



حل معادله دوبعدی پخش - واکنش ماندگار با استفاده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده

هادی ارجمندکركزلو¹، محمدحسین بازیار^{2*}، علیرضا یاسری³، امین موسایی⁴

- 1- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی عمران - مکانیک خاک و پی، دانشگاه یاسوج، یاسوج
 - 2- استادیار، مهندسی عمران - مکانیک خاک و پی، دانشگاه یاسوج، یاسوج
 - 3- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی عمران - مکانیک خاک و پی، دانشگاه شیراز، شیراز
 - 4- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه یاسوج، یاسوج
- * یاسوج، صندوق پستی 75918-74831، mhbazyar@yu.ac.ir

چکیده

در این تحقیق، از یک روش نیمه تحلیلی به نام روش المان محدود با مرز مقیاس شده برای حل معادله پخش - واکنش در حالت ماندگار با ضرایب پخش و زوال ثابت که کاربرد گسترده‌ای در مسائل انتقال آلودگی، مهندسی شیمی و انتقال حرارت دارد، استفاده می‌شود. این روش در دهه گذشته با موفقیت برای حل مسائل مختلف مهندسی مانند الاستودینامیک، مکانیک شکست و تراوش به کار گرفته شده است. این روش مزایای هر دو روش المان محدود و المان مرزی را هم‌زمان داراست. شبکه بندی فقط روی مرزها صورت می‌گیرد؛ بنابراین ابعاد مسئله به اندازه یک واحد کاهش می‌یابد، اما برخلاف روش المان مرزی، نیازی به حل معادلات بنیادی پیچیده نیست. درونیابی در مرزها همانند روش المان محدود با استفاده از توابع شکل تقریب زده می‌شود. این روش نقاط تکین، مسائل ناهمسان و ناهمگنی که شرط تشابه را ارضا کنند، به خوبی مدل سازی می‌کند و همچنین قادر به ارضاء شرایط مرزی در بی‌نهایت (شرط تابشی) برای تسخیر دامنه‌های نامحدود است. در این تحقیق ابتدا فرمولاسیون روش المان محدود با مرز مقیاس شده برای حل معادله پخش - واکنش ارائه و سپس معادلات به کمک روشی پیشنهادی حل خواهند شد. دقت و عملکرد این روش با استفاده از سه نمونه عددی بررسی می‌شود. نتایج نشان می‌دهند که جواب‌های روش المان محدود با مرز مقیاس شده هم‌خوانی مناسبی با جواب‌های تحلیلی و عددی پرکاربرد دارد.

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 13 دی 1393
پذیرش: 06 فروردین 1394
ارائه در سایت: 05 اردیبهشت 1394
کلید واژگان:
روش المان محدود با مرز مقیاس شده
پخش
واکنش
شبکه بندی

A Scaled Boundary Finite-Element Solution to Two-Dimensional Steady-State Reaction-Diffusion Equation

Hadi Arjmand Karkazloo¹, Mohammad Hossein Bazyar^{1*}, Ali Reza Yaseri², Amin Moosaie³

- 1- Department of Civil Engineering, Yasouj University, Yasouj, Iran
 - 2- Department of Civil Engineering, Shiraz University, Shiraz, Iran
 - 3- Department of Mechanical Engineering, Yasouj University, Yasouj, Iran
- * P.O.B. 75918-74831 Yasouj, Iran, mhbazyar@yu.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 03 January 2015
Accepted 99 January 9999
Available Online 25 April 2015

Keywords:
Scaled Boundary Finite-Element Method
Diffusion
Reaction
Discretization

ABSTRACT

A semi-analytical method, the so-called Scaled Boundary Finite-Element Method (SBFEM) is employed for solving two-dimensional steady-state reaction-diffusion equation with constant diffusion and decay coefficients which are widely used in contaminant transfer, chemical engineering and heat transfer problems. This method has been successfully applied to various problems of engineering such as elastodynamics, fracture mechanics and seepage. This method has the advantages of both boundary element method and finite-element method. Only the boundary is discretized reducing the spatial dimension by one. Unlike the boundary element method no fundamental solution is required. Interpolation over the boundaries is approximated using shape functions the same as in the finite-element method. Singularities, anisotropic problems, non-homogeneities satisfying similarity and radiation condition at infinity used in modeling unbounded domains are simply modeled by this technique. In this study, after derivation of the scaled boundary finite-element formulations for reaction-diffusion equation, the equations are solved using the proposed solution procedures. The accuracy and performance of the SBFEM is evaluated using three numerical examples. Reasonable agreement exists between the results of the scaled boundary finite-element method, the analytical solutions and the popular numerical approaches.

آلودگی است که در دسته معادلات بیضوی¹ طبقه بندی می‌شود. این معادله

1- مقدمه

معادله پخش - واکنش ماندگار یکی از معادلات پرکاربرد در انتقال حرارت و

1- Elliptic Equations

Please cite this article using:

H. Arjmand Karkazloo, M.H. Bazyar, A.R. Yaseri, A. Moosaie, A Scaled Boundary Finite-Element Solution to Two-Dimensional Steady-State Reaction-Diffusion Equation, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 6, pp. 197-208, 2015 (In Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

اول، دوم و سوم بود. ژانگ و همکاران [14] روشی برای تخمین خطاهای ایجاد شده در روش المان محدود برای حل معادله پخش با واکنش خطی ارائه کردند. بلایت و پوزریکیدیس [15] معادله هلمهولتز را با استفاده از روش المان محدود و روش المان مرزی برای شرایط مرزی و ضرایب مختلف بررسی کردند. در شرایط مرزی یکسان، با تغییر ضرایب معادله، جواب‌های به دست آمده از روش المان مرزی به جز در مواردی که منجر به مسئله مقادیر ویژه می‌شوند، دارای دقت بالاتری نسبت به روش المان محدود بودند، ولی زمانی که حل مسئله منجر به مسئله مقادیر ویژه می‌شد، روش المان محدود با دقت بالاتری نسبت به روش المان مرزی جواب‌ها را پیش‌بینی می‌کرد. لولا و همکاران [16] روش المان محدود ناپیوسته⁹ را برای حل معادله هلمهولتز در فرکانس‌های بالا ارائه کردند. ایشان موفق شدند تأثیر آلودگی را که با افزایش فرکانس در مسائل اکوستیک بیشتر می‌شود، کاهش دهند. روش ارائه شده توسط ایشان برای مسائل با شبکه‌بندی منظم دارای دقت بالایی بود، ولی برای شبکه‌بندی نامنظم دقت بالایی نداشت. علاوه بر استفاده از روش‌های فوق پاتیلا و همکاران [17]، چی و همکاران [18] و چن و همکاران [19] با بهره‌گیری از ال. بی. ام¹⁰ معادله پخش-واکنش را حل کردند. هون و همکاران [20] از سیستم معادلات کوپل شده پخش-واکنش برای مدل‌سازی اندرکنش میان انواع متفاوت مواد شیمیایی به‌ویژه اندرکنش میان آران¹¹ یک پیامی در سلول‌های بیولوژیکی استفاده کردند. روش معادله انتگرالی محلی بدون شبکه برای شبیه‌سازی عددی ساخت الگوی دو بعدی در سیستم‌های پخش-واکنش غیرخطی توسط اسلادک و همکاران [21] مورد استفاده قرار گرفت. بامیک [22] با استفاده از روش کمین پس‌مانده تعمیم‌یافته بدون پیش‌شرط چند شبکه‌ای¹² سیستم‌های پخش-واکنش مختلف مورد استفاده در مهندسی و علوم را مدل‌سازی کرد. روش چند مقیاسی سه‌بعدی به منظور بررسی تأثیر ساختار درونی کاتالیست بر نرخ‌های تبدیل اکسیداسیون مونواکسید کربن برای مدل‌سازی حمل و واکنش در لایه‌های کاتالیست متخلخل ایزوترمال توسط پیرا و همکاران [23] مورد استفاده قرار گرفت.

به هر حال هر کدام از روش‌های عددی دارای نقاط ضعف و قوت خاصی است. برای نمونه، در روش المان محدود و روش تفاضل محدود فارغ از قدرت بالای آن‌ها در تحلیل مسائل، نیاز به شبکه‌بندی کل دامنه مسئله است که منجر به افزایش تعداد درجات آزادی و هزینه محاسباتی می‌شود و همچنین سرعت هم‌گرایی پاسخ‌های منتج از این روش‌ها در تحلیل نقاط تکیه بسیار پایین است. این مشکل در روش المان مرزی تا حدی پوشش داده شده و شبکه‌بندی فقط در مرزها انجام می‌شود، ولی در روش المان مرزی نیاز به حل بنیادین است که منجر به پیچیده‌تر شدن معادلات شده و در برخی موارد نیز حل آن‌ها غیرممکن می‌شود. از آن‌جا که روش جدید و نیمه‌تحلیلی المان محدود با مرز مقیاس شده تا به حال برای حل مسائل پخش-واکنش استفاده نشده است و همچنین با توجه به توانایی‌های منحصربه‌فرد این روش که قادر است برخی ضعف‌های روش‌های عددی که تا کنون برای حل معادله پخش-واکنش ارائه شده است را پوشش دهد. در این مقاله از این روش برای حل معادله پخش-واکنش استفاده می‌شود. این روش در دهه گذشته به‌طور موفقیت‌آمیزی برای تحلیل مسائل مختلف مهندسی از جمله الاستودینامیک، مکانیک شکست و تراوش مورد استفاده قرار گرفته و عملکرد قابل‌پذیرشی از

در مسائل فیزیکی و مهندسی مانند انتقال موج، پدیده‌های لرزه‌ای، انتقال جرم، امواج تابشی، صوت‌شناسی اکوستیک¹ و هوانوردی تحت عنوان معادله هلمهولتز² مورد استفاده قرار می‌گیرد [1]. به دلیل کاربرد زیاد این معادله طی سال‌های گذشته تحقیقات زیادی در این زمینه انجام شده و روش‌های مختلفی برای حل معادله پخش-واکنش با ضرایب ثابت و متغیر ارائه شده است. در یک تقسیم‌بندی کلی می‌توان این روش‌ها را به روش‌های تحلیلی و روش‌های عددی تقسیم کرد. هایشی [2] با استفاده از روش تحلیلی معادله دو بعدی هلمهولتز را برای شرایط مرزی نوع اول از نظر تکیگی³ بررسی کرد. آنجل و کلین من [3] از تابع گرین اصلاح‌شده برای حل تحلیلی معادله هلمهولتز با شرط مرزی نوع سوم استفاده کردند. بارانوال و همکاران [4] یک روش تحلیلی برای حل معادله پخش و واکنش غیرخطی با کسرهای زمانی⁴ ارائه دادند. راموس و سولر [5] سیستم معادلات پخش و واکنش غیرخطی را با بهره‌گیری از تجزیه دامنه مسئله به زیر دامنه‌ها و روش تتا⁵ بررسی کردند. کولون [6] با استفاده از روش تکرار، معادله هلمهولتز را برای شرط مرزی نوع اول و فرکانس‌های پایین حل کرد. مارین [7] معادله دو بعدی هلمهولتز و هلمهولتز اصلاح شده را با استفاده از روش حل اساسی⁶ از نظر تکیگی در مرزها مورد بررسی قرار داد. اغلب روش‌های معمولی ارائه‌شده برای حل معادله هلمهولتز، در اعداد موج بالا دچار مشکل می‌شوند که اصطلاحاً به «تأثیر آلودگی»⁷ معروف است. هی و همکاران [8] یک روش برای حل این مشکل ارائه کردند که تنها مشکل مهم روش آن‌ها پیچیده‌تر بودن آن برای تعمیم به حالت سه‌بعدی بود. چن و همکاران [9] از یک روش جدید و با بهره‌گیری از روش لایه جذب کامل⁸ که برای نخستین بار توسط برنگر [10] ارائه شد، برای حل معادله پخش همراه با واکنش خطی استفاده کردند. روش‌های تحلیلی دارای محدودیت زیادی بوده و عموماً برای تحلیل مسائل با مصالح همگن و همسان که دارای هندسه ساده هستند کاربرد دارند و برای تحلیل مسائل پیچیده باید از روش‌های عددی بهره گرفت. به عنوان پرکاربردترین روش‌های عددی که برای تحلیل مسائل پخش-واکنش کاربرد دارند، می‌توان به روش تفاضل محدود، روش المان مرزی و روش المان محدود اشاره کرد. مرور کامل پیشینه تحقیق روش‌های عددی مذکور خارج از حوصله این تحقیق است و در این بخش تنها به چند نمونه از تحقیقات انجام‌شده در این زمینه که از روش‌های عددی فوق بهره گرفته‌اند، اشاره می‌شود. کومار و چاندرا [11] با استفاده از روش تفاضل محدود و با بهره‌گیری از فنون تجزیه دامنه به زیردامنه‌ها معادله پخش-واکنش غیرماندگار را حل کردند. ایشان برای تقریب زمان و مکان به ترتیب از تقریب مرتبه اول و دوم استفاده کردند و توانستند به جواب‌های یکنواخت و با سرعت هم‌گرایی بالا دست یابند. روش تفاضل محدود مرتبه ششم توسط سوتمن [12] برای حل معادله هلمهولتز به کار گرفته شد. ایشان برای این کار، معادله حاکم و شرایط مرزی مسئله را با استفاده از روش حل اساسی تقریب زد. او توانست مسائل با گوشه‌های تیز و ترک‌دار را با دقت بالایی مدل‌سازی کند. بالاکریشن و رامچاندرا [13] معادله پخش-واکنش را با استفاده از روش المان مرزی برای شرایط مرزی غیریکنواخت و هندسه‌های نامنظم و ناهموار حل کردند. از جمله مزایای روش، توانایی آن در تحلیل نقاط تکیه با شرایط مرزی نوع

- 1- Acoustic
- 2- Helmholtz Equation
- 3- Singularity
- 4- Time Fractional Nonlinear Reaction-Diffusion Equation
- 5- θ - Method
- 6- Method of Fundamental Solutions
- 7- Pollution Effect
- 8- Perfectly Matched Layer

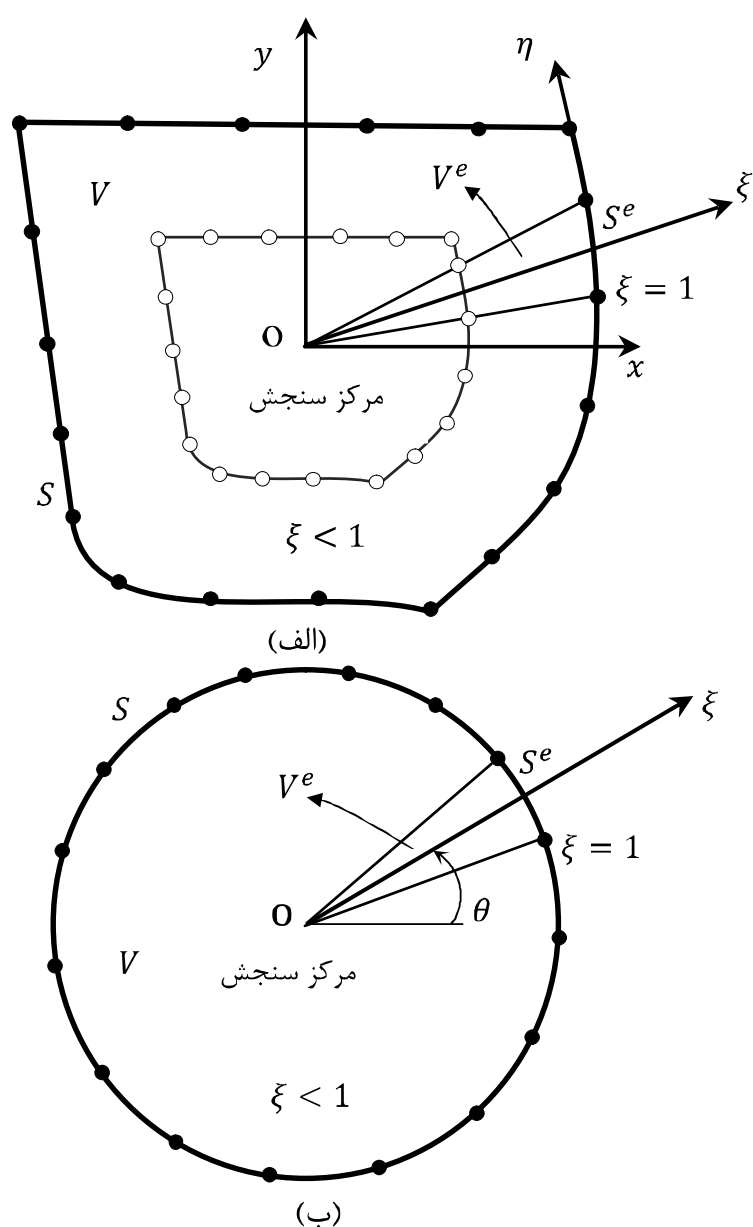
9- Discontinuous Finite Element Method
10- Lattice Boltzmann Method
11- RNA
12- GMRES

رؤیت باشد. این نقطه مرکز سنجش (نقطه 0 در شکل 1) نامیده شده و به عنوان مبدأ مختصات روش المان محدود با مرز مقیاس شده در نظر گرفته می شود. اگر برای مسائل با هندسه پیچیده یافتن چنین نقطه ای ممکن نباشد، مانند شکل 2 دامنه به دو یا چند زیر دامنه تقسیم می شود و برای هر کدام یک مرکز مقیاس در نظر گرفته می شود. سپس دامنه مسئله از سیستم مختصات کارتزین به سیستم مختصات شعاعی ξ و محیطی η انتقال می یابد که این تبدیل در شکل 1 نمایش داده شده است. مختصات شعاعی از مقدار $\xi = 0$ در مرکز سنجش تا مقدار $\xi = 1$ در مرزها تغییر می کند. مرز مسئله مانند مراحل گسسته سازی دامنه مسئله در روش المان محدود، شبکه بندی می شود، به این صورت که در مسائل دوبعدی، مسئله فقط در جهت محیطی η شبکه بندی می شود و همانند المان های ایزوپارامتریک روش اجزا محدود، برای هر المان مقدار η از منفی یک تا مثبت یک تغییر می کند. مقادیر متغیر مسئله در مرزها با استفاده از توابع شکل تقریب زده می شوند؛ بنابراین، این روش منجر به حل تقریبی در جهت محیطی η خواهد شد، اما به دلیل این که در جهت شعاعی ξ تقریب صورت نگرفته و حل معادله به صورت تحلیلی و دقیق است در نتیجه روش المان محدود با مرز مقیاس شده یک روش نیمه تحلیلی است.

3- فرمولاسیون روش المان محدود با مرز مقیاس شده

3-1- معادله حاکم

رابطه (1) به طور طبیعی در حل مسائل گوناگون مهندسی مانند مسائل موج، الکترو استاتیک و انتقال آلودگی ظاهر می شود.



شکل 1 چگونگی مدل سازی و دستگاه مختصات روش المان محدود با مرز مقیاس شده الف- مرکز سنجش و مش بندی مرز ب- هندسه محیط انتقال یافته

خود نشان داده است؛ بنابراین اعمال روش المان محدود با مرز مقیاس شده در مسائل پخش - واکنش و انتقال آلودگی علاوه بر معرفی آن به عنوان یک روش قدرتمند در حل مسائل انتقال آلودگی، موجب استفاده از قابلیت های مفید این روش توسط محققین خواهد شد.

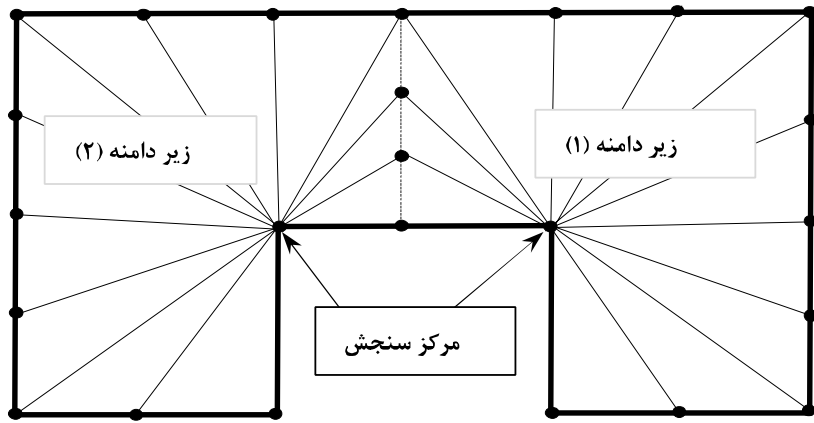
روش المان محدود با مرز مقیاس شده، یک روش نیمه تحلیلی و نسبتاً جدید، برای حل معادلات با مشتقات جزئی است که در سال 1996 توسط ولف و سانگ [24] ابداع شد. در مراحل آغازین پیدایش روش المان محدود با مرز مقیاس شده، از آن برای محاسبه سختی دینامیکی حوزه های نامحدود استفاده می شد، بعدها این روش توسعه بیشتری یافت و برای تحلیل مصالح تراکم ناپذیر و حوزه های محدود و مسائل شامل بارهای حجمی به کار گرفته شد [25]. روش اولیه ای که برای استخراج معادلات این روش به کار گرفته شده بود، روش مکانیکی و پیچیده ای بود. این پیچیدگی موجب شد که معادلات این روش با تکنیک باقی مانده وزن دار گالرکین [26] و روش کار مجازی [27] به دست آید. در مرجع [28]، فرمول بندی روش برای معادله دوبعدی و اسکالر انتشار موج ارائه شده است. در یک مجموعه مقالات، بازیار و سانگ [29-31] روش های اولیه این روش را برای مدل سازی محیط های نامحدود که در تحلیل دینامیکی مسائل اندرکنش خاک و سازه مورد نیاز است، توسعه دادند. بازیار و گرایلی [32] معادله تراوش ماندگار را با این روش حل کردند. بازیار و طالبی [33]، معادله تراوش غیرماندگار را با این روش حل کردند. یاسری و همکاران [34] با استفاده از این روش، لرزش های تونل و محیط اطراف آن در اثر حرکت قطارهای شهری را در حالت سه بعدی بررسی کردند. این روش مزایای دو روش اجزای محدود و اجزای مرزی را با هم ترکیب می کند، بدین صورت که همانند روش اجزای مرزی شبکه بندی فقط روی مرزها صورت می گیرد. در این روش کل دامنه محاسباتی مسئله بر مرز مقیاس شده و مرز نماینده کل مسئله است، بنابراین ابعاد مسئله به اندازه یک واحد کاهش می یابد و در نتیجه هزینه محاسباتی نیز نسبت به روش های تفاضل محدود و المان محدود کاهش یافته و سرعت محاسبات افزایش می یابد، ولی برخلاف روش اجزای مرزی نیاز به حل بنیادین نیست. یکی از مزیت های منحصر به فرد روش المان محدود با مرز مقیاس شده، قدرت فوق العاده این روش در تحلیل مسائل شامل مصالح ناهمگن و مسائل شامل گوشه های تیز است.

به طور خلاصه، عدم نیاز به شبکه بندی کل دامنه، ارضاء دقیق شرایط مرزی در بی نهایت، عدم نیاز به حل انتگرال های بنیادی، دقت بالا در تحلیل مسائل گوشه تیز و دارای نقاط تکین، عدم نیاز به شبکه بندی وجوه کناری و مرز بین مصالح ناهمگن در صورت رویت مرزها از مرکز مقیاس، دقیق بودن پاسخ ها در مرز بین مصالح متفاوت و دقیق بودن پاسخ ها در جهت شعاعی از جمله مزایای مهم روش المان محدود با مرز مقیاس شده است.

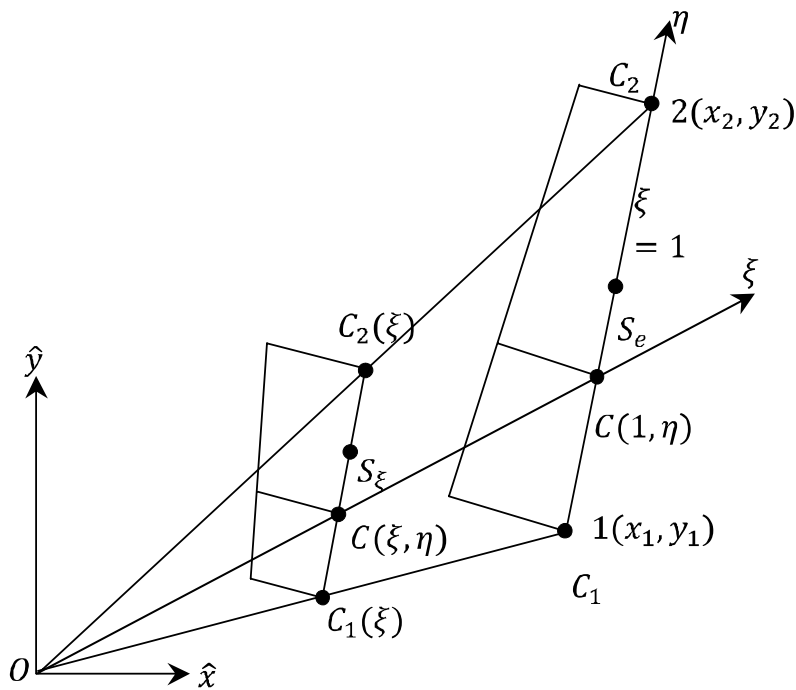
ساختار مقاله بدین صورت خلاصه می شود: در بخش (2) مفهوم روش المان محدود با مرز مقیاس شده به صورت خلاصه بیان می شود. در بخش (3) معادله حاکم و فرمولاسیون روش تشریح می شود. سپس روند حل معادلات به دست آمده در بخش (4) ارائه می شود. در بخش (5) عملکرد روش ارائه شده با استفاده از سه نمونه عددی و تحلیلی ارزیابی می شود و در نهایت در بخش (6) نتیجه گیری بیان خواهد شد.

2- روش المان محدود با مرز مقیاس شده

برای شبیه سازی مسائل با روش المان محدود با مرز مقیاس شده ابتدا نقطه ای در داخل دامنه انتخاب می شود که تمامی مرزهای حوزه از این نقطه قابل



شکل 2 شبیه‌سازی عددی به کمک روش المان محدود با مرز مقیاس شده با تقسیم دامنه به دو زیردامنه



شکل 3 مقادیر غلظت در دستگاه المان محدود با مرز مقیاس شده

برای به دست آوردن معادلات المان محدود با مرز مقیاس شده، ابتدا به کمک ماتریس ژاکوبین و دترمینان آن عملگر دیفرانسیلی $\{L\}$ به سیستم مختصاتی المان محدود با مرز مقیاس مطابق رابطه (9) انتقال داده می‌شود.

$$\{L\} = [b^1(\eta)] \frac{\partial}{\partial \xi} + [b^2(\eta)] \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (9)$$

که در آن:

$$[b^1(\eta)] = \frac{1}{|J|} \begin{Bmatrix} y(\eta)_{,\eta} \\ -x(\eta)_{,\eta} \end{Bmatrix} \quad (10-الف)$$

$$[b^2(\eta)] = \frac{1}{|J|} \begin{Bmatrix} -y(\eta) \\ x(\eta) \end{Bmatrix} \quad (10-ب)$$

بنابراین با استفاده از روابط (8-10)، رابطه (5) به صورت رابطه (11) بازنویسی می‌شود.

$$\{q(\xi, \eta)\} = -[D] \left([B^1] \{C(\xi)\}_{,\xi} + \frac{1}{\xi} [B^2] \{C(\xi)\} \right) \quad (11)$$

که در آن:

$$[B^1] = [b^1][N(\eta, \zeta)] \quad (12-الف)$$

$$[B^2] = ([b^2][N(\eta)])_{,\eta} \quad (12-ب)$$

3-3- تقریب المان محدود در جهت محیطی با روش باقی مانده‌های وزنی

با اعمال روش باقی مانده‌های وزنی در رابطه (3) به رابطه (13) می‌رسیم.

$$\int_A [w]^T \{L\}^T \{q\} dA + \theta \int_A \{w\}^T \{C\} dA = 0 \quad (13)$$

با جای‌گذاری روابط (5)، (9) و (11) در معادله (13) و اعمال انتگرال‌گیری جزء به جزء در آن، رابطه (14) را خواهیم داشت.

$$[E^0] \xi^2 \{C(\xi)\}_{,\xi\xi} + ([E^0] - [E^1] + [E^1]^T) \xi \{C(\xi)\}_{,\xi} - [E^2] \{C(\xi)\} - \theta [E^3] \xi^2 \{C(\xi)\} + \{F(\xi)\} = 0 \quad (14)$$

برای نمونه در حل مسائل موج که در آن $\kappa = \frac{i\omega}{c_0}$ عدد موج در محیط انتشار است (فرکانس موج و c_0 سرعت نور یا صداست). یا در حل معادله پواسون - بولتزمن خطی شده¹ معادله بالا ظاهر می‌شود که در این حالت $\kappa = q_e^2 \sqrt{\frac{8\pi\rho c}{\epsilon}}$ است (q_e شارژ یونی، c غلظت یون‌ها، ϵ ثابت دی‌الکتریک حلال و ρ معکوس انرژی دمایی² است) [4].

$$\nabla^2 C - \kappa^2 C = 0 \quad (1)$$

در این تحقیق، معادله دوبعدی پخش-واکنش خطی که در بحث انتقال آلودگی مطرح است، به صورت رابطه (2) بررسی می‌شود.

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \theta C = 0 \quad (2)$$

که در آن θ ضریب زوال (ضریب واپاشی رادیواکتیوی)، C غلظت آلاینده، D_x و D_y ضریب پخش مولکولی به ترتیب در جهت x و y است. در این مقاله هر سه ضریب مزبور به صورت عدد ثابت در نظر گرفته می‌شوند. رابطه (2) به صورت رابطه (3) باز نویسی می‌شود.

$$\{L\}^T \{q\} + \theta C = 0 \quad (3)$$

که در آن:

$$\{L\} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y} \right\} \quad (4)$$

$$\{q\} = -[D] \{L\} C \quad (5)$$

در طول این تحقیق علامت $\{a\}$ و $[a]$ به ترتیب نشان‌دهنده بردار و ماتریس $\{L\}$ ، عملگر دیفرانسیلی و $\{q\}$ فلاکس جریان گرهی آلاینده است.

2-3- فرمولاسیون روش برای مسائل پخش - واکنش

در روش اجزاء محدود با مرز مقیاس شده، همان‌گونه که در شکل 1 نشان داده شد، دامنه مسئله از دستگاه مختصات کارتزین به دستگاه مختصات اجزای محدود با مرز مقیاس شده شامل ξ و η انتقال می‌یابد. مختصات نقطه‌ای واقع بر یک المان بر مرز مطابق رابطه (6) به دست می‌آید.

$$x(\eta) = [N(\eta)] \{x\} \quad (6-الف)$$

$$y(\eta) = [N(\eta)] \{y\} \quad (6-ب)$$

و مختصات یک نقطه درون دامنه با مقیاس کردن مختصات نقطه متناظر آن واقع بر المان بر مرز، مطابق رابطه (7) به دست می‌آید.

$$\hat{x}(\xi, \eta) = \xi x(\eta) = \xi [N(\eta)] \{x\} \quad (7-الف)$$

$$\hat{y}(\xi, \eta) = \xi y(\eta) = \xi [N(\eta)] \{y\} \quad (7-ب)$$

با توجه به رابطه (7) تفاوت اصلی این روش با روش المان محدود در این است که توابع شکل در روش المان محدود تابعی از هر دو مختصات شعاعی و محیطی است $[N(\xi, \eta)]$ ولی توابع شکل در روش المان محدود با مرز مقیاس شده فقط تابعی از مختصات محیطی است $[N(\eta)]$. در روش المان محدود با مرز مقیاس شده، به دنبال یک پاسخ تقریبی به صورت رابطه (8) است که بتواند معادله پخش همراه با واکنش را ارضا کند.

$$\hat{C}(\xi, \eta) = [N(\eta)] \{C(\xi)\} \quad (8)$$

توابع شکل را می‌توان به صورت محلی، با استفاده از روش معمول المان محدود روی المان خطی تعریف کرد. همان‌گونه که در شکل 3 نمایش داده شده است، با در نظر گرفتن n نقطه روی مرز، بردار $\hat{C}(\xi)$ دارای n تابع گره‌ای خواهد بود که این توابع، مشابه توابع گرهی در روش المان محدود است. مقادیر غلظت در نقاط گره‌ای و در جهت محیطی و برای هر مقداری از ξ ، با استفاده از توابع شکل درون‌یابی می‌شوند.

1- Linearized Poisson-Boltzmann Equation
2- Inverse Thermal Energy

با جای گذاری $\theta = 0$ در رابطه (14) به رابطه (21) می‌رسیم.

$$[E^0]\xi^2\{C(\xi)\}_{\xi\xi} + ([E^0] - [E^1] + [E^1]^T)\xi\{C(\xi)\}_{\xi} - [E^2]\{C(\xi)\} = 0 \quad (21)$$

به کمک مسئله مقادیر ویژه ماتریس همیلتونی $[Z]$ (رابطه (22)):

$$[Z] = \begin{bmatrix} [E^0]^{-1}[E^1]^T & -[E^0]^{-1} \\ -[E^2] + [E^1][E^0]^{-1}[E^1]^T & -[E^1][E^0]^{-1} \end{bmatrix} \quad (22)$$

مطابق رابطه (23):

$$[Z][\Phi] = -[\Phi][\lambda] \\ = - \begin{bmatrix} [\Phi_{11}] & [\Phi_{12}] \\ [\Phi_{21}] & [\Phi_{22}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -[\lambda_i] \\ [\lambda_i] \end{bmatrix} \quad (23)$$

پاسخ عمومی رابطه (21) برای غلظت و نرخ جریان به صورت رابطه (24) خلاصه می‌شود.

$$C(\xi) = [\Phi_{11}][\xi^{-\lambda_i}]\{c_1\} + [\Phi_{12}][\xi^{\lambda_i}]\{c_2\} \quad (24-الف)$$

$$Q(\xi) = [\Phi_{21}][\xi^{-\lambda_i}]\{c_1\} + [\Phi_{22}][\xi^{\lambda_i}]\{c_2\} \quad (24-ب)$$

که در آن بخش حقیقی همه ترم‌های λ_i منفی است. ثابت‌های انتگرال با توجه به شرایط مرزی، به دست می‌آیند. برای حوزه محدود مقدار $C(\xi)$ در $\xi = 0$ باید متناهی باشد؛ بنابراین مقدار $\{c_2\}$ صفر خواهد بود. در نتیجه رابطه (24) به صورت رابطه (25) در می‌آید.

$$C(\xi) = [\Phi_{11}][\xi^{-\lambda_i}]\{c_1\} \quad (25-الف)$$

$$Q(\xi) = [\Phi_{21}][\xi^{-\lambda_i}]\{c_1\} \quad (25-ب)$$

مقدار $\{c_1\}$ با توجه به مقدار غلظت روی مرزها به دست می‌آید. از طرفی رابطه بین مقادیر غلظت و نرخ جریان در روی مرزها با رابطه (26) بیان می‌شود.

$$Q(\xi = 1) = [K]C(\xi = 1) \quad (26)$$

با مقایسه روابط (25) و (26) مقدار $[K_D]$ ، با رابطه (27) به دست می‌آید.

$$[K_D] = [\Phi_{21}][\Phi_{11}]^{-1} \quad (27)$$

در مرحله بعد فرض می‌کنیم که $\theta \neq 0$ باشد، سپس با جای گذاری معادله (19) در رابطه (18) یک عبارت بدون ضریب θ ، یک عبارت با ضریب θ و یک عبارت با ضریب θ^2 که از آن صرف نظر می‌شود، به دست می‌آید. عبارت مستقل از θ همان معادله (18) با ماتریس سختی $[K_D]$ با فرض $\theta = 0$ است که حاصل آن صفر است. در نتیجه فقط عبارت با ضریب θ به صورت رابطه (28) باقی می‌ماند.

$$((-[K_D] + [E^1])[E^0]^{-1})[K_R] + [K_R]([E^0]^{-1}(-[K_D] + [E^1]^T)) + [E^3] = 0 \quad (28)$$

معادله (28)، معادله لیاپانوف¹ است که برای حل آن، ماتریس داخلی معادله (23) (ترم‌های متناظر با $[\Phi_{11}]$) با استفاده از معادله (22) در $[\Phi_{11}]^{-1}$ پس ضرب می‌شود و در نتیجه، رابطه (29) به دست می‌آید.

$$[E^0]^{-1}(-[K_D] + [E^1]^T) = [\Phi_{11}][\lambda_i][\Phi_{11}]^{-1} \quad (29)$$

که در آن، ماتریس $[K_D]$ با استفاده از رابطه (27) از پیش به دست آمده است. با جای گذاری رابطه (29) در معادله (28)، رابطه (30) به دست می‌آید.

$$-([\Phi_{11}]^{-1})^T[\lambda_i][\Phi_{11}]^T[K_R] - [K_R][\Phi_{11}][\lambda_i][\Phi_{11}]^{-1} + 2[K_R] = [E^3] \quad (30)$$

با پیش‌ضرب معادله (30) در $[\Phi_{11}]^T$ و پس ضرب در $[\Phi_{11}]$ ، رابطه (31) را خواهیم داشت.

$$([I] - [\lambda_i])k_r + k_r([I] - [\lambda_i]) = [\Phi_{11}]^T[E^3][\Phi_{11}] \quad (31)$$

که در آن:

$$[k_r] = [\Phi_{11}]^T[E^3][\Phi_{11}] \quad (32)$$

معادله (31) با جای گذاری ساده حل می‌شود، و با توجه به این که بخش حقیقی $[\lambda_i]$ منفی است؛ بنابراین معادله همیشه دارای جواب است؛ پس ماتریس سختی مرحله دوم به صورت رابطه (33) به دست می‌آید:

که در رابطه (14) برای پرهیز از پیچیدگی روابط، ماتریس ضرایب مستقل از ξ به صورت رابطه (15) معرفی می‌شوند. رابطه (14)، که یک معادله دیفرانسیلی معمولی ناهمگن است، معادله المان محدود با مرز مقیاس شده برای غلظت نامیده می‌شود (وجود $\{F(\xi)\}$ در رابطه موجب ناهمگنی معادله (14) شده است).

$$[E^0] = \int_{\eta} [B^1]^T[D][B^1]J|d\eta \quad (15-الف)$$

$$[E^1] = \int_{\eta} [B^2]^T[D][B^1]J|d\eta \quad (15-ب)$$

$$[E^2] = \int_{\eta} [B^2]^T[D][B^2]J|d\eta \quad (15-ج)$$

$$[E^3] = \int_{\eta} [N(\eta)]^T[N(\eta)]J|d\eta \quad (15-د)$$

$$\{F(\xi)\} = [N(\eta)]^T J | [b^2]^T \{q\} |_{\eta} \quad (15-ه)$$

با توجه به فرضیات و روند استخراج معادلات، واضح است که در روش اجزای محدود با مرز مقیاس شده، معادله پخش - واکنش فقط در جهت محیطی با استفاده از توابع شکل تقریب زده شده است؛ بنابراین در جهت محیطی ضعیف شده، ولی در جهت شعاعی، تقریب صورت نگرفته و به شکل قوی باقی مانده است. در ادامه، نحوه به دست آوردن ماتریس سختی و روند حل رابطه (14) ارائه می‌شود.

3-4- ماتریس سختی

با استفاده از تعریف کار مجازی دامنه فلاکس گرهی $\{Q(\xi)\}$ با رابطه (16) بیان می‌شود [35].

$$\{Q(\xi)\} = - \int_{ds\xi} [N(\eta)]^T [b^1]^T \{q\} \xi J | d\eta \quad (16)$$

برای حذف بارهای گرهی، رابطه (16) به صورت رابطه (17) بازنویسی می‌شود:

$$[K(\xi)]\{C(\xi)\} = \int_{ds\xi} [N(\eta)]^T [b^1]^T \{q\} \xi J | d\eta \quad (17)$$

که در آن $[K(\xi)]$ ماتریس سختی است.

با جای گذاری رابطه (11) در رابطه (17) و استفاده از روابط (15) و با جای گذاری $\xi = 1$ برای مرزها، معادله ماتریس سختی استاتیکی، به صورت معادله (18) به دست می‌آید.

$$[K^b][E^0]^{-1}[K^b] - ([E^1][E^0]^{-1})[K^b] - [K^b]([E^0]^{-1}[E^1]^T) + [E^1][E^0]^{-1}[E^1]^T - [E^2] - \theta[E^3] = 0 \quad (18)$$

که در آن $[K^b]$ نشانگر ماتریس سختی استاتیکی برای محیط محدود است. با حل معادله (18) ماتریس سختی کل محدوده بر مرزها به دست می‌آید.

4- روند حل معادلات

4-1- حل تحلیلی معادله ماتریس سختی

ابتدا فرض می‌کنیم که ماتریس سختی کل محیط محدود، به فرم رابطه (19) است.

$$[K^b] = [K_D] + \theta[K_R] \quad (19)$$

که در آن K_D مربوط به مشتقات مرتبه دوم (معادله لاپلاس) و K_R مربوط به عبارت بدون مشتق (عبارت حاوی ضریب زوال) در رابطه (3) است. ماتریس سختی کل در دو مرحله به دست می‌آید، بدین ترتیب که در مرحله اول فرض می‌کنیم، $\theta = 0$ است، بدین معنا که هیچ واکنشی طی فرایند پخش انجام نمی‌شود. با جای گذاری $\theta = 0$ در رابطه (19)، مطابق رابطه (20) در این حالت ماتریس سختی کل فقط مربوط به K_D خواهد بود:

$$[K^b] = [K_D] \quad (20)$$

است. ابتدا برای مقایسه با نتایج ارائه شده در مراجع مذکور $h = 2 \text{ kg}/(\text{K} \cdot \text{s}^3)$ و $k = 1 \text{ (kg} \cdot \text{m)}/(\text{K} \cdot \text{s}^3)$ در نظر گرفته می شود. شرایط مرزی به صورت رابطه (35) بوده و دما برحسب درجه کلین است.

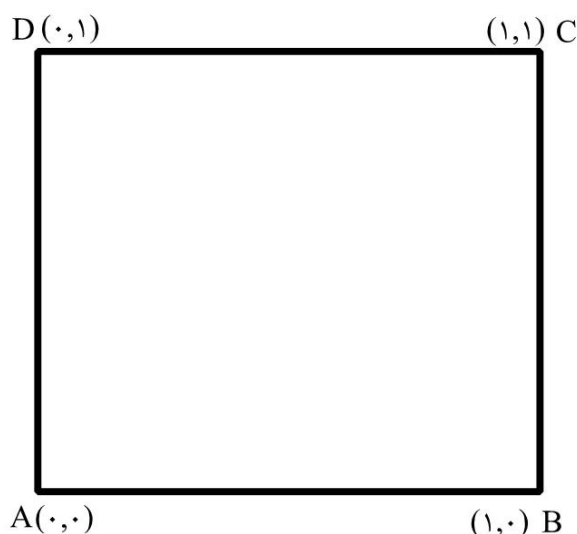
$$\begin{aligned} T(x, 0) &= \cos(\pi x) \\ T(x, 1) &= 0 \\ T(1, y) &= -\frac{\sinh(\mu - \mu y)}{\sinh(\mu)} \\ T(0, y) &= \frac{\sinh(\mu - \mu y)}{\sinh(\mu)} \end{aligned} \quad (35)$$

که در آن $\mu = \sqrt{(4h^2 + \pi^2)}$ است.

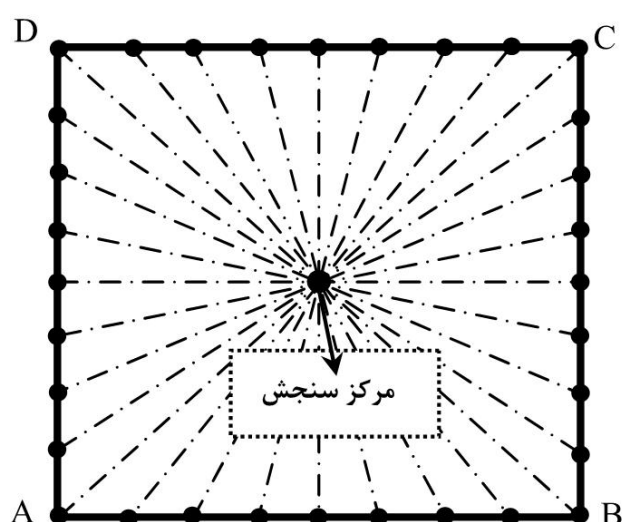
جواب دقیق این مسئله با شرایط مرزی یادشده مطابق رابطه (36) است.

$$T^*(x, y) = \cos(\pi x) \frac{\sinh(\mu - \mu y)}{\sinh(\mu)} \quad (36)$$

برای مدل سازی مسئله با روش المان محدود با مرز مقیاس شده، مرکز سنجش در این نمونه در نقطه ای به مختصات $(0/5, 0/5)$ که همه مرزهای مسئله به راحتی از این نقطه قابل رویت هستند، در نظر گرفته می شود. برای شبکه بندی مرزها از 32 المان دو گرهی با 32 درجه آزادی استفاده می شود (شکل 5). سپس گام های یادشده در انتهای بخش 4 به ترتیب طی می شود تا محاسبات تکمیل شود. اگر مقادیر دمایی به دست آمده از روش تحلیلی در فضای سه بعدی ترسیم شود، به گونه ای که محور قائم آن مربوط به مقادیر دما باشد، نقاط حاصله در فضا تشکیل یک رویه را خواهند داد. برای مقایسه کیفی در شکل 6 مقادیر دمایی به دست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده (با نقطه های سیاه رنگ)، همراه با جواب های تحلیلی (خطوط ممتد)، در فضای سه بعدی ترسیم شده است. برای جلوگیری از شلوغ شدن شکل 6 جواب های روش المان محدود با مرز مقیاس شده فقط در شعاع های $\xi = 0$ تا $\xi = 1$ به فواصل $0/05$ از هم نمایش داده شده اند.



شکل 4 هندسه مربوط به مسئله انتقال حرارت در یک صفحه مربعی شکل



شکل 5 مش استفاده شده در مسئله انتقال حرارت با روش المان محدود با مرز مقیاس شده

$$[K_R] = ([\Phi_{11}]^{-1})^T [k_r] [\Phi_{11}]^{-1} \quad (33)$$

2-4- الگوریتم حل معادله پخش - واکنش با استفاده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده

پس از بررسی روند حل معادله المان محدود با مرز مقیاس شده و نحوه محاسبه ماتریس سختی، به طور خلاصه برای به دست آوردن مقادیر غلظت و فلاکس جریان در مرزها و داخل حوزه با استفاده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده گام های زیر طی می شود:

گام نخست: ابتدا مرکز مقیاس، برای محدوده، انتخاب شده و شبکه بندی روی مرز انجام می شود. با استفاده از رابطه (15) ماتریس ضرایب $[E^0]$ ، $[E^1]$ ، $[E^2]$ و $[E^3]$ برای هر یک از المان ها محاسبه می شود، سپس با اسمبل کردن ماتریس ضرایب المان ها، ماتریس ضرایب برای کل محدوده به دست می آید. گام دوم: با استفاده از رابطه (22) ماتریس هامیلتونی به دست آمده و مسئله مقادیر ویژه حل می شود.

گام سوم: با استفاده از روابط (27) و (33) به ترتیب $[K_D]$ و $[K_R]$ به دست می آیند. گام چهارم: با جای گذاری $[K_D]$ و $[K_R]$ در رابطه (19) ماتریس سختی کل حوزه برای مرز به دست می آید.

گام پنجم: با استفاده از رابطه (26) مقادیر غلظت و فلاکس جریان روی مرز به دست می آید. گام ششم: با معلوم بودن مقادیر غلظت بر مرز، با جای گذاری $\xi = 1$ در رابطه (25)، ثابت انتگرالی $\{c_1\}$ ، به دست می آید. گام هفتم: با در دست داشتن $\{c_1\}$ و جای گذاری آن در رابطه (25)، مقادیر غلظت برای مقادیر مختلف ξ ، برای هر شعاع دلخواه به دست می آید.

5- مثال های عددی

برای نشان دادن دقت و عملکرد بالای روش المان محدود با مرز مقیاس شده در حل مسئله پخش - واکنش، در این بخش سه نمونه عددی مربوط به انتقال حرارت در یک صفحه فلزی مربع شکل، انتقال ماده ردیاب از دیواره یک استخر خاکی و انتقال حرارت در یک صفحه فلزی با مرزهای گوشه تیز با روش المان محدود با مرز مقیاس شده تحلیل می شوند و نتایج حاصله با نتایج روش تحلیلی و روش المان محدود مقایسه می شود.

5-1- مثال نخست: انتقال حرارت در یک صفحه فلزی مربعی شکل

در شکل (4) هندسه قسمتی از یک صفحه فلزی با ابعاد 1 متر در 1 متر و با ضخامت واحد، نشان داده شده است. اگر دمایی پیرامون صفحه فلزی صفر درجه کلین باشد، می توان نحوه انتقال حرارت از صفحه را با رابطه (34) بیان کرد. این مثال بیشتر جهت آشنایی با نحوه آنالیز روش المان محدود با مرز مقیاس شده ارائه شده است که پیش از این در مرجع [17] با استفاده از اس.جی.ال.بی.ام² و در مرجع [18] با استفاده از ام.جی.ال.بی.ام³ مورد بررسی قرار گرفته است.

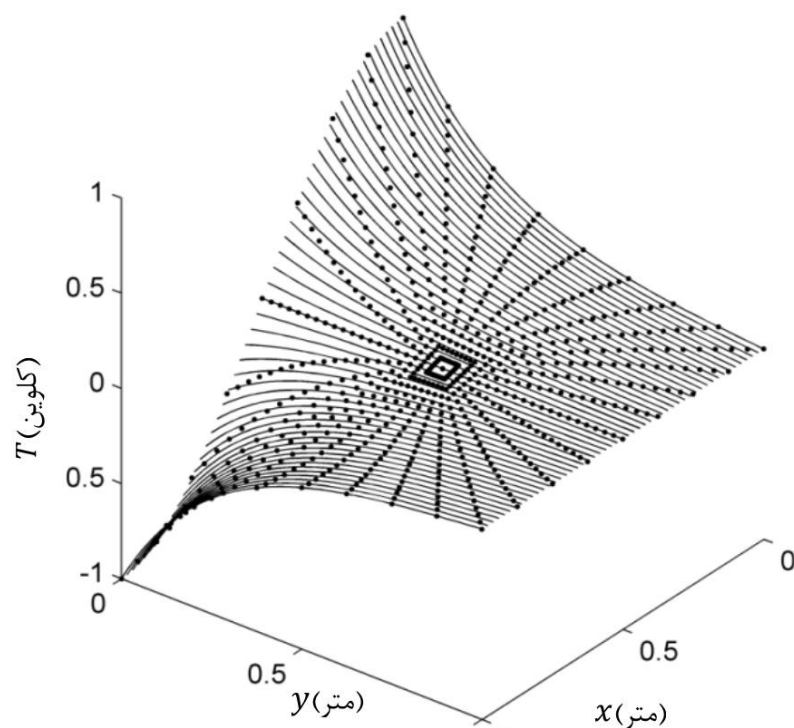
$$k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - 2hT = 0 \quad (34)$$

در رابطه (34)، T دما، h رسانایی گرمایی⁴ و k ضریب همرفتی در سطح⁵

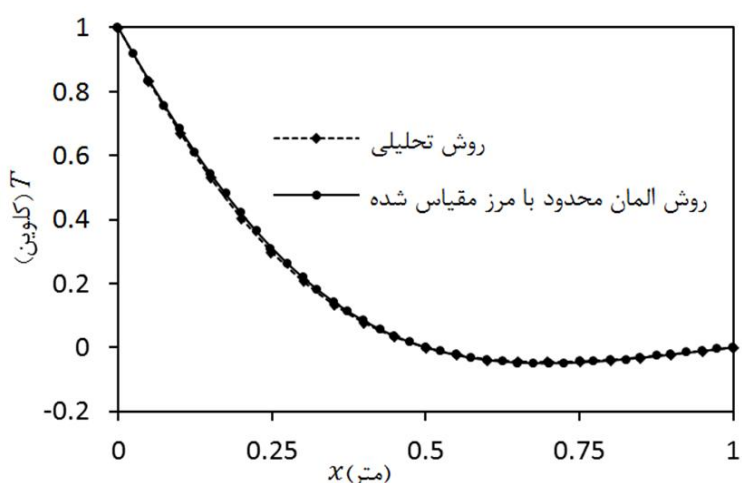
1- Assemble
2- Single-Grid - Lattice Boltzmann Method (LBM)
3- Multi-Grid (MG)- Lattice Boltzmann Method (LBM)
4- Thermal Conductivity
5- Convection Coefficient from the Surfaces

دو گرهی، با دقت مناسبی جوابها را محاسبه می کند که این تعداد المان در مقایسه با روش های عددی مشابه، بسیار کمتر است.

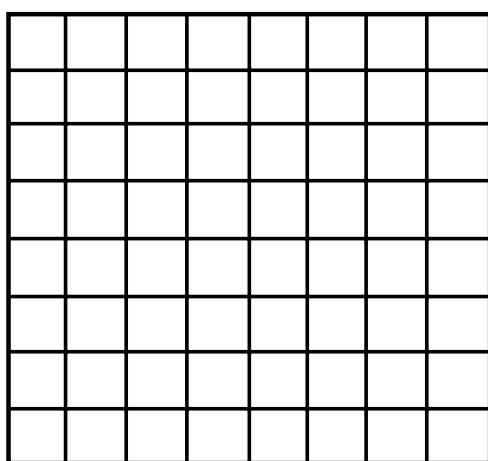
برای مقایسه روش المان محدود با مرز مقیاس شده و روش المان محدود، این مثال با استفاده از روش المان محدود نیز بررسی شده است. در روش المان محدود از شبکه بندی منظم 4 در 4، 8 در 8، 16 در 16، 32 در 32، 64 در 64، 128 در 128 و 256 در 256 با المان های مربعی، استفاده شده است (شکل 10). در نهایت هم گرایی جواب های روش المان محدود با مرز مقیاس شده، در شکل 11 بررسی شده است، همان طور که مشاهده می شود، هم گرایی روش ارائه شده بسیار سریع بوده و با تعداد المان های کمتری به دقت قابل قبول می رسد. با توجه به نمودارهای 6 تا 11 همخوانی خوبی میان جواب های به دست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده و جواب های تحلیلی مشاهده می شود.



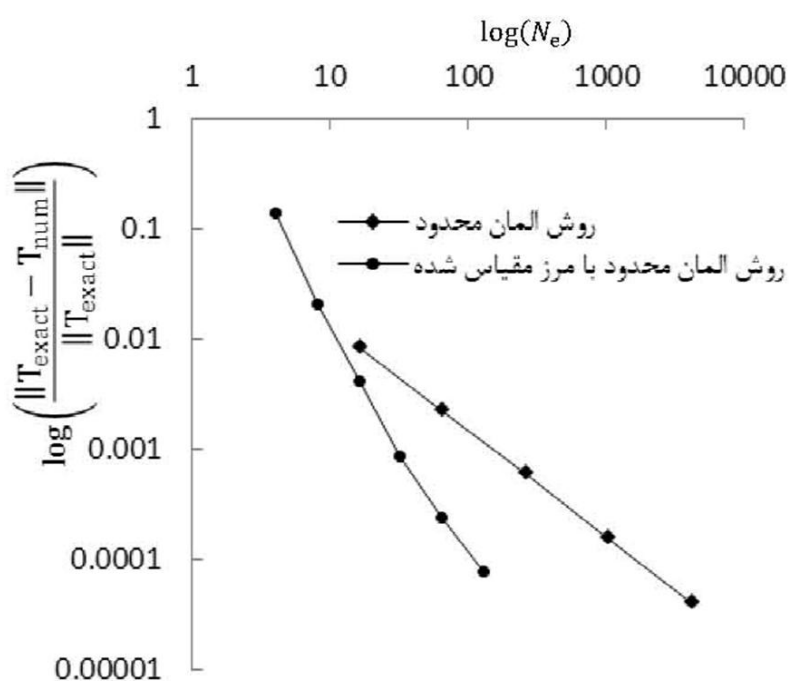
شکل 6 مقایسه مقادیر دمای به دست آمده در مسئله انتقال حرارت با کمک روش المان محدود با مرز مقیاس شده (نقاط سیاه رنگ) و روش تحلیلی (خطوط ممتد)



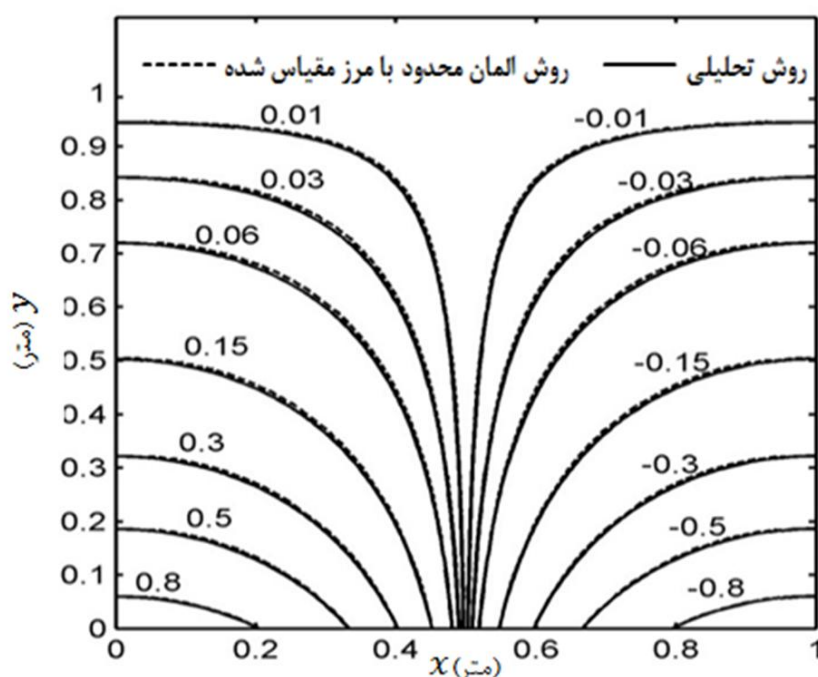
شکل 9 مقایسه جواب های به دست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده و روش تحلیلی روی خط AC در مثال نخست



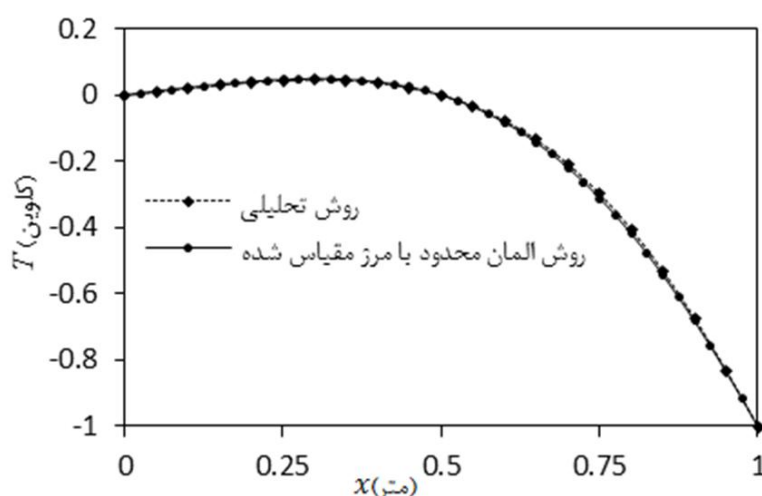
شکل 10 نمونه شبکه بندی دامنه مسئله در مثال نخست به روش المان محدود



شکل 11 مقایسه همگرایی نتایج روش المان محدود با مرز مقیاس شده و روش المان محدود برای مسئله انتقال حرارت در مثال نخست



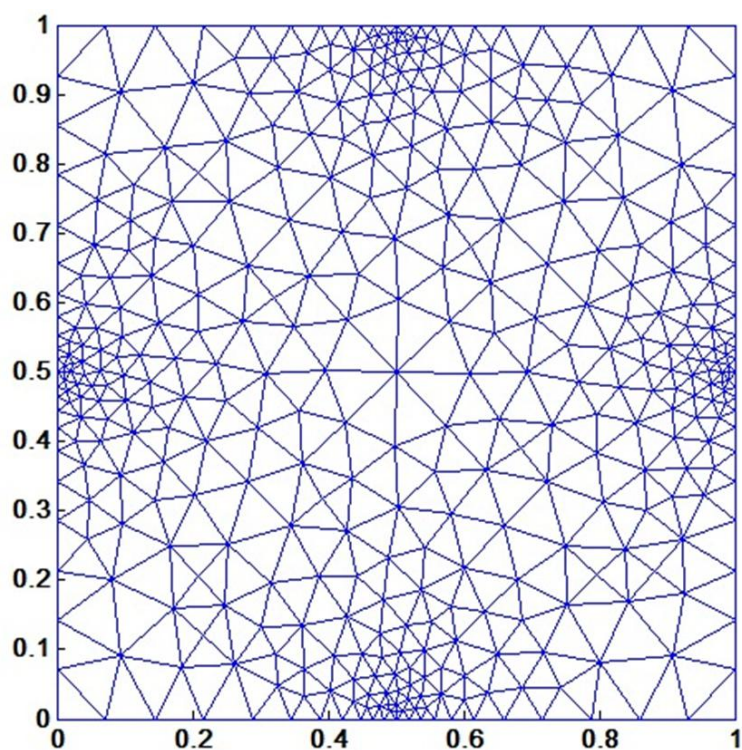
شکل 7 مقایسه خطوط هم دما در مثال اول با استفاده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده و روش تحلیلی



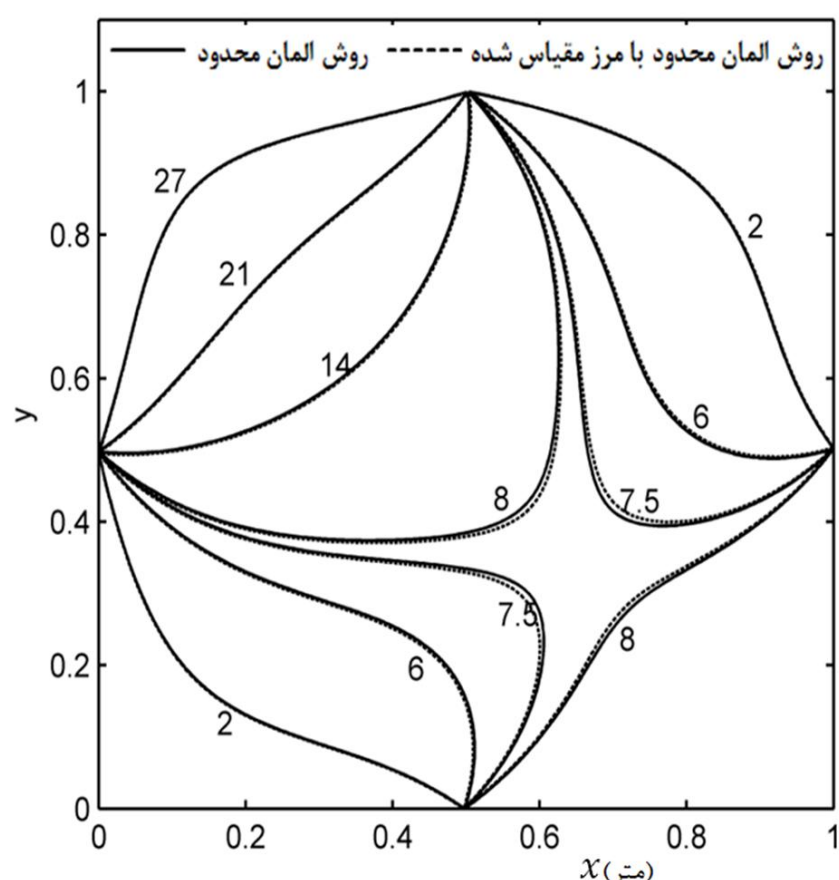
شکل 8 مقایسه مقادیر دمای به دست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده و روش تحلیلی روی خط BD در مثال نخست

با توجه به شکل 6 به وضوح مشاهده می شود که رویه تشکیل شده از هر دو روش کاملاً برهم منطبق شده اند. در شکل 7 خطوط هم دما برای کل محدوده، نمایش داده شده است. در شکل های 8 و 9 مقادیر دما به ترتیب در روی خطوط AC و BD یعنی قطرهای حوزه ی مربعی شکل ترسیم شده است. ملاحظه می شود که، روش المان محدود با مرز مقیاس شده با تعداد المان

برای مقایسه پاسخ‌های به دست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده، این مثال با استفاده از روش المان محدود نیز حل شده است. برای این کار از جعبه ابزار معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی¹ نرم افزار متلب، استفاده شده است. برای افزایش دقت در روش المان محدود نیز، با توجه به تغییرات آنی غلظت در نقاط E، F، G و H نیاز به افزایش تعداد المان‌ها در این نقاط است که این کار در طی چند مرحله انجام شده و در نهایت با 11712 المان مثلثی و 6033 درجه آزادی در روش المان محدود پاسخ‌ها با دقت کافی به دست آمده‌اند. نمونه شبکه بندی مسئله به روش المان محدود در شکل 14 نمایش داده شده است. خطوط هم‌غلظت به دست آمده از روش المان محدود و روش المان محدود با مرز مقیاس شده، در شکل 15 با هم ترسیم شده است. با توجه به شکل 15 خطوط هم‌غلظت به دست آمده از روش ارائه شده، همخوانی خوبی با خطوط هم‌غلظت به دست آمده از روش المان محدود دارد.



شکل 14 نمونه شبکه بندی دامنه مورد استفاده در روش المان محدود در مثال دوم



شکل 15 خطوط هم‌غلظت به دست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده و روش المان محدود در مثال دوم

2-5- مثال دوم: انتقال ماده ردیاب از دیواره یک استخر خاکی

آنالیز مسئله انتقال یک ماده ردیاب در یک محیط متخلخل با ابعاد یک متر در یک متر و عرض واحد که رفتار آن با رابطه (2) بیان می‌شود به عنوان مثال دوم انتخاب شده است. هندسه مسئله در شکل (12) نشان داده شده است. شرایط مرزی از نوع دیرشلت بوده و مطابق رابطه (37) است (اعداد مربوط به غلظت محلول ماده ردیاب بر حسب میلی گرم بر متر مکعب است):

$$C(0, y) = \begin{cases} 0 \text{ mgr/m}^3 & y < 0.5 \\ 30 \text{ mgr/m}^3 & y \geq 0.5 \end{cases}$$

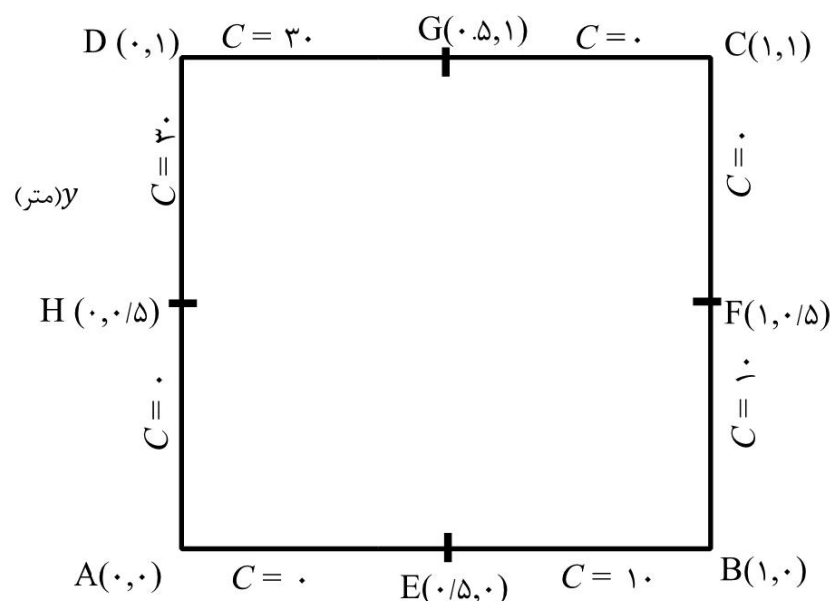
$$C(x, 0) = \begin{cases} 0 \text{ mgr/m}^3 & y < 0.5 \\ 10 \text{ mgr/m}^3 & y \geq 0.5 \end{cases}$$

$$C(x, 1) = \begin{cases} 30 \text{ mgr/m}^3 & y \leq 0.5 \\ 0 \text{ mgr/m}^3 & y > 0.5 \end{cases}$$

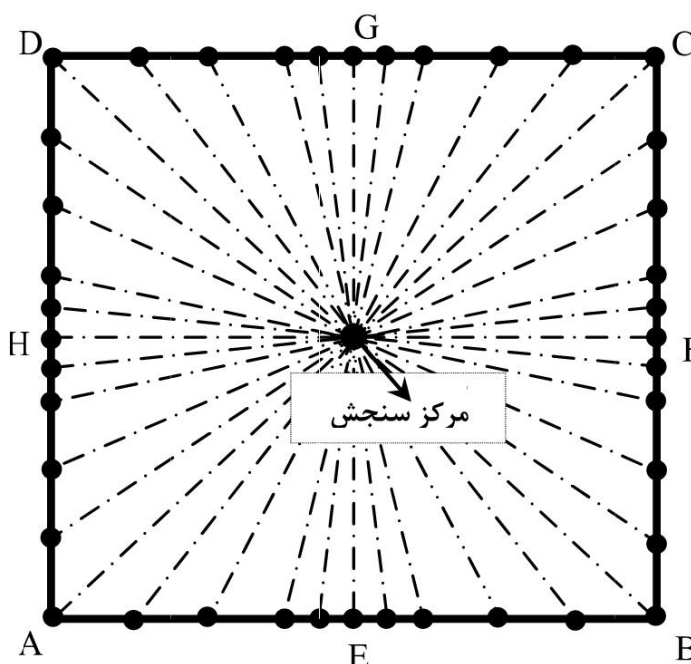
$$C(1, y) = \begin{cases} 10 \text{ mgr/m}^3 & y \leq 0.5 \\ 0 \text{ mgr/m}^3 & y > 0.5 \end{cases} \quad (37)$$

خصوصیات محیط به صورت همگن و همسان بوده و ضرایب پخش و واکنش به ترتیب $D_x = D_y = 2 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ و $\theta = 1 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ انتخاب می‌شوند.

برای تحلیل مسئله با استفاده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده مرکز سنجش در نقطه‌ای به مختصات (0/5, 0/5) انتخاب می‌شود. همچنین برای شبکه بندی مرز، از 64 المان دو گرهی با 64 درجه آزادی استفاده می‌شود که در شکل 13، نمونه‌ای از شبکه بندی دامنه مسئله و مرکز سنجش نشان داده شده است. همان گونه که در شکل 13 مشاهده می‌شود، در نزدیکی نقاط E، F، G و H، به دلیل تغییرات آنی غلظت ماده ردیاب، از المان‌های ریزتری استفاده شده است.



شکل 12 هندسه دیواره استخر خاکی در مثال دوم



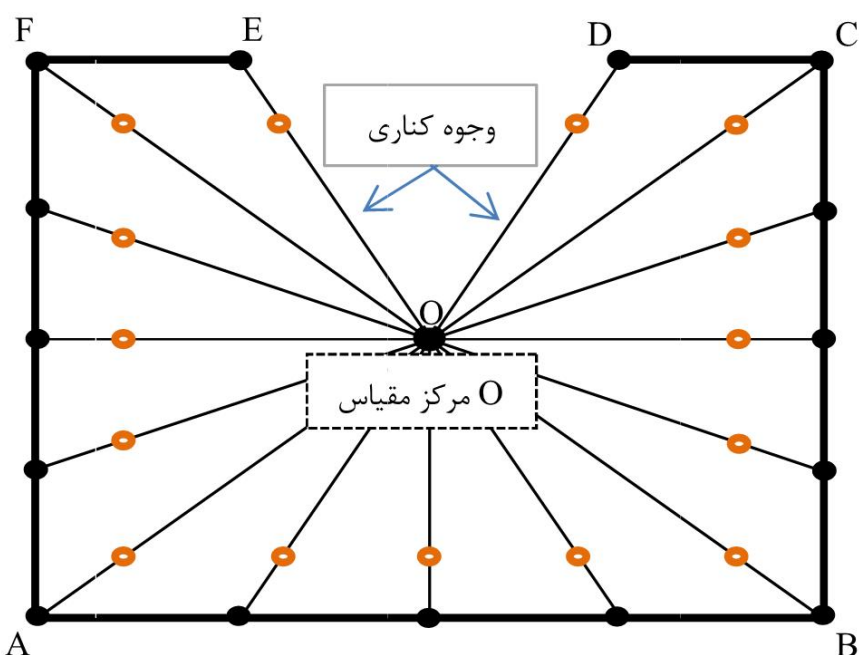
شکل 13 نمونه شبکه بندی دامنه مسئله مورد استفاده در روش المان محدود با مرز مقیاس شده در مثال دوم

5-3- مثال سوم: انتقال حرارت در یک صفحه فلزی با مرزهای گوشه تیز

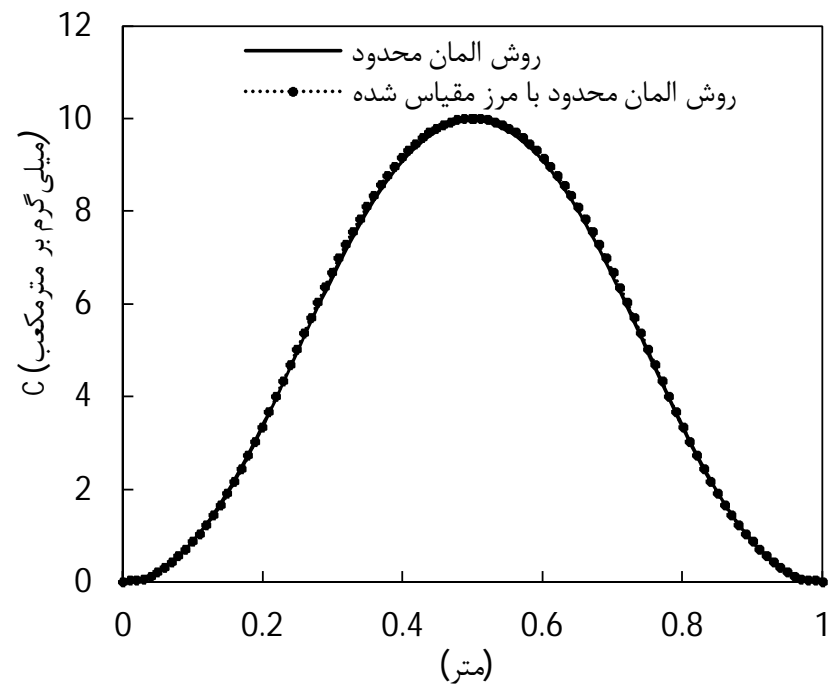
در شکل 18 هندسه مسئله همراه با شرایط مرزی نشان داده شده است که در آن اعداد مربوط به مختصات نقاط بر حسب متر است. در این نمونه برای نشان دادن کارایی روش المان محدود با مرز مقیاس شده، هندسه مسئله نسبت به دو مثال پیشین پیچیده تر شده و همچنین از شرایط مرزی نوع اول و دوم استفاده شده است. بر مرز EF و CD شرط مرزی از نوع نخست بوده و مقدار دما به ترتیب 30 و 10 درجه کلون است و بر مرزهای AB، BC، OD، OE و AF شرایط مرزی نوع دوم حاکم بوده و فلاکس جریان در این مرزها مقدار صفر دارد. مانند مثال نخست اگر دمای پیرامون صفحه فلزی صفر درجه کلون باشد، می توان نحوه انتقال حرارت از صفحه را با رابطه (34) بیان کرد. رسانایی گرمایی و ضریب همرفتی در سطح به ترتیب $h = 3 \times 10^{-4} \text{ kg}/(\text{K} \cdot \text{s}^3)$ و $k = 7 \times 10^{-5} (\text{kg} \cdot \text{m})/(\text{K} \cdot \text{s}^3)$ در نظر گرفته می شود.

برای حل این مسئله با استفاده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده مرکز سنجش مسئله در نقطه ای به مختصات (0,0) انتخاب می شود. انتخاب این نقطه به عنوان مرکز سنجش به این دلیل است که علاوه بر این که همه مرزهای مسئله از این نقطه به راحتی قابل مشاهده است، با انتخاب این نقطه، مرزهای OD و OE به عنوان وجه کناری لحاظ شده و نیازی به شبکه بندی این دو مرز نیست. همان طور که در بخش پیشین بیان شد، حل معادله روش المان محدود با مرز مقیاس شده در جهت شعاعی به صورت تحلیلی است؛ بنابراین جواب های به دست آمده بر خط EOD جواب های تحلیلی و دقیق خواهد بود. سپس مرزهای مسئله شبکه بندی می شود. برای این مثال نیز مانند مثال های پیشین با افزایش تعداد المان ها جواب های مسئله بررسی شد و در نهایت مشخص شد که با تعداد 100 المان دو گرهی جواب های به دست آمده از دقت مناسبی برخوردارند؛ بنابراین برای حل این مسئله از 100 المان دو گرهی با 100 درجه آزادی استفاده شده است که نمونه ای از شبکه بندی این مسئله با استفاده از این روش در شکل 19 نشان داده شده است. توجه داریم که مرزهای OD و OE گسسته سازی نشده اند. در نهایت گام های یاد شده در بخش 4-2 به ترتیب طی می شود تا مقادیر دما بر مرزهای مسئله و داخل دامنه به دست آید.

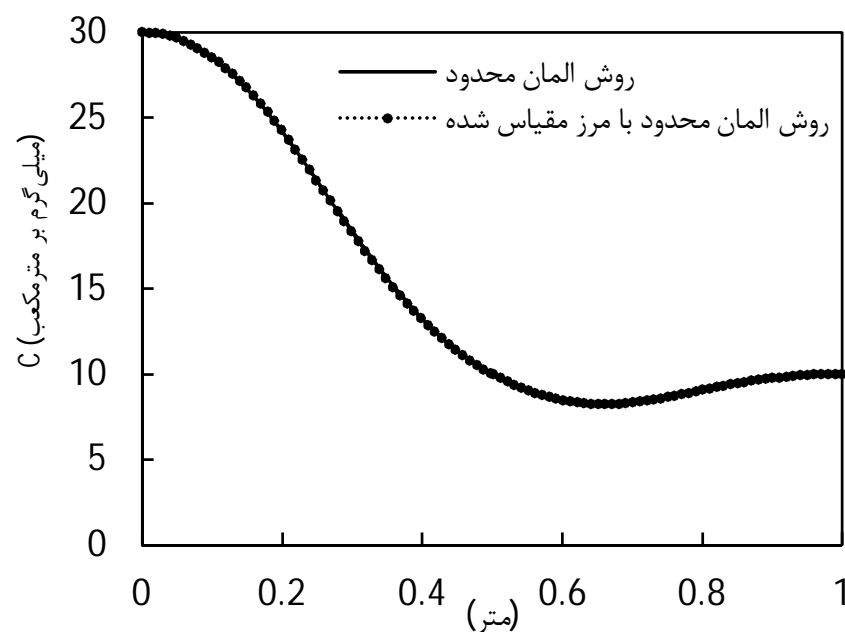
برای صحت سنجی جواب های روش المان محدود با مرز مقیاس شده، این مسئله با استفاده از روش المان محدود نیز تحلیل شده است. برای شبکه بندی در روش المان محدود از المان های مثلثی سه گرهی استفاده شده است.



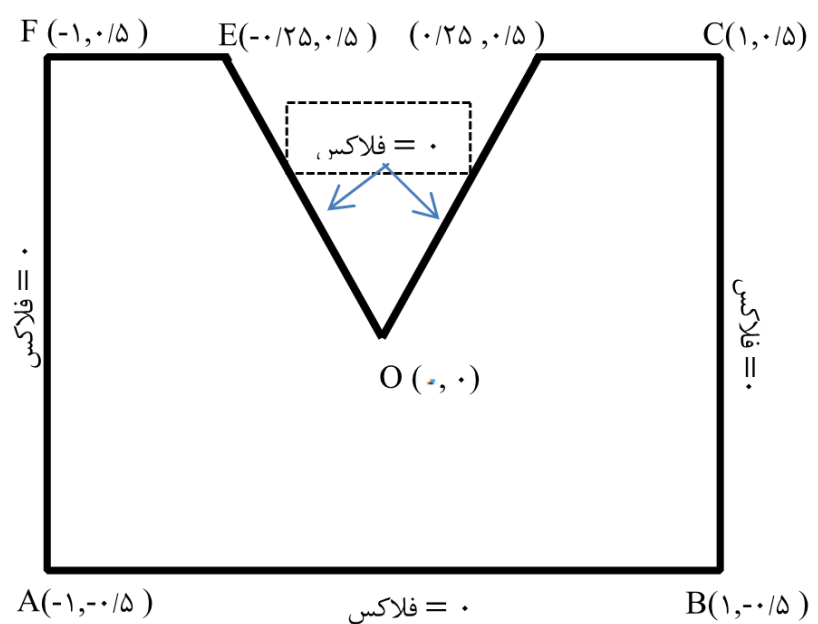
شکل 19 شبکه بندی دامنه مسئله در مثال سوم مورد استفاده در روش المان محدود با مرز مقیاس شده



شکل 16 مقایسه مقادیر غلظت به دست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده و روش المان محدود، بر خط AC در مثال دوم

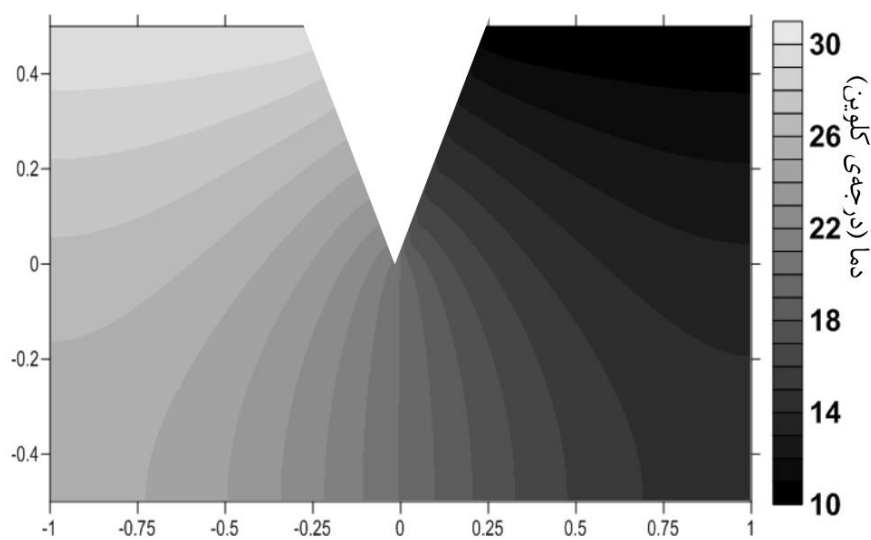


شکل 17 مقایسه مقادیر غلظت به دست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده و روش المان محدود، بر خط BD در مسئله انتقال ماده ردیاب

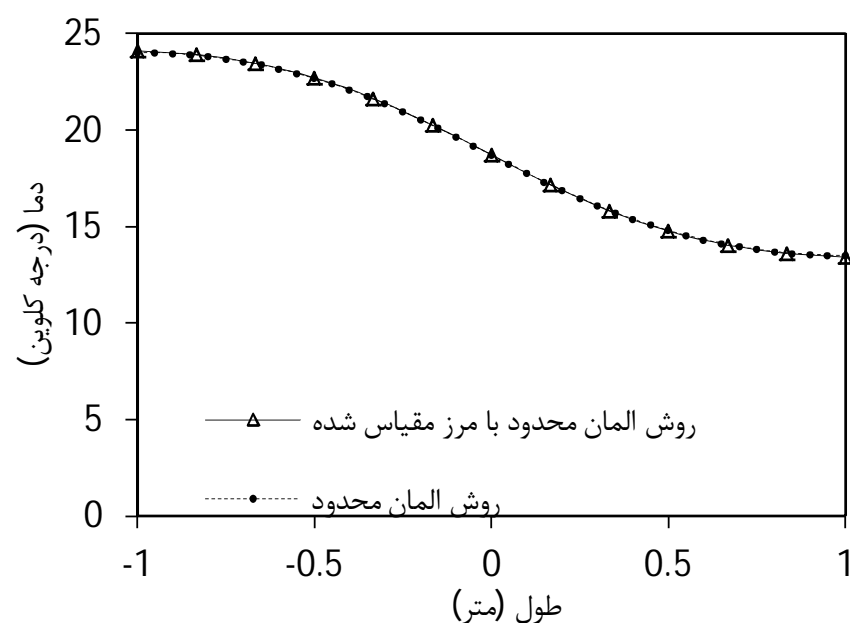


شکل 18 هندسه مسئله انتقال حرارت در یک صفحه فلزی با مرزهای گوشه دار

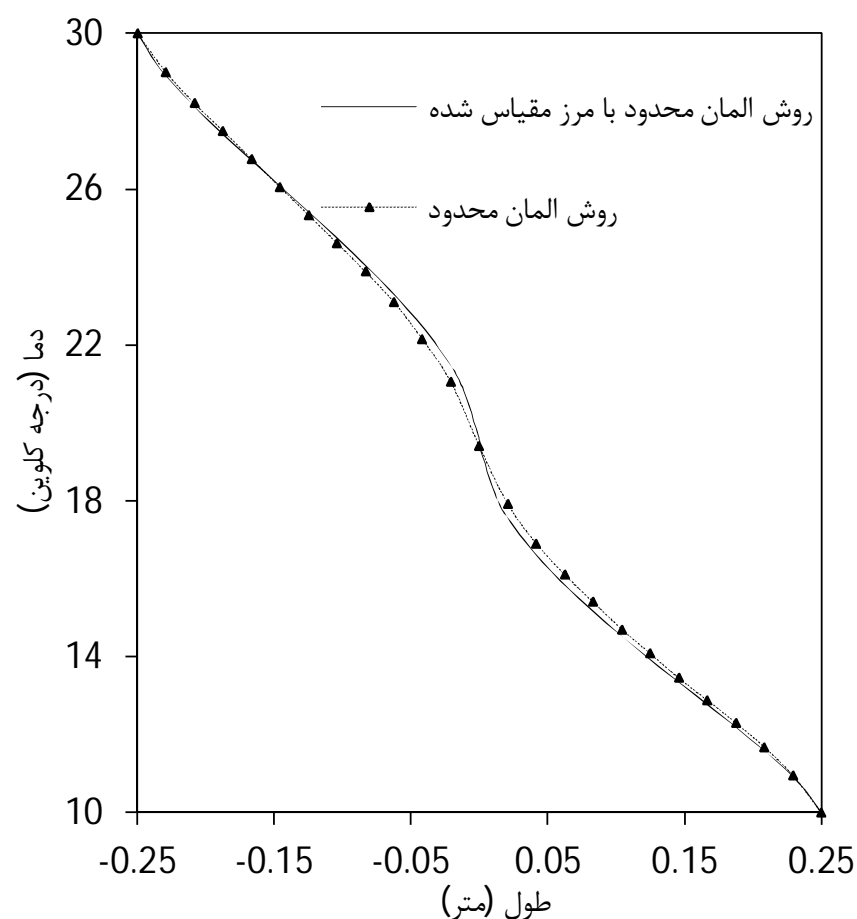
این در حالی است که تعداد درجات آزادی در روش المان محدود 97/3 برابر بیشتر از تعداد درجات آزادی روش المان محدود با مرز مقیاس شده است. همچنین برای مقایسه بیشتر، مقادیر غلظت به دست آمده از روش ارائه شده و روش المان محدود، بر خطوط AC و BD به ترتیب در شکل 16 و 17 ترسیم شده است که همخوانی خوبی بین پاسخ های به دست آمده از هر دو روش مشاهده می شود.



شکل 20 نمونه شبکه بندی دامنه مسئله با روش المان محدود در شکل 20 نمایش داده شده است. با توجه به ماهیت خاص مسئله و تیز گوشه بودن هندسه مسئله در نقطه O، این نقطه، به صورت منفرد¹ است، که برای افزایش دقت در روش المان محدود در اطراف این نقطه مش بندی در طی چند مرحله ریزتر شده است. توجه داریم که در روش المان محدود با مرز مقیاس شده بدون نیاز به شبکه بندی در مرز EOD روی این مرز و در نقطه O جواب دقیق به دست می آید. برای مقایسه کیفی، کانتور مقادیر دمای بدست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده و روش المان محدود بترتیب در شکل 21 و 22 نمایش داده شده است. در نهایت مقادیر غلظت بدست آمده از هر دو روش بر روی مرز AB و خط EOD به ترتیب در شکل 23 و 24 نمایش داده شده است. با توجه به شکل 23 جواب های بدست آمده از هر دو روش روی خط AB همخوانی خوبی با هم دارند.



شکل 22 کانتور مقادیر دمایی به دست آمده از روش المان محدود در مثال سوم

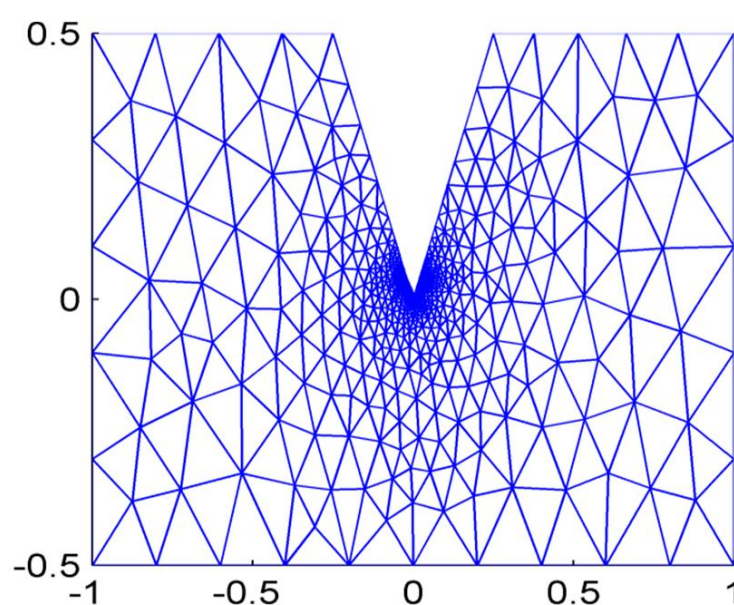


شکل 23 مقادیر دمای به دست آمده از روش المان محدود و روش المان محدود با مرز مقیاس شده بر مرز AB در مثال سوم

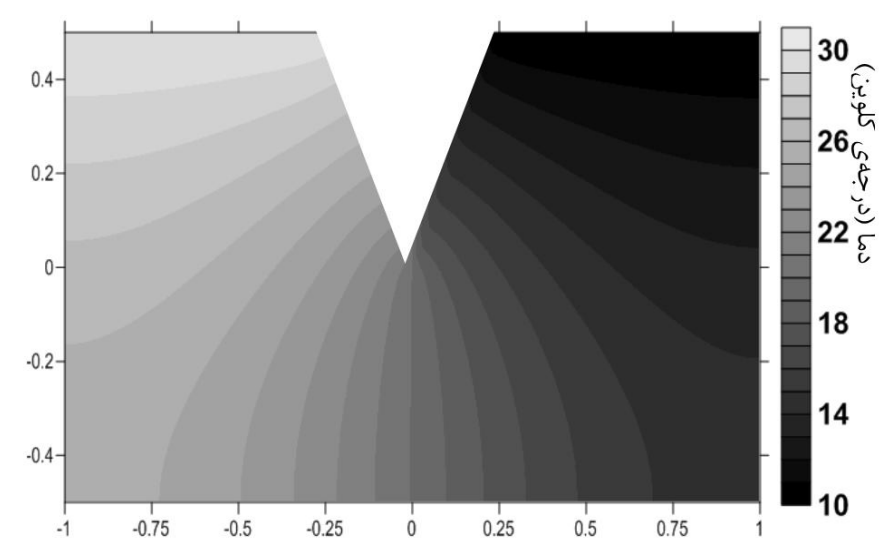
6- نتیجه گیری
در این تحقیق یک روش جدید و نیمه تحلیلی به نام روش المان محدود با مرز مقیاس شده برای حل معادله پخش-واکنش ارائه شد. در این روش

با توجه به اینکه نقطه O نقطه منفرد یا تکین مسئله است؛ بنابراین باید شیب نمودار مقادیر دما روی مرز EOD در شکل 24 و در نقطه O تندتر باشد. با توجه به شکل 24 مشاهده می شود که شیب نمودار مربوط به روش المان محدود با مرز مقیاس شده در نقطه O به دلیل حل تحلیلی روی این مرز تندتر از روش المان محدود است. توجه شود که مرز EOD با توجه به انتخاب مرکز مقیاس در راس گوشه یعنی نقطه O، وجوه EO و OD به عنوان وجوه کناری لحاظ شده اند و روی این وجوه که در جهت شعاعی است، حل به روش تحلیلی انجام شده و جواب های بدست آمده پاسخ های دقیق هستند. در نتیجه روش المان محدود با مرز مقیاس شده در نقطه O با 100 درجه آزادی عملکرد بهتری نسبت به روش المان محدود با 1921 درجه آزادی داشته است.

شکل 20 نمونه شبکه بندی دامنه مسئله با روش المان محدود در مثال سوم



شکل 21 کانتور مقادیر دمای به دست آمده از روش المان محدود با مرز مقیاس شده در مثال سوم



شکل 24 مقادیر دمای به دست آمده از روش المان محدود و روش المان محدود با مرز مقیاس شده در مثال سوم

- [8] L. Marin, Treatment of singularities in the method of fundamental solutions for two-dimensional Helmholtz-type equations. *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 34, Pp. 1615–1633, 2010
- [9] Z. He, P. Li, G. Zhao, H. Chen, A meshless Galerkin least-square method for the Helmholtz equation, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 35, pp. 868–878, 2011
- [10] Zh. Chen, T. Wu, H. Yang, An optimal 25-point finite difference scheme for the Helmholtz equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 236, pp. 1240–1258, 2011
- [11] S. Kumar, S. Chandra Sekhara Rao, A robust overlapping Schwarz domain decomposition algorithm for time-dependent singularly perturbed reaction-diffusion problems, Vol. 261, pp. 127-138, 2014
- [12] J. P. Bérenger, A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, *J. Comput. Phys*, Vol. 114, pp. 185–200, 1994
- [13] V. K. Baranwal, R. K. Pandey, M. P. Tripathi, O. P. Singh. An analytic algorithm for time fractional nonlinear reaction-diffusion equation based on a new iterative method, *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat*, Vol. 17, pp. 3906–3921, 2012
- [14] B. Zhang, Sh. Chen, J. Zhao, A posteriori error estimation based on conservative flux reconstruction for nonconforming finite element approximations to a singularly perturbed reaction-diffusion problem on anisotropic meshes, *Applied Mathematics and Computation* Vol. 232, pp. 1062–1075, 2014
- [15] M.G. Blyth, C. Pozrikidis, A comparative study of the boundary and finite element methods for the Helmholtz equation in two dimensions, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 31, pp. 35–49, 2007
- [16] A. F. D. Loula, G. B. Alvarez, E. G. D. do Carmo, F. A. Rochinha, A discontinuous finite element method at element level for Helmholtz equation, Vol. 196, pp. 867–878, 2007
- [17] D. V. Patila, K. N. Premnath, S. Banerjee, Multigrid lattice Boltzmann method for accelerated solution of elliptic equations, *Journal of Computational Physics*, Vol. 265, pp. 172–194, 2014
- [18] Z. Chai, B. Shi, A novel lattice Boltzmann model for the Poisson equation, *Appl. Math. Model*, Vol. 32, pp. 2050–2058, 2008
- [19] L.Chen, Q. Kang, B. Carey, W. Q. Tao, Pore-scale study of diffusion-reaction processes involving dissolution and precipitation using the lattice Boltzmann method, Vol. 75, pp. 483-496, 2014
- [20] M. E. Hohn, B. Li, W. Yang, Analysis of Coupled Reaction-Diffusion Equations for RNA Interactions, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Vol. 425, pp. 212-233, 2015
- [21] V. Sladek, J. Sladek, A. Shirzadi, The local integral equation method for pattern formation simulations in reaction-diffusion systems, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 50, pp. 329–340, 2015
- [22] S. K. Bhowmik, A multigrid preconditioned numerical scheme for a reaction-diffusion system, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 254, pp. 266–276, 2015
- [23] J. M. C. Pereira, J. E. P. Navalho, A. C. G. Amador, J. C. F. Pereira, Multi-scale modeling of diffusion and reaction-diffusion phenomena in catalytic porous layers: Comparison with the 1D approach, *Chemical Engineering Science*, Vol. 117, pp. 364–375, 2014
- [24] J. P. Wolf, Ch. Song, *Finite element modeling of unbounded media*, John Wiley and Sons, 1996
- [25] Ch. Song, J.P. Wolf, Body loads in Scaled Boundary Finite-Element Method, *Computational Methods in Applied Mechanical Engineering*, Vol. 180, pp. 117-135, 1999
- [26] Ch. Song, J. P. Wolf, The Scaled Boundary Finite-Element Method: alias consistent infinitesimal Finite Element Cell Method for elastodynamics, *Computational Methods in Applied Mechanical Engineering*, Vol. 147, pp. 329–355, 1997
- [27] A.J. Deeks, J.P. Wolf, A virtual work derivation of the Scaled Boundary Finite-Element Method for elastostatics, *Computational Mechanics*, Vol. 28, pp. 489-504, 2002
- [28] M. H. Bazyar, Ch. Song, Time-harmonic response of non-homogeneous elastic unbounded domains using the Scaled Boundary-Finite-Element method, *Earthquake Engineering and Structural Dynamics*, Vol. 35, pp. 357-383, 2006
- [29] M. H. Bazyar, Ch. Song, A continued-fraction-based high-order transmitting boundary for wave propagation in unbounded domains of arbitrary geometry, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 74, pp. 209-237, 2008
- [30] Ch. Song, M. H. Bazyar, A boundary condition in Padé series for frequency domain solution of wave propagation in unbounded domains. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 69, pp. 2330-2358, 2007

همانند روش المان مرزی، فقط شبکه‌بندی بر روی مرزها انجام می‌شود و بعد مسئله به اندازه یک واحد کاهش می‌یابد، ولی برخلاف روش المان مرزی نیاز به حل انتگرال‌های پیچیده ندارد. فرمولاسیون روش برای حل معادله پخش-واکنش استخراج شد و سپس یک روش تحلیلی برای حل معادله ارائه شد. سه مثال عددی با این روش مدل‌سازی شدند. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که همخوانی مناسبی بین روش المان محدود با مرز مقیاس شده با نتایج به‌دست آمده از روش تحلیلی و روش المان محدود وجود دارد. همچنین سرعت بالای همگرایی روش نسبت به روش المان محدود و عملکرد و دقت مناسب روش در تحلیل مسائل دارای نقاط تیزگوشه و تکین نشان داده می‌شود.

7- فهرست علائم

C	غلظت آلاینده (mgr/m^3)
D_x	ضریب پخش در جهت x (m^2/s)
D_y	ضریب پخش در جهت y (m^2/s)
h	ضریب همرفتی ($\text{kg}/(\text{K} \cdot \text{s}^3)$)
k	رسانایی گرمایی ($\text{kg} \cdot \text{m}/(\text{K} \cdot \text{s}^3)$)
N	تابع شکل
N_e	تعداد المان‌های روش عددی
q	فلاکس واحد عرض جریان ($\text{mgr}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$)
Q	فلاکس گرهی ($\text{mgr}/(\text{m} \cdot \text{s})$)
T	دما (K)
T_{exact}	جواب‌های تحلیلی
T_{num}	جواب‌های روش عددی
W	تابع وزن
x	سیستم مختصات کارتیزین
y	سیستم مختصات کارتیزین
η	سیستم مختصات محیطی
θ	ضریب زوال
ξ	سیستم مختصات شعاعی

8- مراجع

- [1] Zh. Chen, D. Cheng, W. Feng, T. Wu, H. Yang, A multigrid-based preconditioned Krylov subspace method for the Helmholtz equation with PML, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Vol. 383, 522–540. 2011
- [2] J. I. Ramos, E. Soler, Domain decomposition techniques for reaction diffusion equations in two dimensional regions with re-entrant corners, *Mathematics and Computation*, Vol. 118, pp. 189–221, 2001
- [3] K. Balakrishnan, P. A. Ramachandran, The method of fundamental solutions for linear diffusion-reaction equations, *Mathematical and Computer Modelling*, Vol. 31, pp. 221-237, 2000
- [4] G. Sutmann, Compact finite difference schemes of sixth order for the Helmholtz equation, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 203, pp. 15–31, 2007
- [5] D. Colton, Iterative methods for solving the exterior dirichlet problem for the Helmholtz equation with applications to the inverse scattering problem for low frequency acoustic waves, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Vol. 77, pp. 60-72, 1980
- [6] Y. Hayashi, The dirichlet problem for the two-dimensional Helmholtz equation for an open boundary, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Vol. 44, pp. 489-530, 1973
- [7] T. S. Angell, R. E. Kleinman, Modified Green's functions and the third boundary value problem for the Helmholtz equation. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Vol. 97, pp. 81-94, 1983

- [34] A. Yaseri, M.H. Bazyar, N. Hataf, 3D coupled Scaled Boundary Finite-Element/Finite-Element analysis of ground vibrations induced by underground train movement. *Computers and Geotechnics*, Vol. 60, pp. 1-8, 2014
- [35] J. P. Wolf, *The Scaled Boundary Finite Element Method*, John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester, 2003
- [31] Ch. Song, M.H. Bazyar, Development of a fundamental solution-less Boundary Element Method for exterior wave problems, *Communications in Numerical Methods for Engineering*, Vol. 24, pp. 257-279, 2008
- [32] M. H. Bazyar, A. Graili, Scaled Boundary Finite-Element solution to confined seepage problems, *Jurnal of Numerical method in engineering*, pp. 61-78, 2011. (In Persian)
- [33] M.H. Bazyar, A. Talebi, Transient seepage analysis in zoned anisotropic soils based on Scaled Boundary Finite-Element Method, *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, DOI: 10.1002/nag.2291, 2014