مجلة محيط شناسي ،سال سي و پنجم،شمارة ۴۹ بهار۸۸،صفحة ۱-۸

مقايسة روش‌هاي مرتبه بالاي MPDATA و تفاضل محدود فشرده در دقت مدل‌سازي انتشار آلودگي هوا

خسرو اشرفي

استاديار گروه مهندسي محيط زيست، دانشكدة محيط زيست دانشگاه تهران

تاريخ دريافت:۸۶/۱۱/۲ تاريخ پذيرش:۸۷/۸/۱۳

چكيده

در اين مقاله روش‌هاي مرتبة بالاي MPDATA و روش تفاضل محدود فشرده (CFDM) به معادله فرارفت يک و دوبعدي براي كـاربرد در مدل‌سازي انتشار آلودگي هوا، استفاده مي‌كنند. روش‌هاي MPDATA، پخش ايجادشده توسط روش پادبادسو را با اضـافه‌كـردن جملـة ضـد پخش خنثي مي‌كنند كه به اين طريق دقت روش بالا مي‌رود، در صورتي‌كه در روش‌هاي فشرده خود روش ذاتـاً بـه‌دليـل لحـاظ‌كـردن رابطـة ضمني بين مشتق تابع و خود تابع از دقت بالايي برخوردار است. در اين تحقيق شبيه‌سازي معادلة فرارفت در حالت يک‌بعدي در شبكه‌هاي ۱۱، ۲۱، ۴۱، ۸۱، ۱۶۱، ۳۲۱ و ۶۴۱ نقطه‌اي و در حالت دوبعـدي در شـبكه‌هـاي ۱۱*۱۱، ۲۱*۲۱، ۴۱*۴۱، ۸۱*۸۱، ۱۶۱*۱۶۱ و ۳۲۱*۳۲۱ بـراي روش MPDATA و در شبكه‌هاي ۱۱*۱۱، ۲۱*۲۱، ۴۱*۴۱ و ۸۱*۸۱ براي روش فشرده انجام شده‌است. با انجام اين شبيه‌سـازي دو نكتـة اساسي مورد مطالعه قرار گرفته است. اول اين‌كه دقت اين دو روش در شبيه‌سازي معادله فرارفت ارزيابي شـده اسـت. بـه‌طـوري‌كـه در حالـت يک‌بعدي دقت شبكة ۶۴۱ نقطه‌اي روش MPDATA با دقت شبكه۱۶۱ نقطه‌اي روش فشرده براي هر دو خطـاي مطلـق نـسبي و خطـاي RMS نسبي تقريباً برابر است. در حالت دو بعدي خطاي شبكه ۳۲۱*۳۲۱ روش MPDATA معـادل خطـاي شـبكه ۴۱*۴۱ روش فـشرده است. اين موضوع دقت بيشتر روش فشرده را نشان مي‌دهد. نكتة دوم در اين شبيه‌سازي، زمان محاسبات است. زمان محاسـبات روش فـشرده بمراتب بيشتر از روش MPDATA به‌دست آمده است، به‌طوري‌كه در حالت يک‌بعدي اين زمان به‌طور ميانگين (در شبكه‌هاي مختلف) براي روش فشرده ۳۳۳ برابر روش MPDATA است و در حالت دوبعدي اين عدد به مقدار ۳۰۶ برابر مي‌رسد.

كليد واژه

روش‌هاي مرتبة بالاي MPDATA - روش‌هاي مرتبة بالاي تفاضل محدود فشرده - معادلة فرارفت - مدل‌ساي انتشار آلودگي هوا

سرآغاز

مدل‌سازي آلودگي هوا يكي از ابزارهاي بسيار مفيد و پر استفاده در سيستم‌هاي مديريت كنترل و كاهش آلودگي هواست. دقت پيش‌بيني‌هاي مدل‌هاي آلودگي هوا مي‌تواند در تصميم‌گيري‌هاي زيست محيطي بسيار تأثيرگذار باشند. اين دقت به عوامل مختلفي بستگي دارد كه يكي از آنها دقت الگوريتم‌هاي عددي به‌كار برده شده در حل ديناميک حاكم بر پخش آلاينده‌هاي هواست. يكي از الگوريتم‌هاي بسيار دقيق روش MPDATA[1] است كه براي مسائل آلودگي هوا استفاده مي‌شود اين روش توسط اسمولاركيوويچ پيشنهاد شده‌است (Smolarkiewicz, 1984). دستة ديگر از روش‌هاي مرتبة بالا روش‌هاي تفاضل محدود فشرده[2] هستند (Sengupta and Ganeriwal, 2003). مهم‌ترين خاصيت روش MPDATA مثبت نگه‌داشتن مقادير كميت در زمان انتگرال‌گيري است، به‌شرطي‌كه شرايط اوليه در همه نقاط مثبت باشد. اين خاصيت براي شبيه‌سازي برخي كميت‌هاي فيزيكي كه هيچ‌گاه منفي نمي‌شوند، بسيار مفيد است. از جمله اين نوع كميت‌هاي فيزيكي، غلظت آلاينده‌هاست. بنابراين براي پيش‌بيني اين كميت فيزيكي يكي از روش‌هاي مناسب استفاده از روش MPDATA است. روش MPDATA بر پاية روش پادبادسو[3] بنا شده‌است و در واقع لزجت مصنوعي ايجاد شده توسط روش پادبادسو در اين روش با استفاده از سرعت ضدپخش در جهت

نويسنده مسئول: تلفن: ۶۱۱۱۳۱۵۱ Email: khashrafi@ut.ac.ir

متضاد با روش پايه پادبادسو به‌نوعي جبران مي‌شود (Smolarkiewicz, 1984). اين روش در كاربردهايي از قبيل پيش‌بيني‌هاي كميت‌هاي فيزيكي از قبيل رطوبت هوا و ساير كميت‌هاي شاره‌هاي ژئوفيزيكي نيز استفاده شده‌است (Smolarkiewicz, 1998). استفاده از روش‌هاي مرتبة بالاي فشرده به‌منظور شبيه‌سازي پديده‌هاي فيزيكي با مقياس‌هاي متفاوت (از مقياس تلاطمي تا مقياس‌هاي بسيار بزرگ) بسيار مناسب است (Lele, 1992; Esfahanian et.al., 2004 ، قادر و اصفهانيان، ۱۳۸۵). ازآنجاكه مسئلة پراكنش آلاينده‌ها در جو نيز داراي اين گسترة مقياسي است، بنابراين براي شبيه‌سازي پخش آلاينده‌ها در جو مي‌توان اين خانواده از روش‌ها را جايگزين روش‌هاي تفاضل محدود معمول و مرسوم كرد. هرچند روش‌هاي طيفي داراي دقت بالايي هستند و براي شبيه‌سازي شاره‌هايي با مقياس‌هاي متفاوت مكاني و زماني مناسب هستند، ولي روش‌هاي طيفي مشكلات خاص خود را در هنگام شبيه‌سازي فرايندهاي فيزيكي با مرزهاي غيردوره‌اي دارند (Lele, 1992). روش‌هاي فشرده به دو خانوادة كلي روش‌هاي فشرده مركزي و روش‌هاي فشرده پادبادسو تقسيم مي‌شوند. در روش‌هاي فشرده براي بالابردن دقت، مشتق كميتي كه حل آن مدنظر است به‌عنوان مجهول وارد مي‌شود و يک معادله كمكي (رابطه بين خود تابع و مشتق آن) به معادلات حاكم اضافه مي‌شود. روش‌هاي فشرده مركزي معمولاً داراي خطاي پراكنش هستند در صورتي‌كه روش‌هاي فشرده پادبادسو داراي خطاي پخش هستند (Sengupta and Ganeriwal, 2003). براي آگاهي از تاريخچة كارهاي انجام شده در زمينة روش‌هاي فشرده مي‌توان به مراجع (Lele, 1992; Hirsch, 1975; Adam, 1977) مراجعه كرد. از آنجاكه هدف اين مقاله، شبيه‌سازي معادله حاكم بر فرارفت آلاينده‌هاست (در اين شبيه‌سازي بهتر است تاجايي‌كه امكان دارد از ايجاد اغتشاش‌هاي عددي اجتناب شود)، بنابراين از بين روش‌هاي فشرده، خانوادة فشرده پادبادسو براي تحليل و مقايسة نتايج آن با روش MPDATA انتخاب شده است. با توجه به مطالب بيان شده مقاله به‌صورت زير ارائه مي‌شود.

روش MPDATA

در حالت M -بعدي ($M \le 3$) معادلة فرارفت بـه‌صـورت زيـر نوشته مي‌شود (Smolarkiewicz, 1984):

$$\underbrace{\frac{\partial c}{\partial t}}_{\text{Local change}} + \underbrace{\sum_{I=1}^{M}\frac{\partial}{\partial x^I}\left(cu^I\right)}_{\text{Advection}} = 0 \qquad (۱)$$

كـــه در آن $c = c(t, x^1, x^2, \cdots, x^M)$ مقـــدار غلظـــت، $u^I = u^I(t, x^1, x^2, \cdots, x^M)$ مؤلفـــة I ام ســـرعت، $\mathbf{x} = (x^1, x^2, \cdots, x^M)$ بردار مكان و t متغير مستقل زمـان هـستند. براي بيان روش MPDATA در ابتدا برخي علايمي كه در اين روش به‌كار مي‌روند، در ذيل تعريف مي‌شوند:

- $c_{\mathbf{i}}^n$: تقريب عددي حل معادله (۱) در نقطه $(t^n, \mathbf{x}_{\mathbf{i}})$
- I, J: مشخص‌كننـده مؤلفـه‌هـاي سـرعت در محورهـاي مختصات
- $\mathbf{e}_I = (0,0,\cdots,1,0,\cdots,0)$: بردار واحد در جهت I ام
- ${}^n u^I_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}$: مؤلفـة I ام سـرعت در زمـان n ام در شـبكه جابه‌جاشده است كه در آن $\mathbf{i} = (i, j)$ در حالت دوبعـدي و $\mathbf{i} = (i, j, k)$ در حالـت سـه‌بعـدي نـشان‌دهنـدة موقعيـت مكاني هستند.

با درنظر گرفتن تعاريف بالا روش مرتبة اول پابادسـو در حالـت كلي به شكل زير نوشته مي‌شود:

$$c_{\mathbf{i}}^{n+1} = c_{\mathbf{i}}^n - \sum_{I=1}^{M}\begin{bmatrix} F^I\left(c_{\mathbf{i}}^n, c_{\mathbf{i}+e_I}^n, u^I_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}\right) - \\ F^I\left(c_{\mathbf{i}-e_I}^n, c_{\mathbf{i}}^n, u^I_{\mathbf{i}-\frac{1}{2}e_I}\right)\end{bmatrix} = 0 \qquad (۲)$$

كه در آن F^I مؤلفة شار فرارفت در جهت I ام است و به‌صورت زيـر تعريف مي‌شود:

$$F^I\left(c_{\mathbf{i}}, c_{\mathbf{i}+e_I}, u_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}\right) = \left[\left(u+|u|\right)c_{\mathbf{i}} + \left(u-|u|\right)c_{\mathbf{i}+e_I}\right]\frac{\Delta t}{2\Delta x^I} \qquad (۳)$$

روش پادبادسو روش مرتبة اول در زمان و مكان است و به‌صورت ضمني داراي خاصيت پخش شديد است ((Tannehill et al., 1977)، براي جبران اين خاصيت پخشيدگي در ابتدا لازم است مقدار اين پخشيدگي محاسبه شود. براي محاسبة ميزان پخشيدگي از معادلة پيراسته[۴] استفاده مي‌شود. معادلة پيراسته براي اين روش به‌شكل زير نوشته مي‌شود (Smolarkiewicz, 1984):

$$\left.\frac{\partial c}{\partial t}\right|_{\mathbf{i}}^{n} = -\sum_{I=1}^{M}\frac{\partial}{\partial x^I}\left(u^I c\right)\Big|_{\mathbf{i}}^{n} + \sum_{I=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x^I}\left\{\begin{matrix} 0.5\left[\left|u^I\right|\Delta x^I - \Delta t\left(u^I\right)^2\right]\dfrac{\partial c}{\partial x^I} \\ -\displaystyle\sum_{J=1, J\neq I}^{M} 0.5\Delta t u^I u^J \dfrac{\partial c}{\partial x^J}\end{matrix}\right\}_{\mathbf{i}}^{n} \qquad (۴)$$

هنگامي‌كه Δt و Δx^I براي همه I ها به سمت صفر ميل مي‌كند معادلة (۴) به معادله فرارفت ميل مي‌كند ولي براي مقادير معيني از Δt و Δx^I ها معادلة (۴) داراي خاصيت پخشيدگي شديد

است که ميزان آن در جملة دوم سمت راست ذکر شده است. اين جمله نقش مهمي در پايداري روش پادبادسو دارد و نمي‌توان آن‌را به‌صورت صريح حذف کرد.

يکي از روش‌هاي جبران اين خاصيت پخشيدگي حل معادلة (۴) و برگشت دادن خاصيت پخشيدگي است. خاصيت پخشيدگي به‌صورت مجزا به‌صورت زير نوشته مي‌شود:

$$\left.\frac{\partial c}{\partial t}\right|_{\mathbf{i}}^{n} = \sum_{I=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x^{I}}\left\{\begin{matrix}0.5\left[\left|u^{I}\right|\Delta x^{I}-\Delta t\left(u^{I}\right)^{2}\right]\frac{\partial c}{\partial x^{I}}-\\ \sum_{J=1,J\neq I}^{M}0.5\Delta t u^{I}u^{J}\frac{\partial c}{\partial x^{J}}\end{matrix}\right\}\Bigg|_{\mathbf{i}}^{n} \qquad (۵)$$

فرايند پخش به‌صورت فيزيکي برگشت‌ناپذير است ولي اين به اين معني نيست که نمي‌توان آثار آن‌را به‌صورت عددي در زمان برگشت داد. براي انجام اين عمل از فرايندي استفاده مي‌شود که در آن مي‌توان به حالت بدون پخشيدگي نزديک شد. اساس و پايه روش MPDATA اين عمل است.

براي اين عمل ابتدا سرعت پخشنده مصنوعي[5] (u_d^I) تعريف مي‌شود، به‌طوري‌که معادلة (۵) به شکل زير نوشته مي‌شود:

$$\left.\frac{\partial c}{\partial t}\right|_{\mathbf{i}}^{n} = \sum_{I=1}^{M}\frac{\partial}{\partial x^{I}}\left(u_d^{I}c\right) \qquad (۶)$$

که در آن

$$u_d^{I} = \begin{cases}0.5\left[\left|u^{I}\right|\Delta x^{I}-\Delta t\left(u^{I}\right)^{2}\right]\frac{1}{c}\frac{\partial c}{\partial x^{I}} - \sum_{J=1,J\neq I}^{M}0.5\Delta t u^{I}u^{J}\frac{1}{c}\frac{\partial c}{\partial x^{J}} & \text{if } c>0\\ 0 & \text{if } c=0\end{cases} \qquad (۷)$$

اکنون سرعت ضدپخشنده تعريف مي‌شود.

$$\widetilde{u}^{I} = -u_d^{I} \qquad (۸)$$

برگشت در زمان معادلة پخشيدگي (۵) مي‌تواند با شبيه‌سازي معادلة فرارفت (۶) منتها با سرعت ضد پخش $\widetilde{u}^{I}$ انجام شود. براساس اين مفهوم گام تصحيح روش پادبادسو به‌صورت زير بيان مي‌شود:

$$c_{\mathbf{i}}^{n+1} = c_{\mathbf{i}}^{*} - \sum_{I=1}^{M}\left[\begin{matrix}F^{I}\left(c_{\mathbf{i}}^{*},c_{\mathbf{i}+e_I}^{*},\widetilde{u}_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}^{I}\right)\\ -F^{I}\left(c_{\mathbf{i}-e_I}^{*},c_{\mathbf{i}}^{*},\widetilde{u}_{\mathbf{i}-\frac{1}{2}e_I}^{I}\right)\end{matrix}\right]=0 \qquad (۹)$$

در رابطة بالا سرعت $\widetilde{u}$ به‌صورت زير از گسسته‌سازي رابطة (۷) به‌دست مي‌آيد:

$$\begin{aligned}\widetilde{u}_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}^{I} &= \left[\left|u_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}^{I}\right|\Delta x^{I}-\Delta t\left(u_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}^{I}\right)^{2}\right]\\ &\times\frac{c_{\mathbf{i}+e_I}^{*}-c_{\mathbf{i}}^{*}}{\left(c_{\mathbf{i}+e_I}^{*}+c_{\mathbf{i}}^{*}+\varepsilon\right)\Delta x^{I}}\\ &+\sum_{J=1,J\neq I}^{M}0.5\Delta t u_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}^{I}\overline{u}_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}^{J}\\ &\times\frac{c_{\mathbf{i}+e_I+e_J}^{*}+c_{\mathbf{i}+e_J}^{*}-c_{\mathbf{i}+e_I-e_J}^{*}-c_{\mathbf{i}-e_J}^{*}}{\left(c_{\mathbf{i}+e_I+e_J}^{*}+c_{\mathbf{i}+e_J}^{*}+c_{\mathbf{i}+e_I-e_J}^{*}+c_{\mathbf{i}-e_J}^{*}+\varepsilon\right)\Delta x^{J}}\end{aligned} \qquad (۱۰)$$

که در آن

$$\overline{u}_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}^{J} = 0.25\left(u_{\mathbf{i}+e_I+\frac{1}{2}e_J}^{J}+u_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_J}^{J}+u_{\mathbf{i}+e_I-\frac{1}{2}e_J}^{J}+u_{\mathbf{i}-\frac{1}{2}e_J}^{J}\right) \qquad (۱۱)$$

در معادلات بالا ε مقدار کوچکي از مرتبة 10^{-15} درنظر گرفته مي‌شود تا در مواقعي که مقادير c صفر مي‌شود در برنامه رايانه‌اي مشکلي ايجاد نکند. مرحلة تصحيح خود يک روش پادبادسوست که داراي خاصيت پخش بوده و اصلاح مجدد آن مي‌تواند مفيد واقع شود. پس اين روش اصلاح مي‌تواند به‌صورت تکراري به‌صورت زير اعمال شود:

$$\begin{aligned}c_{\mathbf{i}}^{(*)^{k}} &= c_{\mathbf{i}}^{(*)^{k-1}}\\ &-\sum_{I=1}^{M}\left[\begin{matrix}F^{I}\left(c_{\mathbf{i}}^{(*)^{k-1}},c_{\mathbf{i}+e_I}^{(*)^{k-1}},\widetilde{u}_{\mathbf{i}+\frac{1}{2}e_I}^{I^{k}}\right)\\ -F^{I}\left(c_{\mathbf{i}-e_I}^{(*)^{k-1}},c_{\mathbf{i}}^{(*)^{k-1}},\widetilde{u}_{\mathbf{i}-\frac{1}{2}e_I}^{I^{k}}\right)\end{matrix}\right]=0\end{aligned} \qquad (۱۲)$$

بنابراين با افزايش تعداد تکرارها $k=1,2,\cdots,IORD$ جواب‌ها اصلاح مي‌شوند. در بخش‌هاي بعدي، اين روش به معادلة پراکنش آلاينده‌ها (قسمت فرارفت) اعمال مي‌شود.

روش تفاضل محدود فشرده پادبادسو

در روش‌هاي تفاضل محدود فشرده رابطة ضمني بين مشتق اول تابع و خود تابع برقرار مي‌شود و اين رابطه به‌همراه معادلة حاکم دسته‌اي معادله براي حل به‌وجود مي‌آورند، به‌طوري‌که مشتق تابع در معادلة حاکم به‌عنوان مجهول درنظر گرفته شده و همراه خود تابع به‌دست مي‌آيد و ديگر همانند روش‌هاي معمولي گسسته‌سازي نمي‌شود. يک خانواده از روش‌هاي فشرده پادبادسو مرتبه پنج به شکل زير بيان مي‌شود (Sengupta and Ganeriwal, 2003):

$$b_{i-1} f'_{i-1} + b_i f'_i + b_{i+1} f'_{i+1} = \frac{1}{h} \sum_{k=-2}^{2} a_{i+k} f_{i+k} - \frac{\alpha}{6!} h^4 \left(\frac{\partial^6 f}{\partial x^6} \right) \qquad (۱۳)$$

در رابطة بالا ضرايب تابع f و مشتق آن به شكل زير بيان مي‌شوند:

$$\begin{aligned} & & a_{i-2} &= -\tfrac{5}{3} + \tfrac{5}{6}\alpha \\ b_{i-1} &= 20 - \alpha & a_{i-1} &= -\tfrac{140}{3} + \tfrac{20}{3}\alpha \\ b_i &= 60 \quad , & a_i &= -15\alpha \\ b_{i+1} &= 20 + \alpha & a_{i+1} &= \tfrac{140}{3} + \tfrac{20}{3}\alpha \\ & & a_{i+2} &= \tfrac{5}{3} + \tfrac{5}{6}\alpha \end{aligned} \qquad (۱۴)$$

در رابطة (۱۳) اگر $\alpha = 0$ باشد روش فوق به روش فـشرده مركـزي مرتبة ۶ تبديل مي‌شود و به‌ازاي $\alpha < 0$، در صورت فرارفت مثبت باد روش فوق به روش پادبادسو تبديل مي‌شود. تحليـل خطـا و پايـداري روش مذكور با بررسي α هاي مختلـف در مرجـع (Sengupta and Ganeriwal, 2003) نـشان داده شـده اسـت و در اينجـا بـه دليـل محدوديت صـفحات مقالـه از آوردن آنهـا خـودداري مـي‌شـود. طبـق بررسي‌هـاي انجـام شـده در مرجـع (Sengupta and Ganeriwal, 2003) مقدار $\alpha = -1$ گزينة مناسبي است و در اينجـا نيـز از همـين مقدار استفاده شده‌است.

شبيه‌سازي پراكنش آلاينده‌ها در يک بعد و تحليل نتايج

معادلة حاكم بر پراكنش يک آلاينده در يک بعد به‌وسيلة رابطة زير بيان مي‌شود (Arya, 1999).

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) \qquad (۱۵)$$

در رابطة بالا c غلظت آلاينده و K_{xx} ضريب پخش آلاينده به‌علت شارهاي تلاطمي هستند. همچنين در اين رابطه $F = cu$ است كه در آن u سرعت باد در جهت x است. از آنجاكه جملة سمت راست معادلة (۱۵) خاصيت پخشي دارد و اغتشاش‌هاي عددي را ميرا مي‌كند در آزمايش روش‌هاي عددي براي مشخص شدن رفتار روش‌هاي عددي اين جمله از معادله حذف مي‌شود و معادلة فرارفت خالص براي آزمايش روش‌هاي عددي استفاده مي‌شود. معادلة فرارفت خالص يک‌بعدي به شكل زير نوشته مي‌شود:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0 \qquad (۱۶)$$

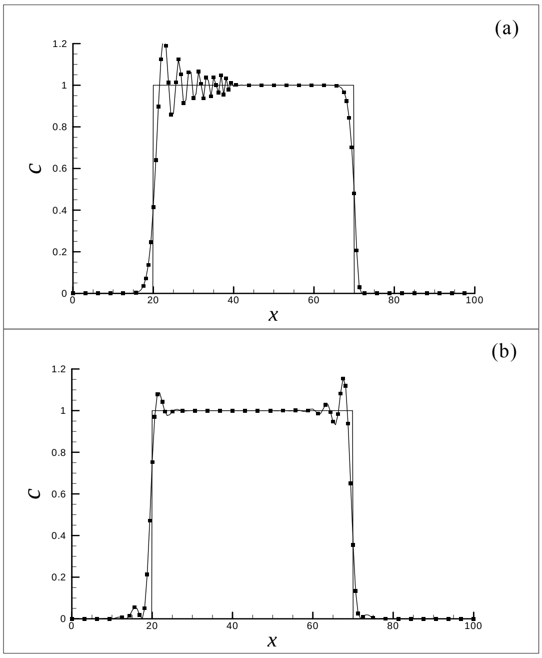
شبيه‌سازي معادلة (۱۶) با استفاده از دو روش مطرح شده در دو بخش قبل انجام شده‌است. در روش فشرده پادبادسو گسسته‌سازي زماني اويلر انجام شده و در هنگام حل اغتشاش‌هاي منفي ايجاد شده پالايش شده‌اند. شرايط اوليه براي غلظت تابع پله در مختصه مكاني با طول $L = 100\,\mathrm{m}$ و مرزهاي دوره‌اي درنظر گرفته شده‌است كه در نصف اول اين فاصله داراي مقدار ۱ و در نصف دوم برابر صفر است. سرعت باد در كل ميدان ثابت و $u = 1$ درنظر گرفته شده‌است. از آنجاكه مرزهاي حل دوره‌اي‌اند بعد از گذشت هر $100\,\mathrm{s}$، شرط اوليه تكرار مي‌شود.

به‌دليل اين‌كه هر دو روش به‌كار برده شده دقت بالايي دارند براي مشخص شدن خطاهاي آنها ۹ دور كامل از تكرار شرايط اوليه ($900\,\mathrm{s}$) بعلاوه $20\,\mathrm{s}$ ثانيه ($t = 920\,\mathrm{s}$) به‌عنوان زمان انتگرال‌گيري انتخاب شده‌است تا ناپيوستگي‌ها از ديواره‌ها فاصله بگيرند.

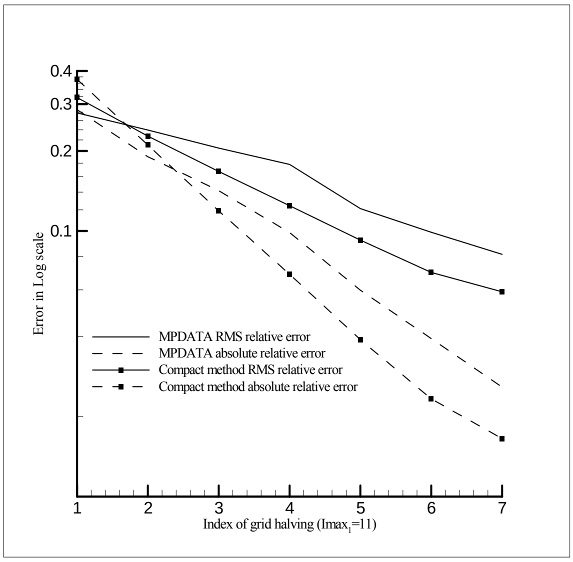
شبيه‌سازي براي تعداد نقاط شبكه‌اي مختلف از $\mathrm{Imax} = 11$ تا $\mathrm{Imax} = 641$ براي هر دو روش انجام شده‌است. در شكل شمارة(۱) نتيجة اين شبيه‌سازي براي دو روش MPDATA و روش تفاضل محدود فشرده پادبادسو مرتبة ۵ براي $\mathrm{Imax} = 161$ نشان داده شده‌است.

البته در حل روش فشرده اغتشاش‌هاي عددي منفي توليد شده به‌دليل اين‌كه مقادير غلظت نمي‌توانند مقدار منفي داشته باشند، پالايش شده‌اند ولي روش MPDATA به‌صورت خودكار اغتشاش‌هاي منفي توليد نمي‌كند. در شبيه‌سازي به روش MPDATA، بالا بردن تعداد تكرار بالاتر از ۴ تأثيري در نتايج ندارد و ميزان تكرار به ۴ محدود شده‌است. آنچه در شكل شمارة (۱) مشهود است شبيه‌سازي بهتر روش فشرده پادبادسو نسبت به روش MPDATA است. براي نشان دادن اين مطلب از ترسيم خطاهاي مطلق و RMS نسبي به‌ازاي نصف كردن فاصلة شبكه‌اي استفاده مي‌شود. در شكل شمارة (۲) اين خطاها نشان داده شده‌اند.

شكل شمارة (۲) نشان مي‌دهد كه براي شبكه‌هاي $\mathrm{Imax} > 21$ خطاي مطلق و خطاي RMS روش فشرده بهتر از خطاي روش MPDATA، است هرچند در روش فشرده زمان محاسبات بسيار بيشتر از روش MPDATA است. در جدول شمارة(۱) زمان محاسبات دو روش براي تعداد نقاط شبكه‌اي مختلف با يكديگر مقايسه شده‌اند. در اين جدول مشخص است كه روش فشرده زمان محاسباتي بيشتري نياز دارد. اين مسئله از آنجا ناشي مي‌شود كه در حل به روش فشرده براي هر نقطه يک ماتريس سه‌قطري وارون مي‌شود.



شکل شمارة (۱): شبيه‌سازي براي شبکة $\text{Imax}=161$ در مقايسه با حل دقيق (خط بدون علامت مربع حل دقيق است و خطوط همراه با علامت مربع نتيجة شبيه‌سازي هستند، (**a**) نتيجه شبيه‌سازي به روش **MPDATA** با $IORD=4$ و (**b**) نتيجه شبيه‌سازي به روش فشرده مرتبة ۵ پادبادسو با $\alpha=-1$)



شکل شمارة (۲): خطاهاي مطلق و **RMS** نسبي روش‌هاي **MPDATA** و فشرده پادبادسو برحسب نصف‌کردن فاصلة شبکه‌اي در حل معادلة فرارفت يک‌بعدي

جدول شمارة (۱): زمان **CPU** براي انجام محاسبات بر حسب ثانيه براي حل معادله فرارفت يک‌بعدي

تعداد نقاط شبکه	زمان **CPU** براي روش **MPDAT**	زمان **CPU** براي روش فشرده
۱۱	۰	۰/۴۰۶۲۵
۲۱	۰	۱/۲۵
۴۱	۰	۳/۷۸۱۲۵
۸۱	۱/۵۶۲۵ E-۲	۱۳/۸۷۵
۱۶۱	۰/۱۲۵	۴۸/۲۰۳۱۲۵
۳۲۱	۰/۵۳۱۲۵	۱۸۴/۰۳۱۲۵
۶۴۱	۲/۸۷۵	۷۴۷/۴۳۷۵

شبيه‌سازي پراکنش آلاينده‌ها در دو بعد و تحليل نتايج

معادلة حاکم بر پراکنش آلاينده در دو بعد توسط رابطة زير بيان مي‌شود (Arya, 1999).

$$\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial F}{\partial x}+\frac{\partial G}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xx}\frac{\partial c}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_{yy}\frac{\partial c}{\partial y}\right) \qquad (۱۷)$$

در رابطة بالا c غلظت آلاينده و K_{xx} و K_{yy} به‌ترتيب ضريب پخش در جهت x و y هستند. همچنين در اين رابطه $F=cu$ و $G=cv$ هستند که در آنها u و v به‌ترتيب سرعت باد در جهت x و y هستند. همان‌طورکه براي حالت يک‌بعدي ذکر شد جملة سمت راست معادلة (۱۷) خاصيت پخشي دارد و اغتشاش‌هاي عددي را ميرا مي‌کند و در آزمايش روش‌هاي عددي براي مشخص شدن رفتار روش‌هاي عددي اين جمله از معادله حذف مي‌شود و معادله فرارفت خالص براي آزمايش روش‌هاي عددي استفاده مي‌شود. معادلة فرارفت خالص دوبعدي به شکل زير نوشته مي‌شود:

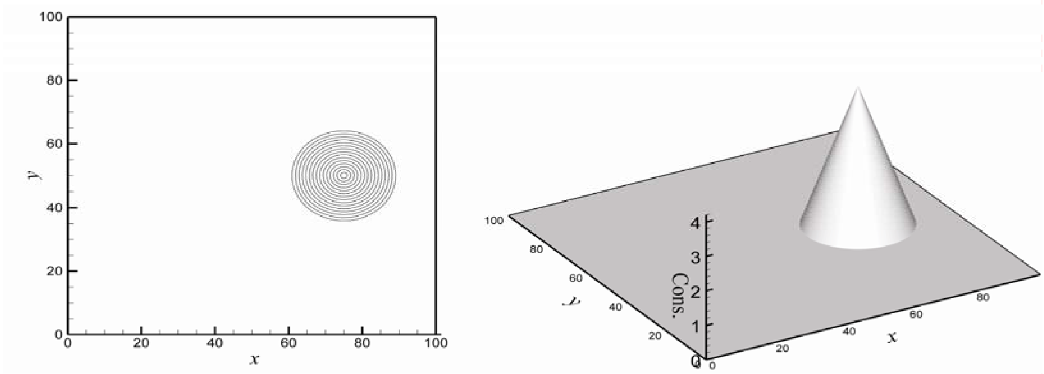
$$\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial F}{\partial x}+\frac{\partial G}{\partial y}=0 \qquad (۱۸)$$

شبيه‌سازي معادلة (۱۸) با استفاده از دو روش مطرح شده در بخش‌هاي قبل انجام شده‌است. در روش فشرده پادبادسو گسسته‌سازي زماني اويلر به روش تجزيه گام زماني در دو بعد انجام شده‌است (۹) و در هنگام حل اغتشاش‌هاي منفي ايجاد شده پالايش شده‌اند. براي شبيه‌سازي معادله فرارفت دوبعدي، معادلة (۱۸) در ناحية مربعي با ضلع $100\ \text{m}$ درنظر گرفته مي‌شود. در اين ناحيه مؤلفه‌هاي سرعت به‌صورت زير تعريف مي‌شوند:

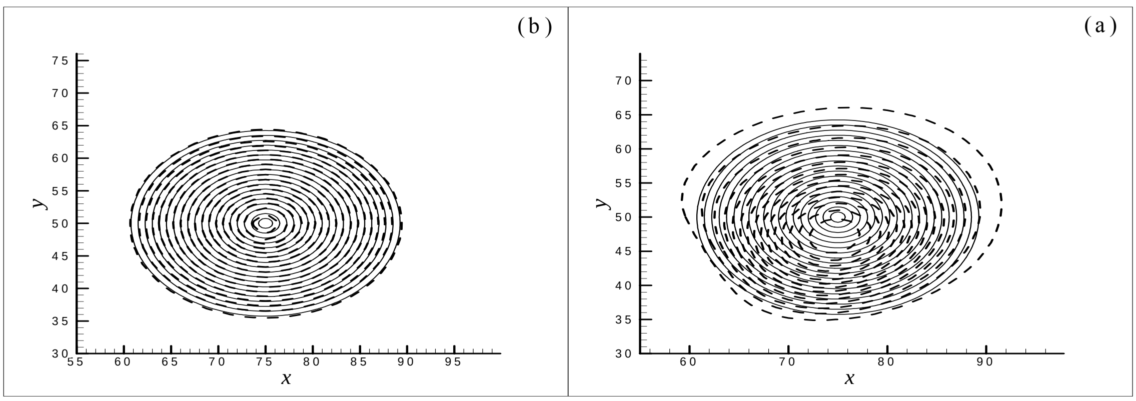
$$(u,v)=-\omega(y-y_{\circ},x-x_{\circ}) \qquad (۱۸)$$

که در آن $\omega=0.1\ \text{rad/s}$ و $x_{\circ}=y_{\circ}=50\ \text{m}$ هستند. شرايط

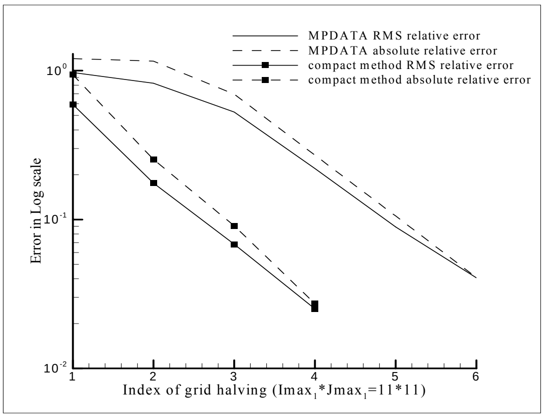
اوليه براي غلظت آلاينده به‌صورت مخروطي است‌كه مقدار بيشينة آن در نقطه $(75\,\mathrm{m}, 50\,\mathrm{m})$ با قله $4\,\mu g/\mathrm{m}^3$ قرار دارد و در دايره‌اي به شعاع $15\,\mathrm{m}$ به صفر مي‌رسد شكل شمارة (۳). مؤلفه‌هاي سرعت در رابطة (۱۸) به‌گونه‌اي تعريف شده‌اند كه مقدار غلظت بعد از طي زمان $2k\pi/\omega$ (k عدد صحيح مثبت است) دقيقاً روي شرايط اوليه قرار مي‌گيرد. با استفاده از اين نكته مي‌توان شبيه‌سازي‌هاي عددي را با حل دقيق مقايسه كرد. براي بررسي نتايج شبيه‌سازي، مدت زمان انتگرال‌گيري براي هر دو روش، ۴ دور كامل درنظر گرفته شده‌است. اين شبيه‌سازي براي شبكه‌هاي مختلف از شبكة ۱۱*۱۱ تا ۸۱*۸۱ براي روش فشرده و شبكة ۱۱*۱۱ تا ۳۲۱*۳۲۱ براي روش MPDATA انجام شده‌است. بيشتر بودن تعداد شبكه‌هاي روش MPDATA به اين دليل است‌كه در روش MPDATA با تعداد نقاط شبكه‌اي بالاتر به دقتي برابر با دقت روش فشرده با تعداد نقاط كمتر مي‌رسيم. در شكل شمارة (۴) هم‌مقدارهاي دو روش به‌كار برده شده با شبكة ۸۱*۸۱ با يكديگر و حل دقيق مقايسه شده‌اند. در اين شكل نشان داده شده‌است كه در شبكه‌هاي يكسان روش پادبادسو فشرده بسيار بهتر از روش MPDATA كارايي دارد ولي براي كمي كردن دقت دو روش مذكور، مقادير خطاهاي مطلق و RMS نسبي اين دو روش نسبت به حل دقيق بعد از ۴ گردش كامل محاسبه شده و در شكل شمارة (۵) نشان داده شده‌اند. از شكل شمارة (۵) مشخص است كه خطاي روش فشرده با شبكة ۴۱*۴۱ تقريباً با خطاي شبكة ۳۲۱*۳۲۱ روش MPDATA برابراست. همچنين در شكل شمارة (۶) مقدار بيشنه غلظت كه مي‌بايد در روش‌هاي عددي استفاده شده پايسته بماند ولي به‌دليل خطاهاي عددي اين مقدار كاهش مي‌يابد، نشان داده شده‌است. از شكل شمارة (۶) كاملاً مشخص است كه در شبكة ۸۱*۸۱ روش فشرده، مقدار غلظت بيشينه را با دقت بيشتري نسبت به دقت روش MPDATA با شبكه ۳۲۱*۳۲۱ پيش‌بيني كرده است. افزايش دقت در روش فشرده باعث افزايش زمان محاسبات و در نتيجه افزايش هزينه‌هاي محاسباتي مي‌شود.



شكل شمارة (۳): شرايط اوليه براي حل معادله فرارفت (شكل سمت راست به‌صورت نمايش سه‌بعدي و شكل سمت چپ به‌صورت نمايش هم‌مقداري)



شكل شمارة (۴): مقايسة هم‌مقدارهاي غلظت با حل دقيق بعد از چهار گردش كامل(خطهاي پر نشان‌دهندة حل دقيق و خط‌چين‌ها نشان‌دهندة حل عددي هستند، (**a**) نتيجة حل با استفاده از روش **MPDATA** و (**b**) نتيجة حل با استفاده از روش فشرده پادبادسو مرتبة)۵

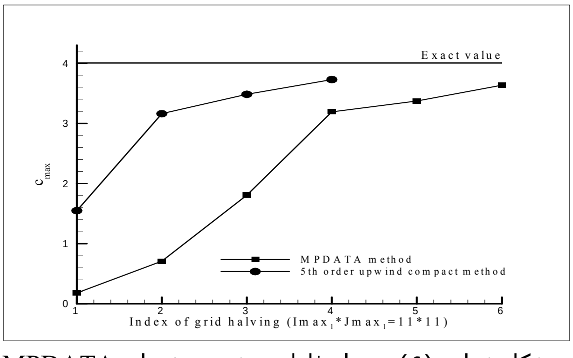


شکل شمارة (۵): خطاهاي مطلق و **RMS** نسبي روش‌هاي **MPDATA** و فشرده پادبادسو برحسب نصف‌کردن فاصلة شبکه‌اي

براي نشان دادن بهتر و مقايسه کمي دقت دو روش تحت بررسي، ميزان خطاي روش MPDATA و روش تفاضل محدود فشرده پادبادسو در شبکه‌هاي مختلف در جدول شمارة(۲) نشان‌داده‌شده‌است.

در جدول شمارة (۳) ميزان زمان محاسباتي اين دو روش براي حل معادله فرارفت دوبعدي با يکديگر مقايسه شده‌اند. همان‌طورکه از جدول شمارة(۳) مشاهده مي‌شود زمان محاسبات براي روش فشرده پادبادسو بمراتب بيشتر از روش MPDATA است. همان طورکه ذکر شد در شبکة ۴۱*۴۱ روش فشرده، دقتي معادل با شبکة ۳۲۱*۳۲۱ روش MPDATA دارد که با توجه به جدول شمارة (۲) زمان محاسبات شبکة ۴۱*۴۱ در روش فشرده برابر با ۲۳۸۸/۹۵۳۱۲۵ است‌که از زمان محاسبات شبکة ۳۲۱*۳۲۱ روش MPDATA که برابر با ۵۵۸۵/۷۸۱۲۵ s است، کمتر است.

بنابراين براي دستيابي به دقت يکسان و برابر، روش پادبادسو فشردة مرتبة پنج در مقايسه با روش MPDATA داراي زمان محاسباتي کمتري است.



شکل شمارة (۶): مقدار غلظت بيشنه روش‌هاي MPDATA و فشردة پادبادسو برحسب نصف‌کردن فاصله شبکه‌اي در حل معادلة فرارفت دوبعدي

جدول شمارة (۲): مقايسة خطاي **RMS** نسبي براي روش **MPDATA** و روش تفاضل محدود فشرده پادبادسو

تعداد نقاط شبکه	روش **MPDATA**	روش فشرده
۱۱*۱۱	۰/۹۷۱۸۹۴	۰/۵۹۳۰۱۶
۲۱*۲۱	۰/۸۲۲۸۱۹	۰/۱۷۵۷۲۰
۴۱*۴۱	۰/۵۲۷۳۵۷	۰/۶۸۲۲۰
۸۱*۸۱	۰/۲۲۰۲۲۴	۰/۰۲۵۱۰۲
۱۶۱*۱۶۱	۰/۰۸۹۱۷۶۴	--
۳۲۱ *۳۲۱	۰/۰۴۰۵۷۸۸	--

جدول شمارة (۳): زمان **CPU** براي انجام محاسبات بر حسب ثانيه در حل معادله فرارفت دوبعدي

تعداد نقاط شبکه	زمان **CPU** براي روش **MPDATA**	زمان **CPU** براي روش فشرده
۱۱*۱۱	۶/۲۵ E-۰۰۲	۱۷/۴۵۳۱۲۵
۲۱*۲۱	۱/۰۶۲۵	۱۹۴/۶۲۵
۴۱*۴۱	۸/۱۸۷۵	۲۳۸۸/۹۵۳۱۲۵
۸۱*۸۱	۶۹/۰۶۲۵	۳۲۵۴۳/۸۱۲۵
۱۶۱*۱۶۱	۶۱۶/۵۶۲۵	--
۳۲۱*۳۲۱	۵۵۸۵/۷۸۱۲۵	--

جمع‌بندي و نتيجه‌گيري

در اين مقاله دو روش مرتبة بالاي MPDATA و پادبادسو فشردة مرتبة پنجم به معادلات فرارفت يک و دوبعدي که معادلات پايه پراکنش آلاينده‌ها در جو هستند استفاده شدند. آزمايش‌هاي عددي در حالت يک‌بعدي روي ناپيوستگي غلظت با شرايط مرزي دوره‌اي اعمال و انتگرال‌گيري زماني براي 920 s انجام شد. نتايج براي حالت يک‌بعدي نشان مي‌دهد که دقت روش فشرده بمراتب بيشتر از روش MPDATA است، ولي مستلزم صرف هزينه محاسباتي بالاتر از روش MPDATA است (شکل شمارة (۲) و جدول شمارة (۱). در حالت دو بعدي شرايط اوليه‌اي درنظر گرفته شد که مؤلفه‌هاي سرعت باد در آن به‌گونه‌اي بودند که حالت گردش حول مرکز ناحيه حل به‌وجود مي‌آوردند. با درنظر گرفتن اين شرايط اوليه براي باد و درنظر گرفتن شرط اوليه غلظت خارج از مرکز، وضعيتي به‌وجود مي‌آيد که غلظت بدون تغيير (براي معادلة فرارفت) حول مرکز ناحية حل به گردش درمي‌آيد.

بدين ترتيب مي‌توان مقادير حل عددي را بعد از هر گردش كامل با مقادير دقيق آن كه همان شرايط اوليه است، مقايسه كرد. مقايسة نتايج براي حالت دو بعدي بعد از چهار گردش كامل نشان مي‌دهد كه دقت روش پادبادسو فشرده بمراتب بيشتر از روش MPDATA است. به‌طوري‌كه خطاي روش فشرده در شبكة ۴۱*۴۱ تقريباً با خطاي شبكة ۳۲۱*۳۲۱ روش MPDATA برابراست، در صورتي‌كه زمان محاسبات روش فشرده در شبكه ۴۱*۴۱ از زمان محاسبات دقت متناظر آن در روش MPDATA كمتر است.

تشكر و قدرداني

اين مقاله از طرح پژوهشي تعريف شده در معاونت پژوهشي دانشكدة محيط زيست دانشگاه تهران با شمارة ۲۶۹۶۹/۱/۱ استخراج شده است كه نويسندة مقاله بدين‌وسيله از دانشگاه تهران به‌علت حمايت مالي از اين تحقيق تقدير و تشكر مي‌كند.

يادداشت‌ها

1- Multi-Dimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm (MPDATA)

2- Compact Finite Difference Method

3- Upwind

4- Modified equation

5- Artificial diffusive velocity

منابع مورد استفاده

قادر، س. و اصفهانيان، و. ۱۳۸۵. حل معادلات آب كم‌عمق با استفاده از روش فشرده تركيبي تعميم يافته، مجموعة مقالات دهمين كنفرانس ديناميک شاره‌ها، دانشگاه يزد.

Adam,Y.1977. Highly accurate compact implicit methods and boundary conditions. Journal of Computational Physics, 24, 10-22.

Arya, S.P.1999. Air Pollution Meteorology and Dispersion, Oxford University Press,. New York.

Esfahanian,V., S.,Ghader, and Kh.,Ashrafi.2004. Accuracy Analysis of Super Compact Scheme in Nonuniform Grid with Application to Parabolized Stability Equations. Int. J. Numer. Methods Fluids, 46, 485-505.

Hirsch, R.S.1975. Higher order accurate difference solutions of fluid mechanics problems by a compact differencing technique. Journal of Computational Physics, 19, 90-109.

Lele, S.K.1992. Compact Finite Difference Schemes with Spectral-Like Resolution. Journal of Computational Physics, 103, 16-42.

Sengupta, T.K. and S.De., Ganeriwal.2003. Analysis of Central and Upwind Compact Schemes. Journal of Computational Physics, 192, 677-694.

Smolarkiewicz, P.K.1984. A Fully Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm with small Implicit Diffusion. Journal of Computational Physics, 54, 325-362.

Smolarkiewicz, P.K. and L.G. Margolin.1998. MPDATA: A Finite-Difference Solver for Geophysical flows. Journal of Computational Physics, 140, 459-480.

Tannehill, J.C., D.A., Anderson, and R.H. Pletcher.1997. Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer, 2nd ed., Taylor & Francis.