

# روش‌های عددی و نرم‌افزارهای محاسباتی در پژوهش‌های پلیمری

## Numerical Methods and Computational Softwares in Polymer Researches

مجید غیاث

تهران، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، صندوق پستی ۱۱۵-۱۴۹۶۵

تشریح مسائل مربوط به مواد و فرایندهای پلیمری نقش اساسی در تولید، به‌کارگیری، نوآوری و پیش‌بینی رفتار این مواد در زندگی امروز دارد. تنوع مواد پلیمری و فرایندهای مختلف تولید به‌همراه پیچیدگی ویژگی‌های رفتاری آنها منجر به روابط و معادلات پیچیده ریاضی شده است که حل آنها از روش‌های کلاسیک ریاضی امکان‌پذیر نیست. مدل‌سازی فرایندهای مربوط به مواد پلیمری، استفاده از روش‌های مناسب عددی و به‌کارگیری تسهیلات نرم‌افزاری، دانش‌آموختگان و پژوهشگران در زمینه‌های مختلف پلیمری را در تشریح کمی و کیفی این فرایندها توانا می‌سازد. در این ارتباط، استفاده از روش‌های محاسباتی عددی مناسب و کارآمد ابزاری ضروری و بخش اجتناب‌ناپذیر پژوهش‌ها خواهد بود. این پژوهش، تلاشی اندک برای آشنایی دانشجویان و پژوهشگران علاقه‌مند با زمینه‌های پژوهشی مدل‌سازی و مشابه‌سازی فرایندهای پلیمری، روش‌های محاسباتی عددی متنوع، انواع روش‌های عددی و نرم‌افزارهای موجود و قابلیت‌هایی است که نرم‌افزارهای مهم برای فعالیت‌های پژوهشی در اختیار پژوهشگر قرار می‌دهد. روش‌ها و نرم‌افزارهای ارائه شده در این مقاله، بخش کوچکی از دنیای روش‌ها و نرم‌افزارهای عمومی و تخصصی است که مسلماً نمی‌توان تمام آنها را مورد بحث و تجزیه و تحلیل قرار داد. اطلاعات ارائه شده به‌هیچ‌وجه قطعیت نداشته و نشان‌دهنده برتری یا ارجحیت نرم‌افزارهای مطرح شده بر انواع دیگر نیست و تنها بر مبنای تجربه و اطلاعات شخصی یا پژوهشگرانی است که تجربه فعالیت با این موارد را داشته‌اند. مطالب مطرح شده در باره ویژگی‌ها و مشخصات روش‌ها و نرم‌افزارها نیز از شبکه جهانی اینترنت به‌دست آمده که به‌راحتی قابل دسترس است.

بسپارش  
فصلنامه پژوهشی-آموزشی  
سال دوم، شماره ۲،  
صفحه ۵۸-۴۸، ۱۳۹۱  
ISSN: 2252-0449

### چکیده



مجید غیاث

### واژگان کلیدی

روش‌های عددی،  
تفاضل محدود،  
اجزای محدود،  
حجم محدود،  
نرم‌افزار

\* مسئول مکاتبات، پیام‌نگار:

m.ghiass@ippi.ac.ir

## مقدمه

تجزیه و تحلیل مسائل آموزشی و پژوهشی در علوم، صنایع و مهندسی مواد و فرایندهای پلیمری در اغلب موارد شامل محاسبات ریاضی ساده یا بسیار پیچیده است. این محاسبات از سطوح بسیار ساده شامل اعمال متداول ریاضی و در حد نیاز کاربری تا سطوح بسیار پیشرفته حل معادلات دیفرانسیل جزئی چندمتغیری را شامل می‌شود. تشریح نهایی فرایند و اطمینان از صحت اطلاعات به دست آمده در گرو به‌کارگیری روش‌های مناسب و درست در محاسبات است. مسلم است، هر چه سطح محاسبات بالاتر باشد، دانش تخصصی مناسب و سطح بالا برای آشنایی با روال محاسبات، آموزش و قابلیت ارزیابی نتایج به دست آمده نیز مورد نیاز است. به‌طور کلی، منظور از روش‌های محاسباتی مجموعه‌ای از اعمال ریاضی به کمک دانش‌های اصلی فیزیک و شیمی در تشریح روابط اصلی سامانه مورد بررسی با نگرش کاربردی در زمینه دانش و مهندسی مربوط به تولید مواد و فرایندهای پلیمری است.

امروزه، دانش و مهندسی پلیمر زمینه‌ای بسیار تخصصی است که خود شامل حوزه‌های متعدد شامل مهندسی واکنش‌ها و طراحی راکتورهای پلیمرشدن؛ رئولوژی محلول‌ها، رزین‌ها، ژل‌ها و مذاب‌های پلیمری؛ تعیین ویژگی‌های فیزیکی و مکانیکی مواد پلیمری، کامپوزیت‌ها و الیاف؛ روش‌های فراوری مواد خام پلیمری و رسیدن به محصول نهایی؛ ویژگی‌های تخریب‌پذیری و زیست‌سازگاری محصولات پلیمری و سایر زمینه‌ها می‌شود [۱]. در هر یک از این زمینه‌ها، علاوه بر فراهم بودن اطلاعات لازم از شاخه‌های مختلف علوم مانند شیمی و فیزیک و مهندسی شیمی و مکانیک نیاز به اطلاعات و موارد تخصصی در زمینه مواد پلیمری نیز وجود دارد. بدین معنی که معمولاً به کمک دانش‌های پایه علوم و مهندسی، معادلات و روابط ریاضی کلی برای تشریح فرایندها به دست آمده و قوانین و روابط کمی و ویژه از حوزه دانش پلیمری اقتباس شده است تا اطلاعات فرایند پلیمری خاص تکمیل و مورد تجزیه و تحلیل قرار گیرد. حتی مرحله نخست روابط و معادلات به دست آمده خود می‌تواند پیچیده باشد که افزودن موارد مخصوص به مواد پلیمری می‌تواند به دشواری‌های آن بیافزاید. از سوی دیگر، رشد روزافزون دانش، صنعت و دستاوردهای مربوط به علوم و فناوری رایانه‌ای، ابزارهای قدرتمند و موثری را برای حل و تشریح بسیاری از سامانه‌های پلیمری فراهم کرده که تجزیه و تحلیل آنها پیش از این غیرممکن یا بسیار پرهزینه و وقت‌گیر بوده است. امروزه، حل بسیاری از سامانه‌های متداول در علوم و مهندسی پلیمر به کمک نرم‌افزارهای ارائه شده

امکان‌پذیر است. ولی، تعداد بسیار زیادتری از مسائل به‌طور ویژه وجود دارند که دانشجویان یا پژوهشگران باید برای حل آنها از روش‌های اختصاصی استفاده کنند. در واقع، تنوع مواد پلیمری موجود در ترکیب آنها، انواع متعدد روش‌های فراورش، شرایط مختلف کاربردی و محیط عملکرد، دامنه گسترده‌ای از مسائل مربوط به مواد و فرایندهای پلیمری را در معرض استفاده و تجزیه و تحلیل قرار می‌دهد.

کسب دانش و توانایی‌های لازم و تسلط بر انواع روش‌های محاسباتی در علوم و مهندسی پلیمر، دانشجویان و پژوهشگران را برای بررسی و مطالعه موضوعات متنوع‌تر و پیچیده‌تری توانا می‌سازد که با روش‌های متداول کلاسیک محاسباتی امکان‌پذیر نیست.

لازم به ذکر است، انجام محاسبات در سطوح نسبتاً پیشرفته برای پژوهش‌های مرتبط با علوم و مهندسی فرایندهای پلیمری عمدتاً در موارد مدل‌سازی ریاضی و مشابه‌سازی سامانه‌های پلیمری مورد نیاز است. به نحوی که تشریح نهایی فرایند مورد نظر منوط به حل روابط ریاضی به دست آمده به شکل معادلات جبری و دیفرانسیل است که مبین مشخصات سامانه و عوامل و پارامترهای اثرگذار است. در اغلب این موارد، روش‌های محاسباتی به شکل استفاده از الگوریتم‌های عددی و برنامه‌نویسی است. افزون بر این، از روش‌های محاسباتی آماری نیز به عنوان ابزار ریاضی برای تجزیه و تحلیل اقتصادی محصولات پلیمری نام برد که امروزه اهمیت زیادی در توجیه‌پذیری و رقابت‌های اقتصادی بازار یافته است [۲].

## روش‌های تشریح سامانه‌های پلیمری

در تجزیه و تحلیل فرایندهای پلیمری معمولاً از دو دیدگاه جبری و تصادفی استفاده می‌شود. دیدگاه جبری یا قطعی بر مبنای استفاده از اصول بقا و معادلات کمی ویژه است که در آن مشخصات و متغیرهای اصلی معین‌کننده رفتار سامانه، در قالب یک معادله ریاضی ارائه می‌شود که باید با روش‌های صحیح محاسباتی حل شود. در دیدگاه تصادفی رفتار سامانه به وسیله یک مجموعه الگوریتم‌های تصادفی با احتمالات متفاوت رخداد، مشابه‌سازی می‌شود. پیچیدگی رفتاری و ساختاری سامانه‌های مورد مطالعه و قابلیت ارائه روش محاسباتی مناسب معین‌کننده ارجحیت و نیاز به استفاده از هر کدام از این دو دیدگاه است [۳].

در دیدگاه جبری روش‌های محاسباتی به شکل الگوریتم‌های

جدول ۱- روش‌های عمومی عددی.

ردیف	روش
۱	مشتق‌گیری عددی
۲	انتگرال‌گیری عددی
۳	درون (برون‌یابی) داده‌ها
۴	پردازش داده به تابع ریاضی
۵	حل عددی معادله غیرخطی
۶	حل عددی مجموعه معادلات خطی
۷	حل عددی مجموعه معادلات غیرخطی
۸	حل عددی معادله دیفرانسیل معمولی (درجه ۱ و ۲)
۹	حل عددی دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی
۱۰	حل عددی معادله دیفرانسیل جزئی چندبعدی
۱۱	حل عددی دستگاه معادلات دیفرانسیل جزئی چندبعدی
۱۲	حل عددی معادله انتگرال-دیفرانسیل همزمان

سامانه به ترتیب زیاد شده و روش محاسباتی پیچیده‌تر می‌شود. شاید بتوان تاریخچه روش‌های عددی را به روش نیوتن (یا نیوتن-رافسون) در حل معادله جبری غیرخطی مرتبط ساخت. این روش، خود اقتباسی از کارهای ریاضیدان فرانسوی Viète است. وی نیز از نوشته‌های شرف‌الدین طوسی و غیاث‌الدین کاشانی در تعیین جذر یا ریشه دوم اعداد استفاده کرده است. هر چند مصریان و یونانیان نیز روش‌های تقریبی برای تعیین جذر عدد دو ابداع کرده بودند [۵]. اساس روش‌های محاسباتی عددی بر مبنای تبدیل ناحیه فضا-زمان از حالت پیوسته و فیزیکی واقعی به نواحی متناهی، گسسته یا ناپیوسته است. بدین معنی که متغیرهای فضا و زمان و ویژگی‌های اصلی سامانه مورد نظر در نواحی یا فواصل متناهی گسترده یا توزیع می‌شوند. این نواحی متناهی ارتباطی با یکدیگر ندارند و فقط در مجاورت فیزیکی با یکدیگر دارند، ولی در مرزها می‌توانند با همدیگر مرتبط باشند. توزیع فضا-زمان را time-space marching می‌نامند. بدین معنی که گویا در فواصل معین روی فضا یا زمان قدم زده می‌شود. تنوع و گستردگی انواع روش‌های محاسباتی عددی به نوع فرایند گسسته کردن این دامنه‌ها، روال محاسبات مربوط به هر ناحیه و مجموع نواحی یا کل ساختار هندسی سامانه، سرعت نزدیک شدن به جواب‌های فیزیکی و واقعی و مقدار وقت و هزینه محاسبات مربوط می‌شود. در اغلب روش‌ها، دامنه زمانی به شکل ساده اولری گسسته می‌شود که در آن اطلاعات لحظه جاری از اطلاعات یک مرحله قبل به دست می‌آید. ولی، فرایند گسسته کردن فضا بر حسب تعداد ابعاد

عددی است که با هدف خاص برای رسیدن به پاسخ نهایی سامانه به کمک روش‌های تقریبی-عددی ریاضی تدوین می‌شود. میزان دقت و سرعت همگرایی هر روش در به دست آوردن پاسخ مناسب و قابل اعتماد از چالش‌های مهم در این مبحث است. در دیدگاه تصادفی، روش‌های محاسباتی بر مبنای تدوین الگوریتم‌های تصادفی مناسب و تکرارپذیر برای ایجاد یک رخداد محتمل است و به طور عمده متکی بر قابلیت برنامه‌نویسی و استفاده از رایانه‌های توانمند است. روش اخیر تا حد بسیار زیادی مبتنی بر خلاقیت‌ها و تجربیات فردی و موردی استوار است به طوری که نمی‌توان برای تشریح یک مجموعه موارد راه حل یکسانی ارائه داد. در حالی که روش نخست بر مبنای استفاده از الگوهای متداول و تأیید شده است. در تجزیه و تحلیل جبری فرایندها، بخش بسیار اندکی از روابط ریاضی به دست آمده را می‌توان با روش‌های کلاسیک تحلیلی دقیق (exact) ریاضی حل کرد. اهمیت و اولویت روش‌های تحلیل دقیق ریاضی در سریع و کم هزینه بودن آنها، اطمینان از صحت نتایج و صریح بودن در تشریح ارتباط متغیرهای معین‌کننده با یکدیگر است. متأسفانه بخش بسیار گسترده‌ای از معادلات ریاضی به دست آمده در تشریح جبری فرایندها را نمی‌توان با روش‌های دقیق ریاضی تجزیه و تحلیل کرد. اگر پیچیدگی‌های مربوط به مشخصات مواد پلیمری از نقطه نظر رفتار ساختاری و ویژگی‌های متنوع فیزیکی، مکانیکی و رئولوژیکی را نیز در نظر بگیریم، به پیچیدگی معادلات و روابط ریاضی افزوده خواهد شد. بنابراین می‌توان بیان کرد، به جز در مسائل بسیار ساده در اغلب موارد، تشریح روابط و معادلات ریاضی به دست آمده از مدل‌سازی یا مشابه‌سازی فرایندهای پلیمری به شدت غیرخطی است. همچنین، برای به دست آوردن جواب نهایی و ویژه مسئله مورد بررسی ناگزیر به استفاده از روش‌های محاسباتی عددی است که به کارگیری این روش‌ها نیازمند دانش برنامه‌نویسی و استفاده از ابزارهای رایانه‌ای است.

## انواع روش‌های محاسباتی

روش‌های محاسباتی عددی که امروزه در علوم و مهندسی فرایندهای پلیمری استفاده می‌شوند، بسیار متنوع‌اند و برای هر مسئله خاص یا شرایط ویژه شاید بتوان راه حل مشخص و اختصاصی ارائه داد. **جدول ۱** موارد اصلی کاربرد روش‌های محاسباتی عددی در فرایندهای مهندسی را نشان می‌دهد [۴]. در این جدول تعداد متغیرهای اصلی فضا-زمان

فضا یا کل سامانه به دست می‌آید. روشن است، هر چه مقدار نقاط در فضای محدود بیشتر باشد، دقت محاسبات افزایش یافته و زمان و حجم فضای محاسباتی نیز افزایش می‌یابد [۴].

### روش‌های نواحی محدود

در روش‌های نواحی محدود (finite regions) ناحیه پیوسته فضای فیزیکی به مجموعه‌ای از نواحی مجزا تقسیم‌بندی می‌شود. این نواحی با یکدیگر دارای مرزها و نقاط مشترک‌اند و می‌توانند منظم یا کاملاً نامنظم و غیریکنواخت باشند. در این وضعیت، مشخصات و متغیرهای فیزیکی سامانه در هر یک از این نواحی محاسبه و سپس برای کل فضای محاسباتی مشخص می‌شود. هر کدام از این نواحی می‌توانند مستقل یا تاثیرپذیر از یکدیگر باشند.

از آنجا که با روش‌های نواحی محدود فضای واقعی هندسی سامانه به‌طور یکنواخت بررسی می‌شوند، این روش‌ها از دقت و اعتبار بیشتری برخوردارند. از عمده‌ترین این روش‌ها می‌توان از روش‌های اجزای محدود (finite element method, FEM) و روش حجم‌های محدود (finite volume method, FVM) نام برد. در روش‌های FEM مقدار مشخصات سامانه در یک ناحیه معین، ولی فقط در نقاط اشتراک با نواحی دیگر اعلام می‌شود. اما در روش‌های حجم‌های محدود، مقدار مشخصات سامانه به شکل توزیع یافته در داخل خود نواحی و مرزها اعلام می‌شود. در هر دو حالت، رفتار و مقدار ویژگی‌های مهم سامانه از مجموع مقدار مشخصات در هر ناحیه به دست می‌آید [۴].

### روش‌های بدون شبکه‌سازی

در روش‌های بدون شبکه‌سازی (mesh free methods) فضای مطالعه شده به نواحی مجزا تقسیم‌بندی شده و کل هندسه سامانه به‌طور مستقیم محاسبه می‌شود. این دیدگاه بیشتر برای تجزیه و تحلیل مسائل مربوط به سیالات به‌کار رفته و بر مبنای دیدگاه لاگرانژی یا مسیر عبور و تعقیب کردن حرکت یک ذره در محیط سیال است. روش بدون شبکه حل مسائل را، نظیر تغییر شکل مرزها در نمونه بررسی شده، مواد کامپوزیتی با خواص غیرخطی و وجود نقاط ناپیوستگی و منفرد به‌طور قابل ملاحظه‌ای آسان می‌کند. برای مثال، فرایند ذوب یا تبلور به‌آسانی با روش‌های بدون مش قابل تجزیه و تحلیل خواهد بود [۸].

### روش‌های طیفی عددی

روش‌های طیفی (spectral methods) مجموعه‌ای از روش‌هاست

یا هندسه سامانه مورد نظر به شکل‌های بسیار متنوع و روش‌های مختلف است. از یک نقطه نظر می‌توان روش‌های محاسباتی عددی را به دو نوع مستقیم و تکرارپذیر تقسیم‌بندی کرد. در روش‌های مستقیم، کل محاسبات در یک یا چند مرحله انجام می‌شود و با اتمام محاسبات جواب‌های نهایی مسئله به دست می‌آید. در روش‌های تکرارپذیر که بخش بسیار گسترده‌ای از روش‌های عددی را شامل می‌شود، مجموعه‌ای از روش‌های محاسباتی بارها تکرار شده تا به تدریج و با در نظر گرفتن معیار مناسب جواب قابل قبول به دست آید [۶،۷]. در هر دو حالت، تجزیه و تحلیل خطاهای محاسباتی و فنون کاهش خطا و هزینه از اهمیت به‌سزایی برخوردار است. علاوه بر این، در هر نوع روش محاسباتی با افزایش ابعاد و حدود و پیچیدگی مسئله نیاز به استفاده از فضای محاسباتی رایانه‌ای است. سطح محاسباتی روش‌های عددی از برنامه نویسی ساده چندخطی برای یک مسئله درسی در زبان‌های رایج و ساده برنامه‌نویسی تا نگارش و به‌کارگیری بسته‌های نرم‌افزاری پیشرفته یا استفاده از برنامه‌های متن باز (open source) در دسترس و استفاده از مجموعه ابررایانه‌ها را شامل می‌شود. صرف نظر از حجم برنامه‌ها، دستگاه‌ها و تجهیزات به‌کار رفته، روال عملیات محاسباتی با در نظر گرفتن پیچیدگی‌های خاص تقریباً یکسان است و از الگوریتم‌های ساده پیروی می‌کند.

### روش‌های گسسته کردن فضای هندسی

همان‌طور که گفته شد، در روش‌های محاسباتی عددی گسسته کردن، فضای هندسی محاسباتی یا space marching از تنوع گسترده‌ای برخوردار است. به‌طور کلی، می‌توان تقسیم‌بندی فضایی را در روش‌های عددی به انواع زیر تقسیم کرد.

### روش‌های تفاضل محدود

در روش‌های تفاضل محدود (finite difference) ناحیه پیوستگی فیزیکی به یک مجموعه نقاط ناپیوسته با فواصل ترجیحاً یکنواخت تبدیل شده و مشخصات سامانه فقط در این نقاط تعریف و محاسبه می‌شوند. فضای بین نقاط به‌طور کلی مجازی و خالی است، ولی به کمک درون‌یابی می‌توان برای هر فاصله اختیاری نیز مقادیر مورد نیاز را محاسبه کرد. در این حالت معادلات ریاضی برای یک نقطه به عنوان نقطه مرکزی و نقاط مجاور آن به دست آمده که با حل معادلات مربوط به آن، مقدار کمیت‌های مورد نظر برای همه نقاط

جدول ۲- بسته‌های نرم‌افزاری روش‌های عددی و برنامه‌نویسی با کارکرد عمومی مهندسی.

مشخصات	بسته نرم افزار
روش‌های عددی و برنامه‌نویسی محاسبات عمومی مهندسی	MATLAB
محاسبات عمومی و سطح بالای مهندسی، قابلیت نمایش بسیار سطح بالا	Mathematica
محاسبات عددی عمومی و حل معادلات جبری و دیفرانسیل	Mathcad
محاسبات ریاضی به شکل تحلیلی و استفاده از نمادهای ریاضی	Maple
محاسبات عددی عمومی و حل عددی معادلات دیفرانسیل	Polymath
محاسبات عمومی عددی	Macsyma
بسته‌های نرم‌افزاری مشابه با Syntax برنامه MATLAB	
محاسبات ریاضی با استفاده از نمادهای ریاضی برنامه‌ریزی کنترل و ابزار دقیق	Simulink
حل معادلات دیفرانسیل چندفیزیکی	Labview
	COMSOL
	Script
نسخه لینوکس مشابه برنامه MATLAB	FreeMat
برنامه داده‌پردازی	FlexPro
نسخه جاوای سامانه برنامه نویسی MATLAB	JLab
بسته‌های نرم‌افزاری آماری	
نمایش و داده‌پردازی عمومی	Excel
نسخه مشابه MATLAB با کاربردهای آماری	Octave
برنامه محاسبات عددی و استخراج و مدیریت داده‌ها	ADaMSoft
برنامه عمومی برازش داده‌ها	SimFit

شگفت‌انگیزی در کاهش زمان محاسبات تکراری، حلقه‌ها و نمایش گرافیکی دارد. عبارت MATLAB مخفف واژه‌های Matrix Laboratory است و از ارائه اولین نسخه تجاری آکادمیک آن در ۱۹۸۴ توسط شرکت Matworks تا امروز پیشرفت‌های قابل ملاحظه‌ای داشته است. این نرم‌افزار ابتدا توسط مهندسان کنترل استفاده شد، ولی به سرعت در بقیه رشته‌های مهندسی و زمینه‌های علمی کاربرد پیدا کرد. از دلایل گسترش و استقبال روزافزون از این نرم‌افزار، قابلیت

که برای حل مسائل مشخصی در حوزه معادلات دیفرانسیل و با استفاده از روش‌های تبدیل فوریه (تبدیلات سینوسی و کسینوسی) به کار می‌رود. در این وضعیت، جواب سامانه به شکل مجموعه‌ای از توابع پایه خواهد بود که باید ضرایب این توابع معین شود. روش‌های طیفی و اجزای محدود شباهت زیادی به یکدیگر دارند. با این تفاوت که در روش‌های اجزای محدود حوزه عملکرد و پوشش توابع پایه تنها به یک جزء محدود می‌شود، ولی در روش‌های طیفی کل فضای هندسی جسم را در برمی‌گیرد [۹]. از میان روش‌های یاد شده، روش تفاضل محدود ساده‌ترین روش برای به‌کارگیری در مقاصد آموزشی است. روش‌های اجزای محدود و حجم محدود به‌طور گسترده در محاسبات مهندسی، دینامیک سیالات، برای هندسه‌های پیچیده و در قالب بسته‌های نرم‌افزاری بسیار مهندسی شده استفاده می‌شوند. روش‌های طیفی دقیق‌ترین و سریع‌ترین روش‌ها هستند و از لحاظ هزینه بسیار اقتصادی به نظر می‌رسد. این روش‌ها، اخیراً کاربردهای متنوعی یافته‌اند، ولی هنوز مانند روش‌های اجزای محدود به طور تجاری عرضه نشده‌اند [۱۰].

## نرم افزارهای محاسبات عمومی مهندسی

امروزه، بسته‌های نرم‌افزاری متعدد و متنوعی برای انجام روش‌های محاسبات عددی به‌طور عمومی یا برای انجام اهداف خاص به‌طور صنعتی و تجاری، قابل خرید یا آزاد در دسترس دانشجویان و پژوهشگران رشته‌های مختلف علوم و مهندسی قرار گرفته است. این بسته‌ها قابلیت برنامه‌نویسی را برای مقاصد ویژه با استفاده از بخش‌های هدفمند (object-oriented) موجود در ساختار بسته را فراهم می‌کند. در واقع در این گونه محیط‌ها، برنامه‌نویسی شامل استفاده مناسب و منطقی از بخش‌های مختلف در کنار یکدیگر برای رسیدن به هدفی خاص است. **جدول ۲**، تعدادی از مهم‌ترین و پرکاربردترین این نوع بسته‌ها را نشان می‌دهد. بعضی از این انواع که در رشته‌های مهندسی شیمی و پلیمر بیشتر قابلیت استفاده دارند، به شرح زیر است:

۱- نرم‌افزار MATLAB یک محیط برنامه‌نویسی بسیار پیشرفته و توانا با استفاده از زبان برنامه‌نویسی ویژه (بسیار شبیه زبان C) و به شکل مفسر خطی (interpreter) است. بدین معنی که برنامه را به‌طور خط به خط اجرا و اشکال‌زدایی (debugging) می‌کند. آموزش این نرم‌افزار بسیار ساده است و قابلیت‌های بسیار

بخشی از ساختار MATLAB ارائه شد، در حال حاضر برای مقاصد کنترل ابزار دقیق، تخمین پارامترها، داده‌پردازی و برنامه‌نویسی جریان داده‌ها در مقیاس آزمایشگاهی و صنعتی استفاده می‌شود.

۲- Mathematica بسته نرم‌افزاری برای محاسبات علمی و مهندسی در زمینه‌های مختلف کاربردی ریاضی است که در سال ۱۹۸۸ توسط Wolfram ارائه شد. این بسته قابلیت ارائه و حل عددی اغلب روش‌های متداول را به طور پیشرفته و با الگوریتم‌های بسیار انعطاف‌پذیر به همراه ارائه با کیفیت نمایش‌های دو و سه بعدی را دارد. قابلیت بسیار مهم این بسته در حل معادلات دیفرانسیل جزئی چندبعدی با نمایش گرافیکی دینامیک است. وبگاه Mathematica قابلیت تعامل دارد. بدین منظور که با دریافت داده‌های مسئله از کاربر به طور لحظه‌ای جواب را ارائه می‌دهد. البته لازم به ذکر است، این وضعیت تنها برای مسائل ساده قابل استفاده است. این بسته به طور تجاری قابل ارائه است، ولی در مقیاس آموزشی، تجاری و صنعتی در جایگاه پایین‌تری نسبت به نرم‌افزار MATLAB قرار دارد.

۳- Mathcad بسته نرم‌افزاری با قابلیت برنامه‌نویسی برای محاسبات عمومی مهندسی است که در سال ۱۹۸۶ ارائه شد. این بسته توسط مهندسان مکانیک، شیمی، سازه و برق بسیار استفاده شده است و قابلیت Live Editing به معنای مشاهده هر تغییر در نتیجه را به طور لحظه‌ای دارد و به شکل WYSIWYG است. به معنای این که مانند نگارش در محیط Word، آنچه می‌بینید همان است که از محیط برنامه به دست می‌آورد. این موضوع برای نرم‌افزارهای محاسباتی یک مزیت بسیار مهم است.

مفهوم عبارت مزبور این است که برای انجام محاسبات ریاضی لازم نیست عبارات ریاضی به زبان قابل فهم به وسیله ماشین ترجمه و تبدیل شود. بلکه در این محیط، عبارات ریاضی به شکل متداول نگاشته می‌شود. قابلیت بسیار زیاد Mathcad در حل معادلات دیفرانسیل دینامیک و مجموعه معادلات دیفرانسیل غیرخطی و حل همزمان آنها یک مزیت بسیار مهم در مدل‌سازی فرایندهایی است که باعث می‌شود تا این بسته در بخش‌های مختلف مهندسی شیمی و پلیمر استفاده شود.

۴- Polymath نیز یک بسته نرم‌افزار محاسباتی است که برای مقاصد آموزشی علمی و حرفه‌ای ابداع شده است. این بسته ابتدا در دانشکده مهندسی شیمی دانشگاه کانکتیکات و به عنوان مدول محاسبات عددی مهندسی شیمی برای حل عددی معادلات دیفرانسیل به کار گرفته شد. اولین نسخه تجاری آن در سال ۱۹۸۶ ارائه شد و امروزه نسخه 6.1 آن موجود است. این بسته به شکل تعاملی (interactive) است که در آن ورودی‌ها به شکل جمله‌های

استفاده از تجربه‌ها و برنامه‌های شخصی استفاده‌کنندگان و ارسال آن به شرکت و در دسترس قراردادن آنها برای سایر کاربران و نیز قراردادن در برنامه اصلی (پس از تایید) است. برنامه MATLAB بخش‌ها یا همزادهای (clone) متعددی دارد که همگی از زبان و دستورات (syntax) مشابه استفاده می‌کنند.

از مهم‌ترین این بخش‌ها می‌توان از GNU Octave برای محاسبات عمومی عددی، FlexPro برای داده‌پردازی و مدیریت اطلاعات، FreeMAT نسخه متن آزاد بدنه اصلی در محیط یونیکس، Scilab برای بررسی نموداری فرایندها، LabVIEW برای برنامه‌نویسی گرافیکی فرایندها با جهت‌گیری کنترل و داده‌پردازی، COMSOL Script برای برنامه‌نویسی بر مبنای حل از روش اجزای محدود و JLab برای برنامه‌نویسی پیشرفته در محیط جاوا نام برد.

مزیت بسیار مهم نرم‌افزار MATLAB در وجود و ارائه بسته‌های کوچکتر تخصصی به نام Toolbox یا جعبه‌ابزار برای مقاصد ویژه است. بدین معنی که به مرور و به تدریج کاربران یک موضوع، برنامه‌های مورد نیاز کاربران را در مجموعه فراهم می‌کنند. این روند رو به تکامل است و تعداد این بسته‌ها روزبه‌روز در حال افزایش و کیفیت کاربردی آنها رو به پیشرفت است.

نظر به سهولت یادگیری و آموزش، گستردگی و قابلیت‌های برنامه‌نویسی MATLAB، استفاده از این نرم‌افزار به عنوان یک بخش اساسی آموزش و پژوهش‌های علمی و مهندسی در دانشگاه‌ها و مراکز تحقیقاتی در نظر گرفته شده و مسلط بودن بر آن به عنوان یک شرط و معیار قابلیت برنامه‌نویسی است.

بخش بسیار مهم، کاربردی و هیجان‌انگیز ارائه شده با این نرم‌افزار، بخش نرم‌افزاری سیمولینک (Simulink) به عنوان یک ابزار مدل‌سازی، مشابه‌سازی و محاسبات دینامیک چنددامنه‌ای است که به شکل یک نمایه گرافیکی و نمودار فرایند برای مقاصد طراحی و به ویژه کنترل استفاده می‌شود.

سیمولینک قابلیت بسیار زیادی در مدل‌سازی، طراحی، کنترل، تخمین پارامتری و پایداری سامانه‌های غیرخطی را دارد. بخش‌های متنوع، مستقل و انعطاف‌پذیر سیمولینک به همراه قابلیت نشان‌دادن تغییرات لحظه‌ای یا آنی آن را ابزاری بسیار قدرتمند در تشریح فرایندهای پلیمری قرار داده است. ویژگی‌های گرافیکی سیمولینک و قابلیت استفاده و ارائه به شکل نمودار فرایند و افزودن قطعات، بخش‌های متنوع و برنامه‌های کتابخانه‌ای کاربرد سیمولینک را در مدل‌سازی، طراحی و کنترل روزبه‌روز افزایش داده است.

برنامه مستقل LabVIEW نیز که در ابتدا در سال ۱۹۸۶، به عنوان

و داده‌پردازی در سطوح بسیار بالا با حجم داده‌های بسیار زیاد استفاده می‌شود.

## نرم‌افزارهای محاسبات تخصصی مهندسی

بخش عمده‌ای از محاسبات مهندسی مربوط به فرایندهای پلیمری اختصاص به مدل‌سازی و شبیه‌سازی فرایندهای تولید و فراورش محصولات پلیمری دارد. به عنوان مثال، می‌توان از فرایند پلیمرشدن تحت فشار اتیلن در راکتورهای لوله‌ای، فرایند اکستروژن لاستیک به‌همراه واکنش شیمیایی، فرایندهای قالب‌گیری مذاب و ریسندهی الیاف نام برد. در این فرایندها، با وجود کسب دانش فنی و تجربی سطح بالا، به علت پیچیدگی ساختاری و غیرخطی بودن معادلات تشریح کننده سامانه، دانش نظری نسبتاً اندک و ناکافی در دسترس است.

در بسیاری از فرایندهای مربوط به مواد پلیمری، توزیع خواص در ابعاد هندسی و غیرخطی بودن ویژگی‌های مربوط به مخلوط مواد، باعث بروز جمله‌های گرادیانت شده که به شکل عوامل غیرخطی در معادلات انتقال و ایجاد معادلات دیفرانسیل جزئی و دینامیک می‌شود. حتی اگر فرایند مدل‌سازی و به‌دست آوردن این نوع معادلات چندان هم ساده نباشد، روال حل و تجزیه و تحلیل آنها به مراتب دشوارتر است. از آنجا که روش‌های متداول حل این نوع معادلات در سطوح پژوهشی اغلب به کمک روش‌های اجزای محدود یا حجم‌های محدود است، بنابراین بدیهی است که بسته‌های نرم‌افزاری مناسب برای تجزیه و تحلیل این گونه مسائل صرفاً اختصاص به استفاده از این روش‌ها داشته باشد.

البته این نوع بسته‌ها برای مجموعه‌ای از شکل‌های عمومی معادلات دیفرانسیل جزئی در دینامیک چندبعدی ارائه می‌شوند و قابلیت حل در زمینه‌های مهندسی مکانیک، سازه و سیالات را دارند. افزودن توابع کتاب‌خانه‌ای مربوط به خواص فیزیکی و رئولوژیکی مواد پلیمری به‌همراه قابلیت استفاده از انواع شرایط مرزی قابلیت این بسته‌ها را برای تجزیه و تحلیل فرایندها افزایش داده است. البته لازم به ذکر است، هیچ نرم‌افزاری قابلیت حل همه مسائل را ندارد.

کلیه روش‌های بر مبنای اجزای محدود یا حجم‌های محدود شامل مرحله تقسیم‌بندی فضایی یا شبکه‌بندی به شکل یک فرایند گرافیکی است که طی آن محدوده‌ها و نقاط مورد نظر برای حل معادله دیفرانسیل معین می‌شود. در نسخه‌های قدیمی، این مرحله بسیار وقت‌گیر و طولانی است و به کمک نرم‌افزارهای CAD و

معمول ریاضی وارد محیط می‌شود و نتایج به‌شکل اطلاعات گرافیکی و قابل پیاده‌سازی در محیط نگارنده‌ها به دست می‌آید. Maple/Symbolic - ۵ بسته نرم‌افزاری است که در نوع خود کم‌نظیر است و برای انجام محاسبات ریاضی به شکل تحلیلی (analytic) و ارائه نمادهای متداول ریاضی و بیشتر با مقاصد نگارشی استفاده می‌شود. قابلیت ویژه این نرم‌افزار حل معادلات جبری غیرخطی و انتگرال‌گیری از معادلات دیفرانسیل پیچیده و حل ضمنی (implicit) است که آن را به عنوان یک نرم‌افزار جذاب میان دانشجویان مطرح کرده است. کلمه Maple به معنای درخت افراسست. این بسته ابتدا توسط دانشجویان دانشگاه واترلوی کانادا ابداع و اولین نسخه تجاری آن در سال ۱۹۸۸ ارائه شد.

در این نرم‌افزار کاربر، نمادهای ریاضی را مطابق متون درسی ریاضی ارائه داده و پاسخ‌ها به شکل عبارات ریاضی قابل استفاده ارائه می‌شود. بخش Symbolic نرم‌افزار MATLAB نیز به عنوان یک جعبه ابزار ویژه برای این کار اختصاص یافته، ولی مقبولیت و کاربرد آن هیچ‌گاه به اندازه Maple نبوده است. با وجود استفاده هیجان‌انگیز از این دو نرم‌افزار برای ارائه حل تحلیلی به جای روش‌های محاسبات عددی، نظر به محدود بودن دامنه جواب‌ها و اینکه مسئله مطرح شده حداقل یک‌بار باید قبلاً توسط کاربر دیگری ارائه و برای آن جوابی وجود داشته باشد، به کارگیری این بسته با تردید و شاید ناکامی نیز همراه باشد.

بسته‌های نرم‌افزاری یاد شده تنها بخش کوچکی از حجم بسیار گسترده نرم‌افزارهای ارائه شده برای محاسبات عمومی مهندسی است. دنیای رقمی و رایانه دنیای بدون حد و مرزی است که به طور پیوسته از لحاظ کمی و کیفی در حال گسترش است. در این زمینه انواع روش‌های جدید ارائه و به طور مستمر جایگزین شده است. به طوری که کاربر به طور همزمان با انتخاب‌های متعدد و حتی گاهی اوقات دشوار نیز روبه‌رو می‌شود. تهیه فهرست جامعی از این نرم‌افزارها شاید امکان‌پذیر نباشد، ولی موارد گفته شده به شکل متداول‌ترین و پراستفاده‌ترین نرم‌افزارهای محاسبات عمومی با قابلیت برنامه‌نویسی برای دانشجویان و پژوهشگران در کلیه رشته‌های مهندسی و به‌ویژه مهندسی شیمی و پلیمر است.

در این زمینه باید به بسته‌های نرم‌افزاری آماری نیز اشاره کرد که برای تجزیه و تحلیل داده‌های تجربی مهندسی به کار می‌رود. مناسب‌ترین و آسان‌ترین این نوع بسته‌ها بخش محاسبات آماری نرم‌افزار Excel است که برای کارهای مهندسی عمومی مناسب است. در سطوح تخصصی‌تر می‌توان از بسته‌های ADaMSoft، BMDP، Minitab و SPSS نام برد که برای محاسبات آماری

جدول ۳- بسته‌های نرم‌افزاری تخصصی حل معادلات دیفرانسیل جزئی.

مشخصات	بسته نرم افزار
روش اجزای محدود	
روش اجزای محدود، طراحی هندسی CAD، نمایش گرافیکی	Abaqus
حل کننده معادلات دیفرانسیل جزئی	ANSYS
حل معادلات دیفرانسیل چند فیزیکی	COMSOL Multiphysics
حل استاتیک و دینامیک معادلات دیفرانسیل جزئی	FEMtool
حل معادلات دیفرانسیل ۲ و ۳ بعدی	FlexPDE
روش حجم‌های محدود	
قدرتمندترین نرم‌افزار حل معادلات دیفرانسیل جزئی	Fluent
حل معادلات دیفرانسیل جزئی- دینامیک سیالات	FLOW-3D
جعبه‌ابزار حل معادلات دیفرانسیل برای مکانیک محیط‌های پیوسته، سامانه لینوکس	OpenFOAM
حل معادلات دیفرانسیل جزئی- دینامیک سیالات	FiPy

بر مبنای اجزای محدود و بخش بررسی نتایج به طور گرافیکی است. این روال کمابیش در اغلب نرم‌افزارها مشاهده می‌شود. این نرم‌افزار به شکل تجاری و در مقیاس گسترده در صنایع خودرو، هوافضا و سازه به کار می‌رود. از قابلیت‌های مهم این بسته، قابلیت حل همزمان چند معادله دیفرانسیل جزئی مربوط به فرایندهای همزمان یا جفت پدیده‌های انتقال گرما، جرم و اندازه حرکت یا به طور کلی فرایندهای چند فیزیکی (multiphysics) است.

ANSYS بخش نرم‌افزاری مربوط به تجزیه اجزای محدود تنها بخش کوچکی از قابلیت‌ها و محصولات گسترده شرکت ANSYS است که در سال ۱۹۷۰ تنها با هدف حل معادلات دیفرانسیل به روش اجزای محدود ایجاد شد. ولی امروزه، نرم‌افزارها و خدمات بسیاری از رشته‌های مهندسی در مقیاس گسترده تجاری و کاملاً تخصصی ارائه می‌کند. شرکت ANSYS بزرگ‌ترین شرکت ارائه دهنده خدمات نرم‌افزاری است که با بسیاری از صنایع مرتبط است و در اقتصاد کشورهای صنعتی سهمی معین کننده دارد. محصولات این شرکت در سطوح آموزشی نیز در زمینه‌های مهندسی سازه، نفت، مکانیک، الکترومغناطیس، هیدرودینامیک، سیالات، شیمی و مهندسی شیمی در حل بسیاری از سامانه‌های معادلات دیفرانسیل جزئی استفاده می‌شود.

COMSOL Multiphysics یا COMSOL بسته نرم‌افزاری شامل حل کننده و تجزیه‌کننده معادلات دیفرانسیل به روش اجزای محدود برای تجزیه و تحلیل سامانه‌های چندفیزیکی به معنای حضور همزمان چند معادله دیفرانسیل است که هر کدام مبین رفتار یکی از متغیرهای اصلی سامانه است. امروزه این بسته، دارای مدل‌های متنوع است و برای حل انواع مسائل مهندسی در آکوستیک، شیمی، مکانیک سیالات و خاک، سازه، برق و مخابرات و حتی علوم زیستی به کار می‌رود. بسته COMSOL در مقایسه با نرم‌افزارهای مشابه بسیار جوان‌تر و در حال گسترش است. این بسته توسط دو دانشجو به نام‌های سعیدی و لیتمارک در سوئد و به تشویق استاد خود پروفیسور دالکوئیست در سال ۱۹۸۶ با تدوین و توسعه جعبه ابزار pde نرم‌افزار MATLAB برای حل گرافیکی معادلات دیفرانسیل جزئی دوبعدی ارائه شد و توسعه یافت. سپس این بسته، تحت عنوان FEMLAB ارائه و در سال ۲۰۰۵ به COMSOL تغییر نام یافت که نسخه حاضر این بسته 4.3 است.

مزیت بسیار مهم آن، افزون بر وجود مدل‌های بسیار متنوع برای حل بسیاری از معادلات دیفرانسیل در شاخه‌های مهندسی به کمک روش اجزای محدود، قراردادن تمام قسمت‌های لازم در یک صفحه گرافیکی یا GUI به معنای صفحه نمایشی کاربر

خارج از بسته نرم‌افزاری اولیه انجام می‌گرفت.

ولی امروزه، این عمل به طور خودکار با قابلیت تغییر ابعاد و اندازه‌ها در داخل بسته نرم‌افزاری انجام می‌شود. این سهولت آموزش، فراگیری و استفاده از این بسته‌ها را آسان می‌کند. این نوع بسته‌های نرم‌افزاری نیز بسیار متنوع و با قابلیت‌های گوناگون است. **جدول ۳** مشخصات و تعدادی از آنها را نشان می‌دهد که در فرایندهای پلیمری استفاده شده یا قابلیت استفاده را دارند.

### نرم افزارهای محاسباتی اجزای محدود

Abaqus بسته نرم‌افزاری برای تجزیه و تحلیل معادلات دیفرانسیل به روش اجزای محدود بر مبنای طراحی کامپیوتری CAD است که در سال ۱۹۷۸ ارائه شد. نام Abaqus ریشه یونانی دارد و به معنای دستگاه قدیمی محاسبه‌گر مانند چرتکه است. این نرم‌افزار شامل بخش‌های اصلی طراحی کامپیوتری هندسه سامانه و شبکه‌بندی، بخش محاسبات دینامیکی سیالاتی، بخش عمومی حل معادلات



تجاری توسعه و تحت لیسانس ANSYS ارائه شد. در این بسته نرم‌افزاری مراحل شبکه‌بندی، حل معادله از راه حل کننده حجم‌های محدود و پردازش اطلاعات به وسیله نرم‌افزارهای گوناگون انجام می‌شود. این بسته نیز از ابتدا تغییرات بسیار زیادی داشته است.

در حال حاضر، بسته مزبور حاوی مدول‌های مختلف ایجاد هندسه سامانه و شبکه‌بندی، الگوهای متنوع جریان سیال از لحاظ آرام یا مغشوش بودن، مدل‌های رئولوژی سیالات، مذاب‌های پلیمری و سیالات غیرنیوتنی و بانک اطلاعات بسیار گسترده حاوی مشخصات فیزیکی مواد است. نسخه جاری این نرم‌افزار 6.3.26 است. در این بسته، ابتدا هندسه سامانه به همراه شبکه‌بندی در نرم‌افزار Gambit انجام و شرایط مرزی تثبیت می‌شود. سپس، سامانه شبکه‌بندی شده وارد بخش حل کننده شده و به کمک برنامه‌های متنوع و روابط ریاضی گسسته شده و حل می‌شود. در نهایت، نتایج به دست آمده در یک نرم‌افزار دیگر پردازش شده و به طور مناسب ارائه می‌شود. وضعیت مجزا بودن بخش‌های مختلف در این بسته و قیمت بسیار زیاد آن، کاربرد آن را در سطوح آموزشی تا حدی محدود کرده است. با این وجود، این نرم‌افزار در مقیاس صنعتی و تجاری و به ویژه در صنایع هوا-فضا و حتی صنایع دریایی نیز به طور گسترده و با موفقیت استفاده می‌شود.

FLOW-3D نیز برای حل مسائل مربوط به جریان و دینامیک سیالات و پژوهش‌های علمی و صنعتی به کار می‌رود. این بسته در سال ۱۹۸۵، برای مدل‌سازی مسائل همزمان پدیده‌های انتقال گرما و هوا-فضا، قالب‌گیری مذاب فلزات، محاسبات مربوط به انرژی، انواع پوشش‌های صنعتی، صنایع الکترونیک و کاربردهای عمومی است. بسته FLOW-3D نیز به طور گسترده توسط صنایع و در مقیاس کمتری برای مقاصد آموزشی استفاده می‌شود. از کاربردهای این بسته مسائل مربوط به مهندسی آب شامل طرح‌های تولید برق و مدیریت منابع آب شهری در مقیاس کلان بوده است.

OpenFOAM نیز برای حل مسائل CFD و مسائل اجزای محدود به طور رایگان در محیط لینوکس است که مخفف Open Field Operation and Manipulation است. این بسته به شکل منبع آزاد در دسترس است و همین مسئله باعث شده تا بیشترین تعداد کاربران را در دنیای آموزشی علمی و حتی صنعتی داشته باشد. ویژگی باز بودن این بسته باعث گسترش برنامه‌های موجود در هسته اصلی این برنامه توسط کاربران شده است. در حال حاضر، این سامانه شامل بیش از ۸۰ مدول حل کننده معادلات دیفرانسیل (از روش‌های اجزای محدود، حجم‌های محدود یا تفاضل متناهی) و بیش از ۱۷۰

مراحل تعریف و ایجاد ساختار هندسی، شبکه‌بندی، تدوین معادلات و شرایط مرزی و اولیه، حل به روش اجزای محدود با قابلیت نمایش لحظه‌ای و پردازش نهایی اطلاعات و نتایج همگی در یک صفحه و در مراحل متوالی انجام می‌پذیرد. در بعضی از بسته‌های مشابه، این روال در مراحل متفاوت و با به‌کارگیری نرم‌افزارهای متنوع انجام می‌پذیرد که می‌تواند باعث بروز خطا در انتقال داده‌ها شود.

معمولاً تمام بسته‌های حل اجزای محدود برای رسم هندسی ساختار و شبکه‌بندی از نرم‌افزارهای AutoCAD استفاده می‌کنند. قرارداد این نرم‌افزار درون هسته اصلی حل کننده (Kernel) اجزای محدود سرعت محاسبات را بسیار افزایش می‌دهد. این بسته با قابلیت بسیار زیاد پردازش اطلاعات به دست آمده از نتیجه حل معادلات به طور گرافیکی، قابلیت نمایش به شکل پویانمایی (animation) را نیز دارد که برای مقاصد ارائه در سمینارها بسیار مناسب است. با توجه به سهولت آموزش و یادگیری این بسته، استفاده از آن برای مقاصد مدل‌سازی و شبیه‌سازی پدیده‌های انتقال در مهندسی شیمی و پلیمر توصیه می‌شود.

نرم‌افزارهای یاد شده بر مبنای استفاده از روش حل اجزای محدود است که برای حل معادلات دیفرانسیل جزئی شامل پدیده‌های انتقال مربوط به تغییرات میدان غلظت و انرژی مناسب است. در مقابل بخش بسیار عمده‌ای از مسائل پلیمری مربوط به تغییرات میدان سرعت و تنش در مسائل مربوط به مکانیک و دینامیک سیالات، مذاب‌ها و مایعات با ویژگی‌های رئولوژیکی پیچیده است. در اغلب این موارد، روش توصیه شده و مناسب برای حل معادلات دیفرانسیل جزئی، روش حجم‌های محدود است که قدرتمندتر و کارآمدتر است. روال محاسباتی مربوط به سیالات را دینامیک محاسباتی سیالات (computational fluid dynamics) یا به اختصار CFD می‌نامند. نرم‌افزارهای متعددی برای تجزیه و تحلیل این گونه در سطوح آموزشی و صنعتی توسعه و ارائه شده است که در به طور مختصر به آن اشاره می‌شود.

## نرم‌افزارهای محاسباتی حجم محدود

Fluent- قدیمی‌ترین و اولین نسخه تجاری نرم‌افزار حل معادلات دیفرانسیل مربوط به دینامیک سیالات است که توسط شرکت Creare در سال ۱۹۸۳ ارائه و در سال ۱۹۸۸ توسط شرکت Fluent تغییر نام یافت. در نهایت، این نرم‌افزار در سال ۲۰۰۶ در مقیاس

چه اتفاقی می‌افتد. این نرم‌افزارها به گونه‌ای طراحی شده‌اند که حداقل موارد شکست را داشته باشند یا موارد شکست آنها بیشتر مربوط به شروع فرایند محاسباتی و منطقی یا غیرقابل قبول بودن داده‌های ورودی است. در حالت بروز هر نوع اشکال محاسباتی طی فرایند محاسبات، معمولا اطلاعات یا وضعیت در اختیار کاربر قرار نمی‌گیرد و فقط پیغام‌های کلی ارائه می‌شود که گاهی درک آنها بسیار وقت‌گیر است. البته شاید این موضوع به عنوان یک نقطه ضعف نرم‌افزاری تلقی شود.

حتی در حالتی که نرم‌افزار درست رفتار کند، روال انجام محاسبات بدون مشکل انجام شود و داده‌های خروجی به دست آیند، باید از صحت نتایج اطمینان حاصل کرد. این عبارت بارها از سوی دانشجویان تحصیلات تکمیلی در جلسات دفاعیه شنیده شده است که در پاسخ به سوال صحت نتایج خود را چگونه تایید می‌کنید گفته شده این نتایج به دست آمده از نرم افزار است.

### نتیجه گیری

استفاده از روش‌های محاسبات عددی در درک فرایندهای مربوط به مواد پلیمری بخش اجتناب ناپذیری در تشریح رفتار کمی و کیفی آنهاست. برای حل معادلات پیچیده ریاضی تشریح کننده رفتار مواد پلیمری، نیاز به قابلیت برنامه‌نویسی و آشنایی با استفاده از بسته‌های نرم‌افزاری عمومی و تخصصی است. این قابلیت‌ها لازم است، در دوران آموزش دانشجویان دوره‌های کارشناسی و کارشناسی ارشد و حتی پژوهشگران حرفه‌ای کسب شود. آموزش زبان‌های برنامه‌نویسی جدید و قدرتمند مانند زبان آموزشی C و نرم‌افزارهای محاسبات مهندسی مانند MATLAB باید از اولویت‌های عمومی قابلیت‌ها و آموزش برنامه‌نویسی باشد. در کنار این امر، آشنایی با نرم‌افزارهای تخصصی یاد شده به‌طور بسیار مختصر، برای آشنایی پژوهشگر با سطح قابلیت آنها نیز الزامی است. در دنیای آموزش و پژوهش حرفه‌ای امروز، استفاده و تسلط بر روش‌های محاسباتی نرم‌افزاری در کنار قابلیت برنامه‌نویسی در محیط‌های متنوع به‌عنوان پیش‌فرض انجام پژوهش‌های مهندسی در سطوح مدل‌سازی و مشابه‌سازی در نظر گرفته می‌شود.

### قدردانی

بخشی از هزینه‌های انجام این پژوهش توسط پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران پشتیبانی شده است.

بسته کاربردی دیگر (شامل پردازش اطلاعات، نمایش گرافیکی نتایج) است. به لطف تلاش کاربران فراوان، تعداد این بسته‌ها و قابلیت افزودن کدهای شخصی به کتاب‌خانه برنامه‌های موجود در حال گسترش است. بسته OpenFOAM برنامه‌ای قابل اجرا روی سامانه‌های عامل لینوکس است و بخشی از محصولات و نرم‌افزارهای رایگان ارائه شده توسط فعالان دنیای نرم‌افزار برای مقابله با سیاست‌های انحصاری شرکت‌های بزرگ نرم‌افزاری است.

### یک نکته مهم آموزشی

همواره در کلاس‌های یادگیری نرم‌افزارهای عمومی یا مهندسی آموزشی، ضمن بیان قابلیت‌ها و آموزش استفاده از بخش‌های مختلف یک نرم‌افزار توصیه می‌شود که برای مسائل نه چندان پیچیده دانشجویان یا پژوهشگر خود برنامه بنویسند. این امر در بردارنده مزایای متعددی است که مهم‌ترین آنها افزایش قابلیت برنامه‌نویسی، درک کدهای موجود، الگوریتم‌نویسی و دنباله‌روی الگوریتم‌های موجود است. در برنامه‌نویسی مفهوم هر جمله، اهمیت و علت وجودی آن را معلوم می‌کند و علاوه بر این رفع اشکال با منطق و سرعت بیشتری قابل انجام است.

در مقابل، استفاده از بسته‌های نرم‌افزاری در برخی موارد به منزله کار با جعبه سیاه است. در واقع، اغلب بسته‌های نرم‌افزاری به ازای هر ورودی می‌تواند خروجی ارائه کنند که الزاما نمی‌توان ارتباط منطقی بین آنها برقرار کرد. در یک روش تلفیقی و آموزشی، نرم‌افزارهایی موفق‌اند که ضمن داشتن قابلیت ارائه فضای برنامه‌نویسی برای موارد ساده و جزئی از بسته‌های تخصصی هدفگرا برای حل مسئله استفاده کنند. این موضوع به ویژه ناشی از این تجربه است که هیچ نرم‌افزاری قابلیت حل تمام مسائل مربوط به یک حوزه را به علت تنوع شرایط محیطی حاکم ندارد. کاربر مجبور است تا شرایط ویژه تجزیه و تحلیل مسئله خود را به‌طور خاص و قابل فهم برای نرم‌افزار ارائه کند. بنابراین، یک نرم‌افزار مناسب شرایط ورودی مختلف را به شکل عبارات و کدهای مناسب و جزئی فراهم می‌کند.

یک مسئله نه‌چندان مناسب در استفاده از بسته نرم‌افزاری تجاری اعتماد و اطمینان بیش از حد به این بسته‌هاست. برای نرم‌افزارهای منبع آزاد دسترسی به کدها و الگوریتم‌ها آزاد است. اما در حالت استفاده از بسته‌های نرم‌افزاری تجاری، کاربر معمولا به کدها و الگوریتم‌ها دسترسی ندارد و به عبارتی دیگر نمی‌داند

## مراجع

1. Phillipson P.E. and Schuster P., *Modeling by Nonlinear Differential Equations*, World Scientific, New York, 2009.
2. LeVeque R.J., *Finite Difference Methods for Differential Equations*, University of Washington, Washington, 2006.
3. Begain K., Balsamo S., Fiems D., and Marin A., *Analytical and Stochastic Modeling Techniques and Applications*, Springer, New York, 2011.
4. Ridgway Scott L., *Numerical Analysis, Princeton University*, 2011.
5. [http://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s\\_method](http://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_method).
6. Chapra S.C., *Applied Numerical Methods with MATLAB for Engineers and Scientists*, 3rd ed., McGraw Hill, 2012.
7. Ralston A. and Rabinowitz P., *A First Course in Numerical Analysis*, Dover Mineola, New York, 1978.
8. Liu G.R., *Mesh Free Methods: Moving Beyond the Finite Element Method*, CRC, New York, 2003.
9. Shen J., Tang T., and Wang L., *Spectral Methods, Algorithms, Analysis and Applications* Springer, New York, 2011.
10. Bueno-Orovio A., Perez-Garciz V.M., and Fenton F.H., Spectral Methods for Partial Differential Equations in Irregular Domains, *SIAM J. Sci. Comput.*, **28**, 3, 886–900, 2006.