

عملکرد روش های ضمنی *QSSA* و *EBI* در مدل های آلودگی هوا و مقایسه آنها با روش های کلاسیک

سید محمد حسینیⁱ؛ محمود رستمیⁱⁱ

چکیده

انتقال ذرات شیمیایی در تروپوسفر بوسیله دستگاه معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی توصیف می‌گردد. بنابراین روشهای زیادی به منظور حل این معادلات دیفرانسیل ارائه شده است. روش های پیشگو-اصلاحگر مبتنی بر روش های کلاسیک *QSSA* و *EBI* برای حل معادلات دیفرانسیل مربوط معرفی می‌شوند. با انجام تکرارهای متفاوت گام اصلاحگر و مقایسه نتایج عددی و دقت و زمان محاسبه بدست آمده با نتایج روش های کلاسیک در نظر گرفته شده لزوم استفاده از این الگوریتم ها به روشنی مشخص می‌شود. همچنین بر پایه تقسیم بندی رفتار تند یا کند جنبش شیمیایی ذرات، معادلات دیفرانسیل مربوط به دستگاه معادلات دیفرانسیل - جبری تبدیل می‌شوند. در ادامه به بررسی الگوریتم هایی (بر مبنای تقسیم بندی ذرات و واکنش های شیمیایی) برای انترال گیری از اینگونه دستگاههای بازمان محاسبه کمتر پرداخته می‌شود. این الگوریتم ها با روش های کلاسیک *QSSA* و *EBI* مقایسه می‌گردند که کارایی و دقت الگوریتم ارائه شده را به روشنی نشان می‌دهد.

کلمات کلیدی

شیمی اتمسفری، روش *QSSA*، معادله دیفرانسیل - جبری، روش *EBI*، سازو کار شیمیایی *CBM4*

ANALYSIS OF AIR POLLUTION TRANSITION MODELS AND METHODS OF SOLVING

S. M. Hosseini; M. Rostami

ABSTRACT

Consider the evolution of chemical species in troposphere that is mathematically described by a system of partial differential equations. On the basis of the slow / fast behavior of chemical kinetics the partial differential equations are replaced by a differential-algebraic system. In this article an easy to perform algorithm is proposed which integrates such system with a low CPU time. Comparison is made with some classical solvers such as Euler Backward Implicit (*EBI*), quasi-steady-state-approximation (*QSSA*) and the second-order Rosenbrock method (*Ros2*). This confirms the efficiency and the accuracy of the proposed algorithm.

KEYWORDS

Atmospheric chemistry; *QSSA* solver; Differential-algebraic-systems; *EBI* solver; *CBM4* scheme

ⁱ استاد بخش ریاضی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، Email: hossei_m@modares.ac.ir

ⁱⁱ کارشناسی ارشد، دانشکده علوم پایه، بخش ریاضی، دانشگاه تربیت مدرس: Email: m0samsami@yahoo.com

می‌توان معادله انتقال ذرات شیمیایی در اتمسفر برحسب غلظت آنها را به صورت معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی رابطه ۱ بیان نمود

$$\frac{\partial Z_i}{\partial t} + \text{div}(\vec{U}Z_i) = \text{div}(D\nabla Z_i) + X_i(z,t) + S_i \quad i=1, \dots, n \quad (1)$$

که در آن Z_i غلظت ذره i ام و U میانگین سرعت باد و D ضریب نفوذپذیری اتمسفری و $X(z,t)$ تابعی است که تبدیلات شیمیایی ذرات را بیان می‌کند. [۲]

همانطور که دیده می‌شود مدل انتقال آلودگی هوا شامل چندین پارامتر مانند انتقال از طریق نفوذ مولکولی، انتقال توده‌ای و انتقال بوسیله تبدیلات شیمیایی می‌باشد.

تفاوت روش‌های گوناگون به چگونگی جدا کردن این پارامترها بستگی دارد. نگرش اصلی در جدا کردن این پارامترها به منظور مطالعه تأثیر هر یک از این عوامل در گام زمانی Δt و در پایان، ترکیب این تأثیرات به منظور بدست آوردن نتایج می‌باشد. تغییرات گسترده زمانهای لازم برای انجام هر واکنش منجر به معادلاتی با میزان سختی بالا می‌شود و در نتیجه انتگرالگیری از این معادلات نیازمند روش‌های ویژه‌ای می‌باشد. زیرا معادله دیفرانسیل در نظر گرفته شده ممکن است برای تعداد ۲۰ تا ۱۰۰ ذره به طور همزمان مورد بررسی قرار گیرد و در نتیجه این انتگرالگیری عددی می‌تواند بسیار زمان گیر باشد. بنابراین جواب عددی این معادلات با استفاده از روشهای کلاسیک با مرتبه همگرایی پایین نظیر روش اویلر یا روش آدامز - مولتون قابل محاسبه نبوده و نیازمند روش‌های ویژه‌ای برای اندازه‌گیری می‌باشند. [۲]

در این مقاله فرض می‌شود که فقط بحث تبدیلات شیمیایی در انتقال ذرات در اتمسفر مطرح باشد لذا معادله دیفرانسیل (۱) به صورت مسئله مقدار اولیه رابطه ۲ نوشته می‌شود.

$$\frac{dz}{dt} = X(z,t) \quad (2)$$

$z(0) = z^0$.
با این فرض که $X(z,t)$ تابعی هموار و Z بیانگر غلظت ذرات مورد نظر باشد.

به عبارت دیگر معادله انتقال در مدل کاهش را می‌توان به صورت رابطه ۳ بیان نمود:

$$\frac{dz}{dt} = X(z,t) = p(t,z) - L(t,z)z(t) \quad (3)$$

$$z(0) = z^0$$

با این فرض که:

$$p(t,z) = [p_1(t,z), \dots, p_n(t,z)]^T \quad (4)$$

$$L(t,z) = \text{diag}[L_1(t,z), \dots, L_n(t,z)] \quad (5)$$

همچنین:

$$z(t) = [z_1(t), \dots, z_n(t)]^T \quad (6)$$

همانطور که دیده می‌شود $p(t,z)$ یک بردار در فضای R^n و $L(t,z)$ یک ماتریس قطری می‌باشد. گفتنی است که مولفه‌های $P_k(t,z)$ و $L_k(t,z)$ به ترتیب جملات تولید و مصرف k امین ذره مورد نظر می‌باشد. در ابتدا به معرفی روشهای پیشین (کلاسیک) به منظور حل معادله دیفرانسیل (۳) پرداخته می‌شود. در ادامه با توجه به تقسیم بندی ذرات شیمیایی، معادله دیفرانسیل در نظر گرفته شده به دستگاه معادلات دیفرانسیل - جبری تبدیل می‌شود. لذا به منظور دستیابی به الگوریتم مطلوب روشهایی به منظور حل قید جبری و همچنین حل قسمت دیفرانسیلی دستگاه حاصل ارائه می‌گردد. همچنین با معرفی روشهای پیشگو - اصلاح گر برای روشهای کلاسیک EBI و QSSA و انجام مراتب گوناگون تکرار گام اصلاح گر و مقایسه عددی نتایج بدست آمده با روشهای کلاسیک در نظر گرفته شده دقت و کارایی این الگوریتم‌ها مشخص می‌گردد.

۲- روشهای کلاسیک

در ابتدا به معرفی روشهای پیشین (کلاسیک) که به منظور حل معادله دیفرانسیل (۳) استفاده شده است اشاره می‌گردد.

۲-۱- روش رزنبروک ۲- مرحله‌ای [۸]

فرض کنید معادله دیفرانسیل (۳) به صورت (۷) تعمیم یافته باشد

$$y' = f(t,y) \quad (7)$$

$$y(t_0) = y_0$$

در نتیجه روش رزنبروک ۲- مرحله‌ای به صورت رابطه (۸) نوشته می‌شود

$$y_{n+1} = y_n + \tau b_1 k_1 + \tau b_2 k_2 \quad (8)$$

به طوریکه

$$k_1 = f(t_n, y_n) + \gamma \tau A k_1 \quad (9)$$

گام زمانی باشد در آن صورت عبارت $e^{-\tau L^n}$ با $1 - \tau L^n$ جابجا می‌گردد لذا برای معادله دیفرانسیل در نظر گرفته شده (۳) روش QSSA به شکل رابطه ۱۳ نوشته خواهد شد.

$$y^{n+1} = (I - \tau L^n)y^n = y^n + \tau(p^n - L^n y^n) = y^n + \tau f^n \quad (13)$$

همانطور که دیده می‌شود روش QSSA به روش اویلر صریح تک مرحله‌ای تبدیل شده است.

ب- اگر طول عمر ذره (زمان پایداری ذره) کوتاه باشد یا به عبارت دیگر $\tau L^n > 10$ ، در این حالت ذره در نظر گرفته شده سریع می‌باشد و در آن صورت عبارت $e^{-\tau L^n}$ با صفر جابجا می‌گردد لذا معادله QSSA به صورت رابطه ۱۴ نوشته می‌شود.

$$y^{n+1} = \frac{p^n}{L^n} \quad (14)$$

ج- اگر $0.1 < \tau L^n < 10$ ، باشد در آن صورت:

$$y^{n+1} = \frac{p^n}{L^n} + (y^n - \frac{p^n}{L^n})e^{-\tau L^n} \quad (15)$$

که همان روش QSSA می‌باشد.

در ادامه بحث به منظور بررسی الگوریتم‌های جدید، معادله دیفرانسیل در نظر گرفته شده بر مبنای افزایش بندی رفتار تند یا کند ذرات شیمیایی به دستگاه معادلات دیفرانسیل - جبری تبدیل می‌شود. این الگوریتم‌ها در سال ۲۰۰۳ توسط اسپورتیس ارائه گردید اساس این روشها ارائه الگوریتم‌هایی به منظور حل قید جبری و همچنین حل قسمت دیفرانسیلی دستگاه در نظر گرفته شده می‌باشد. در آغاز به چگونگی محاسبه دستگاه دیفرانسیل - جبری اشاره می‌گردد.

۳- الگوریتم‌های جدید

۳-۱- محاسبه دستگاه دیفرانسیل - جبری

معادله دیفرانسیل ناشی از انتقال ذرات شیمیایی در مدل کاهش به صورت رابطه ۱۶ نوشته می‌شود:

$$\frac{dz}{dt} = X(z, t) \quad (16)$$

$$z \in R^n$$

$$z(0) = z^0$$

با این فرض که $X(z, t)$ تابعی هموار باشد. در حالت واقعی یک عامل سخت کننده مانند ε وجود دارد که به شرح رابطه ۱۷ تعریف می‌شود:

$$\varepsilon = \frac{\lambda_f}{\lambda_s} \quad (17)$$

$$k_r = f(t_n + \tau, y_n + \tau k_r) A k_r + \gamma \tau A k_r$$

با این فرض که $\tau = t_{n+1} - t_n$ طول گام زمانی و y_n مقدار تقریبی در زمان $t = t_n$ و همچنین $A = f'(t_n, y_n)$ ماتریس ژاکوبین تابع برداری f و $\gamma = 1 + \frac{\sqrt{\tau}}{\tau}$ می‌باشد.

۲-۲- روش [Y]EBI

یکی از روشهای مطلوب برای حل معادلات دیفرانسیل در نظر گرفته شده (۳) روش Euler Backward Implicit یا به اختصار روش EBI می‌باشد. این روش که به صورت گسترده برای حل معادلات شیمی اتمسفری به کار برده می‌شود در سال ۱۹۵۲ توسط کورتیس و هرچ فلدر ارائه شد [Y].

این روش مبتنی بر روش اویلر ضمنی بوده و به صورت رابطه ۱۰ بیان می‌گردد:

$$y^{n+1} = y^n + B h f(y^{n+1}) \quad (10)$$

با این فرض که $h = t_{n+1} - t_n$ طول گام و B پارامتری ثابت و وابسته به روش BDF مورد نظر می‌باشد.

۲-۳- روش QSSA [۱۰، ۹، ۸]

معادله دیفرانسیل ناشی از جنبش شیمیایی ذرات در اتمسفر را می‌توان به صورت رابطه ۱۱ بیان نمود:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) = p(t, y) - L(t, y)y(t) \quad (11)$$

که در آن $p(t, y)$ و $L(t, y)$ به ترتیب جملات تولید و مصرف می‌باشند.

روش Quasi-steady-state-approximation یا به اختصار QSSA که در سال ۱۹۷۸ توسط هستودت ارائه شد برای معادله دیفرانسیل در نظر گرفته شده (۳) به صورت رابطه ۱۲ تعریف می‌شود.

$$y(t + \tau) = e^{-\tau L} y(t) + (I - e^{-\tau L}) L^{-1} p \quad (12)$$

با این فرض که در آن $\tau = t_{n+1} - t_n$ طول گام زمانی مطلوب باشد.

تقسیم‌بندی ذرات شیمیایی به ذرات کند و سریع در روش QSSA به منظور سرعت بخشیدن به محاسبات عددی می‌باشد. اساس این روش عبارت است از [۱۰]:

الف- اگر طول عمر ذره J ام (زمان پایداری) بزرگ باشد در آن صورت ذره J ام، ذره‌ای کند است در این حالت مسئله سخت می‌باشد به عبارت دیگر اگر $\tau L^n < 0.1$ که در آن $\tau = t_{n+1} - t_n$ طول

که در آن λ_f زمان سریعترین واکنش و λ_g زمان کندترین واکنش مطلوب می‌باشد.

بنابراین معادله دیفرانسیل (۱۸) به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\varepsilon \frac{dz}{dt} = X(z, t, \varepsilon) \quad (18)$$

$$z(0) = z^0$$

در ابتدا به افزاینده ذرات شیمیایی به ذرات سریع y و ذرات کند x پرداخته می‌شود بدین ترتیب که $x \in \mathbb{R}^{n-p}$ ، $y \in \mathbb{R}^p$ ، $z = (x, y)$ با این فرض که p تعداد ذرات سریع مطلوب باشد. بنابراین با توجه به افزاینده ذرات می‌توان نوشت

$$\varepsilon \frac{dz}{dt} = X(z, t, \varepsilon) \quad (19)$$

$$\varepsilon \left(\frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt} \right) = X(z, t, \varepsilon) = [f(x, y, \varepsilon), g(x, y, \varepsilon)] \quad (20)$$

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f(x, y, \varepsilon) \\ \varepsilon \frac{dy}{dt} = g(x, y, \varepsilon) \end{cases}$$

اما هنگامی f و g توابعی هموار باشند و $\varepsilon \rightarrow 0$ ، در مدل کاهش، معادله دیفرانسیل در نظر گرفته شده (۱۶) به صورت دستگاه معادلات دیفرانسیل - جبری ۲۱ تبدیل می‌شود:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f(x, y, 0) \\ 0 = g(x, y, 0) \end{cases} \quad (21)$$

حال با دانستن جزئیات دستگاه دیفرانسیل - جبری ناشی از واکنش‌های ذرات شیمیایی در مدل کاهش به ارائه روشهایی جدید به منظور حل اینگونه معادلات پرداخته می‌شود. تمام الگوریتم‌هایی که برای حل این دستگاهها به کار برده می‌شوند در هر گام زمانی ابتدا معادله دیفرانسیل مربوط به ذرات کند x را با یک روش صریح حل نموده و سپس به حل قید جبری مربوط به ذرات سریع y پرداخته می‌شود.

تفاوت میان این الگوریتم‌ها، تنها به نحوه انتخاب روش صریح برای انتگرالگیری از ذرات کند و نیز انتخاب روشی برای حل قید جبری می‌باشد در ادامه به ارائه ۲ روش برای حل قید جبری $g(x, y) = 0$ و سپس به بررسی روشهای صریح به منظور حل معادله دیفرانسیل در نظر گرفته شده پرداخته می‌شود [۳]

به منظور حل قید جبری $g(x, y) = 0$ (وابسته به ذرات شیمیایی سریع) از ۲ روش تکراری استفاده می‌شود که در این قسمت به معرفی این روش‌ها پرداخته می‌شود.

۳-۲- تابع تکرار DAFI [۳]

اولین روش به منظور حل قید جبری در نظر گرفته شده، روش Differential Algorithm Functional Iteration یا به اختصار روش تابع تکرار DAFI می‌باشد. این روش، نیازمند محاسبه هیچ ماتریس معکوسی نمی‌باشد اساس این روش به صورت رابطه ۲۲ است:

$$y^{k+1} = y^k - M(y^k)g(x, y^k) \text{ def } G(x, y^k) \quad (22)$$

یا به عبارت دیگر

$$M(y^k)[y^{k+1} - y^k] = -g(x, y^k) \quad (23)$$

با این فرض که ماتریس پیش شرط $M(y)$ به صورت رابطه ۲۴ تعریف شده باشد.

$$M(y) = \text{diag}(m_1, m_2, \dots, m_p) \quad (24)$$

که در آن

$$m_i = \frac{1}{\varepsilon} \left| \left(\frac{\partial g_i}{\partial y_i} \right)^{-1} \right| \quad i = 1, \dots, p \quad (25)$$

که در آن p تعداد ذرات سریع مطلوب می‌باشد.

۳-۳- الگوریتم تکرار نیوتن DAN [۳]

دومین روشی که به منظور حل قید جبری $g(x, y) = 0$ در نظر گرفته می‌شود،

روش Differential Algorithm of Newton یا به اختصار تابع تکرار نیوتن DAN می‌باشد در این روش از یک نمایش تکراری با استفاده از روش نیوتن برای حل قید جبری استفاده می‌شود.

اساس این روش به صورت رابطه ۲۶ خواهد بود.

$$\frac{\partial g}{\partial y}(x, y^k)[y^{k+1} - y^k] = -g(x, y^k) \quad (26)$$

این روش نیازمند محاسبه ماتریس ژاکوبین سریع در هر گام زمانی تکرار می‌باشد ولی در صورتی که همگرایی نیازمند محاسبه بیش از یک تابع تکرار نباشد این روش بر روش تابع تکرار DAFI برتری نسبی خواهد داشت.

پس از بررسی روشهایی به منظور حل قید جبری $g(x, y) = 0$ ، به ارائه روشهایی برای حل قسمت دیفرانسیلی (وابسته به ذرات کند) پرداخته می‌شود. با این فرض که منظور از DA روشهای در نظر گرفته شده DAN یا DAFI می‌باشد یا به عبارت دیگر $y = DA(x)$ در حقیقت در این قسمت تنها ذرات کند x محاسبه می‌گردند و ذرات سریع y بوسیله روش‌های در نظر گرفته شده (DAFI یا DAN) بدست می‌آیند.



۴-۳- روشهای صریح به منظور حل قسمت

دیفرانسیلی [۳]

روش اول: این روش از مرتبه اول همگرایی بوده و به صورت رابطه ۲۷ تعریف می‌شود. (DAN1 و DAF11)

$$x_{n+1} = x_n + hk_{n,1} \quad (27)$$

با این فرض که $k_{n,1} = hf(x_n, y_n)$ و h طول گام زمانی در نظر گرفته شده باشد.

روش دوم: این روش از مرتبه دوم همگرایی بوده و به صورت رابطه ۲۸ تعریف می‌شود. (DAN2 و DAF12)

$$x_{n+1} = x_n + hk_{n,2} \quad (28)$$

با این فرض که $k_{n,2} = f(x_n^*, y_n^*)$ و $x_n^* = x_n + \frac{1}{2}hk_{n,1}$ و h طول گام زمانی در نظر گرفته شده باشد.

روش سوم: این روش از مرتبه چهارم همگرایی بوده و به صورت رابطه ۲۹ تعریف می‌شود:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{6}(k_{n,1} + 2k_{n,2} + 2k_{n,3} + k_{n,4}) \quad (29)$$

با این فرض که:

$$k_{n,2} = f(x_n^*, y_n^*)$$

$$k_{n,3} = f(x_n^{**}, y_n^{**})$$

$$k_{n,4} = f(x_n^{***}, y_n^{***})$$

که در آن:

$$x_n^* = x_n + \frac{1}{2}hk_{n,1}$$

$$x_n^{**} = x_n + \frac{1}{4}hk_{n,2}$$

$$x_n^{***} = x_n + \frac{1}{8}hk_{n,3}$$

همانطور که دیده می‌شود الگوریتم های اسپورتیس، روشهای تک گامی و بدون تکرار اصلاح گر در هر گام زمانی در نظر گرفته شده می‌باشند لذا با ارائه روشهای پیش گو - اصلاح گر و انجام تکرارهای متفاوت گام اصلاح گر برای روشهای کلاسیک EBI و QSSA و مقایسه عددی نتایج دقت و زمان محاسبه بدست آمده، نیاز استفاده از روشهای پیش گو - اصلاح گر و انجام تکرار گام اصلاح گر به روشنی مشخص می‌شود.

گفتنی است که تعداد تکرار های اصلاح گر در هر گام زمانی، وابسته به دقت محاسبه مطلوب می‌باشد با دانستن این نکته که هر چه تعداد این گام ها افزایش یابد، زمان محاسبه نیز به همان نسبت افزایش می‌یابد.

۴- نتایج عددی

نمایش شیمیایی که در این قسمت استفاده می‌شود واکنش CBM4 می‌باشد که در سال ۱۹۸۹ توسط گری ارائه گردید. گری، این نمایش را برای مدل‌بندی آلودگی فتوشیمیایی هوا در اتمسفر طراحی نمود. این نمایش شیمیایی شامل ۳۱ ذره و ۶۹ واکنش شیمیایی می‌باشد [۴].

همه آزمون ها در سه گام زمانی ۵۰ و ۱۰۰ و ۹۰۰ ثانیه انجام می‌شوند. روشهای کلاسیک QSSA و EBI با ۲ حالت متفاوت با تکرار و بدون تکرار اصلاحگر در هر گام زمانی به کار برده می‌شوند. این مقادیر با نتایج عددی که از روش مرجع LSODE بدست آمده، مقایسه می‌شوند. روش LSODE که در سال ۱۹۸۰ توسط هیند مارش ارائه شد یک بسته نرم‌افزاری خودکار انتگرال گیری باشد. اساس این روش در مورد معادلات غیر سخت، روش پیشگو - اصلاحگر آدامز و روش مشتق گیری پسرو یا BDF برای معادلات سخت می‌باشد.

گفتنی است که بزرگترین خطای مطلق محاسبه شده در زمان انتگرالگیری به صورت رابطه ۳۰ محاسبه می‌شود.

$$DCMAX_i = \max_{i=1, \dots, m} \left| z_{i,n} - Z_{i,n}^{LSODE} \right| \quad n=1, \dots, N \quad (30)$$

با این فرض که اندیس i نشان دهنده ذره i ام، و متغیر m گام زمانی مشخص باشد. به همین ترتیب $Z_{i,n}$ مقدار غلظت ذره در نظر گرفته شده i ام که بوسیله روش EBI یا QSSA در گام زمانی n ام محاسبه شده است و $Z_{i,n}^{LSODE}$ هم مقدار غلظت بدست آمده ذره در نظر گرفته شده توسط روش LSODE می‌باشد.

مطابق تعریف خطای مطلق، می‌توان خطای نسبی را به صورت رابطه ۳۱ بیان نمود:

$$RERR_i = \frac{DCMAX_i}{Z_{i,n}^{LSODE}} \times 100 \quad (31)$$

که در آن n_{max} گام زمانی است که بزرگترین اختلاف میان دو روش در آن رخ می‌دهد. [۳]

۴-۱- مقایسه عددی روشهای کلاسیک EBI و QSSA

در ابتدا به مقایسه روشهای کلاسیک QSSA و EBI پرداخته می‌شود. بدین منظور نتایج عددی برای ۱۰ ذره انتخابی در نمایش شیمیایی CBM4 با هر سه گام زمانی مختلف ۵۰ و ۱۰۰ و ۹۰۰ ثانیه محاسبه شده است. با این فرض که بزرگترین خطای مطلق $DCMAX$ برحسب واحد (ppb) و خطای نسبی (RERR)

برحسب واحد درصد می‌باشد با این توضیح که مقایسه عددی پارامترهای خطای مطلق و خطای نسبی میان الگوریتم های کلاسیک EBI0 و QSSA0 (بدون تکرار اصلاح گر) و روش های کلاسیک در نظر گرفته شده با تکرار اصلاح گر در هر گام زمانی صورت می‌گیرد. قابل توجه است که روشهای در نظر گرفته شده با تعداد تکرارهای اصلاح گر متفاوت مورد بررسی قرار گرفته اند. ولی این روشها با انجام ۵ تکرار گام اصلاح گر به دلیل داشتن دقت بالا و زمان محاسبه مناسب روشهای قابل قبولی می‌باشند. گفتنی است که انجام تکرارهای بیشتر گام اصلاح گر منجر به کسب زمان محاسبه بالاتری می‌گردد بنابراین با فرض اینکه روشهای QSSA5 و QSSA0 به ترتیب متناظر به ۵ تکرار اصلاحگر و بدون تکرار اصلاحگر در هر گام زمانی باشند نتایج بدست آمده در مورد نمایش CBM4 با ۲ روش EBI و QSSA به صورت جدول ۱ ارائه می‌شود.

این تجربه عددی نشان می‌دهد هر چه گام زمانی کوچکتر انتخاب شود، مقدار غلظت بدست آمده توسط روشهای کلاسیک QSSA5 و EBI5 دقیق‌تر و در نتیجه خطای مطلق کمتر و لذا خطای نسبی کمتری حاصل می‌شود. لذا در این جدول فقط به گزارش کوچکترین گام زمانی اکتفا می‌شود و خلاصه این تجربه عددی عبارت است از:

- ۱- با استفاده از یک گام زمانی کوچک $\Delta t = 50$ ثانیه، هر دو روش EBI و QSSA جوابهای دقیقی را ارائه می‌کنند.
- ۲- با افزایش گام زمانی و با در نظر گرفتن مقادیر اولیه غلظت متفاوت، روش EBI از دقت بالاتری نسبت به روش QSSA برخوردار می‌باشد.
- ۳- دقت روش QSSA وابستگی زیادی به روند تکرار اصلاحگر دارد و بدون تکرار اصلاحگر، روش QSSA از دقت بسیار ضعیفی برخوردار می‌باشد اما در روش کلاسیک EBI، تعداد تکرار گام اصلاحگر بوسیله دقت مورد نظر کنترل می‌گردد.
- ۴- با فرض یک گام زمانی کوچک روش EBI در انجام محاسبات از روش QSSA، تندتر می‌باشد. با افزایش گام زمانی، روش کلاسیک QSSA با یک تعداد تکرار گام اصلاحگر ثابت، ممکن است از روش EBI تندتر باشد ولی دقت مقادیر بدست آمده از این روش از نتایج عددی بدست آمده از روش EBI، بسیار کمتر می‌باشد.

۴-۲- چگونگی محاسبه دقت الگوریتم های ارائه شده [۳]

به منظور محاسبه دقت روشهای در نظر گرفته شده می‌توان خطای نسبی را به صورت رابطه ۲۲ تعریف نمود:

$$\text{err}_i(n) = \frac{Z_i^{\text{ref}} - Z_i^S}{Z_i^{\text{ref}}} \quad (22)$$

که در آن Z_i^{ref} و Z_i^S به ترتیب جواب حاصل از روش LSODE و جواب حاصل از روش در نظر گرفته شده S می‌باشد. بنابراین برای محاسبه دقت روشهای در نظر گرفته شده، می‌توان رابطه شماره ۲۳ را بدست آورد:

$$\langle \text{errg} \rangle = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^N \text{err}_i^2(n)} = 10^{-nd} \quad (23)$$

با این فرض که در آن n_d نشان دهنده تعداد رقم‌های درست یا به عبارت دیگر بیانگر دقت روش فوق می‌باشد. [۲]

۴-۳- مقایسه روشهای کلاسیک با الگوریتم‌های ارائه شده

[۳ و ۵]

در این قسمت به مقایسه عددی روشهای کلاسیک ارائه شده و روشهای DAFI و DAN در نمایش واکنش شیمیایی CBM4 پرداخته می‌شود. در ابتدا با به کار بردن روش DAFI و روش QSSA برای واکنش در نظر گرفته شده دیده می‌شود روش DAFI از دقت بالاتری نسبت به روش QSSA برخوردار می‌باشد ولی در هر صورت خطای عددی روش در نظر گرفته شده DAFI همچنان از مقدار ۱٪ بیشتر است و هر تلاشی برای کاهش این خطای عددی، منجر به افزایش تعداد تکرار k به منظور حل قید جبری خواهد شد که در پایان باعث افزایش زمان محاسبه می‌گردد. جدول (۲) ارتباط میان دقت و زمان محاسبه را در مورد روش کلاسیک QSSA و همچنین روش DAFI نشان می‌دهد. [۲]

همانطور که در جدول بالا دیده می‌شود روش DAFI (قسمت جبری با روش DAFI و قسمت دیفرانسیلی با استفاده از روش اویلر مرتبه اول) نسبت به روش کلاسیک QSSA از دقت بالاتری برخوردار می‌باشد ولی باز خطای عددی از ۱٪ بیشتر است به طور مشابه اگر از روش صریح با مرتبه بالاتری برای حل قسمت دیفرانسیلی (مربوط به ذرات کند) استفاده شود به مراتب مناسب تر می‌باشد تا اینکه از روش صریح با مرتبه پایین ولی از تعداد تکرار بیشتری برای حل قسمت جبری استفاده شود. اگر از روش DAN برای حل قسمت جبری استفاده شود، نتایج حاصل برای نمایش در نظر گرفته شده CBM4 عبارت است

ان.[۵]

روش DAN۴ نسبت به روش DAN۲ دارای زمان محاسبه بالاتری می باشد علت آن هم محاسبات بیشتر در قسمت دیفرانسیلی (مربوط به ذرات کند) است.[۵]

در روش DAN۱ بدلیل پایین بودن مرتبه همگرایی روش، نتایج عددی از همگرایی خوبی برخوردار نیستند ولی با افزایش مرتبه همگرایی در روش DAN۲، دقت قابل قبولی بدست می آید. به عنوان نمونه در مورد روش DAN۲ یا $N_{fac} = 1$ فقط با انجام ۲ تکرار خطای عددی کمتر از ۱٪ می گردد.[۵]

همچنین با بررسی روش DAN۴ (قسمت دیفرانسیلی یا روشی مرتبه ۴ انتگرالگیری می شود) دیده می شود که این روش از کارآمدی کمتری نسبت به روش DAN۲ با پارامترهای k (تعداد تکرار لازم برای حل قسمت جبری) و N_{fac} (تعداد گام های زمانی که ماتریس ژاکوبین ثابت فرض می شود) مشابه برخوردار می باشد. بنابراین به عنوان یک نتیجه گیری دیده می شود که روش DAN۲ یک روش بهینه با یک دقت قابل قبولی می باشد.

شایان گفتن است که برای الگوریتم EBI، دارای دقتی مشابه با روش در نظر گرفته شده DAF۱۲ می باشد.

گفتنی است که اینکه کدهای مربوط به محاسبات این مقاله با زبان برنامه نویسی فرترن ۷۷ تهیه شده و توسط کامپیوتر PC پنتیوم معمولی ۴ اجرا شده اند. زمان CPU گزارش شده در جدول ۲ همزمان با اجرای برنامه فرترن بدست آمده است.

۵- نتیجه

معادله دیفرانسیل ناشی از انتقال ذرات شیمیایی در اتمسفر بر مبنای جنبش شیمیایی آنها (ذرات سریع و کند) به دستگاه دیفرانسیل - جبری تبدیل می شود الگوریتم های ارائه شده DAN و DAF۱ (با توجه به افراز بندی مفروض ذرات شیمیایی) به منظور حل این دستگاه با روش های کلاسیک EBI و QSSA (که برای حل معادله دیفرانسیل مربوط، استفاده می شوند) مقایسه می گردند لذا به عنوان نتیجه پایانی حاصل از انجام همه آزمایشات و مقایسه عددی روش های ارائه شده باید دانست که روش DAF۱ با آنکه نسبت به روش های کلاسیک EBI و QSSA از دقت بالاتر و زمان محاسبه قابل قبول تری برخوردار است، ولی با این وجود روش تکرار نیوتن DAN به مراتب دارای دقت بالاتر و زمان محاسبه پایین تری نسبت به روش DAF۱ می باشد.

همچنین روش DAN۲ (قسمت دیفرانسیلی مربوط به ذرات کند با روشی از مرتبه دوم همگرایی و قسمت جبری وابسته به ذرات تند با استفاده از تابع تکرار نیوتن DAN محاسبه می گردد) ارتباط مناسبی بین دقت و زمان محاسبه برقرار می نماید. به عبارت دیگر به عنوان نتیجه حاصل از همه مقایسه ها دیده می شود که روش DAN۲ به منظور حل دستگاه دیفرانسیل - جبری ناشی از انتقال ذرات شیمیایی، یک روش بهینه با دقت و زمان محاسبه قابل قبولی می باشد.

همچنین با ارائه روش های پیشگو - اصلاحگر و تعریف خطای مطلق و خطای نسبی روش های فوق و بکار بردن این روش ها برای نمایش شیمیایی CBM۴ نتایجی با دقت مطلوب نسبت به سایر روش های کلاسیک بدست می آید. این روش ها با داشتن زمان محاسبه مشابه از دقت بالاتری نسبت به روش های کلاسیک برخوردار می باشد.

لازم به یادآوری است که در این مقاله تنها به بررسی عامل تبدیلات شیمیایی در انتقال ذرات موجود در اتمسفر پرداخته شده است. به همین ترتیب می توان نقش سایر عوامل مؤثر در انتقال ذرات شیمیایی را بررسی نمود.

در پایان باید اشاره کرد که گسترش دیگر سازوکارهای شیمیایی به روشی مشابه انجام می شود که اساس این روش ها، انتگرال گیری ضمنی از قسمت دیفرانسیلی (مربوط به ذرات کند) به جای انتگرال گیری صریح از ذرات در نظر گرفته شده می باشد. البته به دلیل ویژگی مدل های مرتبط با بحث این مقاله، بیشتر با دستگاه معادلات دیفرانسیل در بردارنده میلیون ها معادله روبرو شده که باید در یک بازه زمانی طولانی و با بیش از چند صد هزار گام زمانی حل گردد. بنابراین با حجم بسیار سنگینی از محاسبات روبرو بوده که نیازمند استفاده از روش های سریع حل عددی معادلات دیفرانسیل را می کند. البته در مدل های بسیار بزرگ استفاده از کدهای موازی نیز انکار ناپذیر است. تجزیه و تحلیل ارائه شده در این مقاله گر چه سهم اندکی در تشریح و مقایسه روش های روز دنیا دارد اما نگاهی به پیشرفت تند تحقیقات در دنیا [۱۱، ۱۲] می تواند انگیزه ای برای کار بیشتر در این زمینه در کشور باشد.

جدول (۲) نتایج بدست آمده برای روش QSSA و DAFI در نمایش CBM_۴ [۳]

method	K	دقت	زمان محاسبه کل	زمان محاسبه در هر گام
QSSA	-	۰/۴۵	۲	$5/2 \times 10^{-2}$
DAFI1	۱۰	۰/۷	۲	$5/2 \times 10^{-2}$
	۵۰	۰/۷۴	۵/۱	12×10^{-2}
DAFI2	۱۰	۱/۲	۲/۸	7×10^{-2}
	۵۰	۱/۲۷	۱۰	25×10^{-2}
DAFI4	۱	۰/۷۸	۴/۸	12×10^{-2}
	۱۰	۱/۴۲	۷/۲	18×10^{-2}

جدول (۱) - مقدار غلظت ۱۰ نرۀ انتخابی در نمایش CBM_۴ [۵]

Species	EBI5		EBI0		QSSA5		QSSA0	
	DCMAX	RERR	DCMAX	RERR	DCMAX	RERR	DCMAX	RERR
NO	$2/2 \times 10^{-2}$	-/۱۹	$1/31 \times 10^{-1}$	-/۲۹	$2/63 \times 10^{-1}$	۱/۴۶	$2/۰۹ \times 10^{-1}$	۲/۵۲
NO _۲	$2/1 \times 10^{-2}$	-/۱۵۲	$1/۸ \times 10^{-1}$	-/۲۱	$2/۰۶ \times 10^{-1}$	-/۴	$1/۴۵ \times 10^{-1}$	۲/۸۲
O _۳	$1/۲۹ \times 10^{-2}$	-/۲۷۲	$2/2 \times 10^{-1}$	-/۴۶	$1/2 \times 10^{-1}$	۱/۰۵	$-/۵۲ \times 10^{-1}$	۵/۰۴
OH	$1/۷۵ \times 10^{-2}$	-/۱۲۷	$2/۰۳ \times 10^{-1}$	-/۳۱	$1/۰۵ \times 10^{-1}$	۱/۶	$2/۸۴ \times 10^{-1}$	۸/۴۹
HO _۲	$۴/۵۱ \times 10^{-2}$	-/۱۲۲	$2/۶۳ \times 10^{-1}$	-/۲۷	$2/۰۲ \times 10^{-1}$	۱/۴۹	$1/۱۱ \times 10^{-1}$	۸/۱۷
PAN	$۷/۲۲ \times 10^{-2}$	-/۱۲	$1/۲۶ \times 10^{-1}$	-/۳۳	$۵/۸ \times 10^{-1}$	۱/۸۳	$2/۲۶ \times 10^{-1}$	۵/۸۳
NO _۳	$۷/۵۳ \times 10^{-2}$	-/۶۲۸	$۵/۳۹ \times 10^{-1}$	-/۹۲	$1/۳۲ \times 10^{-1}$	۲/۲۷	$۵/۹۵ \times 10^{-1}$	۱۰/۲۸
HNO _۳	$1/۲۹ \times 10^{-2}$	-/۰۴۵	$۴/۴۶ \times 10^{-1}$	-/۱۵	$2/۲۷ \times 10^{-1}$	-/۷۶	$1/۳۱ \times 10^{-1}$	۴/۳۶
HCHO	$۵/۷ \times 10^{-2}$	-/۱۲۲	$2/۱۱ \times 10^{-1}$	-/۱۹	$2/۰۷ \times 10^{-1}$	۱/۰۱	$۷/۸۲ \times 10^{-1}$	۴/۷۷
MGLY	$۴/۳۷ \times 10^{-2}$	-/۱۱۵	$۶/۵ \times 10^{-1}$	-/۲۷	$2/۸۲ \times 10^{-1}$	۱/۱۷	$1/۱۵ \times 10^{-1}$	۶/۱۹

۶- مراجع

- Verwer, J.C.; D. Simpson, Explicit method for stiff odes from atmospheric chemistry, Appl. Numer. Math. 18 (1995) 413-430. [۷]
- Verwer, J.H.; E. J. Spee, J. G. Blom, W.H. Hundsdorfer, A Second order Rosenbrock method applied to photochemical dispersion problems, SIAM J. Sci. Comput. 20(4) (1999) 1456-1480. [۸]
- Verwer, J.C.; M. Ven Loon, An evaluation of explicit pseudo-steady-state approximation schemes for stiff ODE systems from chemical kinetics, J. Comput. Phys. 113 (1994) 347-352. [۹]
- Young, T.R.; J. P. Boris, A numerical technique for solving stiff ODEs associated with chemical kinetics of reaction flow problems, J. Phys. Chem. 81 (1977) 2424. [۱۰]
- Zlatev, Z.; I. Dimov, Computational and numerical challenges in environmental modeling, Elsevier, 2006. [۱۱]
- Lirkov, I.; S. Margenov, J. Wasniewski, (Eds), Large scale scientific computing, Springer-Verlag, Berlin, 2008. [۱۲]
- Dabdub, D.; J. H. Seinfeld, Extrapolation techniques used in the solution of stiff odes associated with chemical kinetics of air quality models, Atmos. Environ 29(3) (1995) 403-410. [۱]
- Djouad, R.; B. Sportisse, Partitioning techniques for reduction in chemical kinetics, alpha: An automatic partitioning and lumping algorithm, Appl. Numer. Math. (2002). [۲]
- Djouad, R.; B. Sportisse, Solving reduced chemical models in air pollution modelling, Appl. Numer. Math 44 (2003) 49-81. [۳]
- Gery M.W., G.z. Whitten, J.P. Kilhis, M.C. Dodge, A photochemical kinetic mechanism for urban and regional scale computer modeling, J. Geophys. Res. 94 (1989) 12952-12956. [۴]
- Hertel, O.; R. Berkowicz, J. Christensen, Test of two numerical schemes for use in atmospheric transport - chemistry models, Atmos. Environ. A27 (16) (1993) 2591-2611. [۵]
- Hindmarsh, A.C.; ODE PACK, A systematized collection of ODE solvers, scientific computing, North-Holland, Amsterdam, 1983 pp.55-64. [۶]