

## شبیه‌سازی عددی و تخمین ضریب پراکنده‌پذیری عرضی آلاینده امتزاج‌پذیر آب شور در یک محیط متخلخل ناهمگن و همگن

مهران ایران‌پور مبارکه<sup>۱\*</sup> و مانفرد کخ<sup>۱</sup>

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۷/۶؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۹/۷)

### چکیده

نابود شدن منابع آب‌های زیرزمینی در مناطق ساحلی به علت پیشروی آب شور در آبخوان‌های این نواحی در حال حاضر یکی از مسائل مهم در تأمین نیازهای آبی در این مناطق است. در نواحی ساحلی، آب شور به صورت یک گوه از زیر، وارد آبخوان می‌شود. با توجه به تفاوت چگالی موجود بین آب شور و شیرین یک ناحیه بینابینی بین دو سیال شکل می‌گیرد. به منظور درک بهتر از اهمیت این موضوع، آزمایش‌ها و تحقیقات عددی جریان‌های وابسته به غلظت و انتقال ماده‌ی حل شده به وسیله تانک پر شده از نمونه ماسه‌های متنوع، کمک زیادی برای دستیابی به این مهم خواهد کرد. در این پژوهش، تانک ماسه‌ای واقعی مذکور، توسط نرم افزار SUTRA شبیه‌سازی شد. این شبیه‌سازی شامل پیکربندی، گسسته‌سازی، تخصیص ویژگی و تعیین شرایط مرزی است. در نهایت ضریب پراکنده‌پذیری عرضی در مقیاس میکروسکوپی برای سناریوهای مختلف انتقال ماده محلول در این تانک برآورد شد. هدف از انجام این پژوهش، تحلیل پراکنده‌پذیری جریان، هنگام اختلاط آب شور و شیرین و اثر سرعت منفذی جریان، غلظت منبع آلاینده و ناهمگنی محیط متخلخل بر خاصیت پراکنده‌پذیری جریان است. در این پژوهش، پس از بررسی تأثیر شرایط مرزی متفاوت در مدل SUTRA بر پیشرفت هاله آلودگی آب شور، شبیه‌سازی مدل نمونه ماسه‌های ناهمگن و مقایسه نتایج آن با مدل آزمایشگاهی و مدل همگن انجام شد. به عنوان نتیجه‌ای کاربردی از انجام این پژوهش، نمودار تغییرات ضریب پراکنده‌پذیری عرضی، نسبت به غلظت منبع ورودی و سرعت واقعی جریان ترسیم شد. در شبیه‌سازی عددی محیط ناهمگن در تمام غلظت‌ها به استثنای غلظت  $C_0 = 35000$ ، با افزایش سرعت جریان، مقادیر ضریب پراکنده‌پذیری عرضی  $At$  محاسبه شده توسط SUTRA کاهش یافت. در تمام سرعت‌ها به استثنای سرعت  $u = 4 \text{ m/day}$  با افزایش غلظت منبع ورودی،  $At$  برآورد شده، افزایش پیدا کرد. همچنین مقادیر  $At$  بدست آمده از مدل SUTRA بیشتر از مقادیر  $At$  آزمایشگاهی به دست آمد. در شبیه‌سازی عددی محیط همگن، برای تمام سرعت‌ها، با افزایش غلظت ورودی  $C_0$ ، ضریب پراکنده‌پذیری عرضی  $At$  افزایش یافت. با توجه به نتایج کاربردی حاصل شده، می‌توان راه‌حل مناسبی برای بهبود کیفیت آب‌های زیرزمینی و جلوگیری از اختلاط منابع آبی شیرین و شور ارائه داد.

واژه‌های کلیدی: انتقال ماده حل شده، ضریب پراکنده‌پذیری عرضی، کالیبراسیون شرایط مرزی، محیط متخلخل ناهمگن و همگن، ناهمگنی

تصادفی، مدل SUTRA

۱. گروه ژئوهیدرولیک و هیدرولوژی مهندسی، دانشکده مهندسی عمران و محیط زیست، دانشگاه کاسل، کاسل، آلمان

۲. گروه مهندسی عمران، واحد لنجان، دانشگاه آزاد اسلامی، اصفهان، ایران

\*. مسئول مکاتبات: پست الکترونیکی: mehran.iranpour.mo@gmail.com

## مقدمه

پیچیده آبخوان‌ها، ارائه مدل ریاضی مناسب، روش بسیار مناسبی برای شبیه‌سازی و بررسی ویژگی‌های مختلف آن است که تقریبی از شرایط واقعی محیط را منعکس می‌کند. به‌طور کلی برای بیان مدل آب زیرزمینی، از قوانین علمی و روابط ریاضی استفاده می‌شود که این فرمول‌ها شامل معادلات دیفرانسیل لازم و شرایط مرزی (Boundary conditions) و اولیه مرتبط با مدل حقیقی است.

زمانی که آب شیرین به‌وسیله پمپاژ استخراج می‌شود، فصل مشترک آب شور و شیرین به سمت داخل و همچنین آب شور نیز بیشتر به داخل آبخوان پیش‌رانده می‌شود. این پدیده همچنین می‌تواند در خشکی، هنگام برداشت آب شیرین از چاه‌ها که باعث کشیده‌شدن آب شور از آبخوان‌های عمیق‌تر به سمت بالا می‌شود، نیز رخ دهد. اگرچه که آب‌های زیرزمینی منابع باارزشی برای دستیابی به آب آشامیدنی هستند، اما به سادگی در مقابل آلودگی‌ها آسیب‌پذیر هستند. آلودگی آب شیرین به سادگی انجام می‌شود زمانی که منابع آلوده‌کننده در سطح زمین، راهی برای نفوذ به آبخوان‌ها از طریق خاک و سنگ پیدا کنند.

جریان با چگالی متغیر و فرایند انتقال آن در محیط متخلخل در موارد بسیاری در هیدرولوژی آب‌های زیرزمینی رخ می‌دهد. برای مثال: الف- هجوم آب شور دریا به ساحل آبخوان‌ها (۴)، ب- بالا آمدگی مخروطی آب شور در سازند آبخوان‌ها (۱۶)، ج- تراوش قائم آب لب شور از کانال‌های باز (۱۲)، د- جابجایی محلول‌های شورآب در گنبد‌های نمکی که به عنوان مخازن دفع زباله‌های هسته‌ای هدف قرار می‌گیرند (۸) و ه- نفوذ مایعات فاز آبی امتزاج‌پذیر (مخلوط‌شدنی سنگین) یا مایعات فازی غیرآبی امتزاج‌ناپذیر (مخلوط‌نشدنی) (۱۱).

پراکندگی در مقیاس ماکروسکوپی (Macrodispersion)، انتشار هیدرودینامیکی مواد محلول در یک آبخوان به‌وسیله تغییرات محلی در سرعت آب زیرزمینی است. از دیدگاه فیزیک، ویژگی و پیچیدگی جریان و انتقال با چگالی متغیر از این واقعیت نشأت می‌گیرد که با توجه به ادغام جریان و انتقال،

آب‌های زیرزمینی از جمله با ارزش‌ترین منابع طبیعی در جهان محسوب می‌شوند. رخدادی که می‌تواند کیفیت آب‌های زیرزمینی را کاهش دهد و استفاده از این منابع را در مصارف کشاورزی و صنعتی غیرممکن سازد، نفوذ آب شور به آبخوان‌های آب شیرین است. از آنجا که چگالی آب شور از آب شیرین بیشتر است، زمانی که این دو لایه با یکدیگر در ارتباط باشند، تا زمانی که سیستم به پایداری برسد، اختلاف فشار بوجود آمده، سبب نفوذ آب شور به آب شیرین می‌شود. همچنین به دلیل برداشت بی‌رویه از منابع آب شیرین، انتقال جریان با چگالی متغیر، در مدل‌هایی مانند هجوم آب شور دریا (Seawater intrusion) در آبخوان‌های ساحلی و بالاآمدگی مخروطی آب شور (Saltwater upconing) در سازند زمین‌شناسی آبخوان‌ها رخ می‌دهد که هدف اصلی این پژوهش نیز بررسی این پدیده‌ها است.

یکی از امتیازاتی که منابع آب‌های زیرزمینی نسبت به آب‌های سطحی از آن برخوردار هستند، حفاظت در برابر برخی آلودگی‌های مضر است. علاوه بر آن، این منابع کمتر در معرض تغییرات و نوسانات فصلی قرار می‌گیرند. با این تفاسیر، اگرچه نمی‌توان به‌طور کامل از سلامت این منابع اطمینان حاصل کرد اما این امتیازات، تمایل کشورها را به حفظ و بهره‌برداری صحیح از این منابع افزایش می‌دهد.

در دهه‌های گذشته به دلیل توسعه اجتماعی و اقتصادی و متعاقب آن افزایش روند تقاضا برای مصرف آب، اغلب آبخوان‌های مهم کشور در معرض زوال قرار گرفته‌اند، به‌طوری که بیشتر دشت‌های کشور به دلیل افت ادامه‌دار سطح آب زیرزمینی در شرایط ممنوعه یا ممنوعه بحرانی با شوری مواجه است. از آنجا که مخازن آب زیرزمینی که همواره یکی از مهم‌ترین منابع آب شیرین و در دسترس شناخته می‌شوند، در زیر زمین و دور از دید مستقیم قرار دارند، شناخت و پایش کامل آنها از نظر کمی و کیفی به سادگی امکان‌پذیر نیست و در عمل به صرف وقت و هزینه‌های زیادی نیاز دارد. لذا به علت ماهیت

راور در شمال استان کرمان، آب زیرزمینی تنها منبع تأمین‌کننده آب شرب و کشاورزی است (۱). در ادامه این موضوع، حتی کشورهایمانند بلغارستان، مجارستان و روسیه قوانین بسیار سختگیرانه‌ای وضع کرده‌اند که با توجه به آن، استفاده از منابع آب‌های زیرزمینی برای مقاصد دیگر فقط در صورتی مجاز خواهد بود که تمام نیازهای مربوط به آشامیدن برطرف شده باشد (۲). گیبس و هرزبرگ، تحقیقات جامعی پیرامون موضوعی به نام هجوم آب شور (Invasion of seawater) داخل آب شیرین ارائه داده‌اند. بر مبنای این پژوهش‌ها، هجوم آب شور داخل آب شیرین پدیده‌ای است که به شدت، کیفیت آب‌های زیرزمینی در نواحی ساحلی را کاهش می‌دهد و استفاده از این منابع را غیرممکن می‌کند. این پدیده زمانی رخ می‌دهد که گرادیان آب‌های زیرزمینی در شرایط پمپاژ ناپایدار کاهش پیدا کند یا تغییر جهت دهد و این موضوع باعث جایگزینی آب‌های شور با چگالی بیشتر با آب شیرین می‌شود. (۵ و ۶).

با توجه به پیچیدگی فرایندهای جریان و انتقال ماده حل‌شده، می‌توان اظهار داشت که تفسیر دقیق الگوریتم ریاضی پراکنده‌پذیری هیدرودینامیکی ناممکن خواهد بود. دانشمندان مختلفی با استفاده از قوانین فیزیکی، مدل‌های مربوط به فرایندهای جریان را در مقیاس ماکروسکوپی (کلان) توسعه داده‌اند. یکی از این دانشمندان که روی مدل پراکنده‌پذیری متخلخل دانه‌ای تحقیقات زیادی ارائه داد، بیر بود (۳).

رئوف و حسنی‌زاده تحقیقاتی در مورد وابستگی پراکنده‌پذیری به میزان اشباع‌پذیری انجام دادند. در این پژوهش، با استفاده از یک مدل شبکه متخلخل، چگونگی ارتباط غیرخطی پراکنده‌پذیری عرضی با اشباع‌پذیری مطالعه شد. آنها محیط متخلخل را به‌عنوان شبکه‌ای با بدنه منفذی با حجم محدود به‌منظور شبیه‌سازی یک محیط متخلخل واقعی طراحی کردند (۱۵).

کارادیمیتریو و همکاران به‌صورت همزمان تصویر حرارتی و نوری جریان دو فاز را در یک مدل کوچک آبخوان به نمایش گذاشتند و به این نتیجه رسیدند که اثرات حرارتی،

اثرات شناوری در میدان جریان ظاهر می‌شود که علاوه‌بر تغییرات منظم هد، ممکن است نیروی محرک غالب برای جریان تشکیل دهد. بسته به لایه‌بندی بر اساس تغییرات چگالی، دو نوع الگوی جریان و انتقال هاله ماده حل‌شده پایدار (مانند موارد الف و ب ذکر شده) یا الگوی جریان ناپایدار (موارد ج و ه) توسعه داده شده‌اند. برای یک پیکربندی هیدرودینامیکی پایدار، سیال سنگین در زیر قرار گرفته که انتظار می‌رود با افزایش چگالی، پراکنده‌پذیری کاهش یابد. درحالی‌که، برای یک لایه‌بندی ناپایدار که سیال سنگین بالا قرار می‌گیرد، عکس این موضوع رخ خواهد داد. یک روش رسیدن به این مهم، ارتباط دادن ضرایب پراکنده‌پذیری ظاهری ( $\alpha_T$  و  $\alpha_L$ )، به طیف اختلاف چگالی در عرض فصل مشترک سیال بین هاله ماده حل‌شده و آب خالص است.

مقادیر پراکنده‌پذیری طولی و عرضی ( $\alpha_T$  و  $\alpha_L$ )، که دارای بعد طول [L]، و از ویژگی‌های محیط متخلخل و فرایندهای انتقال (همرفت و پخشیدگی) هستند، انتشار ماده حل‌شده در جهت‌های افقی و عرضی را نشان می‌دهند. از رابطه (۱) و (۲) می‌توان دریافت که ضریب پراکنده‌پذیری به تغییر چگالی، میزان ناهمگنی محیط و همچنین مقیاس بستگی دارد.

$$\alpha_T = 0.28 (Pe)^{0.72} \frac{D_0}{U} \quad (1)$$

$$Pe = \frac{Ud}{D_0} \quad (2)$$

که در این روابط  $D_0$  ضریب پخشیدگی مولکولی در آب خالص،  $d$  طول مشخصه،  $U$  سرعت متوسط جریان و  $Pe$  عدد پکله است (۱۴).

آرلی (۱۹۹۶)، در پژوهشی به این موضوع اشاره کرد که برخی از شهرها در سراسر دنیا، از آب‌های زیرزمینی به‌عنوان منبع اصلی آب مورد نیاز استفاده می‌کنند. از این قبیل شهرها می‌توان به بوداپست، مونیخ و رم اشاره کرد (۲). همچنین در برخی استان‌های ایران مانند فارس، ۷۸ درصد منابع آب آن از طریق آب‌های زیرزمینی تأمین می‌شود (۱۷). در منطقه دشت

ضریب نفوذپذیری ماسه‌ها تعریف شد. اعدادی که به صورت کامپیوتری تولید می‌شوند از تئوری تصادفی تبعیت می‌کنند.

#### مدل‌سازی مخزن ماسه‌ای (تانک) توسط مدل SUTRA

به منظور شبیه‌سازی عددی آب‌های زیرزمینی از مدل‌های عددی مختلفی مانند SUTRA، MODFLOW و FEFLOW برای آنالیز اشباع و غیراشباع جریان آب زیرزمینی با غلظت‌های گوناگون استفاده می‌شود که در این پژوهش از مدل SUTRA استفاده شده است. شبیه‌سازی SUTRA بر مبنای تلفیق روش اجزای محدود و تفاضل محدود است. این نرم‌افزار یک مدل کامپیوتری پیچیده ابتدا به منظور مدل‌سازی کامپیوتری تانک واقعی پر شده از ماسه‌های متنوع واقع در آزمایشگاه هیدرولیک دانشگاه کاسل آلمان (شکل (۱))، کد نویسی‌های لازم جهت پیکر بندی مدل انجام شد. بدین منظور مدل از نظر مکانی و زمانی اجزایندی و به  $98 \times 392$  اجزا محدود (Finite elements) مستطیلی شکل، مش بندی شد. خواص ماسه‌ها شامل نفوذپذیری، تخلخل و پراکنده‌پذیری  $\alpha_L$  (در جهت طولی) و  $\alpha_T$  (در جهت عرضی)، متناظر با نمونه واقعی تانک ماسه به آلمان‌ها و گره‌ها تخصیص داده شد. تخصیص میزان هر ویژگی به ساختار تانک محتوی نمونه پک ماسه (Sand pack) مربوط می‌شود. این فرایند طی کدنویسی ۲۲ عدد Dataset به‌عنوان فایل ورودی برای SUTRA انجام پذیرفت. این پارامترها برای تخلخل در Dataset ۱۴A و B۱۴ و برای نفوذپذیری و پراکنده‌پذیری A۱۵ و B۱۵ تعریف می‌شوند. لازم به ذکر است Dataset ۱۴ مربوط به گره‌ها و Dataset ۱۵ مربوط به آلمان‌ها هستند. بقیه ویژگی‌های مواد و سیال از قبیل تراکم‌پذیری آبخوان و سیال، غلظت و شیب معادله غلظت و ویسکوزیته سیال در Dataset ۹ قابل تعریف است. اگر چه ویسکوزیته به صورت ثابت در نظر گرفته می‌شود اما تا حدودی نیز به غلظت وابسته است. شرایط مرزی شامل غلظت نمک به‌عنوان منبع ورودی و اختلاف هد برای تأمین سرعت تراوش برای شبیه‌سازی ۱۵ سناریو به‌عنوان فایل‌های ورودی تعریف شدند.

پراکنده‌پذیری را افزایش می‌دهد (۱۰).

در این پژوهش، هدف، بررسی تأثیرات مشخصات تصادفی محیط متخلخل بر پراکنده‌گی در حالت پراکنده‌گی پایدار در مقیاس ماکروسکپی (Macro dispersion) و همچنین بررسی تأثیرات تغییرات غلظت و سرعت آب شور بر میزان پراکنده‌گی در محیط متخلخل بسیار ناهمگن است.

#### مواد و روش‌ها

به منظور انجام آزمایش‌های ردیاب دوبعدی (در یک صفحه قائم X-Z) از پراکنده‌گی در مقیاس ماکروسکپی در جریان وابسته به چگالی (Density-dependent flow)، مخزن (تانک) پلکسی گلاس با مشخصات  $9/8$  متر طول،  $1/2$  متر ارتفاع و  $10$  سانتی‌متر عرض که در آزمایشگاه هیدرولیک دانشگاه کاسل آلمان ساخته شده است، با هدف مدل‌سازی تصادفی محیط متخلخل ناهمگن، مورد مطالعه و آزمایش قرار گرفت. این آزمایش‌ها در شرایط پایدار هیدرودینامیکی (Hydrodynamically stable case) یعنی تزریق آب شور زیر یک لایه آب شیرین انجام شد. برای هدف‌های واسنجی (Calibration) و اعتبارسنجی (Validation)، آزمایش‌ها با شبیه‌سازی‌های عددی انجام گرفته با مدل جریان و انتقال وابسته به چگالی SUTRA همراه شدند. بدین منظور ۱۲ سناریوی انتقال ماده محلول (غلظت و سرعت‌های مختلف) در محیط متخلخل ناهمگن به صورت آزمایشگاهی و عددی شبیه‌سازی شد. علاوه بر آن ۱۵ سناریوی انتقال ماده محلول در محیط متخلخل همگن (Homogeneous) فقط به صورت عددی شبیه‌سازی شد و ضریب پراکنده‌پذیری عرضی در مقیاس ماکروسکپی ( $A_T$ ) و توزیع غلظت برای هر دو محیط همگن و ناهمگن (Heterogeneous) مقایسه شد. به دلیل ناشناخته بودن ویژگی‌های و سازندهای زمین‌شناسی آبخوان‌ها، از تئوری تصادفی برای تعریف محیط متخلخل ناهمگن استفاده شده است. بدین منظور با استفاده از نرم‌افزار معروف Turning band method TBM، ماتریس تصادفی متناظر با



شکل ۱. مدل تانک با ابعاد  $z=1/225$  m و  $x=10$  m و  $y=0/1$  m در آزمایشگاه هیدرولیک دانشگاه کاسل آلمان

بهرتر فیزیک فرایند انتقال ماده حل شده در یک محیط متخلخل ناهمگن تصادفی (Heterogeneous Stochastic) انجام می‌شود. موضوعی که می‌تواند به‌عنوان پیش‌بینی در این پژوهش مطرح شود عبارتست از بررسی تأثیر ناهمگنی محیط متخلخل بر ضریب پراکنده‌پذیری در مقیاس میکروسکوپی.

پس از اجرای برنامه SUTRA، پروفیل‌های غلظت در ستون‌های مختلف تانک به‌همراه کانتورهای غلظت برای مقایسه با موارد مشابه به‌دست آمده از آزمایش‌ها توسط نرم‌افزار متلب ترسیم شد. سپس واریانس غلظت نمک از روی پروفیل‌های غلظت حاصل شد و نمودار واریانس، نسبت به طول تانک ترسیم شد و یک رگرسیون خطی به‌دست آمد. با توجه به مباحث ذکر شده، نصف شیب خط برازش شده برابر با مقدار پراکنده‌پذیری در مقیاس میکروسکوپی (AT) است (۵).

تغییر قائم توزیع نرمال شده  $C(x,y)/C_0$  در یک نقطه معین  $(x)$ ، که یک توزیع گاوسی با واریانس رابطه (۳) است:

$$\sigma^2 = 2 \frac{D_{TX}}{u} = 2A_T x \quad (3)$$

بدین ترتیب با توجه به رابطه فوق، رابطه (۴)، فرمول نهایی برای تخمین  $A_T$  از عرض فصل مشترک پراکنده‌پذیر که توسط انحراف معیار  $\sigma$  به‌عنوان تابعی از مکان افقی  $x$  محاسبه می‌شود، به‌دست می‌آید.

$$A_T = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sigma^2}{x} \quad (4)$$

**واستنجی یا کالیبراسیون شرایط مرزی در مدل SUTRA**  
انتخاب شرایط مرزی جریان برای فشار هیدرواستاتیک، (P)، همانند غلظت، نقش مهمی در مدل جریان وابسته به غلظت دارد. غلظت با توجه به شرایط مرزی برای معادله انتقال محلول مشخص می‌شود، هر چند تعیین غلظت خروجی به روش صریح بسیار دشوار خواهد بود. برای تعیین شرایط مرزی گزینه‌های احتمالی که در یک سری از شبیه‌سازی SUTRA اجرا می‌شود، عبارت است از: غلظت خروجی برابر صفر ( $C_{out}=0$ ) یا غلظت خروجی برابر غلظت مخلوط آب شور و شیرین ( $C_{out}=C_{mix}=0/5 \times C_{in}$ ).

### پیش‌بینی مدل SUTRA برای تخمین پراکنده‌پذیری

بعد از صحت‌سنجی و اعتبارسنجی و همچنین کالیبره‌کردن مدل عددی، یکی از اهداف نهایی مهم، پیش‌بینی (Prediction) فرایند هیدرولوژیکی یا پیش‌بینی پارامترهای دیگر موجود و یا مورد نیاز در آینده خواهد بود. اهمیت این موضوع به این علت است که مدل‌های عددی مانند SUTRA یا مدل‌های دیگر کمک زیادی به مدیریت مسائل مربوط به آب‌های زیرزمینی خواهند کرد. در حال حاضر، مطالعه جریان وابسته به غلظت و مدل SUTRA به‌عنوان یک ابزار پیش‌بینی به‌منظور شبیه‌سازی رفتار هاله آلودگی در تانک با وجود پارامترهای ورودی و شرایط مرزی مختلف به‌کار گرفته می‌شود و این موضوع با هدف درک

جدول ۱. مشخصات شرایط مرزی متفاوت و زمان در شبیه‌سازی تانک

شکل	a)	b)	c)	d)	e)	f)	g)	h)
گام زمانی	۵۰	۵۰	۱۵۰۰	۱۵۰۰	۵۰	۵۰	۱۵۰۰	۱۵۰۰
زمان سپری شده	h۸/۳۳	h۸/۳۳	h۲۵۰	h۲۵۰	h۸/۳۳	h۸/۳۳	h۲۵۰	h۲۵۰
C [PPm]	۲۵۰	۲۵۰	۲۵۰	۲۵۰	۳۵۰۰۰	۳۵۰۰۰	۳۵۰۰۰	۳۵۰۰۰
شرایط مرزی	C <sub>out</sub> =۰	C <sub>out</sub> =C <sub>mix</sub>	C <sub>out</sub> =۰	C <sub>out</sub> =C <sub>mix</sub>	C <sub>out</sub> =۰	C <sub>out</sub> =C <sub>mix</sub>	C <sub>out</sub> =۰	C <sub>out</sub> =C <sub>mix</sub>

مختلف تانک توسط آنها ارائه شد. ضریب پراکنده‌پذیری عرضی محلی در مدل‌سازی آنها  $m^{(-5)} = 1/9 \times 10^{-5}$  در نظر گرفته شد. پژوهش‌های آنها نشان داد که شرایط مرزی خروجی در پروفیل‌های غلظت بسیار اثرگذار است که این موضوع با نتایج این پژوهش تطابق خوبی دارد (۱۳).

واسنجی پراکنده‌پذیری عرضی و طولی در مقیاس میکرو توسط مقایسه پروفیل‌های غلظت به‌دست آمده از SUTRA و آزمایش‌ها انجام گرفت. نرم‌افزار SUTRA برای ۱۵ سناریوی آزمایشگاهی انتقال ماده محلول تا رسیدن پراکنده‌گی آب شور به حالت پایدار برای محیط متخلخل همگن معادل، به‌همراه ۱۵ سناریوی مشابه برای محیط ناهمگن تانک واقعی ماسه اجرا شد. واسنجی مدل‌های انتقال از مباحث پیچیده در آب‌های زیرزمینی بوده و شبیه‌سازی‌ها با یک چگالی ثابت، فقط یک تطابق تقریبی در طول تانک (x) نشان می‌دهند. طبق یافته‌های آزمایشگاهی با استفاده از واریانس‌های فضایی یا مکانی توزیع غلظت با مقادیر ورودی متفاوت برای تعیین پراکنده‌پذیری ناشی از ساختار دانه‌بندی، مقدار بهینه  $\alpha_T$  که تطابق قابل قبولی با نتایج آزمایشگاهی داشته انتخاب شد ( $\alpha_L = 0/003 \text{ m}$ ,  $\alpha_T = 0/0015 \text{ m}$ ). این واسنجی انتقال برای غلظت‌های بالاتر، پیچیده‌تر خواهد شد که با معادلات جریان و انتقال همراه است.

### آنالیز مقادیر ضرایب پراکنده‌پذیری عرضی برای حالت‌های مختلف جریان

شکل (۳) مقایسه واریانس‌های توزیع قایم غلظت به‌دست آمده از نتایج آزمایشگاهی و شبیه‌سازی شده را که منجر به پراکنده‌پذیری عرضی در مقیاس ماکروسکوپی  $A_T$  می‌شود، برای

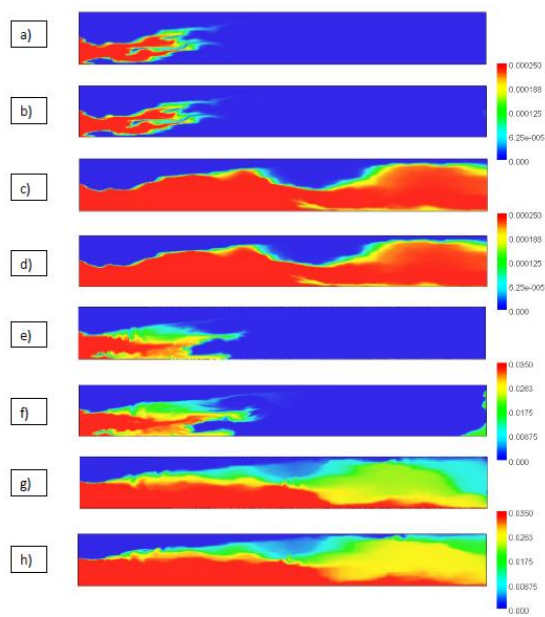
بنابراین، تخمین مقدار انحراف معیار  $\sigma$  یا واریانس  $\sigma^2$  به صورت گرافیکی و بر اساس منحنی غلظت نرمال  $C(x,y)/C_0$  به‌دست می‌آید، که در این حالت، عرض منطقه اختلاط ( $B=2\sigma$ ) برابر است با:

$$B = 2\sigma = h \left( \frac{c}{c_0} = 0/1586 \right) - h \left( \frac{c}{c_0} = 0/8414 \right) \quad (5)$$

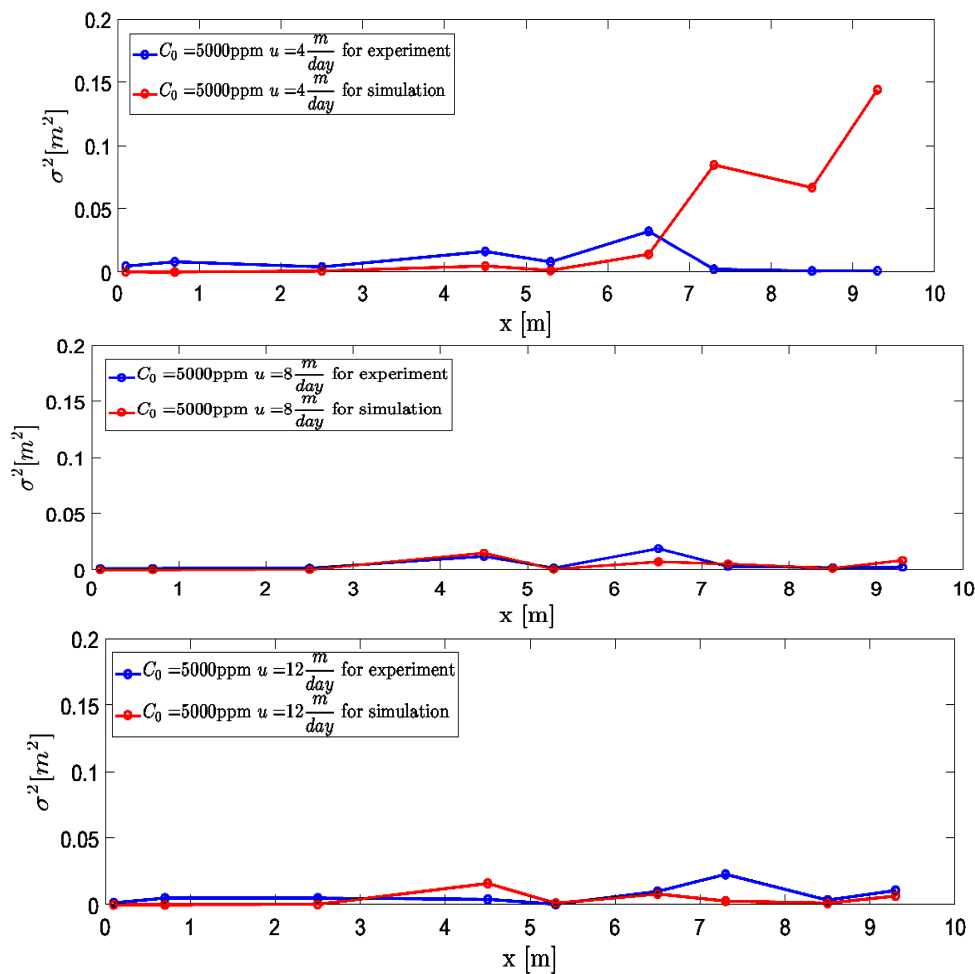
در این پژوهش، ضریب پراکنده‌پذیری عرضی در مقیاس ماکروسکوپی  $A_T$  از روش ممان‌های فضایی هاله آلودگی ماده حل‌شده (solute plume spatial moments) استفاده شده است (۵).

### نتایج و بحث

نتایج واسنجی یا کالیبراسیون شرایط مرزی در مدل SUTRA به‌منظور درک اثرات دو نوع از شرایط مرزی غلظت یعنی  $C_{out}=0$  یا  $C_{out}=C_{mix}=0/5 \times C_{in}$  روی حرکت هاله آلودگی آب شور، هشت مدل مختلف با غلظت  $C_{in}$  متفاوت و مدت زمان سپری‌شده مختلف با استفاده از داده‌های موجود در جدول (۱) شبیه‌سازی شده‌اند و تصاویر مربوط به آن در شکل (۲) قابل مشاهده است. با توجه به توضیحات ارائه‌شده، همانطور که قابل انتظار بود نتایج نشان می‌دهد تغییر شرایط مرزی برای غلظت  $C_0=250 \text{ ppm}$  به‌طور کلی اثر ملموس و قابل مشاهده‌ای در پراکنده‌گی نخواهد داشت. تنها در اولین گام زمانی، یک جریان غیرمنتظره از خروجی مخزن در حالتی که  $C_{out} = C_{mix}$  باشد، مشاهده شد. همچنین کخ و اشتارکه از جمله پژوهشگران قبلی، هر دو شرایط مرزی فشار آب شیرین و فشار مخلوط آب شور و شیرین در مرز خروجی تانک را با مدل SUTRA شبیه‌سازی کردند. برای سناریوهای مختلف غلظت و سرعت منفذی، پروفیل‌های قایم غلظت در ستون‌های



شکل ۲. تأثیر شرایط مرزی متفاوت بر پیشرفت هاله آلودگی آب شور



شکل ۳. واریانس توزیع غلظت نرمال شده برای آزمایش و شبهه‌سازی عددی SUTRA

جدول ۲. مقایسه ضرایب پراکنده‌پذیری آزمایشگاهی با نتایج شبیه‌سازی ناهمگن و همگن SUTRA

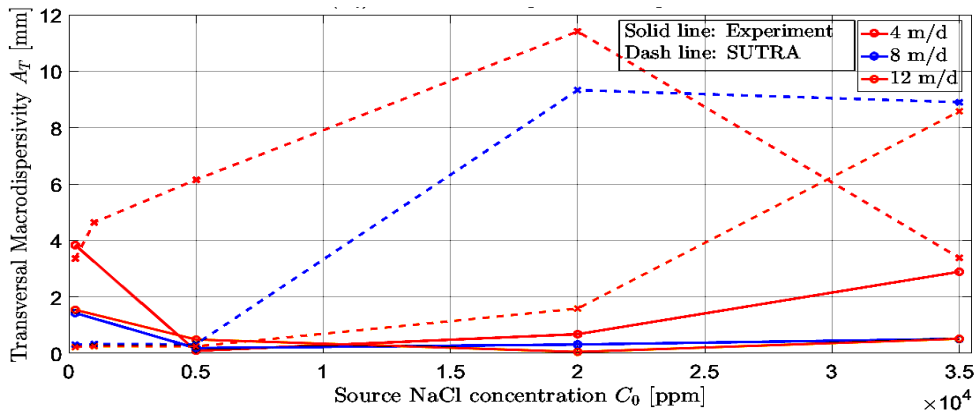
C <sub>o</sub> (ppm)	u (m/d)	NTMAX	SCALE	SUTRA A <sub>T</sub> (mm)	R <sup>۲</sup>	Homogeneous A <sub>T</sub> (mm)	R <sup>۲</sup>	A <sub>T</sub> Experiment (mm)
۲۵۰	۴	۲۷۰۰	۶۰۰	۳/۳۶۱	۰/۴۱۵	۰/۱۱۹	۰/۸۳۱	۳/۸۳۴
	۸	۱۸۰۰	۶۰۰	۰/۳۰۵	۰/۱۸۵	۰/۱۴۶	۰/۹۸۱	۱/۴۲۸
	۱۲	۹۰۰	۶۰۰	۰/۲۱۹	۰/۰۸۷	۰/۱۵۱	۰/۹۹۶	۱/۵۴۰
۱۰۰۰	۴	۲۷۰۰	۶۰۰	۴/۶۴۱	۰/۴۳۱	۰/۱۲۳	۰/۸۶۲	-----
	۸	۱۸۰۰	۶۰۰	۰/۳۲۸	۰/۱۹۵	۰/۱۴۶	۰/۹۸۴	-----
	۱۲	۹۰۰	۶۰۰	۰/۲۵۳	۰/۱۰۹	۰/۱۵۲	۰/۹۹۷	-----
۵۰۰۰	۴	۵۴۰۰	۳۰۰	۶/۱۵۴	۰/۶۱۶	۰/۱۵۴	۰/۹۹۱	۰/۰۹۰
	۸	۳۶۰۰	۳۰۰	۰/۳۲۳	۰/۱۷۱	۰/۱۵۴	۰/۹۹۹	۰/۱۸۲
	۱۲	۱۸۰۰	۳۰۰	۰/۲۴۵	۰/۰۹۱	۰/۱۵۶	۱/۰۰۰	۰/۴۸۷
۲۰۰۰۰	۴	۱۰۸۰۰	۱۵۰	۱۱/۴۱۰	۰/۷۶۴	۰/۶۳۸	۰/۳۶۶	۰/۶۷۷
	۸	۷۲۰۰	۱۵۰	۹/۳۲۹	۰/۷۴۴	۰/۲۲۱	۰/۸۰۱	۰/۳۱۲
	۱۲	۳۶۰۰	۱۵۰	۱/۵۸۵	۰/۲۱۰	۰/۱۸۲	۰/۹۳۸	۰/۰۵۰
۳۵۰۰۰	۴	۲۱۶۰۰	۷۵	۳/۳۸۲	۰/۳۵۶	۱/۴۷۶	۰/۲۹۸	۲/۸۹۰
	۸	۱۴۴۰۰	۷۵	۸/۹۰۲	۰/۷۴۹	۰/۵۴۵	۰/۳۹۰	۰/۵۰۹
	۱۲	۷۲۰۰	۷۵	۸/۵۷۷	۰/۷۷۱	۰/۲۶۵	۰/۶۵۳	۰/۵۱۴

شبیه‌سازی شده (A<sub>T</sub>) همراه با مقادیر آزمایشگاهی را برای آزمایش‌های مختلف گزارش می‌کند. به‌منظور درک بهتر از موضوع، شکل‌های (۴) تا (۷) مقادیر پراکنده‌پذیری عرضی (A<sub>T</sub>) جدول ۲ را نشان می‌دهند. شکل‌های (۴) و (۵) ضریب پراکنده‌پذیری عرضی را به‌صورت تابعی از غلظت منبع ورودی نشان داده و شکل‌های (۶) و (۷) تابعی از سرعت واقعی هستند. شکل‌های (۴) و (۶) برای یک ماسه ناهمگن و شکل‌های (۵) و (۷) برای مدل‌های همگن معادل، شبیه‌سازی شده‌اند.

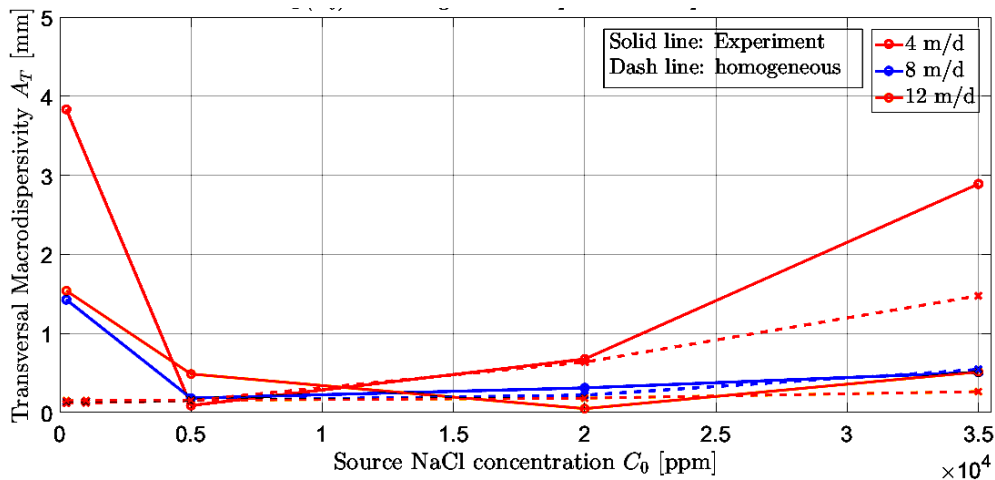
**آنالیز مقادیر ضرایب پراکنده‌پذیری عرضی در حالت همگن**  
 شکل (۸) حرکت هاله آلودگی آب شور برای دو شبیه‌سازی همگن معادل SUTRA را نشان می‌دهد، این دو شبیه‌سازی برای غلظت‌های C<sub>o</sub>=۲۵۰ ppm و C<sub>o</sub>=۳۵۰۰۰ ppm با سرعت مشترک u=۴ m/dmg است.

انتقال ماده حل شده با سرعت‌های ۴، ۸ و ۱۲ متر بر روز و غلظت ورودی C<sub>o</sub>=۵۰۰۰ ppm نشان می‌دهد. برای غلظت فوق، واریانس‌های توزیع غلظت برای شبیه‌سازی SUTRA در مقایسه با مقادیر اندازه‌گیری شده آزمایشگاهی تقریباً یکسان و مقدار واریانس، ناچیز است. به‌عبارت دیگر، در این غلظت، مقدار پراکنده‌پذیری در مقیاس ماکروسکوپی A<sub>T</sub> حاصل از نتایج آزمایشگاهی و SUTRA یکسان هستند. پانزده مدل قطعی SUTRA برای محیط ناهمگن و پانزده مدل قطعی معادل همگن با ضریب هدایت هیدرولیکی معادل اندازه‌گیری شده در آزمایشگاه (K=۰/۰۱ m/s) شبیه‌سازی شد. بر مبنای پروفیل‌های غلظت شبیه‌سازی شده در آخرین گام زمانی، ضریب پراکنده‌پذیری در مقیاس ماکرو (A<sub>T</sub>) از عرض ناحیه اختلاط B فصل مشترک آب شور و شیرین در طول تانک محاسبه شد. جدول ۲، خلاصه‌ای از ضرایب پراکنده‌پذیری عرضی

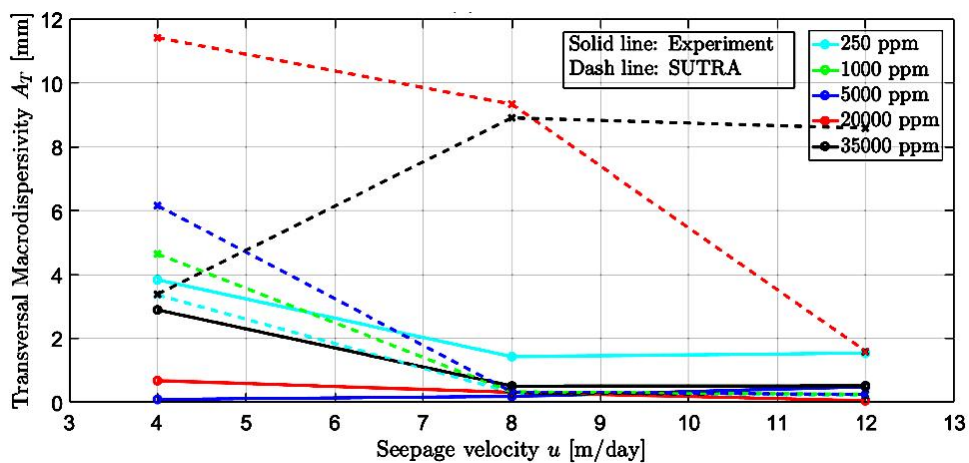




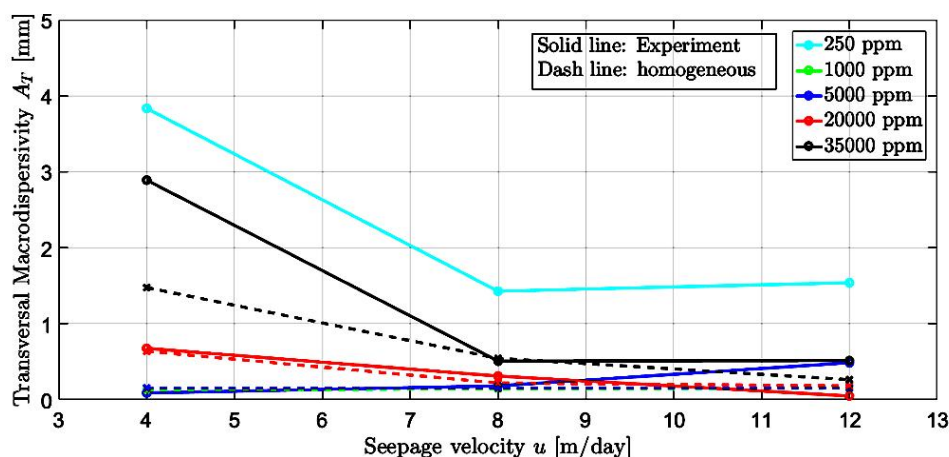
شکل ۴. مقادیر به‌دست آمده از داده‌های واقعی آزمایشگاهی و همچنین از داده‌های شبیه‌سازی عددی SUTRA برای پراکنده‌پذیری عرضی در مقیاس ماکروسکوپی  $A_T$  در یک نمونه پک ماسه ناهمگن به‌عنوان تابعی از غلظت  $NaCl$  منبع ورودی برای سرعت‌های واقعی منفذی مختلف



شکل ۵. مقادیر به‌دست آمده از داده‌های واقعی آزمایشگاهی و همچنین از داده‌های شبیه‌سازی عددی SUTRA برای پراکنده‌پذیری عرضی در مقیاس ماکروسکوپی  $A_T$  در یک نمونه پک ماسه همگن معادل ( $K=0.1$  m/s) به‌عنوان تابعی از غلظت  $NaCl$  منبع ورودی برای سرعت‌های واقعی منفذی مختلف



شکل ۶. مقادیر به‌دست آمده از داده‌های واقعی آزمایشگاهی و همچنین از داده‌های شبیه‌سازی عددی SUTRA برای پراکنده‌پذیری عرضی در مقیاس ماکروسکوپی  $A_T$  در یک نمونه پک ماسه ناهمگن به‌عنوان تابعی از سرعت‌های واقعی منفذی برای غلظت‌های  $NaCl$  منبع ورودی مختلف



شکل ۷. مقادیر به دست آمده از داده‌های واقعی آزمایشگاهی و همچنین از داده‌های شبیه‌سازی عددی SUTRA برای پراکنده‌پذیری عرضی در مقیاس ماکروسکوپی  $A_T$  در یک نمونه پک ماسه همگن معادل ( $K=0.1$  m/s) به عنوان تابعی از سرعت واقعی منفذی مختلف برای غلظت‌های NaCl منبع ورودی مختلف

منبع ورودی  $C_0=35000$  ppm بیشتر از غلظت حالت ردیاب  $C_0=250$  ppm است.

۵. مقادیر ضریب پراکنده‌پذیری عرضی  $A_T$  برای پک‌های ماسه همگن معادل در شبیه‌سازی‌های SUTRA به‌طور قابل توجهی کمتر از نمونه پک ماسه واقعی مربوط به شبیه‌سازی آزمایشگاهی با نفوذپذیری تصادفی ناهمگن است. این نتیجه کاملاً منطقی است زیرا در محیط همگن به دلیل اینکه تغییرات خلل و فرج ماسه ناچیز و به تبع آن تغییرات سرعت محلی نسبت به حالت ناهمگن ناچیز است، ماده حل شده به‌طور ثابت با انحراف معیار حداقل منتشر می‌شود. در صورتی که در محیط ناهمگن به دلیل تغییرات زیاد سرعت محلی، انتشار ماده محلول بیشتر است.

۶. در شبیه‌سازی عددی محیط ناهمگن، به‌استثنای سرعت؛ با افزایش  $u=4$  m/day، مقدار ضریب پراکنده‌پذیری عرضی  $A_T$  به‌طور قابل توجهی افزایش می‌یابد. برای سرعت  $u=4$  m/day، با افزایش غلظت تا  $C_0=20000$  ppm، مقدار ضریب پراکنده‌پذیری عرضی  $A_T$  به‌طور قابل توجهی افزایش می‌یابد، اما از این غلظت تا غلظت  $C_0=35000$  ppm این روند به‌صورت کاهشی است.

۷. در شبیه‌سازی آزمایشگاهی تا غلظت  $C_0=5000$  ppm، با افزایش

## نتیجه‌گیری

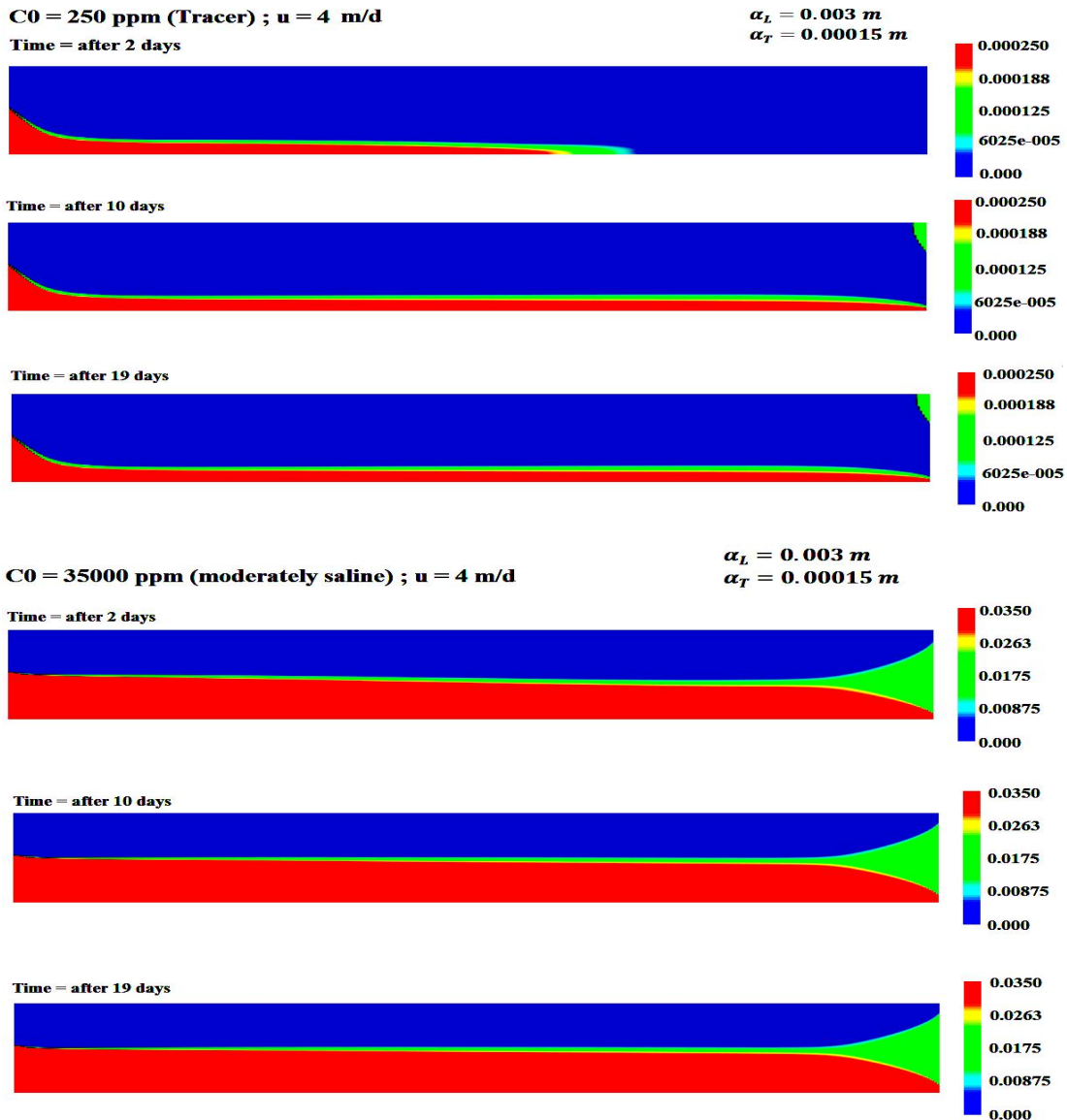
در این پژوهش، با توجه به شبیه‌سازی‌های صورت گرفته توسط SUTRA و داده‌های مربوط به آزمایش‌های تانک، نتایج زیر قابل استنباط است:

۱. برای غلظت  $C_0=35000$  ppm برخلاف غلظت  $C_0=250$  ppm، عرض منطقه بینابین (ناحیه اختلاط بین آب شور و شیرین) در انتهای تانک زیاد و تقریباً کل ارتفاع تانک را دربر می‌گیرد.

۲. عرض ناحیه اختلاط بین آب شور و شیرین به مقدار پراکنده‌پذیری طولی محلی (میکروسکوپی) و به‌ویژه پراکنده‌پذیری عرضی محلی بستگی دارد.

۳. تغییر شرایط مرزی خروجی برای غلظت  $C_0=250$  ppm به‌طور کلی اثر ملموس و قابل مشاهده‌ای در توزیع غلظت (پراکنده‌پذیری هاله آلودگی) ندارد. حال آنکه برای غلظت  $C_0=35000$  ppm برخلاف غلظت‌های پایین‌تر، فرونشست بیشتری از هاله آلودگی آب شور در انتهای تانک قابل تشخیص است.

۴. می‌توان استنباط کرد در هر دو حالت همگن و ناهمگن، کانتور غلظت مربوط به  $C_0=35000$  ppm زمان کمتری برای رسیدن به حالت پایدار، نسبت به حالت ردیاب  $C_0=250$  ppm نیاز دارد. همچنین سرعت تکامل جریان انتقالی برای غلظت



شکل ۸. مدل شبیه‌سازی شده توسط SUTRA برای حرکت انتقالی (گذرا) هاله آلودگی آب شور در حالت همگن در آزمایش‌های تانک ماسه‌ای با  $C_0 = 250 \text{ ppm}$  (حالت ردیاب) و  $u = 4 \text{ m/d}$  (برای سه کانتور بالایی) و  $C_0 = 35000 \text{ ppm}$  (بسیار شور) و  $u = 4 \text{ m/d}$  (برای سه کانتور پایین)، پس از گذشت ۲، ۱۰ و ۱۹ روز.

به‌استثنای غلظت  $C_0 = 35000$ ، با افزایش سرعت جریان، مقادیر  $A_T$  محاسبه شده SUTRA کاهش می‌یابد.  
 ۱۰. انتقال ماده محلول برای غلظت  $C_0 = 35000 \text{ ppm}$  نسبت به  $C_0 = 250 \text{ ppm}$  سریع‌تر به حالت پایدار خواهد رسید.  
 ۱۱. میزان پایین‌افتادگی ناحیه اختلاط بینابینی آب شور و شیرین در نمونه پک ماسه برای  $C_0 = 250 \text{ ppm}$  بیشتر از

غلظت در تمام سرعت‌ها مقدار ضریب پراکنده‌پذیری عرضی  $A_T$  افزایش می‌یابد.  
 ۸. در شبیه‌سازی عددی محیط همگن، برای هر سه سرعت، با افزایش غلظت ورودی  $C_0$ ، ضریب پراکنده‌پذیری عرضی  $A_T$  افزایش می‌یابد.  
 ۹. در شبیه‌سازی عددی محیط ناهمگن، در تمام غلظت‌ها

## سیاسگزاری

$C_0 = 35000$  ppm است.

با تشکر فراوان از دانشگاه کاسل آلمان که امکانات و تجهیزات کامل برای انجام آزمایش‌های مربوطه طی پنج سال دوره دکتری را در اختیار ما قرار داد و همچنین از پروفیسور جهانگیر عابدی کوپایی که زحمت مشاوره و ویراستاری علمی این پژوهش را بر عهده داشتند، صمیمانه قدردانی می‌شود.

۱۲. در شبیه‌سازی عددی محیط همگن، همانند نتایج آزمایشگاهی با افزایش سرعت، ضریب پراکنده‌پذیری عرضی  $A_T$  کاهش می‌یابد البته این تغییرات بعد از سرعت  $u=8$  m/day ناچیز است.

۱۳. مقادیر  $A_T$  به دست آمده در آزمایش‌ها از مقادیر محاسبه شده توسط SUTRA کمتر هستند.

## منابع مورد استفاده

1. Abdollahi, M., A. Qeshlaqi and A. Abbasnejad. 2015. Environmental Hydrogeochemistry of Groundwater Resources of Ravar Plain (North of Kerman Province). *Journal of Environmental Studies* 41 (1): 81-95.
2. Aureli, A. 1996. Methods for evaluating groundwater discharge as applied in southern Italy. LOICZ Reports Studies, 152.
3. Bear, J., 1972. Dynamics of fluids in porous media.
4. Bear, J., J. M. Buchlin and A. A. Bakr. 1999. Modelling and applications of transport phenomena in porous media. Springer.
5. Garabedian, S. P., D. R. LeBlanc, L. W. Gelhar, M. A. Celia. 1991. Large-scale natural gradient tracer test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts: 2. Analysis of spatial moments for a nonreactive tracer. *Water Resources Research* 27: 911-924.
6. Ghyben, B. 1888. Nota in verband met de voorgenomen putboring nabil Amsterdam. *Inst. Ing., The Hague* 27: 1888-1889.
7. Herzberg, A. 1901. Die Wasserversorgung Einiger Nordseebader, Munich. *Journal für Gasbeleuchtung und Wasserversorgung* 4: 248-251.
8. Herbert, A. W., C. P. Jackson and D. A. Lever. 1988. Coupled groundwater flow and solute transport with fluid density strongly dependent on concentration, *Water Resources Research* 24: 1781-1795.
9. Iranpour-Mobarakeh, M. 2017. Experimental and numerical Investigations of Tracer- and Density-dependent Transport in highly stochastic heterogeneous porous Media and Evaluation of transverse Macrodispersion, PhD Thesis, University of Kassel, Germany.
10. Karadimitriou, N. K., P. Nuske, P. J. Kleingeld, S. M. Hassanizadeh and R. Helmig. 2014. Simultaneous thermal and optical imaging of two-phase flow in a micro-model. *Lab on a Chip* 14(14): 2515-2524.
11. Kimmel, G. E. and O. C. Braids. 1980. Leachate Plumes in Ground Water from Babylon and Islip Landfills, Long Island, New York, U.S. Geological Survey Professional Paper 1085, U.S.G.S, Reston.
12. Koch, M. and G. Zhang. 1990. Numerical simulations of groundwater flow and solute transport by means of the SUTRA-model. Technical report to the Florida Department of Environmental Regulation, Supercomputer Computations Research Institute, Tallahassee, FL.
13. Koch, M. and S. B. Tarke. 2003. Experimental and numerical investigation of macrodispersion of density-dependent transport in stochastically heterogeneous media: Effects of boundary conditions and high concentrations. In: Proceeding of the 2<sup>nd</sup> International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers, Mérida, Yucatán, México. Citeseer.
14. Olsson, Å. and P. Grathwohl. 2007. Transverse dispersion of non-reactive tracers in porous media: a new nonlinear relationship to predict dispersion coefficients. *Journal of Contaminant Hydrology* 92: 149-161.
15. Raoof, A. and S. Hassanizadeh. 2012. A new formulation for pore-network modeling of two-phase flow. *Water Resources Research* 48: 1-13.
16. Voss, A. and M. Koch. 2001. Numerical simulations of topography-induced saltwater upconing in the state of Brandenburg, Germany. Physics and Chemistry of the Earth, Part B: Hydrology, *Oceans and Atmosphere* 26: 353-359.
17. Yamani, M. and Sh. Alizadeh. 2014. Groundwater Resource Potentials Using Analytic hierarchy process "AHP" (Case Study: Abadeh –Eghlid Fars Basin). *Journal of Hydrogeomorphology* (1): 144-131.

## Numerical Simulation and Estimation of the Transvers Macrodispersivity Coefficient of Aqueous Phase (Miscible) Contaminants of Salt Water in a Heterogeneous and Homogeneous Porous Media

M. Iranpour Mobarakeh<sup>1, 2\*</sup> and M. Koch<sup>1</sup>

(Received: September 28-2018 ; Accepted: November 28-2018)

### Abstract

Deterioration of groundwater resources in coastal regions due to the progression of saline water in aquifers in these regions is currently one of the important issues in providing water needs in these areas. In coastal regions, saline water enters the aquifer from below in shape of wedge. Due to the difference in the density between fresh and salty water, an interface zone forms between two fluids. In order to better understanding the importance of this issue, experiments and numerical investigations of density-depended flow and transport through a tank filled with a variety of sand, are great help in achieving this. In this research, the real sand tank was simulated using SUTRA model. This simulation includes configuration, discretization, property assignment and boundary conditions determination. Finally, the transverse macro-dispersivity coefficient was estimated for different scenarios of the solute transport in this tank. The purpose of this research is to analyze of the solute dispersion, in mixing salt and fresh water, and the effect of seepage velocity, concentration of pollutant source and heterogeneity of porous media on the flow dispersivity property. In this research, after studying the effect of different boundary conditions in SUTRA model on the development of the salt water plume, simulation of the model of heterogeneous sand tank and comparing its results with laboratory model and homogeneous model were performed. As a practical result of this research, the diagram of changes in the coefficient of transverse dispersivity against the source concentration and seepage flow velocity was plotted. In numerical simulation of heterogeneous Porous media, for all concentrations, with the exception of the concentration  $C_0= 35000$ , with increasing flow velocity, the values of the transverse dispersivity coefficient AT calculated by SUTRA decreased. Also AT for all seepage velocities, with the exception of seepage velocity  $u=4$  m/day, increased with increasing source concentration. Also, the values obtained AT from the SUTRA model were more than the values of AT obtained from experiments. In numerical simulation of the homogeneous porous media, for all velocities, as the concentration source  $C_0$  increases, the transvers macro dispersivity coefficient AT increases. According to the applied results, suitable solutions can be found to improve the quality of groundwater and prevent the mixing of fresh and saltwater resources.

**Keywords:** solute transport, transverse dispersivity coefficient, boundary conditions calibration, heterogeneous and homogeneous porous media, stochastic heterogeneity, SUTRA model

1. Department of Geohydraulics and Engineering Hydrology, Faculty of Civil and Environmental Engineering, University of Kassel, Kurt-Wolters Str. 3, D-34119, Kassel, Germany.

2. Department of Civil Engineering, Lenjan Branch, Islamic Azad University, Isfahan, Iran.

\*: Corresponding Author, Email: Mehran.iranpour.mo@gmail.com