

## توسعه مدل انتقال- انتشار اکسیژن محلول با استفاده از حل عددی

اشرف السادات میرهاشمی\* و محمد شایان نژاد<sup>۱</sup>

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۶/۳/۱۳؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۱/۲۱)

### چکیده

مهم‌ترین منبع آلاینده آب‌های سطحی را می‌توان فاضلاب‌های شهری و پساب کارخانه‌ها دانست. با ورود این آلاینده‌ها به رودخانه، غلظت اکسیژن محلول آب کاهش می‌یابد و حیات آبریان مورد تهدید قرار می‌گیرد؛ بنابراین یکی از شاخصه‌های کیفی لازم برای مدیریت منابع آب، غلظت اکسیژن محلول است. اساس مدل توسعه‌یافته در این پژوهش، معادله انتقال- انتشار در خاک است. عوامل تولید و مصرف اکسیژن در رودخانه مورد مطالعه، به معادله انتقال- انتشار اضافه شد. معادله نهایی به روش عددی تفاضلات محدود و به کمک الگوی ضمنی منفصل شد. پس از منفصل‌سازی معادله و اعمال شرایط اولیه و مرزی، دستگاه معادلات حاصل با الگوریتم توماس حل شد. کدنویسی‌ها در نرم‌افزار MATLAB انجام شد. برای واسنجی و تأیید مدل اکسیژن محلول، از داده‌های رودخانه زاینده‌رود در محدوده کارخانه‌های ذوب‌آهن و فولاد مبارکه استفاده شد. تغییرات زمانی و مکانی اکسیژن محلول، ترسیم شد و با داده‌های مشاهده‌ای و نتایج حاصل از مدل‌های MSP و CSP مقایسه شد. نتایج نشان داد که با حل عددی معادله انتقال- انتشار و اعمال عباراتی برای مصرف و تولید اکسیژن، می‌توان غلظت اکسیژن محلول را به‌خوبی پیش‌بینی کرد. مقایسه نتایج حاصل از پژوهش حاضر با مدل‌های کیفی MSP، CSP و داده‌های مشاهده‌ای، برتری مدل مذکور را نشان داد.

واژه‌های کلیدی: اکسیژن محلول، الگوریتم توماس، زاینده‌رود، معادله انتقال- انتشار، نرم‌افزار Matlab

۱. گروه آبیاری و زهکشی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه صنعتی اصفهان

\*: مسئول مکاتبات: پست الکترونیکی: mirhashemi931@yahoo.com

## مقدمه

نیترژن‌دار، دقت مدل‌سازی را افزایش داده است. معادله مورد استفاده در مدل MSP به شرح معادله (۲) است (۶):

$$D = (c_s - c) \cdot e^{-K_r \cdot t} + \frac{K_C \cdot L_{C_0}}{K_r - K_C} (e^{-K_C \cdot t} - e^{-K_r \cdot t}) + \frac{K_n \cdot L_{n_0}}{K_r - K_n} (e^{-K_n \cdot t} - e^{-K_r \cdot t}) \quad (2)$$

در این معادله،  $K_n$ : ثابت شدت کاهش اکسیژن برای مواد آلی نیترژن‌دار (۱/روز)،  $L_{n_0}$ : اکسیژن‌خواهی نهایی مواد آلی نیترژن‌دار (میلی گرم بر لیتر)،  $K_C$ : ثابت شدت کاهش اکسیژن مواد آلی کربن‌دار (۱/روز) و  $L_{C_0}$ : اکسیژن‌خواهی نهایی مواد آلی کربن‌دار (میلی گرم بر لیتر) است (۶).

مدل توسعه‌یافته: اساس مدل توسعه‌یافته در این پژوهش، معادله انتقال-انتشار املاح در خاک است. برای استفاده از این معادله در شبیه‌سازی حرکت اکسیژن محلول رودخانه، باید اصلاحاتی روی آن صورت بگیرد. برای انجام این اصلاحات، ابتدا مفاهیم سرعت و پخشیدگی بر مبنای حرکت آب در رودخانه تعریف می‌شود. سپس عوامل تولید و مصرف اکسیژن محلول در رودخانه بررسی خواهند شد تا در نهایت، یک جمله برای تولید اکسیژن محلول و جمله‌ای دیگر به‌منظور مصرف آن به معادله اضافه شود. حل معادله و انجام اصلاحات، به کمک روش‌های حل عددی صورت می‌گیرد. مدل‌هایی همچون CSP و MSP، تنها قادر به شبیه‌سازی در مکان‌های مختلف هستند؛ چرا که در معادله‌های مورد استفاده در مدل‌های نام‌برده به‌جای پارامتر زمان باید از نسبت فاصله به سرعت استفاده کرد و به حل معادله پرداخت. اما مدل توسعه‌یافته، توانایی شبیه‌سازی در مکان‌های مختلف و در زمان‌های مختلف را دارد.

سابقه مدل‌سازی، بسته به تعریف مدل، متفاوت است؛ اما عمده مدل‌سازی به مفهوم امروزی مربوط به سال‌های دهه ۱۹۵۰ به بعد است که بارها از روش‌های عددی برای حل معادله‌های جریان و انتقال، استفاده شده و برنامه‌های کامپیوتری متعددی برای حل این معادله‌ها نوشته شده است (۱۲). از آن جمله می‌توان به سرکار و پاندی اشاره کرد که به‌منظور برآورد غلظت اکسیژن محلول در رودخانه یامونا در

آب‌های سطحی جاری یا رودخانه‌ها از مهم‌ترین منابع آب هستند که نقش مهمی در تأمین آب مورد نیاز فعالیت‌های مختلف دارند. حفظ و استفاده از منابع آب از اصول توسعه پایدار هر کشور است. آگاهی از کیفیت منابع آب، یکی از نیازهای مهم در برنامه‌ریزی و توسعه منابع آب و حفاظت و کنترل آنها است (۵). مهم‌ترین منبع آلاینده آب‌های سطحی، فاضلاب‌های شهری و پساب کارخانه‌ها است. با ورود این آلاینده‌ها به آب، غلظت اکسیژن محلول کاهش می‌یابد؛ زیرا ریزجانداران موجود، مواد آلی قابل تجزیه را به‌عنوان غذای خود قرار می‌دهند که این کار با فرایند اکسیداسیون همراه است. با کاهش میزان اکسیژن محلول، حیات آبزیان مورد تهدید قرار می‌گیرد؛ بنابراین یکی از شاخصه‌های کیفی منابع آب، غلظت اکسیژن محلول است (۱۰). امروزه مدل‌سازی به‌عنوان ابزار مناسب و کارآمد در تعیین و ارزیابی اثرات آلاینده‌های مختلف در منابع آب کاربرد دارد (۱۲). از جمله مدل‌های اکسیژن محلول، می‌توان مدل‌های CSP، MSP و مدل توسعه‌یافته در این پژوهش را نام برد:

مدل CSP: مدل CSP یکی مدل کیفی برای جریان آب در رودخانه‌هاست و اساس آن قانون بقای جرم است (۵). با استفاده از مدل CSP و در نظر گرفتن شرایط دائمی، می‌توان معادله توازن جرم برای DO را به شکل معادله (۱) نوشت:

$$D = (c_s - c) \cdot e^{-K_r \cdot t} + \frac{K_d \cdot L_0}{K_r - K_d} (e^{-K_d \cdot t} - e^{-K_r \cdot t}) \quad (1)$$

در این معادله،  $D$ : کمبود اکسیژن محلول نسبت به حالت اشباع (میلی گرم بر لیتر)،  $c_s - c$ : کمبود اکسیژن در زمان صفر (میلی گرم بر لیتر)،  $K_r$ : ثابت هوادهی (۱/روز)،  $K_d$ : ثابت شدت کاهش اکسیژن (۱/روز)،  $L_0$ : اکسیژن‌خواهی نهایی (میلی گرم بر لیتر) و  $t$ : زمان (روز) است (۵).

مدل MSP: مدل CSP، تنها به ارزیابی شدت اکسیژن مصرف شده جهت تجزیه مواد آلی کربن‌دار توجه دارد؛ ولی در مدل MSP، به‌کارگیری همزمان مواد آلی کربن‌دار و مواد آلی

عمق آب رودخانه و ... اشاره کرد.

### مواد و روش‌ها

#### معادله انتقال- انتشار املاح در خاک

معادله انتقال- انتشار املاح (ADE) در خاک به شکل معادله (۳) است (۵):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V \frac{\partial c}{\partial x} \quad (3)$$

در این معادله،  $c$ : غلظت آلاینده یا املاح مورد نظر،  $V$ : سرعت واقعی جریان در خاک و  $D_0$ : ضریب پخشیدگی و انتشار املاح در خاک است (۵). برای اینکه از معادله (۳) به منظور شبیه‌سازی حرکت اکسیژن محلول در آب استفاده شود؛ ابتدا باید مفاهیم سرعت جریان و پخشیدگی و انتشار بر مبنای حرکت آب در رودخانه بیان شود. پس از آن نیاز است جملاتی برای تولید و مصرف اکسیژن تعریف شود و معادله جدیدی استخراج شود.

#### استخراج معادله‌ها

به‌طور کلی حرکت املاح در رودخانه‌ها، تحت فرایندهای انتقال، پخشیدگی و انتشار صورت می‌گیرد. در فرایند انتقال، حرکت املاح، ناشی از حرکت آب در رودخانه با سرعت  $V$  است. بنابراین اگر غلظت املاح  $c$  باشد؛ میزان شدت انتقال املاح طبق معادله (۴) برابر است با (۱):

$$J_c = V \cdot c \quad (4)$$

شدت جریان املاح ناشی از فرایندهای پخشیدگی و انتشار، تابعی از گرادیان غلظت است و بنابر قانون اول فیک، به صورت معادله (۵) بیان می‌شود (۱):

$$J_d = -D_0 \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \quad (5)$$

در این معادله،  $J_d$ : شدت جریان املاح ناشی از فرایند پخشیدگی و انتشار (جرم املاح پخش شده و منتشر شده در واحد سطح و در واحد زمان) و  $D_0$ ، مجموع ضریب پخشیدگی املاح ( $D_s$ ) و ضریب انتشار املاح ( $D_h$ ) در آب ( $L^2 T^{-1}$ ) است (۱).

تعیین  $D_0$ : طبق معادله (۶)،  $D_0$  از مجموع ضریب پخشیدگی

هند، از مدل شبکه عصبی مصنوعی استفاده کردند. نمونه‌های دبی، دما، pH، BOD و DO را در سه مکان (بالادست، مرکز و پایین دست) به صورت ماهانه برداشت کردند و سه نوع مدل ترکیب‌های مختلف از متغیرهای ورودی و ایستگاه‌ها، توسعه دادند. عملکرد شبکه عصبی مصنوعی را با استفاده از ابزارهای آماري مورد ارزیابی قرار دادند. در مطالعه سرکار و پاندي، ضریب همبستگی بالا (حدود ۰/۹) بین مقادیر اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده‌ی DO، نشان‌دهنده‌ی دقت برجسته این مدل بوده است (۹). علی‌وردی و اسلامی، با استفاده از مدل WASP6، به ارزیابی و بررسی اکسیژن محلول و اکسیژن مورد نیاز بیولوژیکی رودخانه کرخه در بازه‌های پل- الهایی پرداختند. نتایج به‌دست‌آمده از مدل‌سازی ثابت کرد نرم‌افزار WASP6 در مدل‌سازی اکسیژن محلول و اکسیژن مورد نیاز بیولوژیکی، پیش‌بینی قابل‌قبولی را عرضه می‌کند (۲). حیدر و علی، برای توسعه مدل اکسیژن محلول در رودخانه راوی در پاکستان، از مدل‌های CSP و MSP استفاده کردند. داده‌های مورد نیاز، از پنج خروجی فاضلاب و دو زهکش سطحی در اطراف رودخانه جمع‌آوری شده است. از آنجایی که ضریب همبستگی قابل‌قبولی بین داده‌های محاسبه شده توسط دو مدل و داده‌های مشاهده‌ای به‌دست آمده، مدل‌های مذکور برای مدل‌سازی اکسیژن محلول، از دقت قابل‌قبولی برخوردارند (۶). در این پژوهش، با درج جملاتی برای مصرف و تولید اکسیژن محلول در معادله انتقال و انتشار املاح، معادله جدیدی به‌دست آمد که به روش عددی و با کدنویسی در نرم‌افزار MATLAB حل شد. پس از توسعه مدل اکسیژن محلول حاصل در رودخانه زاینده‌رود، به واسنجی و صحت‌سنجی مدل پرداخته شد. در نهایت، نتایج مدل توسعه یافته با مدل‌های MSP و CSP مقایسه شد. از جمله محدودیت‌های تحقیق، می‌توان به عدم ثبات در دبی و سرعت آب رودخانه، خطاهای انسانی (خطا در نمونه‌برداری) و تغییر شرایط محیطی و خطاهای ناشی از آنها (تغییر در دما،

و  $M_p$  نمایش داده می‌شود. پس می‌توان طبق معادله (۱۲) نوشت:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(V \times c - D_o \times \frac{\partial c}{\partial x}) + M_1 - M_p \quad (12)$$

چون جریان یکنواخت فرض شده است؛ می‌توان سرعت جریان را ثابت در نظر گرفت. در این صورت معادله (۱۳) حاصل می‌شود:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{-V(\partial c)}{\partial x} + D_o \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) + M_1 - M_p \quad (13)$$

چون معادله (۱۳) قرار است برای اکسیژن محلول استفاده شود؛ بنابراین  $c$  برابر با غلظت اکسیژن محلول در آب خواهد بود و  $M_1$  و  $M_p$  به ترتیب میزان اکسیژن تولیدی و مصرفی در واحد حجم آب در واحد زمان خواهند بود. منابع تولید و مصرف اکسیژن متعدد است؛ اما مهم‌ترین آنها عبارت است از تولید اکسیژن توسط هوادهی و مصرف اکسیژن توسط ریزجانداران برای تجزیه مواد آلی موجود در آب‌های آلوده به فاضلاب و مواد شیمیایی. در ادامه معادلاتی برای  $M_1$  و  $M_p$  ارائه می‌شود.

#### تولید اکسیژن توسط هوادهی

در اثر تلاطم جریان و حرکت آب در رودخانه عمل هوادهی صورت می‌گیرد. میزان اکسیژن محلول تولیدشده در واحد حجم آب و در واحد زمان تابعی از کمبود اکسیژن محلول است و به صورت معادله (۱۴) بیان می‌شود. در این معادله،  $c_s - c$ : کمبود اکسیژن محلول در آب و  $K_T$ : ثابت هوادهی ( $T^{-1}$ ) است.

$$M_1 = K_T (c_s - c) \quad (14)$$

تعیین  $c_s$ : برای  $c_s$  معادلات متعددی پیشنهاد شده است. یکی از آنها، معادله (۱۵) است (باکاو آرنست ۱۹۷۶):

$$c_s = 14/652 - 0/41022T + 0/07991T^2 - 7/7774 \times 10^{-5}T^3 \quad (15)$$

$T$ : دمای آب برحسب درجه سانتی‌گراد و  $c_s$ : غلظت اکسیژن محلول در آب در حالت اشباع برحسب میلی‌گرم بر لیتر است (۱۰).

تعیین  $K_T$ : برای تعیین  $K_T$  از روش‌های تجربی که براساس

املاح و ضریب انتشار املاح در آب به دست می‌آید (۶):

$$D_o = D_s + D_h \quad (6)$$

$$D_s = 7/4 \times 10^{-8} \frac{T \times (2/26 M_{H_2O})^{0/5}}{\mu \cdot V_{O_2}^{0/6}} \quad (7)$$

در این معادله،  $T$ : دمای آب ( $K$ )،  $M_{H_2O}$ : جرم مولکولی آب،

$\mu$ : لزجت آب (سانتی‌پویز)،  $V$ : حجم مولی اکسیژن و  $D_o$

برحسب ( $cm^2/s$ ) است (۲). برای محاسبه  $D_h$ ، می‌توان معادله

(۸) را به کار برد (۶):

$$D_h = \lambda \cdot V \quad (8)$$

در این معادله،  $\lambda$ : ضریب انتشارپذیری و  $V$ : بیانگر سرعت است. بنابراین مجموع شدت جریان املاح ناشی از فرایندهای انتقال، پخشیدگی و انتشار به صورت معادله (۹) محاسبه می‌شود (۶):

$$J = J_d + J_c = V \cdot c - D_o \left( \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (9)$$

اگر بخشی یک بعدی به طول  $\Delta x$  از رودخانه در نظر گرفته شود؛ می‌توان نوشت:

$$\frac{\partial}{\partial t}(A \cdot \Delta x \cdot c) = J \cdot A + m_1 - [J \cdot A + \frac{\partial(J \cdot A)}{\partial x} \Delta x] - m_p \quad (10)$$

در این معادله،  $\frac{\partial}{\partial t}(A \cdot \Delta x \cdot c)$ : تغییر جرم املاح در واحد زمان،

$J \cdot A$ : جرم ورودی املاح در واحد زمان،  $m_1$ : جرم املاح تولید

شده در واحد زمان،  $[J \cdot A + \frac{\partial(J \cdot A)}{\partial x} \Delta x]$ : جرم املاح خارج شده

در واحد زمان و  $m_p$ : جرم املاح مصرف شده در واحد زمان است. اگر از تغییرات  $A$  نسبت به زمان و مکان صرف نظر شود

(چون جریان یکنواخت و ماندگار فرض شده است)؛ می‌توان

معادله (۱۱) را نوشت:

$$m_1 - A \cdot \Delta x \cdot \frac{\partial J}{\partial x} - m_p = A \cdot \Delta x \cdot \frac{\partial c}{\partial t} \quad (11)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{-\partial J}{\partial x} + \frac{m_1}{A \cdot \Delta x} - \frac{m_p}{A \cdot \Delta x}$$

مقادیر  $m_1$  و  $m_p$ ، اگر بر  $A \cdot \Delta x$  (حجم بخش مورد نظر)

تقسیم شود؛ برابر می‌شود با جرم املاح تولید شده و

مصرف شده در واحد حجم و در واحد زمان که به ترتیب با  $M_1$

معادله (۱۸) محاسبه می شود (۱۱):

$$L_t = L_0 - BO D_t \quad (18)$$

چنانچه از مفهوم اکسیژن خواهی باقیمانده در زمان  $t$  استفاده شود؛ تغییرات  $L_t$  نسبت به زمان به صورت مرتبه اول زیر در نظر گرفته می شود (۱۱):

$$\frac{dL_t}{dt} = -K.L_t \rightarrow \int_0^t \frac{dL_t}{L_t} = \int_0^t -K.dt \rightarrow \ln \frac{L_t}{L_0} = -K.t$$

$$\frac{L_t}{L_0} = e^{-K.t} \rightarrow L_t = L_0 e^{-K.t} \rightarrow BO D_t = \quad (19)$$

$$L_0 - L_t = L_0 (1 - e^{-K.t})$$

در این معادله،  $K$ : ضریب واکنش BOD با دیمانسیون  $T^{-1}$  است (۱۱). با اندازه گیری  $BOD_t$  حداقل در دو زمان مختلف، می توان مقادیر  $K$  و  $L_0$  را به دست آورد. حال اگر فرض شود میزان مصرف اکسیژن توسط ریزجانداران تابعی از  $L_t$  باشد؛ می توان  $M_p$  را از معادله (۲۰) به دست آورد:

$$M_p = K_d \times L_t = K_d \times L_0 \times e^{-K.t}$$

$$K_d = K$$

$$\rightarrow M_p = K \times L_0 \times e^{-K.t} \quad (20)$$

در این معادله،  $K_d$ : ثابت شدت کاهش اکسیژن برحسب (۱/روز)،  $t$ : زمان برحسب روز،  $L_0$ : اکسیژن خواهی نهایی برحسب (میلی گرم در لیتر) و  $M_p$  برحسب (میلی گرم در لیتر) در روز) است که بیانگر مقدار اکسیژن مصرف شده در واحد زمان از واحد حجم آب است. در نهایت، با اصلاحاتی که در این پژوهش بر روی معادله انتقال- انتشار املاح در خاک صورت گرفت؛ معادله ADE برای شبیه سازی غلظت اکسیژن محلول در طول رودخانه به شکل معادله (۲۱) درآمد:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_x \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) - V \left( \frac{\partial c}{\partial x} \right) + K_T (c_s - c) - K \times L_0 \times e^{-K.t} \quad (21)$$

**حل عددی معادله استخراج شده**

**منفصل سازی معادله**

برای حل عددی معادله استخراج شده (۲۱)، از الگوی ضمنی و

دبی و عمق است استفاده می شود. در این پژوهش، با در نظر گرفتن میانگین سرعت رودخانه زاینده رود در محدوده کارخانه های ذوب آهن و فولاد مبارکه، در فصول پاییز و زمستان ۱۳۹۱ و بهار ۱۳۹۲ و عمق آن، پس از تطبیق با محدوده های پیشنهادی معادلات تجربی، ابتدا معادله کتر- دینس برای محاسبه  $K_T$  استفاده شد و مجموع کدنویسی ها اجرا شدند. سپس معادله چرچیل و همکاران مورد استفاده قرار گرفت. بار دیگر روی  $K_T$  به دست آمده از معادله چرچیل و همکاران، تصحیح دمایی هم صورت گرفت. در مجموع، میزان RMSE های حاصل از روش سوم نسبت به دو روش دیگر کمتر بود. به همین دلیل برای محاسبه  $K_T$ ، از معادله چرچیل و همکاران با تصحیح دمایی استفاده شد. معادله چرچیل و همکاران به صورت معادله (۱۶) است. در این معادله،  $V$ : سرعت جریان (متر بر ثانیه)،  $H$ : عمق جریان (متر) و  $K_T$ : ثابت هوادهی (۱/روز) است (۶):

$$K_T = 5/0.26 \frac{V}{H^{1/67}} \quad (16)$$

تصحیح دمایی  $K_T$ : با توجه به اینکه سرعت و عمق رودخانه در محدوده مورد مطالعه در دمای ۲۰ درجه سانتی گراد محاسبه شده است؛ برای برآورد ضریب در دماهای دیگر نیاز به تصحیح دمایی ضریب مربوطه است. معادله (۱۷) برای تصحیح ضرایب استفاده می شود (۶):

$$(K_T)_T = (K_T)_{\theta} (\theta)^{T-20} \quad (17)$$

در این معادله،  $T$ : دمای مورد نظر (°C) و  $\theta$ ، ۱/۰۲۴ است (۶).

**مصرف اکسیژن توسط ریزجانداران**

مقدار تقاضا برای مصرف اکسیژن توسط ریزجانداران برای تجزیه مواد آلی با BOD (Biological oxygen demand) بیان می شود که به آن اکسیژن خواهی بیولوژیکی گویند. بنابراین میزان اکسیژن مصرف شده در مدت زمان  $t$  را به صورت  $BOD_t$  نمایش می دهند. اگر اکسیژن خواهی نهایی توسط ریزجانداران با  $L_0$  نمایش داده شود؛ اکسیژن خواهی باقیمانده در مدت زمان  $t$  که با  $L_t$  نمایش داده می شود به صورت

واکنش‌های مربوط به تولید و زوال اکسیژن محلول، از کدنویسی با نرم‌افزار MATLAB استفاده شد.

#### منطقه مورد مطالعه

زاینده‌رود، مهم‌ترین رودخانه فلات مرکزی ایران است که از زردکوه بختیاری سرچشمه می‌گیرد و پس از طی ۴۰۵ کیلومتر مسیر پر پیچ و خم به تالاب گاوخونی در ۱۲۳ کیلومتری جنوب شرقی اصفهان می‌ریزد. این رودخانه ۱۶ میلیون سال پیش شکل گرفته است ولی در سال‌های اخیر بخش مهمی از مسیرش خشک شده است (۸).

جمع‌آوری اطلاعات DO و BOD رودخانه: در این پژوهش، تمرکز بر آلودگی صنعتی است. اطلاعات در محدوده کارخانه‌های ذوب‌آهن و فولاد مبارکه و با توجه به مکان‌های ورود پساب‌های صنایع مذکور به رودخانه جمع‌آوری شده است. به‌منظور نمونه‌برداری از رودخانه زاینده‌رود، نمونه‌برداری در عمق ۰/۶ متری رودخانه، به‌صورت ماهانه در ماه‌های آذر تا اسفند سال ۱۳۹۱ و فروردین ماه سال ۱۳۹۲ انجام شده است. به‌طور تصادفی در ۱۵ روز از هر یک از ماه‌های ذکر شده، نمونه‌برداری از رودخانه صورت گرفته است. پس از هر بار نمونه‌برداری، آب مورد آزمایش در دو بطری ۳۰۰ میلی‌لیتری با درپوش سمباده‌ای ریخته شده است. در یکی از آنها اندازه‌گیری اکسیژن محلول، بلافاصله در محل، با استفاده از دستگاه پرتابل مدل ۸۴۰۳ انجام شده است. در نمونه دوم، اندازه‌گیری اکسیژن محلول به‌صورت روزانه (تا ۱۵ روز)، با این دستگاه انجام شده است تا مقدار اکسیژن‌خواهی بیولوژیکی (BOD) در روزهای متوالی به‌دست آید. برای انجام پژوهش و اندازه‌گیری غلظت اکسیژن محلول، پنج نقطه در پایین‌دست کانال تخلیه پساب کارخانه ذوب‌آهن و پنج نقطه در پایین‌دست کانال تخلیه پساب مجتمع فولاد مبارکه در نظر گرفته شده است.

اطلاعات دما و pH: پارامترهای دما و pH، در هنگام اندازه‌گیری مقدار اکسیژن محلول در محل رودخانه، توسط دستگاه Mi805 اندازه‌گیری شده است.

برای منفصل‌سازی آن از روش تفاضلات محدود استفاده شد:

$$\begin{aligned} &\rightarrow A.(c_{i-1}^{n+1}) + B.(c_i^{n+1}) + C.(c_{i+1}^{n+1}) = D \\ &\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} = D_0 \frac{c_{i-1}^{n+1} - 2(c_i^{n+1}) + c_{i+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \\ &V \frac{c_i^{n+1} - c_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} + K_T(c_s - c_i^{n+1}) - \\ &K \times L_0 \times e^{-K(t^{n+1})} \end{aligned} \quad (22)$$

#### حل دستگاه معادلات خطی ایجاد شده

پس از منفصل‌سازی معادله (۲۱)، یک دستگاه معادلات خطی ایجاد می‌شود. به دلیل سه قطری بودن ماتریس ضرایب دستگاه به‌دست آمده، از روش الگوریتم توماس برای حل آن استفاده شد. برای این کار نیازمند به شرایط اولیه و مرزی است:

اعمال شرایط اولیه: غلظت اکسیژن محلول در رودخانه قبل از ورود فاضلاب  $c_i^n = 0$  for  $i=1: n+1$   
 شرایط مرزی: شرایط مرزی باید در دو نقطه  $x=L$  و  $x=0$  محاسبه شود. غلظت در نقطه  $x=0$  از معادله (۲۳) به‌دست می‌آید (۵).

$$c_i^{n+1} \Big|_{x=0} = \frac{(c_w \times Q_w) + (c_r \times Q_r)}{Q_w + Q_r} \quad (23)$$

که در این معادله،  $Q_w$ : دبی فاضلاب ورودی و  $Q_r$ : دبی رودخانه است (۵).

اعمال شرایط مرزی در  $x=L$ :

$$\frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{i=n+1} = 0 \rightarrow \frac{c_{n+1} - c_n}{\Delta x} = 0 \rightarrow c_{n+1} = c_n \quad (24)$$

حال معادله (۲۲) به ازای مقادیر مختلف  $i$  بازنویسی می‌شود ( $i=2,3,4,5 \dots n$ )؛ بنابراین  $n-1$  معادله و  $n-1$  مجهول به‌دست می‌آید. با حل دستگاه حاصل به روش الگوریتم توماس مقادیر غلظت در نقاط دو الی  $n$  در زمان  $n+1$  به‌دست می‌آید. سپس با تکرار محاسبات، می‌توان در سایر زمان‌ها نیز غلظت را به‌دست آورد و توزیع غلظت در طول رودخانه را در زمان‌های مختلف ترسیم کرد. به‌منظور توسعه مدل اکسیژن محلول بر مبنای حل عددی معادله انتقال-انتشار املاح با منظور کردن

جدول ۱. مقادیر  $K_T$

ماه	$K_T$ محاسبه شده	$K_T$ با تصحیح دمایی
آذر	۱/۵۸	۱/۶۶
دی	۲/۵۰	۲/۰۷
بهمن	۲/۵۰	۱/۹۳
اسفند	۲/۵۰	۲/۱۷
فروردین	۲/۰۳	۱/۹۹

جدول ۲. مقادیر  $L_0$  و  $K$  حاصل از برازش منحنی روی اندازه‌گیری‌های انجام شده در اطراف فولادمبارکه و ذوب‌آهن

مکان	$L_0$ (mg/lit)	$K$ (1/day)
ذوب آهن	۶/۰۴	۰/۱۶
فولاد مبارکه	۵/۴۰	۰/۲۰

رودخانه در دمای  $20^\circ\text{C}$  محاسبه شده‌اند؛ نیاز به تصحیح دمایی ضرایب است. مقادیر به دست آمده در جدول (۱) آورده شده است:

واسنجی مدل: با توجه به معادله  $L_t$  برای محاسبه پارامترهای  $K$  و  $L_0$  در مدل، از برازش منحنی روی داده‌های اندازه‌گیری شده برای BOD استفاده شده است. برازش منحنی به کمک نرم‌افزار sigmaplot انجام شده است. شکل‌های (۱) و (۲) مقادیر BOD نسبت به زمان در ایستگاه اول فولادمبارکه و ذوب‌آهن را نشان می‌دهند. برازش منحنی روی داده‌های اندازه‌گیری شده BOD برای محاسبه ضرایب  $K$  و  $L_0$  به کار گرفته شده و نتایج آن در جدول (۲) آورده شده است.

اعتبارسنجی مدل: به منظور اعتبارسنجی مدل توسعه یافته، نمودارهای غلظت اکسیژن محلول در برابر فاصله در ماه‌های آذر تا فروردین در دو مکان فولادمبارکه و ذوب‌آهن ترسیم شد. بخشی از نمودار شامل داده‌های مشاهداتی است که میانگین اکسیژن محلول در هر ماه در نظر گرفته شده است. برای ترسیم خروجی مدل توسعه یافته، کدنویسی‌هایی در MATLAB انجام شده و برای مقایسه نتایج مدل مورد نظر با سایر مدل‌ها، با استفاده از اطلاعات در دسترس، مدل‌های MSP و CSP نیز اجرا شده‌اند. شکل‌های (۳) و (۴) دو نمونه از این نمودارها را نشان می‌دهند:

اطلاعات ذبی: مقدار ذبی رودخانه و کانال‌های انتقال پساب در ماه‌های مورد مطالعه، از سازمان آب منطقه‌ای اخذ شده است و میانگین این مقادیر به عنوان ذبی رودخانه، ذبی کانال تخلیه پساب ذوب‌آهن و کانال تخلیه پساب فولادمبارکه در نظر گرفته شده است.

واسنجی مدل: با توجه به اطلاعات جمع‌آوری شده از منطقه مورد مطالعه، تعدادی از پارامترهای مورد نیاز برای حل معادله انتقال- انتشار املاح به دست آمد. برای سایر پارامترها مقدار اولیه‌ای در نظر گرفته شد. پس از اجرای مدل، تغییراتی بر روی ضرایب مجهول مدل اعمال شد تا در مجموع، میزان RMSEها به حداقل رسید. سپس با توجه به معادله  $BOD = L_0 \cdot (1 - e^{-K \cdot t})$ ، برای محاسبه دقیق‌تر پارامترهای  $K$  و  $L_0$  در مدل، از برازش منحنی روی داده‌های اندازه‌گیری شده برای BOD استفاده شده است.

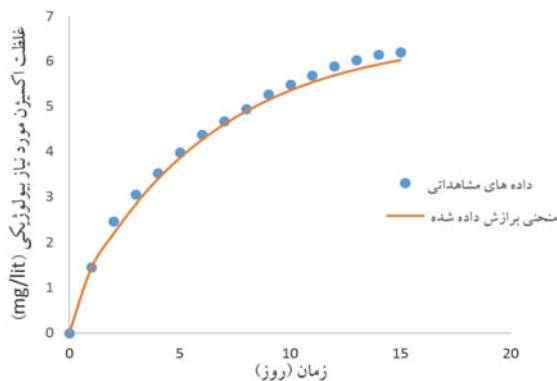
اعتبارسنجی مدل: برای بررسی اعتبارسنجی مدل، نمودارهای غلظت اکسیژن محلول در برابر فاصله (برای ماه‌های دی تا فروردین) ترسیم شده است.

مقایسه نتایج شبیه‌سازی مدل توسعه یافته با سایر مدل‌های کیفی رودخانه: با توجه به اطلاعات موجود، مدل‌های MSP و CSP هم اجرا شدند. پس از به دست آوردن شاخص‌های آماری، مدل توسعه یافته و مدل‌های MSP و CSP مقایسه شدند.

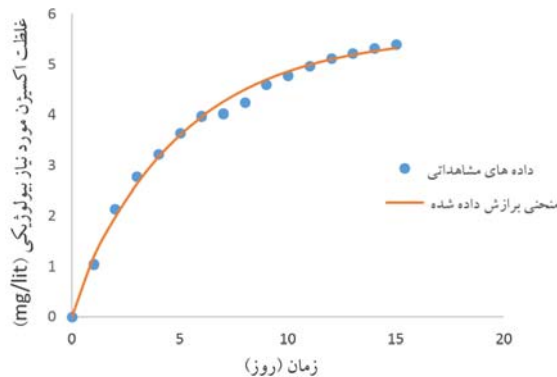
## نتایج و بحث

در این پژوهش، معادله انتقال- انتشار املاح با وارد کردن دو جمله مربوط به تولید و مصرف اکسیژن محلول، اصلاح و کامل شد تا برای شبیه‌سازی غلظت اکسیژن محلول در رودخانه استفاده شود. مجهول‌های معادله محاسبه شدند. سپس با استفاده از توسعه مدل در نرم‌افزار MATLAB، روند تغییرات غلظت اکسیژن محلول در این رودخانه، نسبت به زمان و مکان مورد بررسی قرار گرفت.

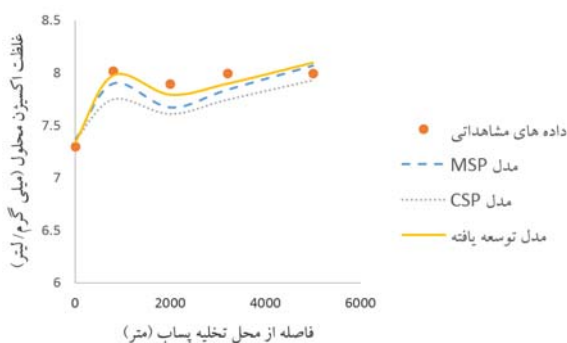
مقادیر محاسبه شده  $K_T$ : برای محاسبه ضریب  $K_T$ ، از معادله چرچیل و همکاران استفاده شد. از آنجایی که سرعت و عمق



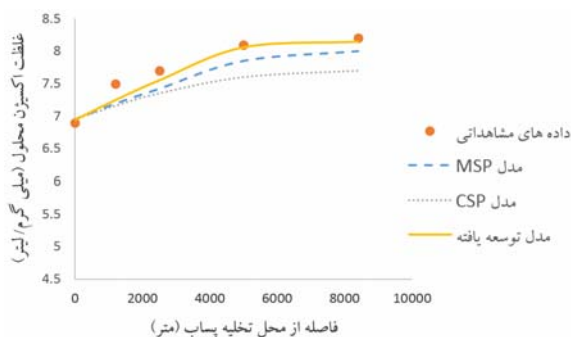
شکل ۲. ترسیم تغییرات BOD نسبت به زمان (ذوب آهن)



شکل ۱. ترسیم تغییرات BOD نسبت به زمان (فولاد مبارکه)



شکل ۴. غلظت اکسیژن محلول در برابر فاصله (دی - فولاد مبارکه)



شکل ۳. غلظت اکسیژن محلول در برابر فاصله (دی - ذوب آهن)

بررسی شاخص‌های آماری مدل توسعه یافته، مدل MSP و مدل CSP: کارایی این سه مدل، با استفاده از شاخص‌های آماری جذر میانگین مربعات خطای نرمال شده (RMSEn) برحسب  $\text{mg/lit}$ ، میانگین حداقل مربعات خطا (RMSE) برحسب  $\text{mg/lit}$ ، ضریب همبستگی پیرسون (r) و خطای نسبی (RE) برحسب درصد بررسی شد. دو نمونه از این نتایج در جداول (۳) و (۴) آورده شده است:

چنانچه مقدار RMSEn کمتر از ۱۰ باشد؛ شبیه‌سازی دقیق، اگر بیشتر از ۱۰ و کمتر از ۲۰ باشد؛ شبیه‌سازی خوب، اگر بیشتر از ۲۰ و کمتر از ۳۰ باشد؛ شبیه‌سازی تا حدی خوب و اگر بالای ۳۰ باشد؛ شبیه‌سازی ضعیف ارزیابی می‌شود (۳). با توجه به نتایج حاصل، می‌توان نتایج شبیه‌سازی هر سه مدل را خوب و دقیق دانست. دقت شبیه‌سازی مدل توسعه یافته، بیشتر از دو مدل دیگر است. این مدل، نسبت به مدل‌های MSP و CSP، همبستگی بهتری را بین داده‌های

بررسی نمودارهای غلظت اکسیژن محلول در برابر فاصله، بیانگر آن است که بیشترین مقدار غلظت اکسیژن محلول برای ذوب آهن و فولاد مبارکه در دی ماه است که نشان می‌دهد در بین ماه‌های نمونه برداری شده، بیشترین قدرت خودپالایی رودخانه در دی ماه بوده است. خروجی‌های مدل توسعه یافته نسبت به دو مدل دیگر، اختلاف کمتری را با داده‌های مشاهده‌ای نشان می‌دهد. اما هر سه مدل کیفی، روند کمابیش مشابهی را برای تغییرات غلظت اکسیژن محلول در طول رودخانه نشان می‌دهند. این دو مدل نیز حداقل غلظت اکسیژن محلول را در محل تخلیه پساب و نقاط نزدیک به آن برآورد کرده‌اند. علت آن را می‌توان ریزجانداران موجود در محل تخلیه پساب‌های صنعتی دانست که مواد آلی قابل تجزیه را به‌عنوان غذای خود قرار داده و به‌دنبال آن، فرایند اکسیداسیون، کاهش غلظت اکسیژن محلول را همراه خواهد داشت. بررسی داده‌های میدانی به‌تنهایی نیز نتایج حاصل از هر سه مدل را تأیید می‌کند.



جدول ۴. مقادیر RMSEn سه مدل اجرا شده- فولاد مبارکه

ماه	مدل توسعه یافته	مدل MSP	مدل CSP
دی	۸/۵۶	۹/۸۵	۱۰/۰۶
بهمن	۱۰/۳	۱۵/۵۱	۱۵/۹۸
اسفند	۹/۱۱	۹/۶۱	۱۰/۰۳
فروردین	۱۱/۲۷	۱۳/۴۹	۱۴/۳۱

جدول ۳. مقادیر RE سه مدل اجرا شده- ذوب آهن

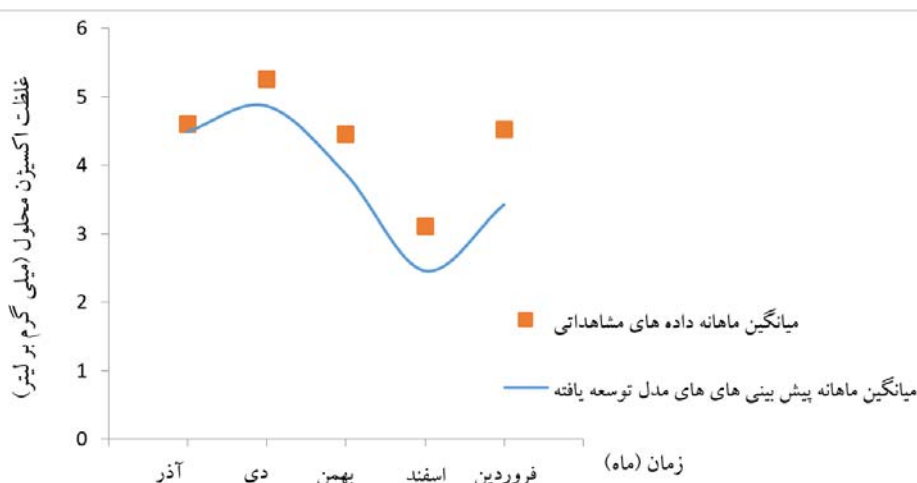
ماه	مدل توسعه یافته	مدل MSP	مدل CSP
دی	۱/۲۳	۲/۵۷	۴/۲۷
بهمن	۱/۱۸	۲/۳۸	۳/۳۰
اسفند	۰/۶۹	۱/۰۹	۱/۸۹
فروردین	۱/۲۶	۱/۱۹	۱/۶۱

جدول ۶. مقادیر AIC سه مدل اجرا شده- ذوب آهن

ماه	مدل توسعه یافته	مدل MSP	مدل CSP
دی	۰/۶۰	۰/۸۳	۰/۹۱
بهمن	۰/۶۱	۰/۸	۰/۹۷
اسفند	۰/۶۰	۰/۸۳	۰/۹۳
فروردین	۰/۶۲	۰/۸۹	۰/۹۷

جدول ۵. مقادیر AIC سه مدل اجرا شده- فولاد مبارکه

ماه	مدل توسعه یافته	مدل MSP	مدل CSP
دی	۰/۶	۰/۸۳	۰/۹۱
بهمن	۰/۶۱	۰/۸	۰/۹۷
اسفند	۰/۶	۰/۸۳	۰/۹۳
فروردین	۰/۹۷	۰/۸۸	۰/۶۲

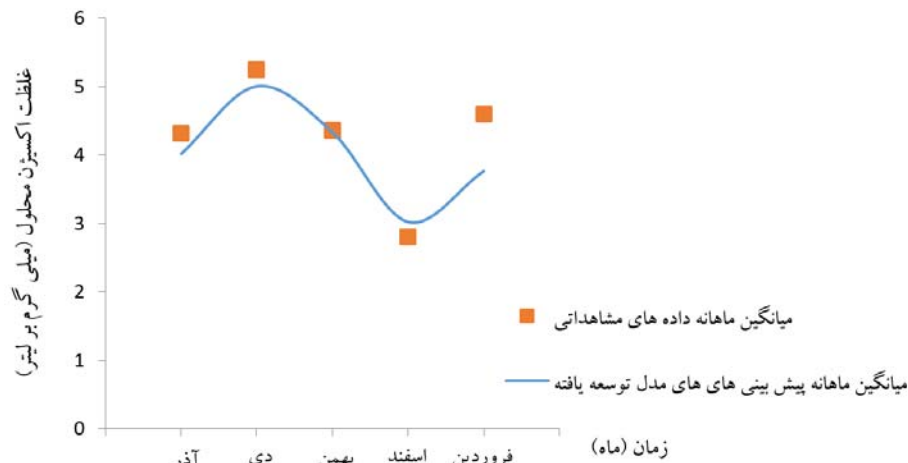


شکل ۵. میانگین ماهانه غلظت اکسیژن محلول- ایستگاه پنج فولاد مبارکه

کمتری داشته باشد (۳). بنابر جداول (۵) و (۶)، کمترین AIC، به مدل توسعه یافته اختصاص دارد.

نمودارهای میانگین ماهانه غلظت اکسیژن محلول در هر یک از ایستگاه‌ها: میانگین ماهانه غلظت اکسیژن محلول نمونه‌گیری شده از آب رودخانه در هر ایستگاه در ماه‌های آذر، دی، بهمن، اسفند و فروردین در مقایسه با میانگین ماهانه مقادیر خروجی مدل توسعه یافته، در محدوده کارخانه‌های فولاد مبارکه و ذوب آهن ترسیم شد. شکل‌های (۵) و (۶)

مشاهده‌ای و خروجی‌های مدل نشان می‌دهد. همچنین، مقادیر خطای نسبی و RMSEهای حاصل از توسعه این مدل، نسبت به خطاهای برآورد شده دو مدل دیگر، کاهش یافته است. معمولاً در مدل‌سازی‌ها، خطای نسبی تا ۱۰ درصد قابل قبول است (۳). بنابراین اختلاف بین داده‌های مشاهده‌ای و خروجی‌های هر سه مدل قابل قبول است. برای تعیین مدل بهینه از میان سه مدل اجرا شده، از آماره اطلاعاتی آکاییکه استفاده شد. از میان مدل‌ها، مدلی مناسب‌تر است که AIC



شکل ۶. میانگین ماهانه غلظت اکسیژن محلول- ایستگاه پنج ذوب آهن

بنابراین حداقل غلظت اکسیژن محلول در این ماه مشاهده می شود. در تمامی ترسیم ها، در ماه فروردین، اختلاف میان داده های مشاهده ای و پیش بینی های مدل افزایش یافته است. دلیل اینکه چرا مدل توسعه یافته در ماه فروردین به خوبی سایر ماه ها اجرا نشده است، را می توان در عوامل تولید و مصرفی که مدل در نظر نگرفته است، جستجو کرد. از جمله این عوامل می توان تنفس و فتوسنتز گونه های گیاهی را نام برد.

نمونه هایی از نمودارهای ذکر شده است. نتایج نمودارهای میانگین ماهانه غلظت اکسیژن محلول نشان داد که در بیشتر موارد، بیشترین میزان اکسیژن محلول در ماه دی به دست آمده است که می توان دلیل آن را کاهش دما و عمق آب در زمستان دانست. در نمونه گیری های صورت گرفته، میزان BOD در ماه اسفند حداکثر است. به این معنا که تقاضای ریزجانداران برای مصرف اکسیژن به حداکثر رسیده است.

## منابع مورد استفاده

- Abasi, F. 2008. Advanced Soil Physics. Tehran University. Iran. (In Farsi).
- Aliverdi, A. and H. Eslami. 2015. Modeling of quality parameters of Dissolved Oxygen (DO) and Biological Oxygen Demand (BOD) in Karkhe River by using WAsP6 Software. *First National Architecture, Civil and environmental Conference* (In Farsi).
- Chai, T. and R. R. Draxler. 2014. Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)? Arguments against avoiding RMSE in the literature. *Geoscientific Model Development* 7: 1274- 1250.
- Chapra, S. C. 1997. Surface Water Quality Modeling. MC-Graw Hill International Editions, Singapore.
- Erfani Manesh, M. and M. Afyuni. 2012. The Pollution of Water, Soil and Air. Arkan. Esfahan (In Farsi).
- Haider, H. and W. Ali. 2010. Development of Dissolved Oxygen Model for a Highly Variable Flow River: A Case Study of Ravi River in Pakistan. *Environmental Modeling and Assessment* 15:583-599.
- Li, H., Z. Yang, G. Lin, M. Casazza and X. Yin. 2017. Analyzing virtual water pollution transfer embodied in economic activities based on gray water footprint: A case study. *Journal of Cleaner Production* 161: 1064-1073.
- Salarian, M., M. Najafi, S. Hosseini and M. Heydari. 2015. Classification of zayandehrud river basin water quality regarding agriculture, drinking and industrial usage. *ARJCSSE* 1(1).
- Sarkar, A. and P. Pandey. 2015. River water quality modeling using artificial neural network technique. *Aquatic Procedia* 4: 1070-1077.
- Torabiyani, A. and H. Hashemi. 2003. Quality Modeling of Surface Water. Tehran University. Iran. (In Farsi).
- Shayannejad, M. 2017. Computational Methods in Water Engineering Modeling by Using MATLAB Software. Jahade Daneshgahi of Isfahan University of Technology, Isfahan. (In Farsi).
- Water Resources Management Company. 2006. Guide to Self-Purification Studies of River. Journal no. 292: 9- 11 (In Farsi).

## Development of Advection-Dispersion Model of Dissolved Oxygen Using Numerical Solutions

A. Mirhashemi\* and M. Shayannejad<sup>1</sup>

(Received: June 3-2017; Accepted: April 10-2018)

### Abstract

Urban and industrial wastewaters are considered as the most contaminant of surface water. Entrance of these pollutants to the river reduces the concentration of dissolved oxygen and aquatic life will be threatened. So, one of the main qualitative characteristics of water resources management is the concentration of dissolved oxygen. The base of the developed model in this investigation is the convection- diffusion equation in soil. Terms of production and decay of dissolved oxygen were added to this equation. The final equation was discretized using the finite difference method with the implicit scheme. With applying the initial and boundary conditions, the equation set was solved by the Thomas algorithm. The calculations were done by programming in the MATLAB software. For the calibration and validation of the model, data obtained from two reaches of Zayanderoud River, including steel melt and Mobarakeh Steel factories, were used. The temporal and spatial variations of the dissolved oxygen were plotted and compared with the real data and the results of the MSP and CSP models. The results showed that the concentration of the dissolved oxygen could be well predicted through solving convection-diffusion equation with introducing two terms for the decay and production of oxygen. The comparison between the results of the model and two other models showed that the model led to better results in comparison to the MSP and CSP models.

**Keywords:** Dissolved oxygen, Thomas algorithm, Zayandehrud, Advection- Dispersion Equation, MATLAB software

---

1. Department of Water Engineering, College of Agriculture, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran.

\*: Corresponding Author, Email: mirhashemi931@yahoo.com