



## مدیریت آب و آبیاری

دوره ۵ ■ شماره ۲ ■ پاییز و زمستان ۱۳۹۴

صفحه‌های ۱۹۰-۱۶۹

# مدل یک‌بعدی انتقال آلاینده در رودخانه‌های طبیعی با تأکید بر نقش نواحی نگهداشت

مریم براتی مقدم<sup>۱</sup>، مهدی مظاهری<sup>۲</sup>، جمال محمد ولی سامانی<sup>۳</sup>

۱. دانش‌آموخته کارشناسی ارشد گروه سازه‌های آبی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

۲. استادیار گروه سازه‌های آبی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

۳. استاد گروه سازه‌های آبی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۳۹۴/۸/۳

تاریخ وصول مقاله: ۱۳۹۴/۴/۸

### چکیده

رودخانه‌ها از منابع اصلی تأمین آب شرب و کشاورزی هستند؛ بنابراین، کنترل و مدل‌سازی دقیق کیفیت آب رودخانه‌ها به منظور حفظ سلامت انسان‌ها و پایداری محیط‌زیست ضروری است. یکی از مواردی که انتقال ماده آلاینده، به‌ویژه در نهرهای کوهستانی کوچک را به شدت تحت تأثیر قرار می‌دهد، نواحی نگهداشت موقت هستند. تأثیرات اصلی این نواحی شامل حبس موقتی ماده آلاینده، کاهش غلظت این مواد در پایین‌دست و تأثیر غیرمستقیم بر فرایند جذب در بستر نهر است. هدف این تحقیق، ارائه مدلی جدید و جامع با تلفیق الگوهای عددی با درجه دقت بسیار (روش QUICK) برای شبیه‌سازی انتقال آلاینده با لحاظ نگهداشت موقت و جذب سینتیک در رودخانه‌ها با مقطع نامنظم تحت رژیم جریان غیرماندگار است. نتایج اجرای مدل برای مثالی فرضی و دو سری داده واقعی و مقایسه آن‌ها با نتایج دو مدل رایج دیگر، حاکی از دقت مطلوب و پایداری عددی فراوان آن بود. بنابراین، می‌توان مدل را در بسیاری از مطالعات انتقال آلاینده به‌عنوان جایگزین مناسبی برای مدل‌های رایج فعلی پیشنهاد کرد.

**کلیدواژه‌ها:** جذب سینتیک، جریان غیرماندگار، روش QUICK، مدل‌سازی کیفیت آب، نگهداشت موقت.

## ۱. مقدمه

شده است (۵). از زمان معرفی این مدل تا به حال، فرایندهای نگهداشت موقت در گستره‌ای از نهرهای کوهستانی کوچک تا رودخانه‌های بزرگ بررسی و نشان داده شده است که نتایج حاصل از شبیه‌سازی داده‌های آزمایش مادهٔ ردیاب،<sup>۵</sup> با در نظر گرفتن تأثیر نگهداشت موقت، تطابق بیشتری با داده‌های واقعی دارد و فعل و انفعالات مادهٔ حل شده بین کانال اصلی و نواحی نگهداشت، به‌ویژه در نهرهای کوهستانی، تأثیر بسزایی بر نحوهٔ انتقال مادهٔ حل شده می‌گذارد (۹، ۱۱، ۱۲، ۱۳، ۱۵، ۱۷، ۱۸، ۲۱، ۲۸، ۶۸، ۷۰).

مروری بر مقالات مربوط به حوزهٔ مدل‌سازی انتقال آلاینده در رودخانه‌های طبیعی نشان می‌دهد که برخلاف پیشرفت‌های چشمگیر، هنوز مشکلات عدیده‌ای وجود دارد که نیازمند تحقیقات بیشتری است؛ از جملهٔ این مشکلات این است که در گذشته، اغلب مطالعات بر انتقال مادهٔ حل شده در رژیم جریان ماندگار و مقاطع منظم تمرکز می‌کردند که با در نظر گرفتن سرعت متوسط ثابت در مدل نمود پیدا می‌کند. این در حالی است که وجود شرایط جریان غیرماندگار و مقاطع نامنظم در نهرها و رودخانه‌های طبیعی امری معمول است. همچنین تا به حال توجه زیادی به جنبه‌های حل عددی معادلات با لحاظ نگهداشت موقت نشده است و موارد معدودی از آن را می‌توان در مقالات یافت (۳، ۵، ۱۶، ۲۵، ۲۷).

تعدادی از محققان از روش تفاضل محدود<sup>۶</sup> CTCS برای حل معادلات نگهداشت موقت استفاده کرده‌اند که بنکالا و والترز (۱۹۸۳) از آن دسته هستند (۳، ۵). دسته‌ای دیگر، روی روش‌های عددی مؤثر و کارآمد برای حل معادلات نگهداشت موقت کار کردند. آن‌ها زمان محاسبات را به دو روش مختلف کاهش دادند: تجزیهٔ معادلات

با توجه به محدودیت منابع آب در دسترس بشر و آلوده شدن بخش عمده‌ای از این منابع بر اثر فعالیت‌های انسانی مثل تخلیهٔ مستقیم فاضلاب شهری و پساب‌های صنعتی به داخل محیط‌های آبی، کشاورزی و آبی‌پروری، مدل‌سازی دقیق کیفیت آب به‌منظور تأمین آب مورد نیاز مصارف شرب و کشاورزی از اهمیت فراوانی برخوردار است. یکی از مواردی که انتقال مادهٔ آلاینده در رودخانه‌ها را به شدت تحت تأثیر قرار می‌دهد، وجود نواحی ماندابی یا نواحی نگهداشت موقت<sup>۱</sup> است. نواحی نگهداشت عمدتاً شامل ادی‌ها،<sup>۲</sup> نواحی عمیق کنارهٔ نهر،<sup>۳</sup> بستر سنگ‌ریزه‌ای کانال نهر، رسوبات بستر نهر، نواحی متخلخل کنارهٔ نهر و نواحی ماندابی پشت موانع جریان مثل تخته‌سنگ‌های بزرگ، پوشش گیاهی کنارهٔ نهر، ضایعات چوبی و نظایر آن است. این نواحی از سویی، با حبس موقتی مادهٔ حل شده و رهاسازی تدریجی آن، سبب ایجاد شکل نامتقارن در پروفیل‌های غلظت مشاهداتی می‌شود که با تئوری کلاسیک جابه‌جایی - پراکندگی توجیه نمی‌شود و از طرف دیگر، با ایجاد فرصت طولانی‌تر برای تماس مواد آلایندهٔ واکنش‌پذیر<sup>۴</sup> با رسوبات بستر نهر، به‌طور غیرمستقیم فرایند جذب مادهٔ حل شده را تحت تأثیر قرار می‌دهد و باعث شدت یافتن آن می‌شود (۱، ۵، ۸، ۱۰، ۱۴، ۲۳).

یکی از روش‌های رایج برای شبیه‌سازی انتقال مادهٔ حل شده در رودخانه‌های دارای نواحی نگهداشت، مدل نگهداشت موقت است. مدل ریاضی نگهداشت موقت به‌منظور نشان دادن حرکت مادهٔ حل شده از کانال اصلی به پهنه‌های ماندابی و برگشت آن به کانال اصلی توسعه داده

1. Transient storage
2. Eddy
3. Side pool
4. Non-conservative or reactive

5. Tracer study

6. Centered Time-Centered space (CTCS)

تشکیل شده است: ۱. زیرمدل محاسبه مشخصات هندسی مقطع نامنظم برای محاسبه مستقیم پارامترهایی از قبیل مساحت و محیط خیس شده، شعاع و قطر هیدرولیکی و سطح آزاد آب به‌ازای رقوم مختلف سطح آب با استفاده از داده‌های توپوگرافی و زبری بستر رودخانه؛ ۲. زیرمدل محاسبات جریان غیرماندگار که با حل عددی معادلات جریان سنت و نانت، دبی‌ها و عمق‌ها را در هر گره محاسباتی به‌ازای تغییرات رقوم سطح آب با زمان تعیین می‌کند؛ ۳. زیرمدل انتقال برای تعیین پروفایل‌های مکانی و زمانی غلظت پایین‌دست با حل عددی معادلات جابه‌جایی - پراکندگی با لحاظ نگهداشت و جذب سینتیک با استفاده از روش حجم کنترل و الگوی عددی QUICK. این ساختار امکان شبیه‌سازی انتقال آلاینده تحت تأثیر مکانیسم‌های فیزیکی و شیمیایی گوناگون در انواع مقاطع رودخانه (منظم و غیرمنظم) و تحت رژیم‌های مختلف جریان را با دقت مطلوب و قابل قبول فراهم می‌آورد. به‌منظور نشان‌دادن کارایی و دقت مدل، نتایج حاصل از اجرای آن برای مسئله فرضی ساده و دو سری داده واقعی، با نتایج حاصل از دو مدل MIKE11 (که از معادله کلاسیک ADE برای حل معادلات بهره می‌گیرد) و مدل OTIS مقایسه شدند.

## ۲. مواد و روش‌ها

### ۱.۲. مدل نگهداشت موقت

مدل نگهداشت موقت نوعی چارچوب ریاضی ساده‌سازی شده از فرایندهای فیزیکی پیچیده انتقال در نهر و رودخانه طبیعی است. این مدل با نوشتن معادلات تعادل جرم برای دو ناحیه فرضی شکل می‌گیرد: کانال اصلی به‌عنوان بخشی از نهر یا رودخانه که در آن جابه‌جایی و پراکندگی، مکانیسم‌های غالب انتقال هستند و ناحیه نگهداشت، بخشی از نهر که در نگهداشت موقت مشارکت

دیفرانسیل و استفاده از الگوریتم توماس<sup>۱</sup> (۲۷). بعدها در سال ۱۹۹۸، مدل<sup>۲</sup> OTIS برای حل عددی معادلات نگهداشت موقت با استفاده از روش CTCS برای شبیه‌سازی انتقال ماده حل شده در نهرها و رودخانه‌ها توسعه داده شد (۲۵). در حال حاضر، OTIS تنها مدل تجاری است که برای حل معادله جابه‌جایی - پراکندگی با لحاظ تأثیر نواحی نگهداشت موقت در دسترس محققان قرار دارد. با وجود این، معایب بسیاری نیز دارد که از آن جمله می‌توان به نداشتن برنامه روندیابی جریان، استفاده از روش مشتق‌گیری مرکزی برای گسسته‌سازی مکانی معادلات و محدودیت در تعداد پارامترهای ورودی اشاره کرد. الهان و مدینا (۲۰۰۶) معادلات نگهداشت موقت را با استفاده از روش تفاضل محدود ضمنی پسر<sup>۳</sup> مرتبه اول برای زمان و مرکزی برای مکان (BTCS) گسسته‌سازی کردند. اشکال اساسی که در اکثر این تحقیقات به چشم می‌خورد، استفاده از روش‌های مشتق‌گیری مرکزی برای گسسته‌سازی مکانی معادلات است. این روش دو ضعف اساسی دارد: نخست اینکه دارای دقت درجه دوم است و دوم، در مواردی که سرعت جریان زیاد و جابه‌جایی فرایند قابل انتقال است، نتایج نوسانات عددی شدیدی به شکل غلظت‌های منفی دارد (۲۹، ۱۹).

هدف این تحقیق ارائه مدلی جامع با تلفیق الگوهای عددی دقیق‌تر برای مدل‌سازی انتقال آلاینده با لحاظ تأثیر نگهداشت موقت و جذب سینتیک در حالت وجود جریان غیرماندگار در رودخانه‌ها با مقطع نامنظم است تا نواقص موجود در مدل‌های رایج شبیه‌سازی انتقال آلاینده را مرتفع سازد. مدل پیشنهادی، از ترکیب سه زیرمدل مختلف

1. Thomas algorithm
2. One-Dimensional Transport with Inflow and Storage (OTIS)
3. Backward

## ۲.۲. جذب سینتیک

جذب فرایندی است که طی آن، ماده حل شده به داخل رسوبات جامد بستر نهر منتقل و با آن‌ها همراه می‌شود. این فرایند شامل تجمع مواد حل شده بر سطح رسوبات<sup>۱</sup> و ترکیب و واکنش مواد حل شده با رسوبات<sup>۲</sup> است. در این تحقیق برای توصیف فرایند جذب از معادله‌ای کاملاً ساده استفاده شده است که جذب را بر مبنای روش ضریب توزیع<sup>۳</sup> در نظر می‌گیرد. از قوت‌های این معادله می‌توان به تمایز قائل شدن بین عبارات توصیف‌کننده جذب در دو ناحیه کانال اصلی و نگهداشت موقت، با توجه به ویژگی‌های متفاوت این دو ناحیه اشاره کرد. در کانال اصلی، جذب ماده حل شده در بستر نهر و بازجذب آن از بستر نهر به‌عنوان واکنش، نوعی انتقال جرم مرتبه اول در نظر گرفته می‌شود که نرخ تغییر در غلظت ماده حل شده در رسوبات بستر نهر، با اختلاف غلظت آن و غلظت پتانسیل در حالت تعادل متناسب است. در ناحیه نگهداشت فرض شده است تمام جرم ماده حل شده که وارد این ناحیه شده است، به‌سرعت و برای زمان طولانی جذب رسوبات بستر می‌شود (۲).

## ۳.۲. معادلات دیفرانسیل حاکم

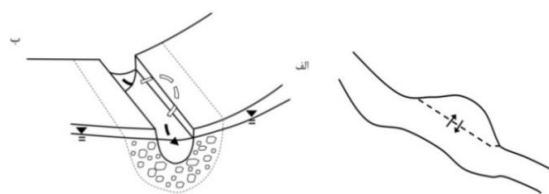
با نوشتن معادلات بقای جرم برای ماده حل شده در کانال اصلی و ناحیه نگهداشت، زوج معادله دیفرانسیل زیر برای کانال اصلی و ناحیه نگهداشت به دست می‌آید:

(۱)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{-Q}{A} \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left( AD \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{q_{LIN}}{A} (C_L - C) + \alpha (C_S - C)$$

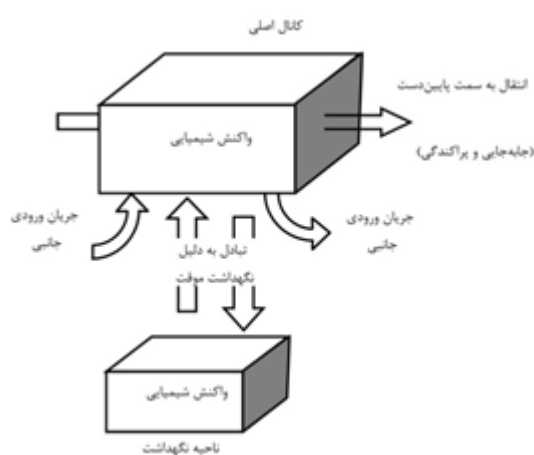
1. Adsorption
2. Absorption
3. Distribution coefficient

دارد (مثل پهنه‌های ماندابی و نواحی متخلخل بستر نهر که در شکل ۱ آمده است). این مدل، مقادیر غلظت در کانال اصلی و ناحیه نگهداشت را محاسبه می‌کند و نگهداشت موقت را به‌صورت تبادل جرم بین کانال اصلی و ناحیه نگهداشت به علت اختلاف غلظت بین کانال اصلی و ناحیه نگهداشت در نظر می‌گیرد. شکل ۲ فرایندهای تأثیرگذار بر ماده حل شده در کانال اصلی و ناحیه نگهداشت را به‌صورت شماتیک نشان می‌دهد.



شکل ۱. مکانیسم‌های نگهداشت موقت

الف) وقتی مواد حل شده وارد توده‌های کوچک آب می‌شوند که با سرعت کم حرکت می‌کنند؛ ب) وقتی مواد حل شده کانال اصلی را ترک می‌کنند و وارد نواحی متخلخل بستر و کناره‌های کانال می‌شوند. پیکان‌ها حرکت آب بین کانال اصلی و ناحیه نگهداشت موقت را نشان می‌دهند (۲۶)



شکل ۲. مدل فرضی شامل کانال اصلی و ناحیه نگهداشت (۲۵)

### ۱.۳.۲. حل عددی معادله جابه‌جایی - پراکندگی با لحاظ نواحی نگهداشت موقت و جذب سینتیک در حالت یک‌بعدی

حل عددی معادلات (۵ تا ۵) در این تحقیق بر اساس روش حجم کنترل و الگوی مرکزی در زمان و QUICK در مکان (CTQS)<sup>۳</sup> انجام می‌گیرد. در الگوی عددی استفاده‌شده، مشتقات مکانی با استفاده از الگوی QUICK و به‌صورت میانگین سطوح زمانی  $n$  و  $n+1$  گسسته می‌شوند.

### ۲.۳.۲. الگوی مرکزی در زمان و QUICK در مکان (CTQS)

الگوی QUICK بر مبنای درونیابی بالادست درجه دوم، برای گسسته‌سازی مکانی معادله جابه‌جایی - پراکندگی قرار دارد (۱۹). در این الگو، تخمین مقادیر مجهول روی سطوح کنترل با برازش منحنی درجه دوم (سه‌می) از دو نقطه در بالادست و یک نقطه در پایین دست انجام می‌شود. در سال‌های اخیر، این روش به دلیل دقت عددی بسیار (دقت از درجه سوم)، پخشیدگی عددی خیلی کم و داشتن محدوده پایدار بالاتر، در موارد غالبیت فرایند جابه‌جایی در قیاس با سایر روش‌های عددی، به‌طور گسترده استفاده شده است (۲۰، ۲۲). در این روش برای محاسبه مقادیر کمیت موردنظر روی سطوح کنترل از معادلات زیر استفاده می‌شود:

$$\varphi_{\text{face}} = \frac{6}{\lambda} \varphi_{i-1} + \frac{3}{\lambda} \varphi_i - \frac{1}{\lambda} \varphi_{i-2} \quad (6)$$

$$\text{if } u_w > 0: \quad \varphi_w = \frac{6}{\lambda} \varphi_w + \frac{3}{\lambda} \varphi_p - \frac{1}{\lambda} \varphi_{ww} \quad (7)$$

$$\text{if } u_e > 0: \quad \varphi_e = \frac{6}{\lambda} \varphi_p + \frac{3}{\lambda} \varphi_E - \frac{1}{\lambda} \varphi_w \quad (8)$$

در این رابطه، اندیس  $P$  نشان‌دهنده گرهی است که

$$\frac{dC_s}{dt} = \alpha \frac{A}{A_s} (C - C_s) \quad (2)$$

در این رابطه  $A$  = مساحت مقطع عرضی کانال اصلی،  $A_s$  = مساحت مقطع عرضی ناحیه نگهداشت،  $C$  = غلظت ماده حل‌شده در کانال اصلی،  $C_L$  = غلظت ماده حل‌شده در جریان ورودی جانبی،  $C_s$  = غلظت ماده حل‌شده در ناحیه نگهداشت،  $D$  = ضریب پراکندگی طولی،  $Q$  = دبی جریان،  $q_{LIN}$  = دبی در واحد عرض جریان ورودی جانبی و  $\alpha$  = ضریب تبادل ناحیه نگهداشت هستند. برای مواد واکنش‌دهنده، با در نظر گرفتن دو نوع واکنش‌های شیمیایی، جذب سینتیک و زوال مرتبه اول، معادلات (۲ و ۳) به‌صورت زیر بازنویسی می‌شوند:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = L(C) + \rho \hat{\lambda} (C_{sed} - K_d C) - \lambda C \quad (3)$$

$$\frac{dC_s}{dt} = S(C_s) + \hat{\lambda}_s (\hat{C}_s - C_s) - \lambda_s C_s \quad (4)$$

در این رابطه  $\hat{C}_s$  = غلظت پس‌زمینه<sup>۱</sup> ماده حل‌شده در ناحیه نگهداشت،  $C_{sed}$  = غلظت مواد جذب‌شده در رسوبات بستر نهر،<sup>۲</sup>  $K_d$  = ضریب توزیع،  $\lambda$  = ضریب زوال مرتبه اول کانال اصلی،  $\lambda_s$  = ضریب زوال مرتبه اول ناحیه نگهداشت،  $\hat{\lambda}$  = ضریب نرخ جذب در کانال اصلی،  $\hat{\lambda}_s$  = ضریب نرخ جذب در ناحیه نگهداشت و  $\rho$  = جرم قابل دسترس رسوب در حجم آب است.  $L(C)$  و  $S(C_s)$  ترتیب سمت راست معادلات ۱ و ۲ هستند. در معادله (۴) غلظت متغیری دیگر،  $C_{sed}$  هم ظاهر شده است که باید برای آن هم معادله تعادل جرم نوشته شود:

$$\frac{dC_{sed}}{dt} = \hat{\lambda} (K_d C - C_{sed}) \quad (5)$$

در این رابطه  $C_{sed}$  = غلظت رسوبات بستر نهر است.

1. Background concentration  
2. Sorbate

3. Centered Time - QUICK Space (CTQS)

به دست آمده برای پراکنندگی، مشابه عبارات به دست آمده از روش تفاضل مرکزی است، یعنی:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \quad (9)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \quad (10)$$

بر اساس این الگو، صورت گسسته شده معادلات ۳ و ۵ به صورت معادلات (۱۱ تا ۱۳) در می آیند:

$$\begin{aligned} \frac{C_P^{n+1} - C_P^n}{\Delta t} = & \frac{1}{\tau} \left[ \left( \frac{-Q_p}{A_p \Delta x} (C_e - C_w) \right)^{n+1} + \left( \frac{-Q_p}{A_p \Delta x} (C_e - C_w) \right)^n \right] + \\ & \frac{1}{\tau} \left\{ \frac{1}{A_p^{n+1} \Delta x} \left[ \left( AD \frac{\partial C}{\partial x} \right)_e - \left( AD \frac{\partial C}{\partial x} \right)_w \right]^{n+1} + \frac{1}{A_p^n \Delta x} \left[ \left( AD \frac{\partial C}{\partial x} \right)_e - \left( AD \frac{\partial C}{\partial x} \right)_w \right]^n \right\} + \\ & \frac{1}{\tau} \left[ \frac{q_{LIN}^{n+1}}{A_p^{n+1}} (C_L - C_P)^{n+1} + \frac{q_{LIN}^n}{A_p^n} (C_L - C_P)^n \right] + \frac{\alpha}{\tau} \left[ (C_S - C_P)^{n+1} + (C_S - C_P)^n \right] + \\ & \frac{\rho \hat{\lambda}}{\tau} \left[ (C_{Sed} - K_d C_P)^{n+1} + (C_{Sed} - K_d C_P)^n \right] - \frac{\lambda}{\tau} (C_P^{n+1} + C_P^n) \end{aligned} \quad (11)$$

$$\frac{C_S^{n+1} - C_S^n}{\Delta t} = \frac{1}{\tau} \left[ \left( \alpha \frac{A_p}{A_s} (C_P - C_S) + \hat{\lambda}_s (\hat{C}_S - C_S) - \lambda_s C_S \right)^{n+1} + \left( \alpha \frac{A_p}{A_s} (C_P - C_S) + \hat{\lambda}_s (\hat{C}_S - C_S) - \lambda_s C_S \right)^n \right] \quad (12)$$

$$\frac{C_{Sed}^{n+1} - C_{Sed}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\tau} \left[ \left( \hat{\lambda} (K_d C_P - C_{Sed}) \right)^{n+1} + \left( \hat{\lambda} (K_d C_P - C_{Sed}) \right)^n \right] \quad (13)$$

دست آورد:

$$\begin{aligned} C_S^{n+1} = & \frac{\gamma_P^{n+1} C_P^{n+1} + \gamma_P^n C_P^n + (\tau - \Delta t \lambda_s - \gamma_P^n) C_S^n}{\tau + \gamma_P^{n+1} + \Delta t \lambda_s} \quad \gamma = \frac{\alpha \Delta t A}{A_s} \\ C_{Sed}^{n+1} = & \frac{(\tau - \Delta t \hat{\lambda}) C_{Sed}^n + \Delta t \hat{\lambda} K_d (C_P^n + C_P^{n+1})}{\tau + \Delta t \hat{\lambda}} \end{aligned} \quad (16)$$

اگر تعداد احجام کنترل در کل طول دامنه حل برابر با  $N$  باشد، با نوشتن معادله ( برای هر چهار حجم کنترل متوالی با شروع از سومین حجم کنترل تا حجم کنترل

مجهولات برای آن گره محاسبه می شوند و نقاط واقع در غرب و شرق این نقطه به ترتیب با  $W$  و  $E$  نشان داده شده اند. همچنین سطح کنترل غربی نقطه  $P$  با  $w$  و سطح کنترل شرقی آن با  $e$  نام گذاری شده اند. عبارات پراکنندگی هم با استفاده از مشتق سهمی تقریب زده و محاسبه می شوند. با توجه به برابری شیب وتر بین دو نقطه در یک سهمی با تانژانت سهمی در نقطه میانی آن، در شبکه ای یکنواخت با احجام کنترل یکسان، عبارات

با جایگزین کردن مقادیر کمیت های روی سطح کنترل با استفاده از معادلات ۷ تا ۱۰ و انجام کمی عملیات جبری، می توان معادله (۱۱) را به صورت زیر نوشت:

$$a_{ww} C_{ww}^{n+1} + a_w C_w^{n+1} + a_p C_p^{n+1} + a_e C_e^{n+1} = R_p \quad (14)$$

برای این حل دستگاه معادلات خطی حاصل، باید تمام مقادیری که در سمت راست معادله ( ظاهر می شوند، معلوم باشند؛ لذا مقادیر غلظت ناحیه نگهداشت و غلظت مواد جذب شده در رسوبات بستر نهر  $(C_{Sed}^{n+1} و C_S^{n+1})$  را که مجهول هستند، باید با استفاده از معادلات ۱۲ و ۱۳ به



جدول ۱. مقایسه کیفی ویژگی‌های سه مدل

ویژگی‌های مدل					
مدل	عدم محدودیت در تعداد پارامترهای ورودی	محاسبه مشخصات هندسی مقاطع نامنظم	زیرمدل جریان غیرماندگار	در نظر گرفتن نگهداشت موقت	در نظر گرفتن جذب سینتیک
تحقیق حاضر	+	+	+	+	+
OTIS	-	-	-	+	+
MIKE 11	+	+	+	-	-

توضیح: علامت + به معنای داشتن مشخصه و علامت - به معنای فقدان آن است.

جدول ۲. مقایسه روش‌های عددی استفاده شده در ساختار سه مدل

مدل	روش گسسته‌سازی	روش عددی	پخشیدگی عددی
تحقیق حاضر	کرانک نیکلسون در زمان، QUICK در مکان	درجه دو در زمان درجه سه در مکان	عدد پکلت* کمتر از $\frac{8}{3}$
OTIS	کرانک نیکلسون در زمان، مرکزی در مکان	درجه دو در زمان درجه دو در مکان	عدد پکلت کمتر از ۲
MIKE 11	پسرو در زمان، مرکزی در مکان	درجه یک در زمان درجه دو در مکان	عدد پکلت کمتر از $U^2 \Delta t / 2$

\*  $(Pe = u \Delta x / D)$

که غلظت آن در مرز بالادست ۱۰۰ واحد غلظت است (۲۴). سایر مشخصات مسئله در جدول ۳ نشان داده شده‌اند. به منظور بررسی قابلیت‌های مدل در موارد سرعت جریان و غالب بودن فرایند جابه‌جایی و با توجه به اینکه عدد بدون بعد پکلت معیاری برای سنجش قدرت نسبی جابه‌جایی است، مسئله مذکور در سه حالت و با اعداد پکلت مختلف اجرا شد. مشخصات سه حالت اجرای مدل‌ها در جدول ۴ آورده شده‌اند.

### ۱.۳. مثال اول: انتقال ماده ردیاب با در نظر گرفتن زوال مرتبه اول

این مثال کاربرد سه مدل مورد بحث را در شبیه‌سازی انتقال ماده حل شده تحت تأثیر زوال مرتبه اول بدون در نظر گرفتن نگهداشت موقت و جذب سینتیک، در قالب مسئله‌ای فرضی نشان می‌دهد. ماده تجزیه‌پذیری<sup>۱</sup> در دوره زمانی دوساعته، وارد نهري با جریان یکنواخت و ماندگار می‌شود

1. Decaying substance



جدول ۳. مشخصات مثال فرضی رانکل (۱۹۹۶)

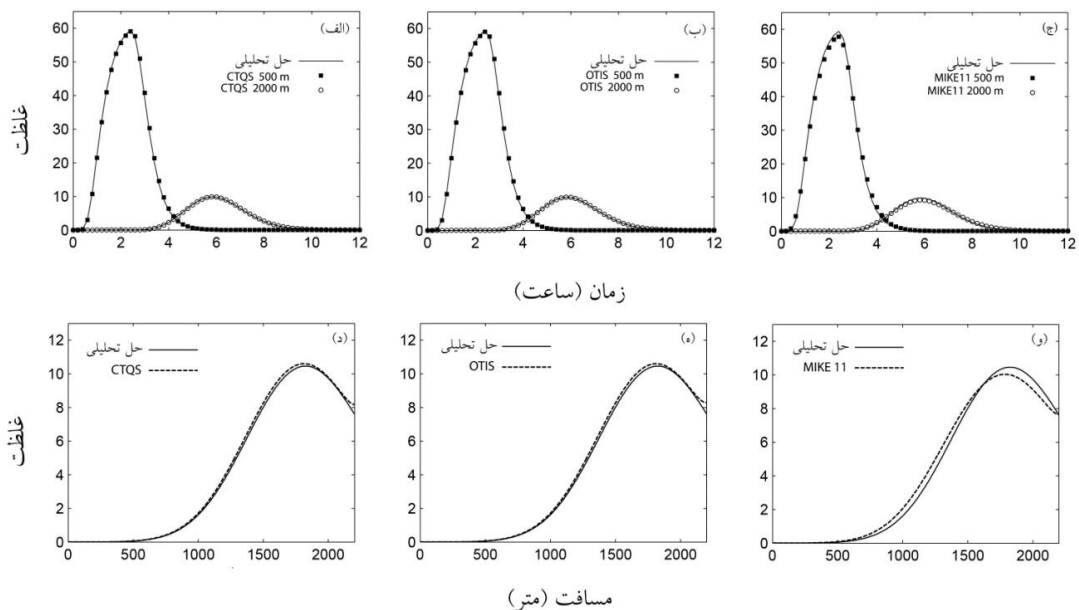
پارامتر	L (m)	Q (lit/s)	A (m <sup>2</sup> )	D (m <sup>2</sup> /s)	$\lambda$ (1/s)
	۲۲۰۰	۰/۱۲	۱	۵	۰/۰۰۰۰۲

جدول ۴. مشخصات سه حالت مختلف اجرای مدل‌ها

حالت	گام زمانی (m)	سرعت (m/s <sup>2</sup> )	عدد پکلت (Pe)
اول	۱۰	۰/۱۲	۰/۲۴
دوم	۱۰۰	۰/۱۲	۲/۴
سوم	۱۰۰	۰/۵	۱۰

مؤید این مطلب هستند. در حالت دوم، با بزرگ‌تر شدن گام مکانی محاسبات، همه روش‌ها پایین‌افتادگی در غلظت پیک را نشان می‌دهند. میزان این پایین‌افتادگی برای مدل MIKE11 بیشتر و برای مدل ارائه‌شده، کمتر از دو مدل دیگر است (شکل ۴ (الف) تا (ج)). شکل ۴ (د) تا (و) و شاخص‌های خطای جدول ۶ هم نشان می‌دهند که نتایج حاصل از دو مدلی که از روش مرکزی استفاده کرده‌اند، نسبت به مدل ارائه‌شده، اختلاف بیشتری با راه‌حل تحلیلی دارند.

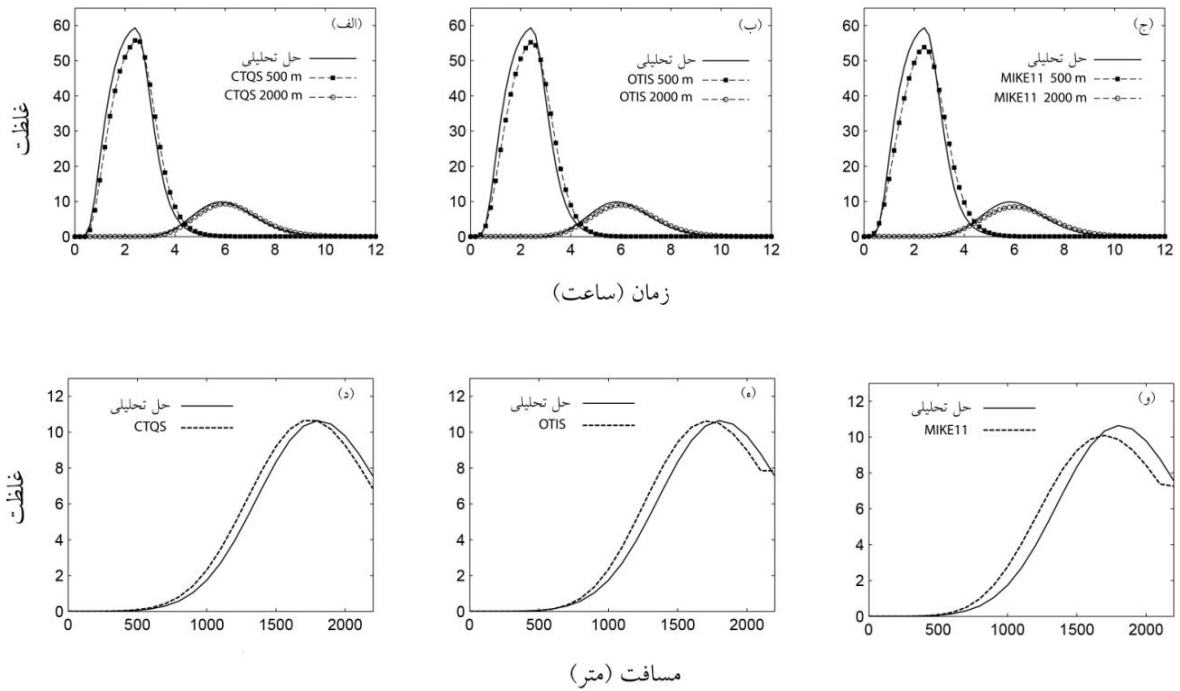
شکل‌های ۳ تا ۵ نتایج شبیه‌سازی مسئله را با استفاده از سه مدل عددی در مقایسه با حل تحلیلی نشان می‌دهند. شاخص‌های خطای هم در جداول ۵ و ۶ آورده شده‌اند. از شکل ۳ (الف) تا (ج) مشخص است که در حالت اول (عدد پکلت کمتر از دو)، تمام روش‌ها پروفیل زمانی غلظت را با دقت یکسانی شبیه‌سازی کرده‌اند. شکل ۳ (د) تا (و) هم نشان می‌دهد که عملکرد مدل MIKE11 در شبیه‌سازی پروفیل مکانی غلظت، تا حدودی نسبت به دو مدل دیگر ضعف دارد. شاخص‌های خطای جدول ۶ هم



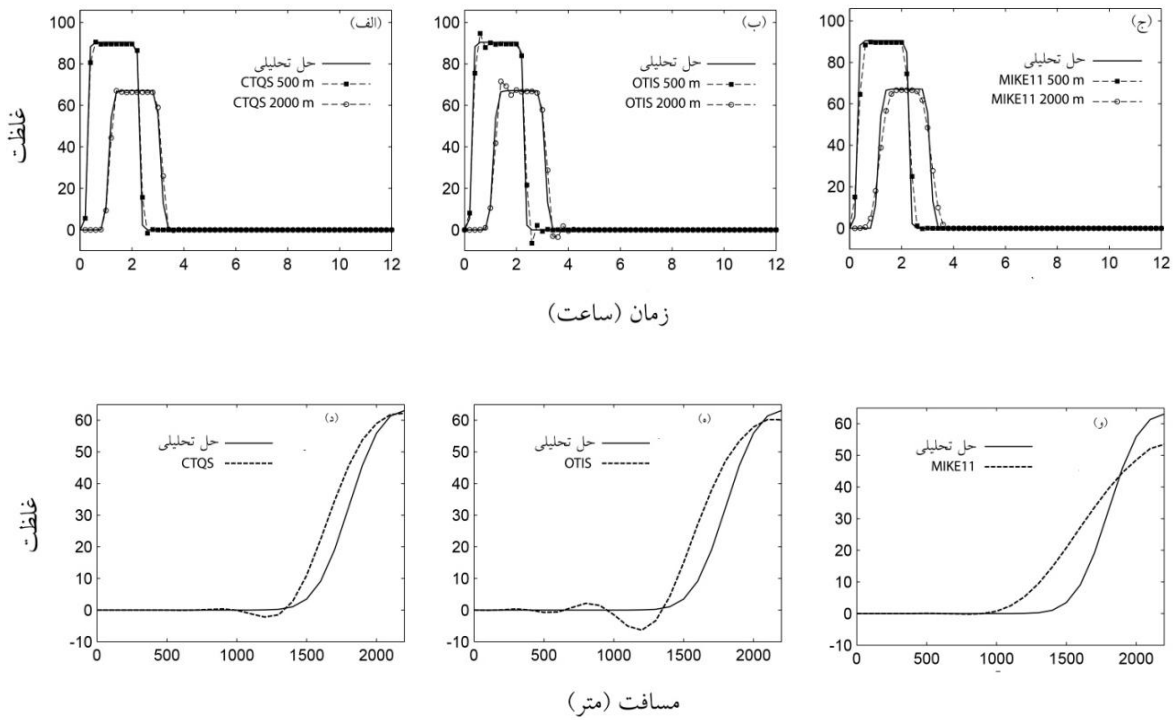
شکل ۳. نتایج اجرای سه مدل در مقایسه با راه‌حل تحلیلی در حالت اول

## مدیریت آب و آبیاری

دوره ۵ ■ شماره ۲ ■ پاییز و زمستان ۱۳۹۴



شکل ۴. نتایج اجرای سه مدل در مقایسه با راه حل تحلیلی در حالت دوم



شکل ۵. نتایج اجرای سه مدل در مقایسه با راه حل تحلیلی حالت سوم

### مدیریت آب و آبیاری

دوره ۵ ■ شماره ۲ ■ پاییز و زمستان ۱۳۹۴

مدل یک‌بعدی انتقال آلاینده در رودخانه‌های طبیعی با تأکید بر نقش نواحی نگهداشت

در مقایسه با نتایج مدل OTIS بسیار کم است (شکل ۵ (د)). البته نوسانات روش QUICK در موارد غالبیت جابه‌جایی کمتر از آنی است که به حل خدشه وارد کند (شکل ۵ (ج) و (و)) هم نشان می‌دهند که نتایج حاصل از مدل MIKE11 نسبت به مدل ارائه‌شده تطابق کمتری با نتایج حل تحلیلی دارد.

در حالت سوم، سرعت جریان به حدود چهار برابر افزایش یافته است. همان‌طور که در شکل ۵ (ج) مشخص است، با بزرگ‌تر شدن عدد پکلت، نتایج حاصل از مدل OTIS نوسانات زیادی در نزدیکی لبه‌ها دارد. نتایج حاصل از این مدل در پروفیل مکانی غلظت هم نوسانات بسیار شدیدی به شکل غلظت‌های منفی از خود نشان می‌دهد. (شکل ۵ (ه))؛ در حالی که نوسانات نتایج مدل ارائه‌شده

جدول ۵. شاخص‌های خطا برای پروفیل‌های زمانی غلظت در ۵۰۰ متری مثال اول

MIKE11	۵۰۰ متر		شاخص	
	OTIS	CTQS		
۹۹/۸	۹۹/۹۳	۹۹/۹۳	R <sup>2</sup> (%)	حالت اول
۰/۸۵	۰/۴۶	۰/۴۶	RMSE	
۰/۴۸	۰/۲۳۸	۰/۲۳۶	MAE	
۱/۷	۱	۰/۹	MRE (%)	
۹۷/۷۵	۹۷/۸۲	۹۸/۲۶	R <sup>2</sup> (%)	حالت دوم
۳/۲۴	۲/۹۸	۲/۶۶	RMSE	
۱/۷۳	۱/۵۵	۱/۴۲	MAE	
۴/۹۳	۴/۱۱	۳/۷۷	MRE (%)	
۹۸/۲۴	۹۸/۲	۹۸/۸	R <sup>2</sup> (%)	حالت سوم
۴/۴۶	۴/۴۱	۳/۶	RMSE	
۱/۱۷	۱/۱۲	۰/۸	MAE	
۲/۱۵	۱/۹۵	۱/۲۵	MRE (%)	

جدول ۶. شاخص‌های خطا برای پروفیل‌های مکانی غلظت مثال اول

MIKE11	شاخص			
	OTIS	CTQS		
۹۹/۹	۹۹/۹	۹۹/۹	R <sup>2</sup> (%)	حالت اول
۰/۳۶	۰/۱۵۴	۰/۱۴۶	RMSE	
۰/۲۸	۰/۱۰۸	۰/۱۰۵	MAE	
۳/۲	۱/۹۷	۱/۹۱	MRE (%)	
۹۶	۹۸	۹۸/۶	R <sup>2</sup> (%)	حالت دوم
۰/۸۶	۰/۶۵	۰/۵۳	RMSE	
۰/۶۴	۰/۴۷	۰/۴	MAE	
۱۱/۲	۶/۵۶	۵/۴	MRE (%)	
۸۸/۴	۹۲	۹۵/۷	R <sup>2</sup> (%)	حالت سوم
۷/۸۸	۷/۲۴	۵/۴۶	RMSE	
۵/۰۵	۴/۴۷	۳/۰۲	MAE	
۱۳/۵	۱۲/۴۴	۶/۲۷	MRE (%)	

مدیریت آب و آبیاری

### ۲.۳. مثال دوم: سری اول داده‌های واقعی، انتقال

#### ماده ردیاب با در نظر گرفتن نگهداشت موقت

این مثال با استفاده از داده‌های آزمایش تزریق ماده ردیاب واکنش‌ناپذیر کلراید به داخل یواس کریک کاربرد مدل نگهداشت موقت را برای داده‌های میدانی نشان می‌دهد. غلظت پس‌زمینه کلراید هنگام انجام آزمایش ۳/۷ میلی‌گرم بر لیتر اندازه‌گیری شد. هنگام انجام آزمایش جریان در یواس کریک غیریکنواخت و ماندگار بود. همچنین به منظور مدل‌سازی آزمایش مذکور، طول بازه مورد مطالعه به پنج بخش با فواصل ۳۸، ۱۰۵، ۲۸۱، ۴۳۳ و ۶۱۹ متری از محل تزریق تقسیم شد. جدول ۷ پارامترهای استفاده شده در شبیه‌سازی آزمایش یواس کریک از جمله طول هر بازه، ضریب پراکندگی، دبی، مساحت مقطع عرضی کانال اصلی نهر و ناحیه نگهداشت و ضریب تبادل را برای هر بازه نشان می‌دهد (۵). به منظور بررسی کارایی و دقت مدل عددی ارائه شده در این تحقیق و دو مدل OTIS و MIKE11 در شبیه‌سازی تأثیر فرایندهای فیزیکی (جابه‌جایی، پراکندگی و نگهداشت موقت) بر انتقال ماده حل شده در یک نهر کوهستانی دارای نواحی نگهداشت موقت، هر سه مدل برای این سری از داده‌های واقعی اجرا شدند. نتایج حاصل در قالب نمودارهای غلظت در برابر زمان و جدول شاخص‌های خطا در ادامه آورده شده‌اند.

دلیل تفاوت در نتایج حالت‌های مختلف اجرای مدل‌ها را می‌توان به تفاوت در نحوه تأثیر دو فرایند جابه‌جایی و پراکندگی بر انتقال ماده حل شده نسبت داد. فرایند پراکندگی توزیع ماده حل شده را در تمام جهات تحت تأثیر قرار می‌دهد؛ در حالی که جابه‌جایی تنها در جهت جریان اتفاق می‌افتد. این تفاوت اساسی، خود را در قالب محدودیت در اندازه شبکه محاسباتی نشان می‌دهد. روش‌های عددی که از روش مرکزی برای گسسته‌سازی مکانی معادلات استفاده می‌کنند، در مواردی که سرعت جریان زیاد و جابه‌جایی فرایند غالب انتقال است، نوسانات ساختگی ایجاد می‌کنند. راهی برای ایزین بردن این نوسانات، استفاده از شبکه‌بندی ریزتر، با انتخاب گام مکانی بر مبنای عدد بدون بعد پکلت است. گسسته‌سازی مکانی در عدد پکلت کمتر از دو می‌تواند نوسانات را حذف کند و انتخاب عدد پکلت کمتر از ۱۰ به طور نسبتاً زیادی این نوسانات را کاهش می‌دهد؛ اما هزینه محاسباتی سنگین ناشی از شبکه محاسباتی، به شدت ریز ممکن است در بعضی از کاربردها، به ویژه در رودخانه‌های طبیعی غیرعملی باشد. این در حالی است که روش‌های میان‌بایی بالادست درجه دوم مثل روش QUICK که در مدل استفاده شده است، به گونه‌ای طراحی شده که بر این رفتار نوسانی فائق آید. این روش‌ها با گام‌های زمانی بزرگ‌تر نسبت به روش مرکزی با دقت قابل ملاحظه مسئله را مدل‌سازی می‌کنند (۲۹).

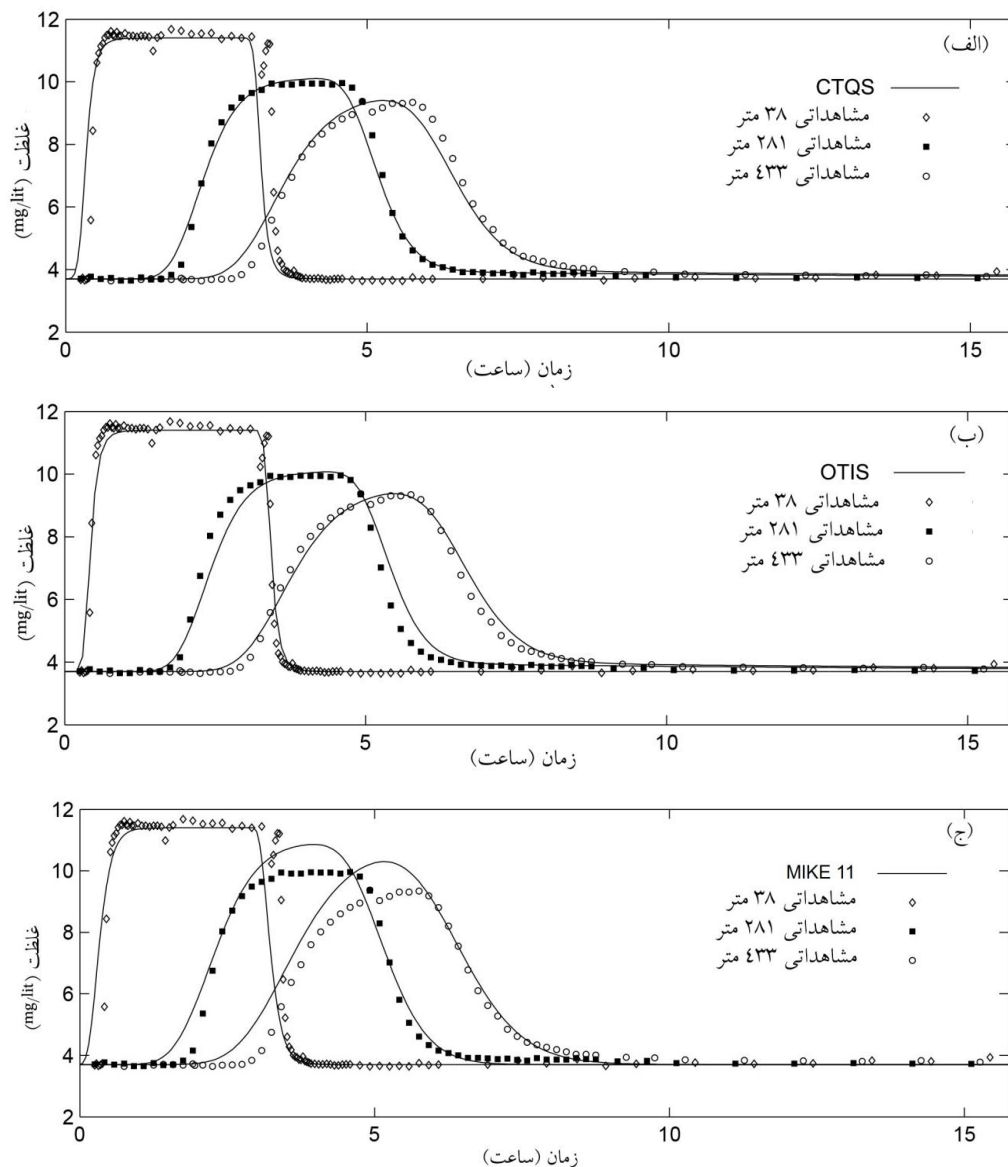
جدول ۷. پارامترهای شبیه‌سازی در آزمایش یواس کریک

ضریب تبادل	مساحت مقطع عرضی		ضریب پراکندگی (m <sup>2</sup> /s)	دبی (m <sup>3</sup> /s)	بازه (m)
	ناحیه نگهداشت	کانال اصلی			
۰	۰	۰/۳	۰/۱۲	۰/۰۱۲۵	۰-۳۸
۰	۰	۰/۴۲	۰/۱۵	۰/۰۱۲۵	۳۸-۱۰۵
۳×۱۰ <sup>-۵</sup>	۰/۳۶	۰/۳۶	۰/۲۴	۰/۰۱۳۳	۱۰۵-۲۸۱
۱×۱۰ <sup>-۵</sup>	۰/۴۱	۰/۴۱	۰/۳۱	۰/۰۱۳۶	۲۸۱-۴۳۳
۴/۵×۱۰ <sup>-۵</sup>	۱/۵۶	۰/۵۲	۰/۴	۰/۰۱۴	۴۳۳-۶۱۹

مدل یک‌بعدی انتقال آلاینده در رودخانه‌های طبیعی با تأکید بر نقش نواحی نگهداشت

(الف) و (ب) نشان می‌دهد که مدل ارائه‌شده و مدل OTIS در مدل‌سازی غلظت پیک دقت خوبی دارند و مدل CTQS در مدل‌سازی دنباله بالارونده نمودار غلظت به‌ویژه در ایستگاه ۲۸۱ متری، عملکرد بهتری دارد. شکل (ج) نتایج حاصل از مدل MIKE11 را نشان می‌دهد.

شکل ۶ (الف) تا (ج)، غلظت شبیه‌سازی‌شده کلراید در کانال اصلی را با استفاده از سه مدل مورد بحث نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل و شاخص‌های خطای جدول ۸ هم مشخص است، مدل ارائه‌شده در این تحقیق نتایج آزمایش مذکور را نسبت به دو مدل دیگر با دقت مطلوب‌تری شبیه‌سازی کرده است. مقایسه دو شکل ۶



شکل ۶. غلظت مشاهده‌شده و شبیه‌سازی‌شده کلراید در کانال اصلی در سه ایستگاه ۳۸، ۲۸۱ و ۴۳۳ متری

یواس کریک با استفاده از مدل (الف) CTQS، (ب) OTIS و (ج) MIKE11.

## مدیریت آب و آبیاری

دوره ۵ ■ شماره ۲ ■ پاییز و زمستان ۱۳۹۴

تئوری بیان شده بود، به خوبی در قالب داده‌های مشاهداتی ارائه می‌کند. این شکل نشان می‌دهد که به تدریج و با گذشت زمان از شروع شبیه‌سازی، از غلظت کانال اصلی کم شده و به غلظت ناحیه نگهداشت افزوده می‌شود. به عبارت دیگر، این نواحی ابتدا به عنوان سینک عمل می‌کنند و بعد از عبور پالس ماده حل شده در نقش منبعی از ماده حل شده ظاهر می‌شوند. اگر زمان طولانی‌تری برای شبیه‌سازی در نظر گرفته شود، مثلاً چند روز یا حتی چندین هفته، می‌توان به تعادل رسیدن غلظت در کانال اصلی و ناحیه نگهداشت و بازگشت غلظت در هر دو ناحیه به سطح غلظت پس‌زمینه را هم مشاهده کرد. این مثال تأثیر فرایندهای فیزیکی را بر انتقال ماده حل شده و لزوم در نظر گرفتن تأثیر نگهداشت موقت بر انتقال ماده حل شده در نهرها و رودخانه‌های طبیعی را به منظور حصول به نتایج دقیق‌تر نشان داد. در مثال بعد، تأثیر توأمان فرایندهای فیزیکی و شیمیایی بر انتقال ماده حل شده بررسی می‌شود.

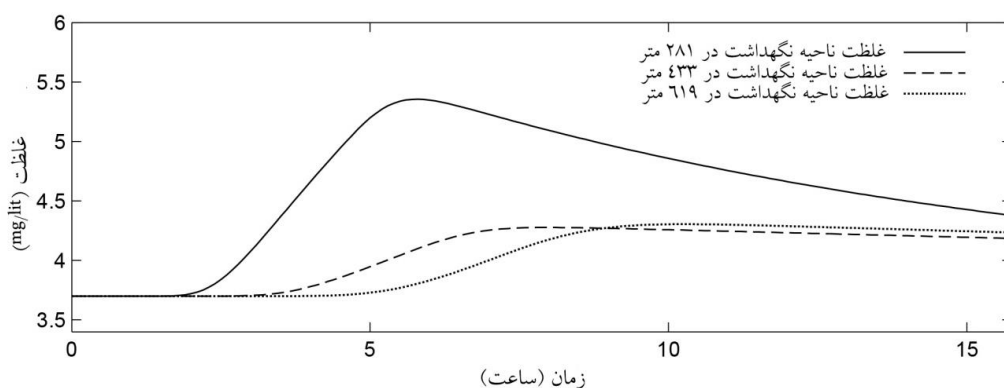
به دلیل استفاده مدل از معادله کلاسیک ADE و در نظر گرفتن تأثیر فرایند نگهداشت موقت، نتایج به خصوص در غلظت پیک تفاوت درخور ملاحظه‌ای با داده‌های مشاهداتی دارند. البته در ایستگاه ۳۸ متری که نگهداشت موقت جزو فرایندهای دخیل در انتقال محسوب نمی‌شود ( $\alpha=0$ )، نتایج هر سه مدل اختلاف بسیار کمی با داده‌های مشاهداتی دارند (جدول ۸).

شکل ۷ مقادیر غلظت شبیه‌سازی کلراید را در ناحیه نگهداشت نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل هم مشخص است، نمودارهای غلظت در برابر زمان ماده حل شده در ناحیه نگهداشت، دنباله طولانی‌تری از نمودارهای غلظت در برابر زمان کانال اصلی دارند. این بدان معنا است که بخشی از جرم ماده حل شده تا مدت‌ها پس از عبور پالس ماده حل شده، در این نواحی باقی می‌ماند و بعد از عبور کامل پالس از نهر، به تدریج به کانال اصلی برمی‌گردد.

شکل ۸ مفهوم نگهداشت موقت را که قبلاً به صورت

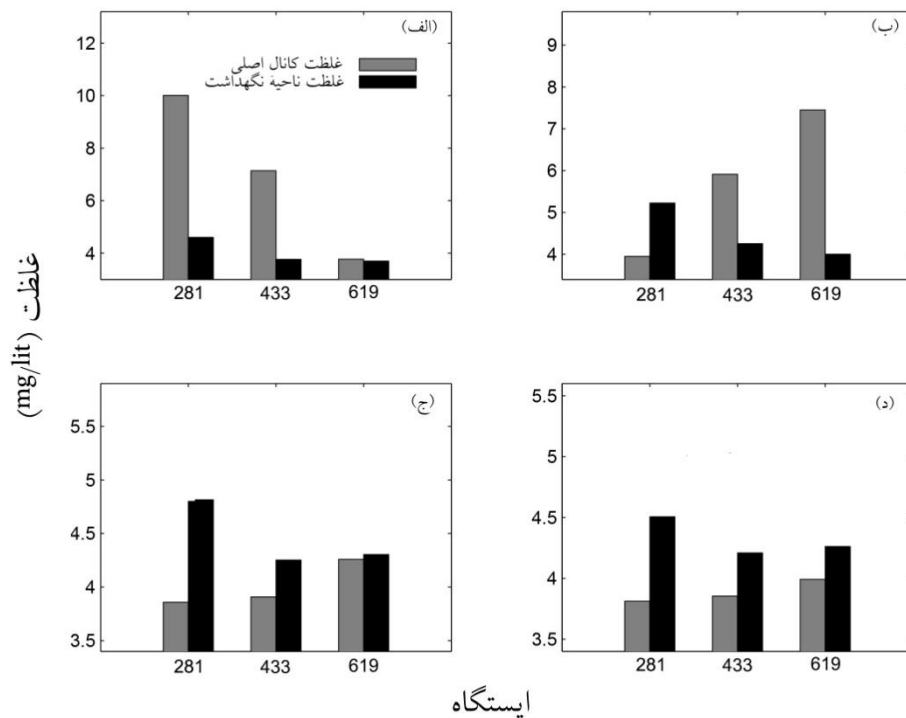
جدول ۸. شاخص‌های خطا مثال دوم

ایستگاه ۴۳۳ متر			ایستگاه ۲۸۱ متر			ایستگاه ۳۸ متر			شاخص
MIKE11	OTIS	CTQS	MIKE11	OTIS	CTQS	MIKE11	OTIS	CTQS	
۹۷/۸۲	۹۸/۸	۹۸/۸۴	۹۹/۱	۹۹/۳۱	۹۹/۴	۹۴/۱	۹۴/۲	۹۴/۳	R <sup>2</sup> (%)
۰/۴۴	۰/۲۰۵	۰/۲۰۳	۰/۳۴	۰/۱۸۳	۰/۱۸	۰/۷۳	۰/۷۲۸	۰/۷۲۷	RMSE (mg/L)
۰/۲۸	۰/۱۲۵	۰/۱۲۱	۰/۲۰۵	۰/۱۰۹	۰/۱۰۸	۰/۲۱۲	۰/۲۰۳	۰/۲۰۲	MAE(mg/L)
۵/۳	۲/۴	۲/۲۷	۳/۶	۲/۰۸	۲/۰۷۵	۳/۶۸	۳/۵۵	۳/۵	MRE (%)



شکل ۷. غلظت مشاهده‌شده و شبیه‌سازی شده کلراید در ناحیه نگهداشت در سه ایستگاه ۲۸۱، ۴۳۳ و ۶۱۹ متری یواس کریک

## مدل یک‌بعدی انتقال آلاینده در رودخانه‌های طبیعی با تأکید بر نقش نواحی نگهداشت



شکل ۸. مقایسه مقادیر غلظت در کانال اصلی (ستون سمت چپ) و ناحیه نگهداشت (ستون سمت راست) در سه ایستگاه ۲۸۱، ۴۳۳ و ۶۱۹متری یواس کریک در زمان‌های مختلف (الف) ۴٫۵، (ب) ۷، (ج) ۱۰٫۵ و (د) ۱۴ ساعت پس از شروع شبیه‌سازی

بستر، شدیدتر از آنی بود که در جریان با دبی بالا اتفاق می‌افتد. بنابراین، در مدل‌سازی این آزمایش باید فرایند جذب در نظر گرفته شود. پارامترهای استفاده‌شده در شبیه‌سازی فرایند جذب در جدول ۹ نشان داده شده‌اند. نکته قابل تأمل در مورد داده‌های این جدول، تفاوت فراوان در مقدار ضریب جذب در کانال اصلی و ناحیه نگهداشت به دلیل ویژگی‌های کاملاً متفاوت این دو ناحیه است. جرم در دسترس رسوب در حجم آب ( $\rho$ ) در دو بازه اول و آخر  $4 \times 10^4$  و در بقیه بازه‌ها  $2 \times 10^4$  در نظر گرفته شد. سایر پارامترهای استفاده‌شده در شبیه‌سازی این آزمایش از جمله طول هر بازه، ضریب پراکندگی، دبی، مساحت مقطع عرضی کانال اصلی نهر و ناحیه نگهداشت و ضریب تبادل برای هر بازه، مشابه پارامترهای ذکر شده در جدول ۷ است.

### ۳.۳. مثال سوم: سری دوم داده‌های واقعی، انتقال همراه با جذب در بستر نهر

هدف از این مثال، نشان دادن توانایی مدل ارائه‌شده در زمینه مدل‌سازی انتقال مواد واکنش‌دهنده در رودخانه‌های طبیعی و نشان دادن چگونگی تأثیر فعل و انفعالات فرایندهای فیزیکی و شیمیایی بر انتقال است. به این منظور، از مشخصات آزمایش میدانی تریق سه‌ساعته ماده واکنش‌دهنده استرانتیوم<sup>۱</sup> به داخل نهر یواس کریک استفاده شده است (۲). آزمایش تحت شرایط جریان با دبی کم انجام شد؛ بنابراین، به دلیل فرصت زیاد ماده حل‌شده برای تماس مکرر با مواد نسبتاً بی‌حرکت بستر نهر، فعل و انفعالات آن با بستر نهر و جذب آن در رسوبات

1. Strontium

جدول ۹. پارامترهای استفاده شده در شبیه سازی فرایند جذب سیستیک

غلظت ورودی (mg/L)	غلظت پس زمینه (mg/L)			ضریب نرخ جذب ( $s^{-1}$ )		ضریب توزیع $K_d$ ( $m^2/s$ )
	رسوبات بستر	ناحیه نگهداشت	کانال اصلی	ناحیه نگهداشت	کانال اصلی	
۱/۷۳	$9/1 \times 10^{-3}$	۰/۱۳	۰/۱۳	۱	$56 \times 10^{-6}$	۷۰

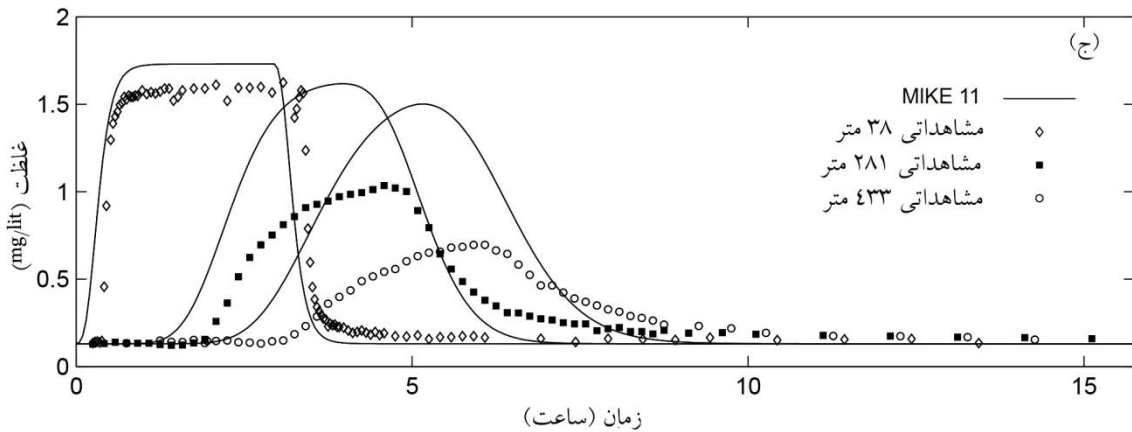
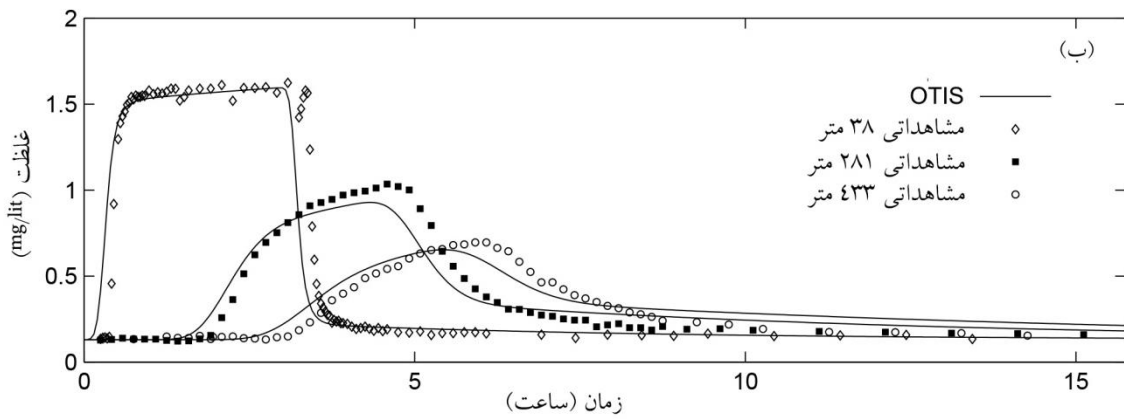
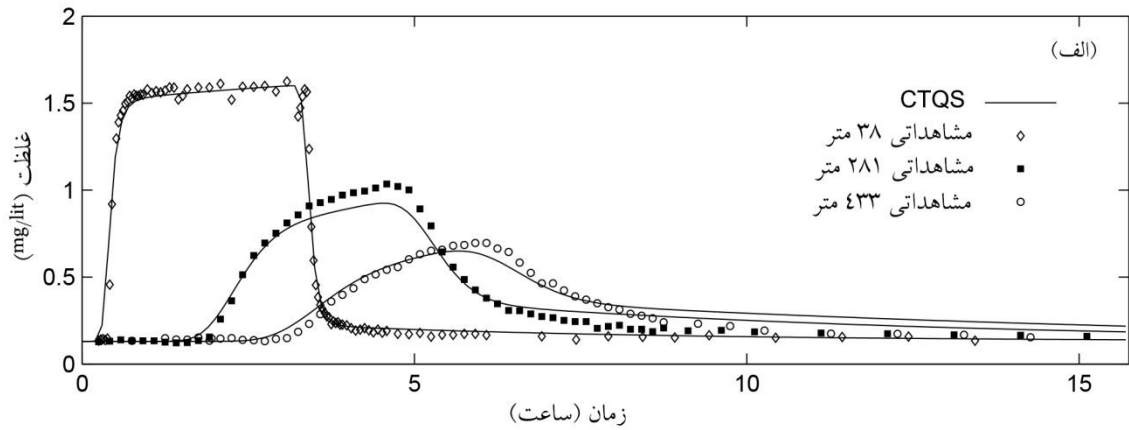
در شکل ۱۱، میزان غلظت جذب شده استرانتیوم در سه زمان مختلف (ابتدا، میانه و انتهای شبیه سازی) در تمامی ایستگاه های نمونه برداری ارائه شده است که به وضوح جذب ماده حل شده در رسوبات بستر و باز جذب آن را نشان می دهد. برای ایستگاه های ۳۸ و ۱۰۵ متری که نواحی نگهداشت ندارند ( $\alpha=0$ )، تغییر در سطوح غلظت در فاصله زمانی بین میانه شبیه سازی تا انتهای آن بسیار زیاد است؛ یعنی مقدار زیادی از استرانتیوم جذب شده به سرعت، دوباره به جریان آب نهر بازمی گردد؛ اما در سایر ایستگاه ها که دارای نواحی نگهداشت هستند، این روند کمی آهسته تر است؛ به خصوص در ایستگاه ۶۱۹ متری که تبادل با نگهداشت بیشتر از سایر ایستگاه ها است (به دلیل ضریب تبادل و مساحت ناحیه نگهداشت بزرگ تر از سایر ایستگاه ها)، مشاهده می شود که با رسیدن به انتهای زمان شبیه سازی همچنان به میزان غلظت جذب شده در رسوبات اضافه می شود و باز جذب هنوز اتفاق نیفتاده است. به عبارت دیگر، وجود نواحی نگهداشت در باز جذب استرانتیوم از رسوبات تأخیر ایجاد کرده است. دلیل این امر طولانی تر بودن ترکیب زمانی انتقال استرانتیوم به داخل ناحیه نگهداشت، باز جذب آن و بازگشت آن به داخل کانال اصلی، در مقایسه با زمان عبور پالس ماده حل شده است.

شکل ۹ (الف) تا (ج) نتایج حاصل از شبیه سازی انتقال ماده حل شده در این نهر را با استفاده از سه مدل بررسی شده در مقایسه با داده های مشاهداتی نشان می دهد. با توجه به شکل ۹ می توان گفت نتایج مدل ارائه شده در این تحقیق، نسبت به دو مدل دیگر، تطابق بهتر و مقبول تری در شکل عمومی نمودار، غلظت پیک و زمان رسیدن به پیک با داده های مشاهداتی دارد. شاخص های خطای ارائه شده در جدول ۱۰ هم این مطلب را تأیید می کنند.

شکل ۹ (ج) به خوبی نشان می دهد که لحاظ نکردن تأثیر نگهداشت موقت و جذب بر انتقال در مدل MIKE11، سبب نتایج بسیار متفاوت از داده های واقعی شده است. نتایج حاصل از این مدل به ویژه برای ایستگاه ۳۸ متری که ضریب تبادل با ناحیه نگهداشت صفر در نظر گرفته شده است، تأثیر مستقیم جذب بر انتقال را به شکل پایین افتادگی در پیک نمودار غلظت نشان می دهد. شکل نتایج مدل سازی غلظت جذب شده را در برابر غلظت مشاهده شده، در دو ایستگاه ۱۰۵ و ۲۸۱ متری، با استفاده از دو مدل CTQS و OTIS نشان می دهد. همان طور که از شکل و شاخص های خطای جدول ۱۱ مشخص است، نتایج حاصل از مدل ارائه شده نسبت به مدل OTIS تطابق بهتری با داده های مشاهداتی دارند. این امر را می توان به تفاوت در دقت روش های عددی استفاده شده در دو مدل نسبت داد.



مدل یک‌بعدی انتقال آلاینده در رودخانه‌های طبیعی با تأکید بر نقش نواحی نگهداشت

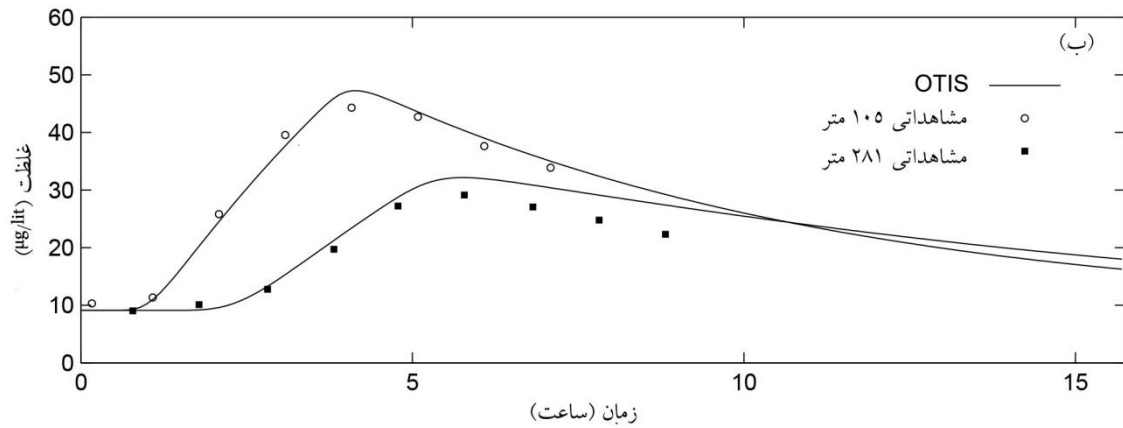
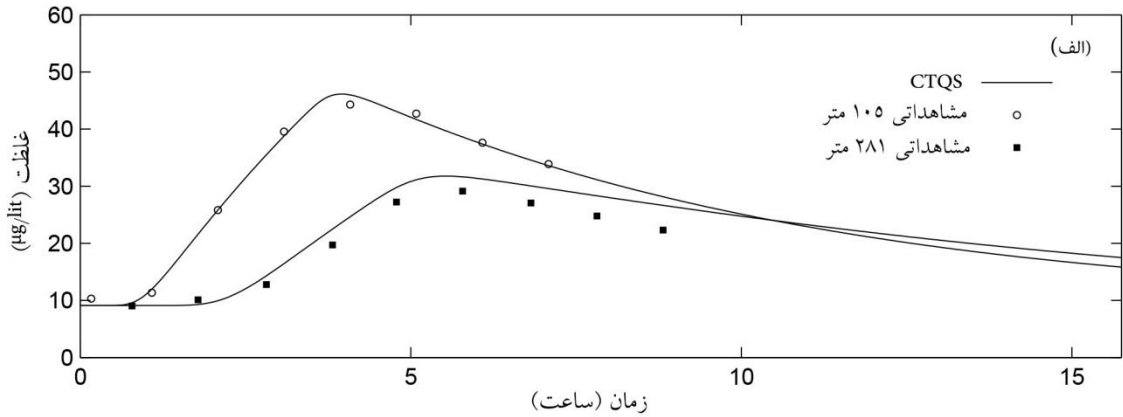


شکل ۹. غلظت مشاهده شده و شبیه‌سازی شده استراتیوم در کانال اصلی با در نظر گرفتن فرایندهای فیزیکی و شیمیایی، در سه

ایستگاه ۳۸، ۲۸۱ و ۴۳۳ متری یواس کریک با استفاده از مدل (الف) CTQS، (ب) OTIS و (ج) MIKE11

## مدیریت آب و آبیاری

دوره ۵ شماره ۲ پاییز و زمستان ۱۳۹۴



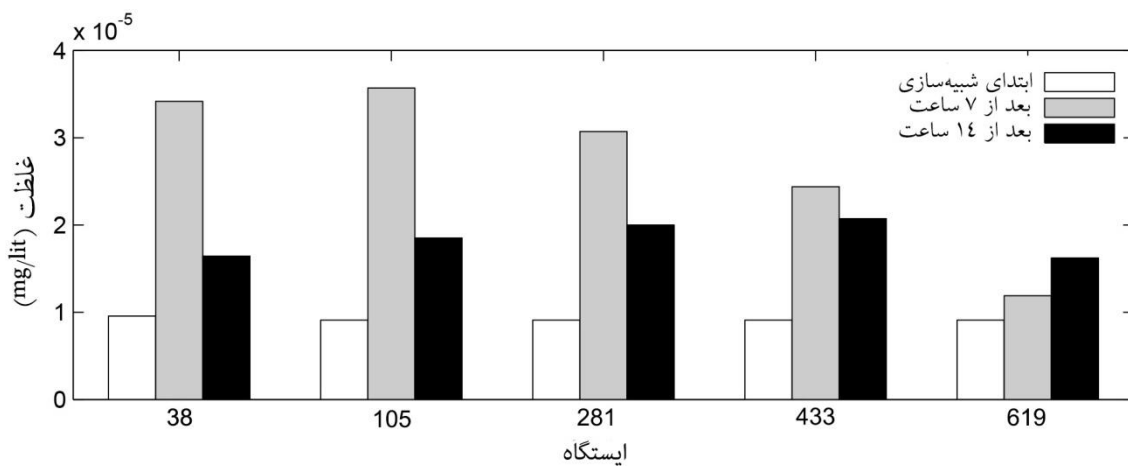
شکل ۱۰. غلظت جذب شده مشاهداتی و شبیه سازی شده استرانتیوم در دو ایستگاه ۱۰۵ و ۲۸۱ متری یواس کریک با استفاده از دو مدل (الف) CTQS و (ب) OTIS

جدول ۱۰. شاخص های خطا سه ایستگاه ۳۸، ۲۸۱ و ۴۳۳ متری در مثال سوم

ایستگاه ۴۳۳ متر			ایستگاه ۲۸۱ متر			ایستگاه ۳۸ متر			شاخص
MIKE11	OTIS	CTQS	MIKE11	OTIS	CTQS	MIKE11	OTIS	CTQS	
۸۰/۲	۹۰	۹۳/۶	۹۰/۸	۹۶	۹۹	۹۳	۹۳/۱۷	۹۹/۳	R <sup>2</sup> (%)
۰/۲۶	۰/۰۶۷	۰/۰۶	۰/۲	۰/۰۷	۰/۰۵۵	۰/۱۷	۰/۱۲	۰/۰۵	RMSE (mg/m <sup>3</sup> )
۰/۱۵	۰/۰۶	۰/۰۵	۰/۱۱۵	۰/۰۵۵	۰/۰۴۸	۰/۰۸۶	۰/۰۴۴	۰/۰۲۱	MAE(mg/m <sup>3</sup> )
۴۰	۲۰/۷	۱۷/۴	۲۷/۴	۱۸	۱۳/۶	۲۴/۶	۱۱/۸	۶/۴	MRE (%)

جدول ۱۱. شاخص‌های خطا در ایستگاه‌های ۱۰۵ و ۲۸۱ متری در مثال سوم

شاخص	ایستگاه ۲۸۱ متر		ایستگاه ۱۰۵ متر	
	OTIS	CTQS	OTIS	CTQS
R <sup>2</sup> (%)	۹۸/۶	۹۹/۱۶	۹۹/۳	۹۹/۴
RMSE (mg/L)	۲/۸۶	۲/۶۷	۱/۶۴	۱/۰۵
MAE(mg/L)	۲/۴۱	۲/۴	۱/۵	۰/۷۵
MRE (%)	۱۰/۸	۱۰/۵	۵/۶۶	۳/۰۴



شکل ۱۱. غلظت جذب‌شده استرانتیوم در زمان‌های مختلف در پنج ایستگاه مشاهداتی یواس کریک

#### ۴. نتیجه‌گیری

حالی است که در نهر کوهستانی کوچک با مورفولوژی پیچیده با دبی جریان نسبتاً کم، تأثیر فرایند نگهداشت موقت و جذب سینتیک ماده حل‌شده در رسوبات بستر نهر در مقایسه با سایر مکانیسم‌ها، نقش پررنگ‌تری در این زمینه ایفا می‌کند. بنابراین، ارائه مدلی جامع ضروری است که تأثیر تمامی این فرایندها را بر انتقال در نظر بگیرد و دقت بسیاری هم در مدل‌سازی نهرها و رودخانه‌ها با شرایط فیزیکی متفاوت تحت انواع رژیم‌های جریان داشته باشد.

از طرف دیگر، بررسی مدل‌های عددی و نرم‌افزارهای تجاری که تاکنون برای حل مسئله انتقال ماده حل‌شده در رودخانه‌ها ارائه شده‌اند، نشان داد که هر یک از آنها

با توجه به رشد روزافزون نگرانی‌های زیست‌محیطی در سال‌های اخیر و لزوم مدیریت دقیق و بهینه منابع آبی موجود، توسعه مدل‌های کامپیوتری برای پیش‌بینی انتشار آلاینده‌ها در نهرها و رودخانه‌ها ضروری به نظر می‌رسد. از طرفی، نتایج آزمایش‌های میدانی نشان داده است که فعل‌وانفعالات بین مکانیسم‌های فیزیکی و شیمیایی دخیل در انتقال ماده حل‌شده، در نهرهای مختلف با درجات متفاوتی اتفاق می‌افتد. برای مثال، در یک کانال یکنواخت با غلظت‌های بالا از رسوبات معلق با دبی جریان نسبتاً زیاد، نگهداشت فیزیکی و شیمیایی ماده حل‌شده در مقایسه با فرایند جابه‌جایی تأثیر کمتری بر انتقال دارد. این در

جزئی حاکم بر پدیده را به دست می‌دهند، دقت، پایداری و انعطاف‌پذیری حل از اهمیت فراوانی برخوردار است. از نظر تئوری، در گسسته‌سازی معادلات به روش‌های عددی، در صورتی که تعداد بازه‌های محاسباتی به سمت بی‌نهایت میل کند، نتایج حاصل از تمام روش‌های عددی کاملاً با حل دقیق مسئله تطابق خواهد داشت؛ اما در عمل این امر مطلوب نیست و روش عددی برتری دارد که با تعداد کمتری از سلول‌های محاسباتی، نتیجه دقیق‌تری به دست بدهد.

در این تحقیق، مدلی جامع برای تلفیق الگوهای عددی دقیق‌تر برای حل عددی معادلات جابه‌جایی پراکندگی با لحاظ نگهداشت موقت و جذب سینتیک در حالت وجود جریان غیرماندگار در رودخانه‌ها با مقطع نامنظم ارائه شد تا نواقص موجود در مدل‌های رایج در زمینه شبیه‌سازی انتقال آلاینده را مرتفع سازد. بدین منظور، از روش QUICK به دلیل پایداری و خطاهای تقریب کم و در گسسته‌سازی مکانی از معادله جابه‌جایی - پراکندگی با لحاظ نگهداشت موقت و جذب استفاده شد.

دقت روش عددی ارائه‌شده در این تحقیق در مقایسه با دو مدل دیگر، در قالب مثالی ساده آزموده شد که فقط دو فرایند جابه‌جایی و پراکندگی را در نظر می‌گرفت. نتایج نشان داد که برای رسیدن به راه‌حل پایدار با استفاده از روش گسسته‌سازی مکانی مرکزی، باید گام مکانی محاسبات به دقت انتخاب شود. نتایج همچنین نشان داد که استفاده از روش‌های میان‌یابی بالادست درجه دوم مثل روش QUICK دامنه پایداری حل عددی معادلات انتقال ماده حل‌شده را گسترش می‌دهد (اعداد پکلت بالاتر) و در عین حفظ حد قابل قبولی از دقت، امکان استفاده از شبکه‌بندی درشت‌تر را فراهم می‌آورد.

سپس کاربرد مدل در مقایسه با دو مدل رایج فعلی در قالب دو سری داده واقعی نشان داده شد. نتایج مثال دوم

به‌نوعی بخشی از مسئله را نادیده می‌گیرند و فاقد جامعیت کافی در برخورد با مسئله هستند. برای مثال، با اینکه در حال حاضر به‌طور گسترده و فزاینده‌ای پذیرفته شده است که برای مدل‌سازی دقیق انتقال ماده حل‌شده در نه‌رها و رودخانه‌های طبیعی، باید تأثیر نواحی نگهداشت موقت در نظر گرفته شود و معادله کلاسیک ADE در این موارد کارایی را لازم را ندارد و حتی ضعف جدی دارد، باز هم اکثر مدل‌های رایج در برخورد با موضوع انتقال از این معادله استفاده می‌کنند که از جمله آن‌ها می‌توان به نرم‌افزار MIKE11 اشاره کرد.

نکته مهم دیگری که در اکثریت قریب به اتفاق مدل‌های متداول از آن غفلت شده است، تأثیر نواحی نگهداشت موقت بر فرایند جذب ماده حل‌شده و واکنش‌پذیر در رسوبات بستر نهر است. همان‌طور که نتایج هم‌نشان داد، این نواحی با حبس موقتی بخشی از جرم ماده حل‌شده، باعث تماس طولانی‌تر این مواد با رسوبات بستر نهر و تأخیر در بازجذب آن می‌شوند که با تشدید فرایند جذب، سبب حادث‌شدن آلودگی و تبعات آن، به‌ویژه در نهرهای کوهستانی دارای نواحی نگهداشت می‌شود. در حال حاضر، تنها مدل عددی که برای حل معادله جابه‌جایی - پراکندگی با لحاظ تأثیر نواحی نگهداشت موقت و جذب سینتیک (با در نظر گرفتن تفاوت رفتار کانال اصلی و ناحیه نگهداشت در مواجهه با ماده حل‌شده قابل جذب) در دسترس محققان قرار دارد، مدل OTIS است که خود معایب بسیاری دارد که از آن جمله می‌توان به عدم محاسبه مستقیم پارامترهای هندسی مقطع نامنظم، نداشتن برنامه روندیابی جریان و محدودیت در تعداد پارامترهای ورودی اشاره کرد.

نکته دیگری که باید به آن توجه شود، الگوی عددی استفاده‌شده در ساختار مدل است. با توجه به اینکه مدل‌های عددی، نوعی حل تقریبی از معادلات دیفرانسیل

3. Bencala K E (1984) Interactions of solutes and streambed sediment: 2. A dynamic analysis of coupled hydrologic and chemical processes that determine solute transport. *Water Resources Research*, 20: 1804-1814.
4. Bencala K E, Mcknight D M and Zellweger G W (1990) Characterization of transport in an acidic and metal rich mountain stream based on a lithium tracer injection and simulations of transient storage. *Water Resources Research*. 26: 989-1000.
5. Bencala K E and Walters R A (1983) Simulation of Solute Transport in a Mountain Pool-and-Riffle Stream: A Transient Storage Model. *Water Resources Research*. 19: 718-724.
6. Chapra S C and Runkel R L (1999) Modeling impact of storage zones on stream dissolved oxygen. *Environmental Engineering*. 125: 415-419.
7. Chapra S C and Wilcock R J (2000) Transient storage and gas transfer in lowland stream. *environmental engineering*. 126: 708-712.
8. Czernuszenko W, Rowinski P-M and Sukhodolov A (1998) Experimental and numerical validation of the dead-zone model for longitudinal dispersion in rivers. *Hydraulic Research*. 36: 269-280.
9. D'Angelo D, Webster J, Gregory S and Meyer J (1993) Transient storage in Appalachian and Cascade mountain streams as related to hydraulic characteristics. *North American Benthological Society*. 12(3): 223-235.
10. Day T J (1975) Longitudinal dispersion in natural channels. *Water Resources Research* 11: 909-918.
11. Ensign S H and Doyle M W (2005) In-channel transient storage and associated nutrient retention: Evidence from experimental manipulations. *Limnology and Oceanography*. 50 (6): 1740-1751.

برای مادهٔ ردیاب غیرواکنش‌دهنده (کلراید) نشان داد که علاوه بر مکانیسم‌های استاندارد جابه‌جایی و پراکندگی، مکانیسم نگهداشت موقت هم بر سطوح غلظت در پایین دست تأثیر می‌گذارد. نتایج مثال سوم هم نشان داد که جذب مواد ردیاب واکنش‌دهندهٔ قابل جذب (استرانتیوم) در رسوبات بستر نهر، در کاهش غلظت در پایین دست نقش دارد. این مطلب به‌ویژه در مواردی که آلودگی با بقایای کودها و سموم کشاورزی وجود دارد، حائز اهمیت است؛ زیرا این فرایند ممکن است بر موجودات آبزی و محیط آبی به‌شدت تأثیر بگذارد. بنابراین، به‌منظور پیش‌بینی دقیق انتقال آلاینده باید تأثیر نواحی نگهداشت و جذب مادهٔ آلاینده در رسوبات بستر نهر در نظر گرفته شود. در مجموع، با توجه به نکات ذکر شده و نتایج به‌دست‌آمده، می‌توان گفت که مدل ارائه‌شده در این تحقیق مدلی جامع و کاربردی است که قابلیت شبیه‌سازی مسئلهٔ انتقال هر نوع مادهٔ حل‌شده (واکنش‌پذیر و غیرواکنش‌پذیر)، در هر دو حالت با در نظر گرفتن و بدون در نظر گرفتن نگهداشت موقت، تحت رژیم‌های جریان ماندگار و غیرماندگار در رودخانه‌ها با مقطع نامنظم و بدون محدودیت در تعداد مقاطع را به‌صورت توأمان دارد که از این نظر، نسبت به سایر مدل‌هایی که تاکنون ارائه شده‌اند، منحصر به فرد است. بنابراین، می‌توان آن را به‌عنوان جایگزینی مناسب برای مدل‌های رایج فعلی مطالعات مربوط به انتقال مادهٔ حل‌شده در نهرها و رودخانه‌های طبیعی پیشنهاد کرد.

## منابع

1. Beltaos S and Day T (1978) A field study of longitudinal dispersion. *Canadian Civil Engineering*. 5: 572-585.
2. Bencala K E (1983) Simulation of solute transport in a mountain pool and riffle stream with a kinetic mass transfer model for sorption. *Water Resources Research*, 19: 732-738.

12. Fernald A G, Wigington P and Landers D H (2001) Transient storage and hyporheic flow along the Willamette River, Oregon: Field measurements and model estimates. *Water Resources Research*, 37(6):1681-1694.
13. Gooseff M N, Bencala K E and Wondzell S M (2008) Solute transport along stream and river networks. In: Stephen P Rice, Andr'e G Roy and Bruce L Rhoads (Eds), *River Confluences, Tributaries and the Fluvial Network*. John Wiley & Sons, Ltd. pp.395-418.
14. Jackman A, Walters R and Kennedy V (1984) Transport and concentration controls for chloride, strontium, potassium and lead in Uvas Creek, a small cobble-bed stream in Santa Clara County, California, USA: 2. Mathematical modeling. *hydrology*. 75: 111-141.
15. Jin L, Siegel D I, Lautz L K and Otz M H (2009) Transient storage and downstream solute transport in nested stream reaches affected by beaver dams. *Hydrological processes*. 23: 2438-2449.
16. Kazezyilmaz-alhan C M and Medina Jr M A (2006) Stream solute transport incorporating hyporheic zone processes. *Hydrology*, 329: 26-38.
17. Kelleher C, Wagener T, Mcglynn B, Ward A, Gooseff M and Payn R, (2013) Identifiability of transient storage model parameters along a mountain stream. *Water Resources Research*. 49: 5290-5306.
18. Laenen A and Bencala K E (2001) Transient storage assessments of dyetracer injections in rivers of the willamette basin, Oregon. *JAWRA*, 37(2):367-377.
19. Leonard B P (1979) A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computer methods in applied mechanics and engineering*. 19: 59-98.
20. Lin Y-C and Medina JR, M A (2003). Incorporating transient storage in conjunctive stream-aquifer modeling. *Advances in Water Resources*. 26: 1001-1019.
21. Morrice J A, Valett H, Dahm, C N and Campana, M E (1997) Alluvial characteristics, groundwater-surface water exchange and hydrological retention in headwater streams. *Hydrological Processes*. 11:253-267.
22. Neumann L, Šimunek J and Cook F (2011) Implementation of quadratic upstream interpolation schemes for solute transport into HYDRUS-1D. *Environmental Modelling & Software*. 26: 1298-1308.
23. Nordin C F and Troutman B M (1980) Longitudinal dispersion in rivers: The persistence of skewness in observed data. *Water Resources Research*. 16: 123-128.
24. Runkel R L (1996) Solution of the advection-dispersion equation: continuous load of finite duration. *Environmental Engineering*. 122: 830-832.
25. Runkel R L (1998) One-dimensional Transport with Inflow and Storage (OTIS): a solute transport model for streams and rivers. *Water-Resources Investigations Report 98-4018*:77p.
26. Runkel R L and Bencala K E (1995) Transport of reacting solutes in rivers and streams. In: Vijay Singh (Eds), *Environmental hydrology*. Springer. pp 137-164.
27. Runkel R L and Chapra S C (1993) An efficient numerical solution of the transient storage equations for solute transport in small streams. *Water Resources Research*, 29: 211-215.
28. Van Mazijk A and Veling E (2005) Tracer experiments in the Rhine Basin: evaluation of the skewness of observed concentration distributions. *Hydrology*. 30: 60-78.
29. Versteeg H K and Malalasekera W (2007) *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. 2<sup>th</sup> Ed. Pearson Education, 517p.