مدرسان شریف

فصل اول

« مدل‌سازی ریاضی و فرمولاسیون »

مقدمه

اولین مرحله برای بررسی و مطالعه سیستم‌ها، بیان ریاضی مسأله می‌باشد. بیان ریاضی مسأله عبارت است از: مدل‌سازی ریاضی و فرمولاسیون سیستم، که خود شامل مراحل زیر است:

۱ـ تعیین پارامترهای متغیر و ثابت سیستم مورد مطالعه

۲ـ انتخاب دستگاه مختصات مناسب

۳ـ رسم شکل سیستم مورد مطالعه

۴ـ تعیین سیستم مورد مطالعه و مدل‌سازی ریاضی

۵ـ بیان فرض‌های فیزیکی مسأله

۶ـ استفاده از قوانین عمومی

۷ـ استفاده از قوانین ویژه متناسب با سیستم

۸ـ مرتب کردن و ساده‌سازی معادلات به‌دست آمده

۹ـ بی‌بعد کردن معادلات

۱۰ـ اعمال شرایط اولیه و مرزی مسأله

در ادامه به شرح مراحل فوق می‌پردازیم.

تعیین متغیرها و پارامترهای سیستم

متغیرهای یک سیستم، به ۲ دستهٔ متغیرهای مستقل و متغیرهای وابسته تقسیم می‌شود.

الف) متغیرهای مستقل: این متغیرها، کمیت‌هایی هستند که سیستم را توصیف کرده و در یک آزمایش خاص می‌توان آن‌ها را مستقل از سایر کمیت‌ها تغییر داد.

ب) متغیرهای وابسته: این متغیرها، خواصی از سیستم هستند که با تغییر مقدار متغیرهای مستقل تغییر می‌کنند. در انجام آزمایش روی یک سیستم، کنترل مستقیم بر متغیر وابسته وجود ندارد و با توجه به رابطه علت و معلولی بین متغیرهای مستقل و وابسته، متغیر وابسته میزان تأثیر یک علت خاص را، روی سیستم نشان می‌دهد. دما، غلظت و راندمان نمونه‌هایی از متغیرهای وابسته هستند.

ج) پارامترها: پارامترها، بزرگ‌ترین گروه علائم هستند که شامل خواص مشخصه دستگاه‌ها و خواص فیزیکی مواد می‌باشند. پارامترها خواصی از سیستم هستند که در حین انجام یک آزمایش خاص، ثابت باقی می‌مانند. برای هر یک از این خاصیت‌ها، در آزمایش‌های مختلف می‌توان مقادیر ثابت متفاوتی را به دست آورد. ابعاد کلی دستگاه، شدت جریان‌ها، ضرایب انتقال حرارت، ضرایب انتقال جرم، گرمای ویژه، چگالی و مقادیر اولیه یا مرزی متغیرهای وابسته، نمونه‌هایی از پارامترها هستند.

انتخاب دستگاه مختصات

برای انتخاب سیستم مورد مطالعه لازم است که ابتدا مروری بر انواع دستگاه‌های مختصات داشته باشیم؛ زیرا با توجه به مسأله مورد بررسی، امکان استفاده از دستگاه‌های سه‌بعدی کارتزین، کروی و استوانه‌ای وجود دارد. این دستگاه‌ها در ۳ جهت بر هم عمود هستند.

نکته ۱: در مدل‌سازی فرمولاسیون ریاضی سیستم، جهت‌های ورودی و خروجی جریان‌ها را باید با توجه به مبدأ مختصات و جهت‌های انتخابی برای مثبت و منفی محورهای مختصات تعیین کرد تا در علائم و در نتیجه مراحل بعدی حل مسأله اشکالی ایجاد نشود.

در این قسمت ابتدا مروری بر تعاریف ابتدایی و فرمول‌های مورد نیاز داشته و سپس هر دستگاه مختصات و نحوهٔ المان‌گیری روی آن را بررسی می‌کنیم.

کمیت اسکالر

به کمیت‌هایی گفته می‌شود که تنها توسط یک عدد که همان اندازه کمیت است، مشخص می‌شود، مانند: جرم و انرژی. در ادامه برای سهولت از نماد B برای نمایش عمومی کمیت‌های اسکالر استفاده می‌شود.

کمیت برداری

به کمیت‌هایی اتلاق می‌شود که برای مشخص شدن، علاوه بر اندازه، به جهت نیز وابسته هستند، مانند نیرو. در ادامه برای سهولت از نماد F برای نمایش عمومی کمیت برداری استفاده می‌شود.

گرادیان (شیب)

گرادیان، بزرگ‌ترین مقدار مشتق یک تابع اسکالر نسبت به تغییر مکان می‌باشد و جهتش در همان سمتی است که بزرگ‌ترین مقدار مشتق نسبت به تغییر مکان اتفاق می‌افتد. بنابراین گرادیان یک مشتق‌گیری جهت‌دار است. به عنوان مثال، در دستگاه مختصات کارتزین، گرادیان کمیت اسکالر B عبارت است از:

$$\nabla B = \frac{\partial B}{\partial x}\vec{a}_x + \frac{\partial B}{\partial y}\vec{a}_y + \frac{\partial B}{\partial z}\vec{a}_z$$

که در آن $\vec{a}_x$، $\vec{a}_y$ و $\vec{a}_z$ به ترتیب بردارهای واحد در سه جهت x ، y و z هستند.

مشتق کامل

این مشتق عبارت است از گرادیان کمیت مورد نظر نسبت به زمان و مکان. بُعد مکان شامل سه جهت بوده و بسته به دستگاه مختصات انتخابی تعریف می‌شود.

$$dB = \frac{\partial B}{\partial t}dt + \frac{\partial B}{\partial x}\vec{a}_x + \frac{\partial B}{\partial y}\vec{a}_y + \frac{\partial B}{\partial z}\vec{a}_z$$ مشتق کامل

مثال: [مشتق کامل کمیت اسکالر B در دستگاه مختصات کارتزین]

(t) کمیت زمان و $\vec{a}_x$، $\vec{a}_y$ و $\vec{a}_z$ به ترتیب بردارهای کمیت B در سه جهت x ، y و z هستند.

با تقسیم طرفین معادله بر dt به مشتق حرکتی می‌رسیم:

$$\frac{dB}{dt} = \frac{\partial B}{\partial t} + V_x\frac{\partial B}{\partial x} + V_y\frac{\partial B}{\partial y} + V_z\frac{\partial B}{\partial z}$$

دیورژانس $(\nabla.)$

نماد دیورژانس عبارت است از (∇) به عنوان عملگر گرادیان $(\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}))$ و $(\cdot)$ به عنوان ضرب نقطه‌ای (داخلی) که عملگر گرادیان را در میدان برداری $[F = (F_x, F_y, F_z)]$ ضرب نقطه‌ای یا داخلی می‌کند. به عنوان مثال در دستگاه مختصات کارتزین، دیورژانس کمیت برداری F عبارت است از:

$$\nabla.F = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}$$

لاپلاسین

لاپلاسین، یک مشتق از مرتبه بالاتر بوده و نماد نمایشگر آن $(\nabla^۲)$ می‌باشد. برای کمیت اسکالر B داریم (درحقیقت دیورژانس گرادیان یک تابع یا کمیت اسکالر می‌باشد):

$$\nabla^۲ B = \nabla.(\nabla B)$$

به عنوان مثال اگر دستگاه مورد استفاده کارتزین باشد، آنگاه داریم:

$$\nabla.(\nabla B) = \nabla.(\frac{\partial B}{\partial x}\vec{a}_x + \frac{\partial B}{\partial y}\vec{a}_y + \frac{\partial B}{\partial z}\vec{a}_z)$$
$$= (\frac{\partial}{\partial x}\vec{a}_x + \frac{\partial}{\partial y}\vec{a}_y + \frac{\partial}{\partial z}\vec{a}_z)(\frac{\partial B}{\partial x}\vec{a}_x + \frac{\partial B}{\partial y}\vec{a}_y + \frac{\partial B}{\partial z}\vec{a}_z)$$

که $\vec{a}_x$ و $\vec{a}_y$ و $\vec{a}_z$ بردارهای واحد در سه جهت x و y و z هستند، بنابراین، با ضرب داخلی خواهیم داشت:

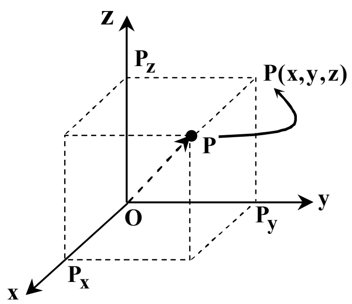
$$\nabla^۲ B = \frac{\partial^۲ B}{\partial x^۲} + \frac{\partial^۲ B}{\partial y^۲} + \frac{\partial^۲ B}{\partial z^۲}$$

پس از آشنایی با کمیت‌ها و تعاریف موردنیاز، مفاهیم فوق را در هر یک از دستگاه‌های مختصات نمایش داده و نحوه المان‌گیری را روی هر یک از این دستگاه‌ها تشریح خواهیم کرد.

الف) دستگاه مختصات کارتزین، دکارتی یا مستطیلی

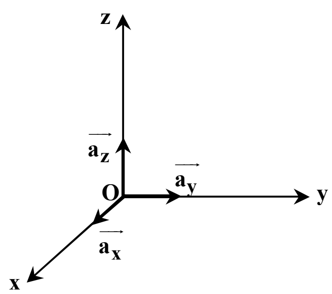
در این دستگاه با تشکیل یک مکعب مستطیل می‌توان موقعیت نقطه یا مکانی را مشخص نمود. با توجه به اینکه محورهای x، y و z در مبدأ o بر هم عمود هستند، برای یافتن مکان هر نقطه و یا انتهای هر بردار، کافی است که از آن نقطه یا انتهای بردار، بر سه محور عمود کرد. سه مختصه یا سه پارامتر x و y و z که از برخورد این عمودها با محورهای مربوطه حاصل می‌شوند، بیانگر موقعیت نقطهٔ مورد نظر می‌باشند.

به عنوان مثال، در (شکل ۱) نقطهٔ P یا بردار $\overrightarrow{OP}$ را در نظر بگیرید. از تجسم فضایی موقعیت نقطه P و رسم عمودهایی بر صفحات zoy (که P_x را به دست می‌دهد)، xoz (که P_y را به دست می‌دهد) و xoy (که P_z را به دست می‌دهد)، مختصه‌ها یا پارامترهای P_x، P_y و P_z که همان مختصات نقطه P به ترتیب روی سه محور x و y و z می‌باشند، به دست می‌آیند.



شکل ۱

بردارهای واحد سه جهت عبارت‌اند از $\vec{a}_x$ و $\vec{a}_y$ و $\vec{a}_z$ که هر کدام به اندازه واحد، منطبق بر محور هم‌نام خود و در جهت مثبت آن محور هستند.



شکل ۲

نمایش بردار فرضی $\overrightarrow{OP}$ در فضای مختصات مستطیلی به صورت تحلیلی به شکل زیر است:

$$\overrightarrow{OP} = P_x\vec{a}_x + P_y\vec{a}_y + P_z\vec{a}_z$$

اندازه OP عبارت است از:

$$OP = \sqrt{P_x^۲ + P_y^۲ + P_z^۲}$$

در دستگاه مختصات کارتزین داریم:

گرادیان کمیت اسکالر B:

$$\nabla B = \frac{\partial B}{\partial x}\vec{a}_x + \frac{\partial B}{\partial y}\vec{a}_y + \frac{\partial B}{\partial z}\vec{a}_z$$

مشتق کامل کمیت اسکالر B:

$$dB = \frac{\partial B}{\partial t}dt + \frac{\partial B}{\partial x}\vec{a}_x + \frac{\partial B}{\partial y}\vec{a}_y + \frac{\partial B}{\partial z}\vec{a}_z$$

مشتق حرکتی کمیت اسکالر B:

$$\frac{dB}{dt} = \frac{\partial B}{\partial t} + V_x\frac{\partial B}{\partial x} + V_y\frac{\partial B}{\partial y} + V_z\frac{\partial B}{\partial z}$$

دیورژانس کمیت برداری F:

$$\nabla.F = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}$$

لاپلاسین کمیت اسکالر B:

$$\nabla^۲ B = \frac{\partial^۲ B}{\partial x^۲} + \frac{\partial^۲ B}{\partial y^۲} + \frac{\partial^۲ B}{\partial z^۲}$$

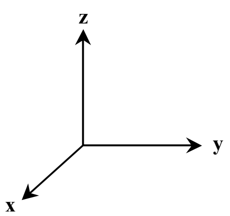
المان‌گیری یا دیفرانسیل‌گیری در دستگاه مختصات کارتزین

با توجه به دستگاه مختصات (شکل ۳) و جهت‌های محورها، اگر محور x را معرف طول، محور y را معرف عرض و محور z را معرف ارتفاع یا عمق در نظر بگیریم و در ادامه داشته باشیم:

سطح عمود بر جهت x: $W.H = A_x$

سطح عمود بر جهت y: $L.H = A_y$

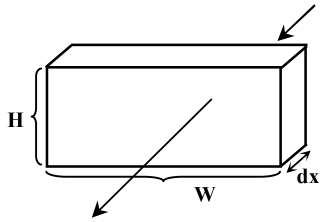
سطح عمود بر جهت z: $L.W = A_z$



شکل ۳

که در آنها: طول $= L$، عرض $= W$ و ارتفاع $= H$ می‌باشند، المان‌های فوق در سه جهت به ترتیب زیر تعیین می‌شوند:

الف) اگر انتقال، تنها در جهت x حائز اهمیت باشد: (شکل ۴)



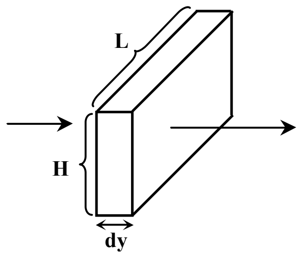
شکل ۴

$A_x = W.H$: سطح عمود بر جهت x را داشتیم

برای به‌دست آوردن حجم المان خواهیم داشت: $dV = A_x.dx = W.H.dx$

تغییرات حجم برحسب تغییرات x: $dV = W \cdot H \cdot dx$

ب) اگر انتقال، تنها درجهت y حائز اهمیت باشد: (شکل ۵)



شکل ۵

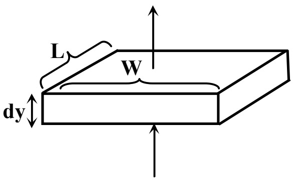
در ادامه برای به‌دست آوردن حجم المان فوق خواهیم داشت:

$A_y = L.H$: سطح عمود بر جهت y را داشتیم

$$dV = A_y.dy = L.H.dy$$

تغییرات حجم برحسب تغییرات y: $dV = L \cdot H \cdot dy$

ج) اگر انتقال، تنها در جهت z حائز اهمیت باشد: (شکل ۶)



شکل ۶

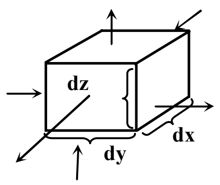
برای به‌دست آوردن حجم المان در جهت z داریم:

$$A_z = L.W$$

$$dV = A_z.dz = L.W.dz$$

تغییرات حجم برحسب تغییرات z (ارتفاع): $dV = L \cdot W \cdot dZ$

د) اگر انتقال در هر سه جهت حائز اهمیت باشد، آنگاه باید المانی به طول dx، عرض dy و ارتفاع dz درنظر بگیریم: (شکل۷)



شکل ۷

$$A_x = dy.dz$$
$$A_y = dx.dz$$
$$A_z = dx.dy$$

پس تغییرات حجم برحسب ۳ متغیر x و y و z به‌دست می‌آید:

$$dV = dx.dy.dz$$

در شکل‌های (۴) الی (۷) جهت بردارها، نشان‌دهنده جهت انتقال است.

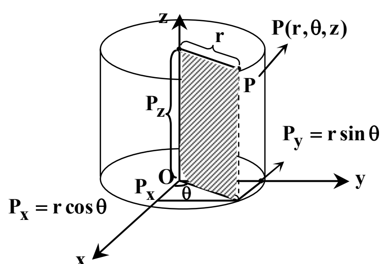
نتیجه: باتوجه به جهت انتقال در ۴ دستگاه مختصات کارتزین فوق معادله برای dV به صورت ذیل دست می‌آید.

انتقال در جهت z: $dV = L \cdot W \cdot dz$　　انتقال در جهت x: $dV = W \cdot H \cdot dx$

انتقال در ۳ جهت x و y و z: $dV = dx \cdot dy \cdot dz$　　انتقال در جهت y: $dV = L \cdot H \cdot dy$

ب) دستگاه مختصات استوانه‌ای

در این دستگاه، مختصات یک نقطه یا انتهای یک بردار برحسب ۳ پارامتر r، z و θ بیان می‌شود. سه پارامتر این دستگاه عبارت‌اند از r، θ و z که r فاصله نقطه P از محور z است. θ زاویه‌ای است که تصویر r روی صفحه xoy با جهت مثبت محور x ، را می‌سازد. (به عبارت دیگر θ زاویه‌ای است که صفحه هاشورخورده با صفحه xoz را می‌سازد). z (ارتفاع) همان پارامتر سوم در مختصات کارتزین می‌باشد. برای یافتن مکان نقطه دلخواه P یا انتهای بردار OP، کافی است که از نقطه P دایره‌ای به شعاع r و عمود بر محور z بگذرانیم.

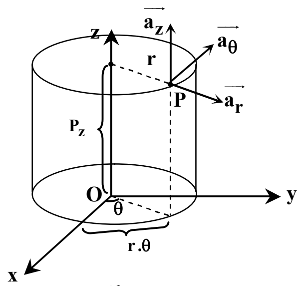


شکل ۸

بنابراین برای مشخص کردن موقعیت نقطه‌ای مانند P در مختصات استوانه‌ای، می‌توان استوانه‌ای تصور و رسم کرد که محور آن محور z، شعاع قاعده آن r، قاعده پایین آن منطبق به صفحه xoy، ارتفاع آن P_z و نقطه P روی محیط قاعده بالایی آن قرار داشته باشد. به این ترتیب محدوده‌های پارامترهای r، θ و z به شرح زیر هستند:

$$0 \le r < \infty \;,\; 0 \le \theta \le 2\pi \;,\; -\infty < z < +\infty$$

بردارهای واحد سه جهت یعنی $\vec{a}_r$، $\vec{a}_\theta$ و $\vec{a}_z$ بر هم عمود هستند و به ترتیب زیر حاصل می‌شوند. (شکل ۹)



شکل ۹

بردار عمود بر محیط قاعده بالایی استوانه نقطه P در امتداد شعاع r و در جهت دورشدن از محور z، $\vec{a}_r$ و بردار مماس بر محیط قاعده بالایی در نقطه P و در جهت دورشدن از جهت مثبت محور xها، $\vec{a}_\theta$ و به‌طور مشابه با دستگاه مختصات کارتزین a_z تعیین می‌شوند. نمایش تحلیلی بردار فرضی $\overrightarrow{OP}$ در فضای مختصات استوانه‌ای به صورت زیر است:

$$\overrightarrow{OP} = P_r\vec{a}_r + P_\theta\vec{a}_\theta + P_z\vec{a}_z \quad \text{یا} \quad \overrightarrow{OP} = r\vec{a}_r + r\theta\vec{a}_\theta + P_z\vec{a}_z$$

و اندازه بردار $\overrightarrow{OP}$ عبارت است از:

$$OP = \sqrt{r^2 + r^2\theta^2 + P_z^2}$$

نکته ۲: با توجه به اینکه کمیت θ از جنس زاویه است، برای تبدیل آن به کمیت طول، از رابطه زاویه با کمان مقابلش استفاده می‌کنیم.

همان‌طور که در (شکل ۸) نشان داده شده است، در دستگاه مختصات استوانه‌ای داریم:

$$\cos\theta = \frac{P_x}{r} \Rightarrow P_x = r\cos\theta \;,\; \sin\theta = \frac{P_y}{r} \Rightarrow P_y = r\sin\theta \;,\; P_z = P_z$$

با توجه به مقادیر P_x و P_y خواهیم داشت:

$$\frac{P_y}{P_x} = \frac{r\sin\theta}{r\cos\theta} \Rightarrow \frac{P_y}{P_x} = tg\theta \Rightarrow \theta = \text{Arc}\tan\left(\frac{P_y}{P_x}\right)$$

و با توجه به اینکه P_x و P_y مختصات نقطه مفروض P روی محورهای x و y می‌باشد، لذا خواهیم داشت:

$$\theta = \text{Arctg}\left(\frac{y}{x}\right)$$

در مختصات استوانه‌ای داریم:

گرادیان کمیت اسکالر B عبارت است از:

$$\nabla B = \frac{\partial B}{\partial r}\vec{a}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial B}{\partial \theta}\vec{a}_\theta + \frac{\partial B}{\partial z}\vec{a}_z$$

مشتق کامل کمیت اسکالر B عبارت است از:

$$dB = \frac{\partial B}{\partial t}dt + \frac{\partial B}{\partial t}\vec{a}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial B}{\partial \theta}\vec{a}_\theta + \frac{\partial B}{\partial z}\vec{a}_z$$

مشتق حرکتی کمیت اسکالر B عبارت است از:

$$\frac{dB}{dt} = \frac{\partial B}{\partial t} + V_r\frac{\partial B}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r}\frac{\partial B}{\partial \theta} + V_z\frac{\partial B}{\partial z}$$

دیورژانس کمیت برداری F عبارت است از:

$$\nabla.F = \frac{\partial F_r}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial F_z}{\partial z}$$

و یا:

$$\nabla.F = \frac{1}{r}\frac{\partial(rF_r)}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial F_z}{\partial z}$$

لاپلاسین کمیت اسکالر B عبارت است از:

$$\nabla^2 B = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial B}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 B}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 B}{\partial z^2}$$

المان‌گیری یا دیفرانسیل‌گیری در دستگاه مختصات استوانه‌ای:

با توجه به (شکل ۳)، اگر محور z را معرف ارتفاع در نظر گرفته و همینطور داشته باشیم:

$R.L = A_\theta : \theta$ سطح عمود بر جهت

$2\pi r.L = Ar : r$ سطح عمود بر جهت

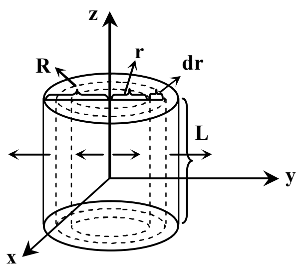
$r.dr.d\theta : A_z = z$ سطح عمود بر جهت

المان‌ها در سه جهت به ترتیب زیر تعیین می‌شوند:

۱) اگر انتقال تنها در جهت r حائز اهمیت باشد (شکل ۱۰):

ارتفاع استوانه × محیط قاعده المان استوانه‌ای = A_r: سطح عمود بر جهت r

برای به‌دست آوردن تغییرات حجم المان باید سطح عمود بر جهت r (A_r) را در تغییرات شعاع (dr) ضرب کرد.



شکل ۱۰

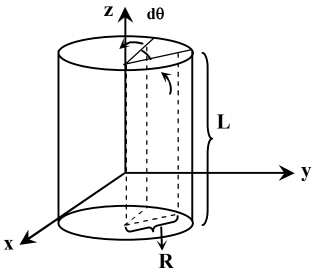
$$A_r = 2\pi r \times L = 2\pi rL$$
$$dV = A_r.dr = 2\pi rL.dr$$

که در آن r شعاع قاعده درونی المان استوانه‌ای و L طول المان است که معادل طول استوانه نیز هست.

۲) اگر انتقال در جهت θ حائز اهمیت باشد: (شکل ۱۱)

شعاع استوانه: R و $A_\theta = R.L$: سطح عمود بر جهت θ

برای به‌دست آوردن تغییرات حجم المان در جهت θ، باید سطح عمود بر جهت θ، (A_θ) را در تغییرات زاویه θ $(d\theta)$ ضرب نمود. در این‌صورت خواهیم داشت: $dV = A_\theta L.d\theta$



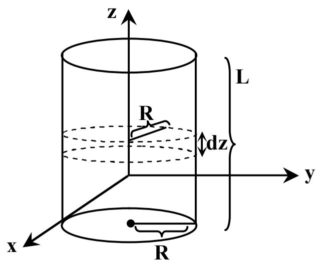
شکل ۱۱

۳) اگر انتقال، تنها در جهت z حائز اهمیت باشد: (شکل ۱۲)

یعنی تغییرات در جهت r و θ نداریم، پس dr و dθ برابر با صفر خواهند بود.

مساحت قاعده استوانه = A_z: سطح عمود بر جهت z

تغییرات حجم المان متناسب با تغییرات ارتفاع (dz) به‌صورت زیر خواهد بود:



شکل ۱۲

$$A_z = \pi R^2$$
$$dV = A_z.dz = \pi R^2 dz$$

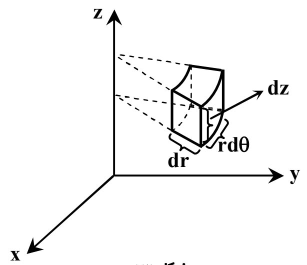
۴) اگر انتقال در هر سه جهت حائز اهمیت باشد: (شکل ۱۳)

یک المان را به‌صورتی‌که در شکل ۱۳ آمده است، در نظر می‌گیریم:

$d\theta$: تغییرات در جهت θ

dz: تغییرات در جهت z

dr: تغییرات در جهت r



شکل ۱۳

$A_r = rd\theta dz$ و $rd\theta$ محیط قاعده المان

$A_\theta = drdz$

$A_z = rd\theta dr = rdrd\theta$

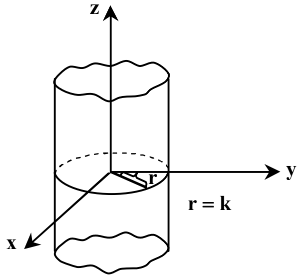
dr: شعاع المان و dz: ارتفاع المان

$A_z \cdot dz = dV$

$dV = rdrd\theta dz$

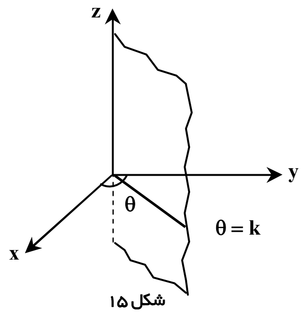
مکان هندسی پارامترهای ثابت در این دستگاه مختصات به قرار زیر است:

در صورتی‌که r ثابت باشد، یعنی $r = k$، آنگاه مکان هندسی موردنظر، سطح جانبی یک استوانه نامحدود با محوریت z و شعاع قاعده $r = k$ خواهد بود. (مطابق شکل ۱۴)

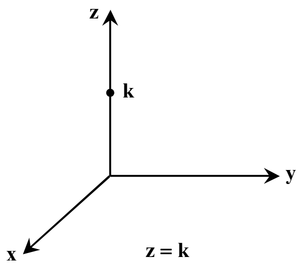


شکل ۱۴

در صورتی‌که زاویه θ ثابت باشد، یعنی $\theta = k$، آنگاه مکان هندسی، نیم‌صفحه‌ای بی‌نهایت و محدود به محور z است که زاویه آن با محور x، θ می‌باشد. (مطابق شکل ۱۵)



شکل ۱۵



شکل ۱۶

اگر z ثابت و برابر با k باشد، آنگاه مکان هندسی یک صفحه بی‌نهایت در ارتفاع k می‌باشد. (مطابق شکل ۱۶)

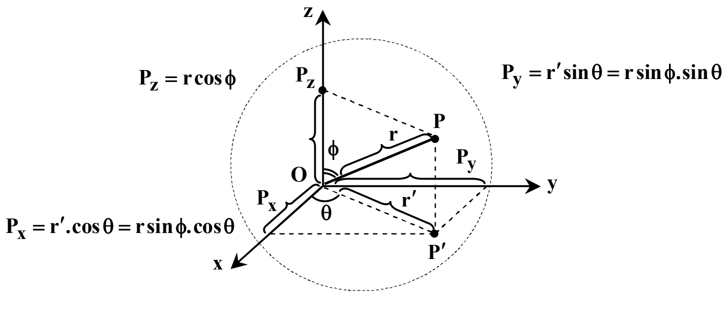
در این حالت r و θ متغیرند و بسته به r و θ صفحات مختلفی در ارتفاع $z = k$ به‌وجود می‌آید.

ج) دستگاه مختصات کروی

در این دستگاه، مختصات سه‌بعدی با تشکیل یک کره که از نقطه مورد نظر P می‌گذرد و مرکز آن همان مبدأ مختصات است، با سه پارامتر تعیین‌کنندهٔ موقعیت نقطه P (ϕ,θ,r) مشخص می‌شود. برای یافتن مکان نقطه P، کره‌ای به شعاع r به مرکز مبدأ مختصات، از آن عبور می‌دهیم که در آن، شعاع r فاصله نقطه P از مرکز کره است.

به شکل مقابل توجه کنید:

با کمی دقت در این شکل درمی‌یابیم که برای به دست آوردن مقادیر P_x و P_y ابتدا باید تصویر نقطه P را بر صفحه xoy به دست آورده (نقطه P') و پس از نقطهٔ P' به هر دو محور x و y عمود رسم کنیم.



شکل ۱۷

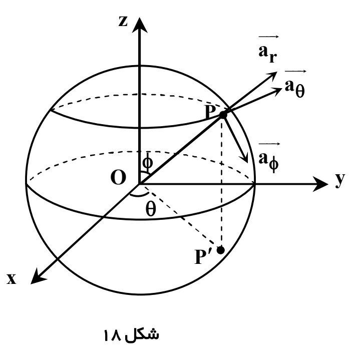
P_z نیز فاصله نقطه P از P' یا صفحه xoy می‌باشد.

ϕ زاویه بین r و جهت مثبت محور z و θ زاویه بین تصویر r بر صفحه xoy با جهت مثبت محور xها.

به این ترتیب محدوده‌های پارامترهای r، θ و ϕ به شرح مقابل می‌باشد:

$$0 \le r < \infty \quad , \quad 0 \le \phi \le \pi \quad , \quad 0 \le \theta \le 2\pi$$

بردارهای واحد سه جهت یعنی $\begin{bmatrix} \vec{a}_r \\ \vec{a}_\phi \\ \vec{a}_\theta \end{bmatrix}$ که بر هم عمود نیز هستند، به ترتیب زیر حاصل می‌شوند:



شکل ۱۸

با توجه به (شکل۱۸) داریم: $\vec{a}_r$ بردار عمود بر سطح کره در نقطه P در جهت دورشدن از مرکز کره می‌باشد.

بردار $\vec{a}_\phi$ از ترسیم خطی عمود بر امتداد $\vec{a}_r$ در نقطه P که در صفحه گذرنده از نقطه O و محور z قرار دارد، حاصل می‌شود. (این صفحه در (شکل ۱۴) قابل ملاحظه است) جهت مثبت $\vec{a}_\phi$ در جهت دورشدن از قسمت مثبت محور zها می‌باشد.

بردار $\vec{a}_\theta$ از ترسیم خط مماسی بر سطح کره در نقطه P و به موازات سطح افق به دست می‌آید که جهت مثبت آن در جهت دور شدن از قسمت مثبت محور xها است.

نمایش تحلیلی بردار فرضی $\overline{OP}$ در فضای مختصات کروی به صورت زیر است:

$$\overline{OP} = P_r\vec{a}_r + P_\phi\vec{a}_\phi + P_\theta\vec{a}_\theta\,,\ \ P_r = r\,,\ \ P_\phi = r\phi\,,\ P_\theta = r'\theta$$

با جایگذاری مقادیر P_r، P_ϕ و P_θ با توجه به (شکل۱۷) داریم:

$$\overline{OP} = r\vec{a}_r + r\phi\vec{a}_\phi + r'\theta\vec{a}_\theta$$

که در آن $r.\phi$ عبارت است از کمان مقابل به زاویه ϕ و $r'\theta$ عبارت است از کمان مقابل به زاویه θ که با جایگذاری مقدار r'، $(r' = r\sin\phi)$ برابر می‌شود با $r\theta\sin\phi$.

بنابراین داریم:
$$\overrightarrow{OP} = r\vec{a}_r + r\phi\vec{a}_\phi + r\sin\phi\vec{a}_\theta$$

و اندازه بردار $\overrightarrow{OP}$ عبارت است از:

با جایگذاری مقادیر P_r و P_ϕ و P_θ
$$OP = \sqrt{P_r^۲ + P_\phi^۲ + P_\theta^۲}$$

و یا:
$$OP = \sqrt{r^۲ + (r\phi)^۲ + (r\theta\sin\phi)^۲}$$

همان‌طور که در (شکل۱۷) قابل ملاحظه است، در دستگاه مختصات کروی داریم:

$$P_x = r\sin\phi\cos\theta \quad , \quad P_y = r\sin\phi\sin\theta \quad , \quad P_z = r\cos\phi$$

$$\left.\begin{array}{l} ۱)\ P_x = r\sin\phi\cos\theta \\ ۲)\ P_y = r\sin\phi\sin\theta \\ ۳)\ P_z = r\cos\phi \end{array}\right\} \xrightarrow[\text{خواهیم داشت}]{\text{از تقسیم رابطه ۲ بر ۱}} \frac{\sin\theta\cdot\sin\phi\cdot r}{\cos\theta\cdot\sin\phi\cdot r} = \frac{P_y}{P_x} \Rightarrow tg\theta = \frac{P_y}{P_x} \Rightarrow \theta = Arctg\frac{y}{x}$$

$$r = \sqrt{P_x^۲ + P_y^۲ + P_z^۲} \quad , \quad \phi = Arc\cos\frac{z}{\sqrt{x^۲ + y^۲ + z^۲}} \quad , \quad \theta = Arc\tan\frac{y}{x}$$

همچنین در این دستگاه مختصات داریم:

گرادیان کمیت اسکالر B:

$$\nabla B = \frac{\partial B}{\partial r}\vec{a}_r + \frac{۱}{r}\frac{\partial B}{\partial\phi}\vec{a}_\phi + \frac{۱}{r\sin\phi}\frac{\partial B}{\partial\theta}\vec{a}_\theta$$

مشتق کامل کمیت اسکالر B:

$$dB = \frac{\partial B}{\partial t}dt + \frac{\partial B}{\partial r}\vec{a}_r + \frac{۱}{r}\frac{\partial B}{\partial\phi}\vec{a}_\phi + \frac{۱}{r\sin\phi}\frac{\partial B}{\partial\theta}\vec{a}_\theta$$

مشتق حرکتی کمیت اسکالر B: با تقسیم مشتق کامل بر dt، به مشتق حرکتی می‌رسیم و در نتیجه خواهیم داشت:

$$\frac{dB}{dt} = \frac{\partial B}{\partial t} + V_r\frac{\partial B}{\partial r} + \frac{V_\phi}{r}\frac{\partial B}{\partial\phi} + \frac{V_\theta}{r\sin\phi}\frac{\partial B}{\partial\theta}$$

دیورژانس کمیت برداری F:

$$\nabla.F = \frac{\partial F_r}{\partial_r} + \frac{۱}{r}\frac{\partial F_\phi}{\partial\phi} + \frac{۱}{r\sin\phi}\frac{\partial F_\theta}{\partial\theta}$$

لاپلاسین کمیت اسکالر B:

$$\nabla^۲B = \frac{۱}{r^۲}\frac{\partial}{\partial r}(r^۲\frac{\partial B}{\partial r}) + \frac{۱}{r^۲\sin\phi}(\sin\phi\frac{\partial B}{\partial\phi}) + \frac{۱}{r^۲\sin^۲\phi}.\frac{\partial^۲B}{\partial\theta^۲}$$

نکته ۳: در حالت کلی لاپلاسین کمیت ϕ به صورت زیر بیان می‌شود:

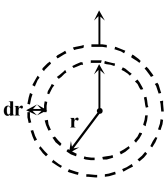
$$\nabla^۲\phi = \frac{۱}{r^m}\frac{\partial}{\partial r}(r^m\frac{\partial\phi}{\partial r}) + \ldots$$

برای مختصات کارتزین: $m = ۰$

برای مختصات استوانه‌ای: $m = ۱$

برای مختصات کروی: $m = ۲$

المان‌گیری یا دیفرانسیل‌گیری در دستگاه مختصات کروی

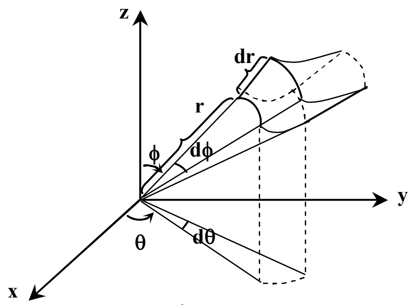


در سیستم کروی معمولاً انتقال در جهت شعاعی حائز اهمیت است. اگر انتقال تنها در جهت r باشد:

سطح جانبی کره: $A_r = ۴\pi r^۲$ و $dV = A_r\cdot dr \Rightarrow dV = ۴\pi r^۲\cdot dr$

کمیت اسکالر دیفرانسیل حجم در دستگاه مختصات کروی که در آن انتقال در هر سه جهت حائز اهمیت باشد، به‌صورت زیر خواهد بود.

ابتدا یک المان کروی به‌صورت شکل ۱۹ را در نظر می‌گیریم:



شکل ۱۹

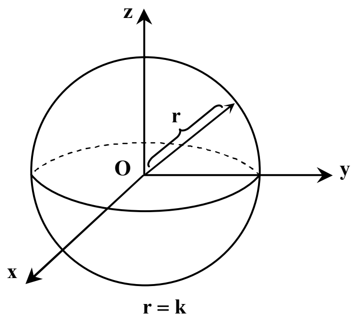
$$A_r = rd\phi\, r\sin\phi\, d\theta$$

$$A_\phi = dr\, r\sin\phi\, d\theta$$

$$A_\theta = dr.\, rd\phi \Rightarrow A_\theta = rdrd\phi$$

$$dV = dr(rd\phi)(r\sin\phi d\theta) \Rightarrow (rdrd\phi)(r\sin\phi d\theta) \Rightarrow$$

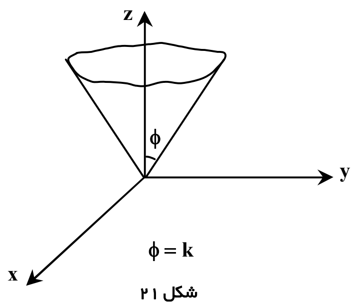
$$dV = r^2 \sin\phi drd\phi d\theta$$



شکل ۲۰

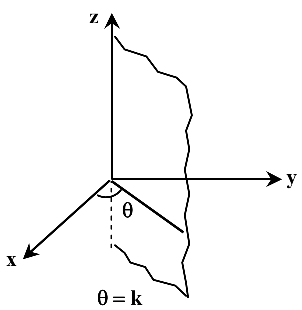
مکان هندسی پارامترهای ثابت در این دستگاه مختصات به شرح زیر است:

۱) در صورتی‌که شعاع ثابت باشد، یعنی $r = k$، مکان هندسی مورد نظر، سطح کره‌ای به شعاع r خواهد بود. (مطابق شکل ۲۰)



شکل ۲۱

۲) در صورتی‌که زاویهٔ ϕ ثابت باشد، یعنی $\phi = k$، آنگاه مکان هندسی موردنظر، سطح مخروطی وارونه با ابعاد بی‌نهایت و رأس مبدأ مختصات و زاویهٔ رأس ϕ می‌باشد. (مطابق شکل ۲۱)



شکل ۲۲

در صورتی‌که زاویهٔ θ ثابت باشد، یعنی $\theta = k$، آنگاه مکان هندسی مورد نظر نیم‌صفحه‌ای است و بی‌نهایت و محدود به محور z که زاویهٔ آن با محور xها، θ می‌باشد (مطابق شکل ۲۲). این مکان هندسی مشابه مکان هندسی متناظر با این شرایط در مختصات استوانه‌ای است.

تعیین سیستم مورد مطالعه (Media) و فرمولاسیون (Formulation)

منظور از تعیین سیستم مورد مطالعه این است که با توجه به فرآیند موردنظر، تشخیص دهیم که تغییرات متغیرها به چه نحوی و در چه محدوده‌ای انجام می‌گیرد.

تعیین سیستم

در حالت کلی سیستم‌های مورد مطالعه را می‌توان به سه دسته اصلی تقسیم کرد که در ادامه می‌آید:

الف) سیستم بسته (Batch System):

در این سیستم، تغییرات کل جرم نسبت به زمان ثابت بوده و جریان ورودی و خروجی جرم نداریم. به‌عنوان نمونه، راکتورهای Batch جزو سیستم‌های بسته هستند. به این ترتیب داریم:

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad \text{رابطهٔ (۱)}$$

که در آن m نشان‌دهنده کمیت جرم و t معرف زمان است. معمولاً سیستم بسته، حالتی از حجم کنترل در نظر گرفته می‌شود.

ب) حجم کنترل (Control Volume):

در این سیستم، تغییرات کل جرم نسبت به زمان متغیر است و جریان ورودی و خروجی جرم وجود دارد و تغییرات متغیرهای مورد نظر به مکان بستگی ندارند. در حجم کنترل $(C.V)$، جریان ورودی و خروجی جرم وجود داشته، بنابراین داریم:

$$\sum \dot{m}_i - \sum \dot{m}_e = \frac{dm}{dt} \quad \text{رابطهٔ (۲)}$$

در این رابطه $\dot{m}_i$ شدت جریان جرم ورودی و $\dot{m}_e$ شدت جریان جرم خروجی است.

ج) المان (Element):

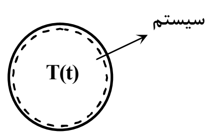
سیستم انتخابی برای فرآیندهایی که در آن‌ها متغیرها برحسب مکان تغییر می‌کنند، المان است. در انتخاب و تشکیل المان، باید به جهت تغییرات متغیرها توجه داشت. انتخاب دستگاه مختصات نیز حائز اهمیت می‌باشد.

فرمولاسیون

انتخاب سیستم مناسب، پیش‌نیاز فرمولاسیون می‌باشد. فرمولاسیون خود می‌تواند به دو شکل توده‌ای و دیفرانسیلی صورت گیرد. در ادامه به شرح دو نوع فرمولاسیون ذکر شده می‌پردازیم.

الف) فرمولاسیون توده‌ای یا متمرکز (Lumped Formulation):

فرمولاسیون متمرکز برای سیستم‌هایی استفاده می‌شود که کمیت مورد نظر در آن‌ها فقط با زمان تغییر کند و وابستگی مکانی نداشته باشد یا قابل اغماض باشد. در این حالت، سیستم مورد مطالعه مانند یک نقطهٔ مادی تلقی می‌شود و کل آن به عنوان حجم کنترل انتخاب می‌شود. برای مثال گرم شدن یک کره فلزی کوچک را در یک کوره در نظر بگیرید. به دلیل شعاع کوچک این کره، تغییرات دمای آن با زمان به صورت $T(t)$ در نظر گرفته شده و سیستمی که برای فرمولاسیون انتخاب می‌شود، به شکل مقابل نشان داده می‌شود:



ب) فرمولاسیون دیفرانسیلی (Differential Formulation):

در صورتی‌که کمیت مورد بررسی برحسب زمان و مکان متغیر باشد، از فرمولاسیون دیفرانسیلی استفاده می‌نمائیم و با انتخاب یک المان بسیار کوچک از جسم، قوانین بقا را اعمال می‌کنیم.

با المان‌گیری در حالت کلی در هر سه جهت و در هر سه دستگاه مختصات آشنا هستید. اما در مسائل، معمولاً با توجه به اینکه تغییرات در هر سه جهت اتفاق نمی‌افتد، المان‌گیری ساده‌تر شده و ما تنها در یک یا دو جهت، جهت مورد نظر تغییرات را بررسی می‌کنیم.

رسم شکل سیستم مورد مطالعه

در واقع این مرحله، اولین گام عملی برای حل مسأله است. در این مرحله با تسلط و در نظر داشتن مراحل یک یا سه، و همچنین اطلاعات جریان‌های ورودی و خروجی، شکل مسأله را در نمودار اجرا می‌کنیم.

طرح فرض‌های فیزیکی مسئله

معمولاً در مسائل توضیحاتی وجود دارد که منجر به فرض‌هایی می‌گردند و با طرح آن‌ها، مسیر حل مسأله را تعیین و یا تسهیل می‌کنیم.

مثلاً «استفاده از همزن» باعث می‌شود که غلظت جریان خروجی از ظرف (C_o) با غلظت داخل ظرف (C) یکسان باشد. یعنی بر مبنای توضیح «استفاده از همزن»، فرض می‌کنیم که $C = C_o$ و براساس این فرض، سیستم مورد مطالعه را حجم کنترل انتخاب می‌کنیم؛ چون تغییرات غلظت با مکان تغییر نمی‌کند و نیازی به المان‌گیری وجود ندارد، با توجه به انتخاب سیستم، نوع فرمولاسیون متناسب با مسأله نیز تعیین می‌شود که در این مثال، فرمولاسیون توده‌ای (Lumped Formulation) استفاده می‌شود.

استفاده از قوانین عمومی

در این مرحله به قوانین عمومی مرتبط با مباحث مهندسی شیمی و مهندسی پلیمر و رشته‌های نزدیک توجه می‌کنیم. می‌توان از قوانین بقا، به عنوان اصلی‌ترین قوانین عمومی یاد کرد. قوانین عمومی مورد نظر ما عبارت‌اند از: قانون بقای جرم، قانون بقای انرژی و قانون بقای اندازه حرکت (مومنتوم) که در ادامه به توضیح هریک از آن‌ها می‌پردازیم.