌سازی و نحوه رسیدن به معادلات دیفرانسیل تحت شرایط گوناگونی هم‌چون انتقال گرما و جرم، مکانیک سیالات و فرایندهای شکل‌دهی آشنایی کافی دارند که عموماً از آنها تحت عنوان کلی پدیده‌های انتقال یاد می‌شود. اما آنچه که استفاده از این مدل‌سازی‌ها را دشوار می‌سازد، حل آنها برای مسائل واقعی و روزمره است که نیاز هر مهندس به پژوهشگری است که به دنبال طراحی یا راهبری بهینه است. این‌گونه مسائل معمولاً از مسائل پیچیدگی برخوردار هستند که روش‌های تحلیلی یا حتی تقریبی که در اغلب کتب و منابع این‌ها اشاره می‌شود (همانند روش‌های تفاضل محدود^۱ و حجم محدود^۲) نیز قابلیت حل دقیق معادلات حاکم را ندارند و نیاز به روش‌ها و فنون‌های قوی‌تر و دقیق‌تر کاملاً مشهود است. میان انواع روش‌های عددی که بدین منظور تاکنون ابداع شده‌اند، روش اجزای محدود^۳ به عنوان روشی جامع و استاندارد مورد قبول تمام دست‌اندرکاران این حوزه قرار گرفته است. از زمان عرضه

1. Finite difference method

2. Finite volume method

3. Finite element method

این روش تاکنون، توسعه‌های فراوانی در آن انجام شده و همچنان نیز در حال توسعه است. روش اجزای محدود چند ویژگی منحصر به فرد دارد که آن را به عنوان یک روش محبوب و پرکاربرد در حوزه‌های گوناگون مهندسی بدل ساخته است. از مهم‌ترین این ویژگی‌ها می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

۱- اصلی‌ترین ویژگی این روش، مستقل بودن روش حل از شکل هندسی دامنه مسئله است. این بدین معنی است که وقتی یک معادله دیفرانسیل به کمک این روش حل شود در آن سکا می‌توان آن را برای تمام اشکال هندسی که منطبق بر دامنه اولیه باشند به کار برد. عنوان مثال، وقتی یک معادله انتقال گرما در فضای دوبعدی کارتزین (x,y) حل شود، می‌توان این روش را برای تمام فضاهای دوبعدی صرف‌نظر از میزان پیچیدگی شکل هندسی آن استفاده کرد. این ویژگی دست مهندسان و کاربران را در شبیه‌سازی سامانه‌های گوناگون باز می‌سازد و آن‌ها را از ساده‌سازی‌هایی که در مدل‌سازی ریاضی عموماً مورد نیاز است، رها می‌سازد.

۲- حل مسائل بدون در نظر داشتن شرایط مرزی واقعی حاکم بر مسئله میسر نیست. روش اجزای محدود امکان به‌کارگیری شرایط مرزی مختلفی را که در مسائل گوناگون وجود دارد به راحتی میسر می‌سازد. همان‌گونه که بعداً مشاهده خواهد شد، شرایط مرزی نوع اول، دوم و سوم در این روش به آسانی قابل اعمال است. از این رو، پاسخ‌های به دست آمده نسبت به سایر روش‌ها به جواب‌های واقعی نزدیک‌ترند.

۳- اغلب مسائل از دامنه‌هایی تشکیل می‌شود که در آنها از چند نوع ماده با خواص فیزیکی، مکانیکی و گرمایی استفاده شده است. در این روش می‌توان برای هر جزء، از ویژگی همان جزء استفاده و بدین ترتیب ترکیب مواد مختلف در یک مسئله (همانند آمپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با الیاف) را در نظر گرفت. همچنین، در روش اجزای محدود به می‌توان تغییرات ویژگی‌های مواد با متغیرهای گوناگون (نظیر وابستگی گرانشی به سرعت برش و دما) را در مدل لحاظ کرد.

روش اجزای محدود در حقیقت یک فناوری محاسباتی به شمار می‌آید که در آن دانش مربوط به محاسبات عددی در بخش‌های گوناگون نظیر تقریب زدن در یک فضا، انتگرال‌گیری

عددی، حل دستگاه معادلات و غیره در کنار یکدیگر به نحو معنی‌داری استفاده می‌شود. از این رو، روش مزبور قابلیت حل پیچیده‌ترین مسائل پیش‌رو در مهندسی را در کمترین زمان و با بیشترین دقت داراست. همین امر کاربران این روش را قادر می‌سازد تا بتوانند آن را در قالب الگوریتم‌های مختلف درآورده و به شکل یک نرم‌افزار کامپیوتری تجاری قابل عرضه سازند. امروزه، نرم‌افزارهای مختلفی بر پایه این روش نوشته و به بازار عرضه شده که از جمله معروف‌ترین آنها می‌توان به نرم‌افزارهای ABAQUS، ANSYS، MARC و COCOS/M اشاره داشت. این نرم‌افزارها عمدتاً همراه با نرم‌افزارهای دارای محیط‌های گرافیکی بسیار قوی و جذاب، ارائه می‌شوند و کاربران را قادر می‌سازند تا با حداقل دانش محاسباتی، پیچیده‌ترین مدل‌ها را ساخته و مورد تجزیه و تحلیل قرار دهند. استفاده از این نوع نرم‌افزارها ادراک به فاجده شبیه‌سازی را بسیار آسان می‌کند و نیاز به دانش محاسباتی گسترده را مرتفع می‌سازد. به سبب این اصطلاحاً جعبه سیاه عمل می‌کنند و آگاهی چندانی از چگونگی محاسبات و نحوه رسیدن به پاسخ‌ها را در اختیار کاربر قرار نمی‌دهند. از این رو، کاربرانی که در سطوح عالی و به خصوص قصد استفاده از این روش برای حل مسائل خود دارند، ترجیح می‌دهند تا نرم‌افزار یا برنامه کامپیوتری مورد نیاز خود را شخصاً نوشته یا از نرم‌افزارهای منبع باز استفاده کنند. این مطلب آنها را قادر می‌سازد تا با شفاف‌سازی تمام مراحل محاسبه از جزئیات اطلاع حاصل کرده و به این ترتیب بیشتری نسبت به حالتی که از نرم‌افزارهای تجاری استفاده می‌شود، دست یابند. بدین منظور لازم است تا اصول نظری و پایه محاسبات اجزای محدود مورد توجه قرار گرفته و پس از آشنایی آنها بتوان نسبت به برنامه‌نویسی کامپیوتری اقدام کرد.

در این کتاب سعی شده است تا به نیاز اولیه دانش‌پژوهان و مهندسان شیمی، دانش اصول نظری و چگونگی حل معادلات دیفرانسیل در این حوزه از مهندسی به کمک روش اجزای محدود پاسخ داده شود. بنابراین، سطح کتاب بیشتر به طرف ریاضیات و مباحث مربوط به آن تمایل داشته و حل معادلات دیفرانسیل که غالباً از مرتبه دوم هستند، مستقیماً مورد توجه قرار گرفته است.

برای دست‌یابی به این هدف در فصل نخست این مجموعه، به فرمول‌بندی تغییراتی^۱ و چگونگی تقریب زدن^۲ که پایه روش اجزای محدود است و در دنباله از فصل دوم تا ششم به حل انواع معادلات دیفرانسیل که در مهندسی شیمی و پلیمر پیش روی پژوهشگران و مهندسان قرار دارد، پرداخته شده است. بدین ترتیب که فصل دوم به حل معادلات یک‌بعدی و فصل سوم به حل معادلات انتقال گرمای دوبعدی رسانی اختصاص دارد. ذکر این نکته ضروری است که تمرکز کتاب بر حل معادلات یک و دوبعدی است که در دستگاه‌های رتزی و استوانه‌ای (متقارن محوری^۳) بیان شده باشند. علت آن است که اگرچه بین نحوه حل و فرمول‌بندی معادلات یک و دوبعدی تفاوت زیادی وجود دارد، اما تعمیم و گسترش آن به میدان‌های بعدی کار چندان دشواری نیست و تنها نیازمند محاسبات بیشتر است. در فصل چهارم توانایی‌های سه‌بازن و چگونگی انتگرال‌گیری عددی برای انواع اجزای یک و دوبعدی همراه با جداول مورد انتظار ارائه شده است. در فصل‌های پنجم و ششم به ترتیب جریان سیالات پلیمری و انتقال گرما در جابه‌جایی که جزو مباحث زیربنایی مهندسی شیمی و پلیمر به شمار می‌آید، به‌طور تفصیلی بحث شده است. افزون بر این، از آنجا که هدف این کتاب ارائه اصول نظری و مبانی روش اجزای محدود و تلفیق آن با نحوه کاربرد برای حل مسائل مختلف است، بنابراین در فصل ششم که آخرین فصل به شمار می‌آید، چگونگی برنامه‌نویسی و تبدیل روش‌های گفته شده در فصل‌های قبلی به برنامه‌های کامپیوتری به تفصیل شرح داده شده است. همچنین، ضمن ارائه فهرست یک‌جمله‌ای از پیچیدگی‌های کامپیوتری که به همین منظور و به‌طور اختصاصی برای این کتاب نوشته شده است به حل مسائل کاربردی به وسیله آن پرداخته شده و روش شبیه‌سازی مسائل مختلف شرح داده شده است.

مباحث مطرح شده در این کتاب و تحلیل‌های ارائه شده همگی حاصل تحقیقات چندساله مؤلف در تدریس این مبحث و نیز پروژه‌های پژوهشی و مهندسی متعددی است که طی این سال‌ها به‌مورد اجرا درآمده‌اند. در بخش‌های متعددی از این کتاب از مباحث مطرح شده و مثال‌های داده شده در کتاب معروف *An Introduction to the Finite Element Method*

1. variational formulation
2. approximation
3. axisymmetric

نوشته دانشمند برجسته J.N. Reddy (Reddy, 2005) استفاده شده است. کلام آخر اینکه برای بهره‌گیری هرچه بهتر از مطالب این کتاب آشنایی کافی با دو مبحث مهم پدیده‌های انتقال و حساب دیفرانسیل و انتگرال میدان‌های اسکالر و برداری ضرورت تام دارد. همچنین قویاً توصیه می‌شود، خواننده بر مفاهیم مدل‌سازی ریاضی و معادلات انتقال (اندازه حرکت، گرما و جرم) مسلط شده و درک کافی از فیزیک حاکم بر مسائل موجود در مهندسی شیمی و پلیمر داشته باشد. برای این منظور مطالعه دو کتاب (Bird, Stewart, & Lightfoot, 2006) و (Bird & Hasager, 1987) پیشنهاد می‌شود.

فهرست مطالب

صفحه

فصل اول: فرمول‌بندی تغییراتی و تقریب‌زدن

۱-۱ فرمول‌بندی تغییراتی	۱۷
۱-۱-۱ فانکشنال	۱۷
۱-۱-۲ علامت تغییراتی	۱۹
۱-۱-۳ فرمول‌بندی تغییراتی و شکل تضعیف شده مسائل شرط مرزی	۲۰
۱-۱-۴ فانکشنال مربعی شکل	۲۴
۱-۱-۵ انتخاب توابع تقریب‌زن	۲۶
۱-۱-۶ چند مثال	۲۷
۲-۱ روش باقی مانده ماندگار	۳۲
۳-۱ خلاصه	۴۲

فصل دوم: تحلیل اجزای محدود با اعداد یک به بعدی

۱-۲ مقدمه	۴۵
۲-۲ انتخاب و حل معادله مدل	۴۷
۱-۲-۲ توابع تقریب‌زن	۵۱
۳-۲ سوار کردن	۵۴
۴-۲ اعمال شرایط مرزی	۵۷
۱-۴-۲ روش اول	۵۸
۲-۴-۲ روش دوم	۵۹
۵-۲ حل دستگاه معادلات	۶۰
۶-۲ مرحله پس پردازش	۶۰
۷-۲ چند نکته	۶۱
۸-۲ یک مثال	۶۴
۹-۲ مسائل شرط اولیه	۷۲
۱۰-۲ خلاصه	۸۲

فصل سوم: انتقال گرمای رسانشی

۸۵	۱-۳ مقدمه
۸۶	۲-۳ معادلات حاکم در فضای دوبعدی کارتزین
۸۶	۳-۳ حل معادله به روش اجزای محدود
۸۹	۴-۳ توابع تقریب زن
۱۰۱	۵-۳ شرط مرزی نوع سوم
۱۰۴	۶-۳ مسائل گذرا
۱۱۲	۷-۳ نائل غیرخطی
۱۱۳	۱-۷-۱ روش پیکارد
۱۱۳	۲-۷-۳ روش رن-رفسن
۱۱۶	۳-۷-۳ حل یک مسئله غیرخطی
۱۲۰	۴-۷-۳ معیار سادگر
۱۲۰	۸-۳ شرط مرزی تابش
۱۲۱	۹-۳ خلاصه

فصل چهارم: توابع تقریب زن و انتگرال گیری عددی

۱۲۵	۱-۴ مقدمه
۱۲۶	۲-۴ توابع تقریب زن و مختصات طبیعی
۱۲۷	۱-۲-۴ جزء یک بعدی (خطی) دو گره ای (L2)
۱۲۸	۲-۲-۴ اجزای یک بعدی سه گره ای (L3)
۱۲۸	۳-۲-۴ اجزای مثلثی سه گره ای (T3)
۱۲۹	۴-۲-۴ اجزای مثلثی چهار گره ای (T4)
۱۳۰	۵-۲-۴ اجزای شش گره ای مثلثی درجه دوم (T6)
۱۳۱	۶-۲-۴ اجزای چهار گره ای چهار ضلعی (Q4)
۱۳۱	۷-۲-۴ اجزای ۸ گره ای چهار ضلعی (Q8)
۱۳۲	۸-۲-۴ اجزای ۹ گره ای چهار ضلعی (Q9)
۱۳۴	۳-۴ اجزای تک پارامتری و تبدیل مختصات

۱۳۷	۴-۴ انتگرال گیری عددی
۱۴۲	۴-۴-۱ انتگرال گیری گوس در دو بعد

فصل پنجم: جریان سیالات غیرنیوتونی گرانو تراکم ناپذیر

۱۴۹	۱-۵ مقدمه
۱۵۰	۲-۵ معادلات حاکم
۱۵۱	۱-۵ معادلات حاکم در فضای دو بعدی کارتزین (x,y)
۱۵۲	۲-۵ معادلات حاکم در فضای استوانه‌ای با تقارن محوری (r,z)
۱۵۴	۳-۵ حل معادلات حاکم برای اجزای محدود
۱۵۵	۱-۳-۵ معادلات جاری اجزای عددی ترکیبی دوبعدی کارتزین (x,y)
۱۵۹	۱-۳-۵-۱ انتخاب اجزای عددی
۱۶۰	۲-۳-۵ معادلات جاری اجزای محدود ترکیبی استوانه‌ای با تقارن محوری (r,z)
۱۶۴	۳-۳-۵ معادلات جاری اجزای محدود ترکیبی دوبعدی کارتزین (x,y)
۱۶۸	۴-۳-۵ معادلات جاری اجزای محدود ترکیبی استوانه‌ای با تقارن محوری (r,z)
۱۶۹	۴-۵ غیرخطی بودن و تغییرات گرانروی
۱۷۱	۱-۴-۵ معیار همگرایی
۱۷۱	۵-۵ شرایط مرزی
۱۷۲	۱-۵-۵ شرط مرزی بدون سرخوردگی
۱۷۲	۲-۵-۵ شرط مرزی سرخوردگی
۱۷۳	۳-۵-۵ شرط مرزی فشاری
۱۷۳	۴-۵-۵ شرط مرزی سطوح آزاد
۱۷۴	۶-۵ روش بازیابی تغییراتی
۱۷۶	۷-۵ یک مثال
۱۸۱	۸-۵ خلاصه

فصل ششم: انتقال گرمای جابه‌جایی

۱۸۵	۱-۶ مقدمه
-----	-----------

۱۸۶	۲-۶ معادلات حاکم
۱۸۶	۳-۶ حل معادلات به روش اجزای محدود
۱۸۹	۴-۶ بادی‌بند
۱۹۵	۱-۴-۶ بادی‌بندی در حالت دوبعدی
۱۹۸	۲-۴-۶ روش بادی‌بند برای اجزای با مرتبه بالاتر
۲۰۱	۳-۴-۶ SUPG غیریکنواخت در برابر SUPG یکنواخت
۲۰۶	۱ خلاصه

فصل هفتم: برنامه کامپیوتری

۲۰۹	۱-۷ مقدمه
۲۱۰	۲-۷ برنامه کامپیوتری
۲۱۴	۳-۷ مثال
۲۲۰	۴-۷ فهرست برنامه

۲۳۵	مراجع
۲۳۹	واژه‌نامه