نکاتی بر آموزش محاسبات عددی در مهندسی شیمی

فرامرز هرمزی*
استادیار دانشکده مهندسی دانشگاه سمنان
farayandjt@yahoo.com

نهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران

دانشگاه علم و صنعت ایران
۳-۵ آذر ماه ۱۳۸۳

چکیده

توسعه سریع دینامیک سیالات محاسباتی در مهندسی شیمی، نتیجه پیشرفتهای شگرف در تحلیل عددی، تکنولوژی کامپیوتر و روش های تجربی اندازه گیری در طول ده سال گذشته می باشد. با اضافه شدن درس محاسبات عددی در برنامه جدید آموزشی دوره کارشناسی، لازم است نحوه آموزش این درس و ارتباط آن با سایر دروس مرتبط با محاسبات عددی روشن گردد.

توصیف کامل و بحث روی تمام روش های مفید عددی در یک درس قابل انجام نیست، لذا هدف این مقاله راهنمایی برای درک عمیق تر آموزش محاسبات عددی در مهندسی شیمی می باشد. این مقاله شامل پنج قسمت است. بخش اول مقدمه‌ای در مورد اهمیت روش های عددی در مهندسی شیمی می باشد. کاربرد روش های عددی در مهندسی شیمی در بخش دوم مرور شده است. ارتباط میان دروس مرتبط با محاسبات عددی برای دوره‌های کارشناسی در بخش سوم و برای دوره های تحصیلات تکمیلی در بخش چهارم آورده شده است.

نویسنده مقاله امیدوار است نکات ارائه شده در اینجا برای توسعه محاسبات عددی در مهندسی شیمی مفید

کلمات کلیدی: محاسبات عددی، مهندسی شیمی، آموزش، پژوهش

مقدمه

مکانیک سیالات، انتقال حرارت و جرم، طراحی راکتور و ترمودینامیک اصلی ترین دروس مهندسی شیمی در مقاطع کارشناسی، کارشناسی ارشد و حتی دوره دکتری می باشند. در این دروس ضمن معرفی قوانین بقا، روش فرمول بندی و بدست آوردن معادلات حاکم برای سیستم های مختلف به دانشجویان آموزش داده می‌شود. در اکثر موارد این معادلات مجموعه ای از معادلات دیفرانسیل پاره ای غیرخطی و وابسته می باشند که باید در یک قلمرو فیزیکی ناهموار و با شرایط اولیه و مرزی گوناگون و حتی مجهول حل شوند. حل تحلیلی برای این معادلات فقط با لحاظ کردن فرضیات ساده کننده فراوان میسر است. این فرضیات گاه باعث غیرواقعی شدن مسائل می گردد لذا در بیشتر موارد لازم است روش های عددی برای حل معادلات حاکم بر مسائل مهندسی شیمی بکار گرفته شود.

اما اینگونه نیست. بعبارت دیگر علیرغم اهمیت روش های عددی بعنوان تنها روش برای بررسی و حل معادلات حاکم بر مسائل واقعی مهندسی شیمی، این روش ها بطور گسترده بکار گرفته نمی‌شود. به نظر نگارنده این مقاله، دلایل عدم توجه مناسب به استفاده از روش های عددی در مهندسی شیمی بصورت ذیل است:

۱- از کاربردهای جدید محاسبات عددی در مهندسی شیمی اطلاع دقیقی وجود ندارد.

۲- آموزش محاسبات عددی به دانشجویان مهندسی شیمی ناقص و غیر کاربردی است.

۳- به محاسبات عددی در تحصیلات تکمیلی توجه مناسبی نمی شود.

خوشبختانه در این راستا، در برنامه جدید آموزشی دوره کارشناسی دروس خوبی مانند محاسبات عددی و کارگاه عمومی نرم‌افزار اضافه شده است اما لازم است نحوه آموزش این دروس و ارتباط آنها با سایر دروس مرتبط با محاسبات عددی، روشن گردد. در این مقاله نکاتی در ارتباط با نحوه آموزش دروس مرتبط با محاسبات عددی در مقطع کارشناسی ارائه شده است. سپس برای مقاطع تحصیلات تکمیلی پیشنهاداتی در مورد سرفصل های دروس محاسبات عددی پیشرفته و نحوه بکارگیری روش های عددی در پژوهش ها ارائه شده است. رعایت این نکات باعث افزایش توان علمی و عملی در بکارگیری محاسبات عددی در رشته مهندسی شیمی می گردد .

کاربرد محاسبات عددی در مهندسی شیمی

پیشرفت های به دست آمده در ساخت کامپیوترهای با سرعت و پرحافظه، امکان حل معادلات حاکم بر سیستم های واقعی را با استفاده از روش های عددی مختلف فراهم کرده است. این پیشرفت ها سبب معرفی روش های عددی جدیدتری شده اند که تقریبا به صورت روزانه پیشنهاد می شود. بخشی از این روش‌ها که در ارتباط با معادلات حرکت و انرژی درون سیالات است، علمی مستقل به نام دینامیک سیالات محاسباتی یا به اختصار CFD را تشکیل داده است. اخیرا استفاده از CFD در مهندسی شیمی نیز مورد توجه قرار گرفته است [۱] و کاربردهای آن روز به روز در حال افزایش است به حدی که یکی از بخش های مجلات معتبر و یا کنفرانس های مهندسی شیمی به کاربردهای CFD در مهندسی شیمی اختصاص دارد [۲].

با استفاده از محاسبات عددی برای حل مسائل به فرضیات ساده کننده کمتری مورد نیاز بوده و مسأله مورد بررسی بسیار نزدیک به مساله واقعی می باشد. نتایج محاسبات حاوی اطلاعات بسیاری از جزئیات میدان سرعت، نحوه تغییرات درجه حرارت، غلظت و . . . است که برای بررسی عملکرد آن بسیار سودمند است.
با تکرار حل می توان اثر پارامترهای مختلف را روی سیستم مورد نظر بررسی و آنرا بهینه کرد [۱، ۲] . بدین ترتیب ملاحظه می شود که با بکارگیری روش های عددی برای حل مسائل مهندسی شیمی اطلاعات فراوانی بدست می آید. این اطلاعات می تواند از نظر آموزشی برای افزایش درک دانشجویان مهندسی شیمی از رویدادهای واقعی موجود در سیستم ها مورد استفاده قرار گیرد یا به عنوان وسیله ای قدرتمند به پژوهشگران این رشته در بررسی مسائل مختلف یاری رساند.

آموزش محاسبات عددی به دانشجویان مهندسی شیمی

محاسبات عددی یا آنالیز عددی کاربردی، علمی ریاضی و هنری محاسباتی است [۳]. کامپیوتر در محاسبات عددی، کاربرد بسیار وسیعی دارد و با توجه به توسعه سخت افزار و نرم افزار مربوطه، برنامه های مختلف و پیچیده‌ای برای حل مسائل ریاضی نوشته و ارائه شده اند. تعدادی از معروف ترین این برنامه ها یا بسته‌های نرم‌افزاری عبارتند از Maple, Matlab و Mathematica. در حالیکه این نرم افزار ها توانایی و پتانسیل بالایی در اختیار دانشجویان و مهندسان قرار می دهند اما بدلیل آموزش نامناسب و کمبود مهارت دانشجویان و فارغ‌التحصیلان مهندسی شیمی، این امکانات بخوبی بکار گرفته نمی‌شود. موارد ذیل می تواند در آموزش محاسبات عددی به دانشجویان مهندسی شیمی موثر باشد.

تدریس مبانی کامپیوتر و برنامه نویسی

اولین آشنایی و آموزش کامپیوتر در درس مبانی کامپیوتر و برنامه نویسی انجام می شود. در این درس ضمن تشریح مبانی کار کامپیوتر و قسمتهای مختلف آن، یک مترجم یا زبان برنامه‌نویسی به دانشجویان آموزش داده می شود. نکات قابل توجه در این قسمت عبارتند از:

لزوم تدریس زبان فرترن

زبان های آموزش داده شده به دانشجویان شامل فرترن (Fortran) ,C و پاسکال (Pascal) می‌باشد. اما پیشنهاد می شود که فقط آخرین نسخه از زبان فرترن آموزش داده شود. زیرا کلمه Fortran در اصل از مخفف دو کلمه Formula Translation ساخته شده است و در واقع در میان سایر زبان های برنامه‌نویسی، فرترن بیشترین قابلیت و سرعت برای حل فرمول های ریاضی و انجام محاسبات عددی دارد. نسخه های جدید فرترن، یک زبان کاملا مدرن، نیرومند و همه جانبه برای انجام محاسبات عددی است و شامل تمام قابلیت‌هایی است که استفاده‌کنندگان از پاسکال یا C انتظار دارند. نسخه های جدید فرترن به جهتی بیش از یک زبان برنامه نویسی می باشند این زبان در بردارنده مفاهیم و اصطلاحاتی است که در دنیای حرفه ای مهندسی نرم افزار مورد نیاز است. کاربردهای پیچیده و خارج از علوم ریاضی و انجام عملیات روی داده‌های غیر عددی نیز توسط این زبان انجام می‌شود [۴].

ارائه مثال های ساده ریاضی

در آموزش زبان فرترن به دانشجویان می بایست روی قابلیت های مختلف زبان تاکید شود. این کار با ارائه مثالهای گوناگون که مفاهیم ریاضی ساده ای دارند انجام می گیرد. سادگی مفاهیم ریاضی موجود در مثال ها باعث تمرکز دانشجویان به قابلیت های زبان برنامه نویسی می‌شود.

آموزش خواندن انتقاد آمیز برنامه ها

برنامه نویسی خوب را نمی توان تنها با بیان مفاهیم آموزش داد. راه یادگیری برنامه نویسی خوب این است که بارها و بارها به تجربه دریافت شود که برنامه های کاربردی را چگونه می توان با بکارگیری تعداد محدودی از اصول تجربی خوب و کمی فراست اصلاح کرد. تمرین در خواندن انتقاد آمیز برنامه ها سبب کسب مهارت در بازنویسی آنها می شود. که به نوبه خود منجر به افزایش مهارت در نوشتن برنامه خواهد شد [۵].

آموزش سبک برنامه نویسی

آموزش سبک برنامه نویسی، نکته ای است که معمولا در آموزش برنامه نویسی یا سایر دروس مرتبط به محاسبات عددی از آن غفلت می شود. در سبک برنامه نویسی، نحوه درست نوشتن برنامه‌ها (نه زبان برنامه‌نویسی) ارائه می گردد. کمبود مهارت دانشجویان در سبک برنامه نویسی باعث عدم موفقیت آنها در نوشتن برنامه های کاربردی و بزرگ می گردد.

تدریس محاسبات عددی

مبانی ریاضی محاسبات عددی در درس جدیدی که به همین نام به دروس مهندسی شیمی اضافه شده، آموزش داده می شود. در این درس مقرر شده است که مفاهیمی همچون حل ریشه های یک معادله غیرخطی، حل دستگاههای بزرگ معادلات خطی، بدست آوردن جواب های یک دستگاه معادلات غیرخطی و . . . آموزش داده شود. نکات قابل توجه در تدریس محاسبات عددی عبارتند از:

تاکید روی اصول نظری

پیشنهاد می شود در این درس روی اصول نظری محاسبات عددی به همراه کاربردهای عمومی آن تاکید گردد. لزومی به ارائه مثالهایی از مهندسی شیمی در این درس نیست زیرا می بایست توجه دانشجویان به مفاهیم ریاضی و شکل کلی معادلات جلب شده و ذهن آنها درگیر مسائل فنی مهندسی شیمی نگردد.

افزایش مهارت برنامه نویسی

لازم است در این درس مهارت برنامه نویسی دانشجویان برای حل مسائل پیچیده تر افزایش یابد. اینکار با نوشتن برنامه، خواندن نقادانه برنامه های نوشته شده و افزایش معلومات در مورد سبک برنامه‌نویسی قابل انجام است. بدین ترتیب می بایست بین مدرسان این دروس هماهنگی ایجاد گردد.

عدم استفاده از بسته های نرم افزار

استفاده از بسته های نرم افزار ریاضی مانند Mathematica, Maple, Matlab که قابلیت انجام محاسبات عددی را نیز دارند، در این درس توصیه نمی گردد. زیرا استفاده از این نرم افزار باعث کاهش توجه دانشجویان به درک مفاهیم ویژه محاسبات عددی می گردد. در صورتی که لازم است ابتدا این مفاهیم بخوبی و با تمرین زیاد توسط دانشجویان فراگرفته شود.

تدریس کارگاه عمومی نرم افزار

پیشنهاد می شود درس کارگاه عمومی نرم افزار پس از گذراندن درس محاسبات عددی ارائه گردد. با توجه به قابلیت های فراوان نرم افزار Matlab، توصیه می گردد در این کارگاه این نرم افزار آموزش داده شود. حل مثال‌های شاخص و مطرح شده در درس محاسبات عددی با استفاده از این نرم افزار، می‌تواند قابلیت آنرا بخوبی به دانشجویان نشان دهد. لذا می بایست بین مدرسان این کارگاه و درس محاسبات عددی هماهنگی ایجاد گردد.

تدریس کاربرد ریاضیات در مهندسی شیمی

با توجه به موارد فوق نگرش به درس کاربرد ریاضیات در مهندسی شیمی تغییری می‌یابد. در گذشته که درس محاسبات عددی و کارگاه عمومی کامپیوتر جزء دروس مهندسی شیمی نبود، سر فصل‌های درس محاسبات عددی با تاکید بر مثال های مهندسی شیمی به دانشجویان آموزش داده می شد و از دانشجویان انتظار می رفت که در این درس بصورت ذیل عمل کنند:

۱- بدست آوردن معادله حاکم برای مسأله.

۲- فرا گرفتن و بکارگیری یک روش عددی مناسب برای حل معادلات حاکم.

۳- نوشتن یک برنامه یا استفاده از نرم افزار و رفع اشکالات آن برای حل مساله.

۴- تحلیل نتایج از جهت دقت و صحت.

تجربه اینگونه بود که موارد ۲ و ۳ که در غالب مسائل مهندسی شیمی کمترین اثر یادگیری و آموزشی را داشت، بیشترین زمان را به خود اختصاص داده و سخت ترین بخش تکالیف این درس بود. بنابراین دانشجویان برای حل مسائل واقعی ناچار به صرف زمان زیاد و آموزش همزمان چند موضوع بودند که ارتباط چندانی با یکدیگر نداشتند [۶] . اینک با اضافه شدن دروس محاسبات عددی و کارگاه عمومی کامپیوتر مهارت در موارد ۲ و ۳ در دانشجویان ایجاد شده است. لذا می بایست در این درس بیشتر روی موارد ۱و۴ تاکید شود و مجددا نیاز به هماهنگی میان مدرسان این سه درس ضروری می باشد.

محاسبات عددی در دوره های تحصیلات تکمیلی

در اینجا پیشنهاداتی برای آموزش محاسبات عددی در دوره های تحصیلات تکمیلی و بکارگیری این روش‌ها در پژوهش های تحصیلات تکمیلی ارائه می گردد.

آموزش

به نظر نگارنده، اکثر مباحث ریاضیات مهندسی پیشرفته تحلیلی در درس انتقال حرارت پیشرفته (هدایت) قابل آموزش است و برای افزایش مهارت دانشجویان کارشناسی ارشد در محاسبات عددی، پیشنهاد می‌شود بجای درس ریاضیات پیشرفته، محاسبات عددی پیشرفته آموزش داده شود. البته لازم است مبانی نظری و محتوای مباحث محاسبات عددی در درس محاسبات عددی پیشرفته نسبت به سرفصل های کنونی تغییر یابد تا مطالب علمی مورد نیاز برای حل عددی مسائل موجود در مهندسی شیمی به دانشجویان آموزش داده شود. به طور کلی برای حل عددی مسائل سه مرحله ذیل وجود دارد:

- تقریب متغیرهای مجهول با استفاده از توابع.
- گسسته سازی با استفاده از جایگذاری تقریب ها در معادلات حاکم و سپس انجام تغییرات ریاضی.
- حل دستگاه های بسیار بزرگ معادلات جبری.

روش های عددی موجود برای حل این مسائل، اختلاف محدود (Finite Difference)، المان محدود (Finite Element) و روشهای طیفی (Spectral) می باشند. تفاوت اصلی میان این سه روش، چگونگی تقریب متغیرهای مجهول در معادلات حاکم و فرآیند گسسته سازی می باشد. در روش اختلاف محدود مقدار مجهولات با استفاده از مقادیر همسایه ها در هر نقطه در نقاط گره مربوط به خطوط شبکه تعیین می شوند. در این روش از بسط‌های سری تیلور منقطع برای بدست آوردن تقریب های اختلاف محدود استفاده می شود. در کاربردهای جدید بجای این روش از روش حجم محدود (Finite Volume) که حالت ویژه ای از اختلاف محدود است، بکار گرفته می شود. در روش المان محدود، از توابع تکه ای ساده (خطی، درجه دوم یا درجات بالاتر) برای تعیین تغییرات محلی متغیرهای مجهول استفاده می شود. در این روش مقادیر باقیمانده (یا خطاها) در برخی جهت‌ها با ضرب آنها در مجموعه ای از توابع وزنی، انتگرال‌گیری شده و به حداقل می‌رسند.

در روش های طیفی، مجهولات با استفاده از سریهای قطع شده فوریه یا سریهای چند جمله ای چبی شف تقریب زده می شوند و بر خلاف دو روش قبل، این تقریب ها محلی نبوده و برای تمام ناحیه محاسباتی معتبر می‌باشند. تمام روش های فوق کاربرد وسیعی در مسائل پژوهشی دارند لذا بهتر است ضمن معرفی اجمالی هر یک از این روش ها، روش حجم محدود در مقطع کارشناسی ارشد آموزش داده شود. برای مقطع دکتری و یا دانشجویانی که پایان نامه خود را در زمینه محاسبات عددی انتخاب می کنند، آموزش روش های پیشرفته حجم محدود یا آموزش روش های المان محدود و روش‌های طیفی مناسب است.

پژوهش

محاسبات عددی به دو شکل می تواند در پژوهش های مهندسی شیمی وارد شود. در شکل اول محاسبات عددی موضوع پژوهش می باشد. در این حالت پژوهش‌هایی با هدف گسترش مبانی نظری و ارائه روش های جدید محاسبات عددی برای افزایش سرعت، دقت یا کاهش حجم محاسبات و حافظه اشغال شده توسط کامپیوتر انجام

می شود. در این حالت دانش عمیقی از روش های جدید محاسبات عددی محدودیت و مشکلات مربوطه و توانایی حل مورد نیاز می باشد. این موضوع در حوزه فعالیت‌های محققین فوق دکتری، دانشجویان دکتری و یا متخصصین محاسبات عددی با تجربه چندین ساله می باشد. در شکل دوم روش های عددی بعنوان یک ابزار (نه موضوع تحقیق) برای انجام پژوهش‌های مهندسی شیمی بکار گرفته می شود.

برای اینکار لازم است از کدها یا بسته های نرم افزاری که قبلا توسط خود محققان یا سایرین ارائه شده و دقت و صحت آنها اثبات شده است، برای بررسی مسائل جدید بکار گرفته شود. نکته قابل توجه در مورد پژوهش های محاسبات عددی این است که حل یک مساله واقعی با روش محاسبات عددی آن هم در حد مرزهای دانش یک کار حجیم و بزرگ است که نیرو و توان بسیاری از محققین صرف آن می شود.

برای بررسی صحت و دقت روش های عددی بکار گرفته شده نیز روش های استانداردی وجود دارد لذا روش موجود در اکثر دانشکده های مهندسی شیمی که انجام محاسبات عددی را توام با ارائه کار تجربی برای اثبات نتایج عددی می کنند، باعث کاهش پیشرفت در زمینه محاسبات عددی می گردد و پیشنهاد می‌شود. مانند سایر رشته های مهندسی از روش‌های استاندارد برای بررسی نتایج محاسبات عددی استفاده می شود.

نتیجه گیری

- بیش از یک دهه از بکارگیری حرفه ای روش های محاسبات عددی در سایر کشورها می گذرد و لازم است در کشور ما نیز به آموزش و بکارگیری این روش ها، توجه بیشتری شود.
- در برنامه آموزشی جدید دوره کارشناسی دروس خوبی مانند محاسبات عددی و کارگاه عمومی کامپیوتر ارائه شده است اما لازم است ارتباط این دروس با سایر دروس مرتبط با محاسبات عددی مانند مبانی کامپیوتر و برنامه نویسی و کاربرد ریاضیات در مهندسی شیمی و اهداف آموزشی هر یک روشن گردد.
- در مقاطع تحصیلات تکمیلی، پیشنهاد شد که محتوای درس ریاضیات پیشرفته و محاسبات عددی پیشرفته مورد بازنگری قرار گرفته و روی نکات نظری و جنبه های کاربردی آن بیشتر تاکید شود.
- بکارگیری روش های محاسبات عددی در پژوهش های مهندسی شیمی به دو شکل قابل انجام است و برای بررسی صحت و دقت نتایج، نیازی به داده گیری توسط خود پژوهشگر نمی باشد.

منابع و مراجع

۱. هرمزی، ف و همکاران، CFD ابزاری جدید برای آموزش و پژوهش در مهندسی شیمی، مجله آموزش مهندسی ایران، شماره ۴، سال دوم ص ۵۳-۴۵، ۱۳۷۹.

2. Harris C K., etal, Computational fluid dynamics for chemical reactor engineering, Chem. Eng. Sci. Vol 51, 1569-1564, 1996.

3. Gerald C., etal, Applied numerical analysis, J.W.S., 2003.

4. Metcalf H. etal., Programming in fortran 90, Oxford Sci. Pub., 1995.

5. Kernighan B.W. etal. The elements of Programming Style, 2nd ed. Mc Grow Hill, 1985.

6. Cutlip,M,B. etal, Problem Solving in Chem. Eng. with Numerical Methods, J.W.S., 1999.