

## اعتبارسنجی مدل SUTRA برای سناریوهای مختلف انتقال شوری در یک نمونه تانک ماسه ناهمگن به منظور ارزیابی پراکنده پذیری عرضی

مهران ایرانپور مبارکه<sup>۱\*</sup> و مانفرد کخ<sup>۲</sup>

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۶/۳۰؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۱۰/۱)

### چکیده

امروزه با افزایش روزافزون جمعیت در کشور ایران، به ویژه در مناطق خشک و نیمه خشک و در نتیجه افزایش اهمیت کیفیت منابع آبی از جمله آب های زیرزمینی، آزمایش های میدانی و مدل سازی های بسیاری برای پیشرفت آلودگی آب های زیرزمینی به وسیله نرم افزارهای قدرتمند و به روز انجام شده است. اما در بیشتر مواقع تفاوت ملموسی بین داده های اندازه گیری شده در آزمایشگاه ها و داده های تولید شده با نرم افزارها وجود دارد که به همین دلیل، از اعتبار علمی و صحت سنجی نتایج پژوهش کاسته می شود. در این مطالعه، به منظور توجیه و تصحیح داده های مذکور، از اصل کالیبراسیون استفاده شده است که خطای آزمایش و مدل سازی را به حداقل برساند. هدف از انجام این پژوهش، صحت و اعتبارسنجی مدل SUTRA برای سناریوهای مختلف انتقال ماده محلول در یک نمونه تانک ماسه با ضریب هدایت هیدرولیکی ناهمگن به منظور ارزیابی پراکنده پذیری عرضی است. به این منظور ابتدا کدنویسی برای پیکربندی و کالیبراسیون مدل عددی SUTRA برای شبیه سازی سناریوهای مختلف انتقال ماده محلول در مخزن ماسه ای ناهمگن موجود در آزمایشگاه هیدرولیک دانشگاه کاسل آلمان تا دستیابی به مقادیر قابل قبول انجام و سپس نتایج آن با مدل آزمایشگاهی مقایسه شد. به منظور صحت سنجی و اعتبارسنجی داده های حاصل از شبیه سازی با مدل SUTRA، پروفیل های غلظت مربوطه با نتایج مدل آزمایشگاهی مقایسه شد. نتایج حاصل از مدل های عددی و آزمایشگاهی، اثرات چگالی را از طریق پایین افتادگی مرکز هندسی ناحیه اختلاط برای غلظت های پایین نمک  $C_0 = 250 \text{ ppm}$  آشکار می سازد. همچنین نتایج نشان داد که عرض ناحیه اختلاط بین آب شور و شیرین به مقدار پراکنده پذیری طولی و به ویژه پراکنده پذیری عرضی بستگی دارد. با تحلیل نتایج شبیه سازی و آزمایشگاهی مشاهده شد که افزایش سرعت، باعث کاهش میزان پایین افتادگی و افزایش غلظت ورودی، باعث کاهش زمان مورد نیاز برای رسیدن به پایداری پراکنده پذیری می شود.

واژه های کلیدی: انتقال ماده محلول، پراکنده پذیری عرضی، ناحیه اختلاط آب شور و شیرین، مدل SUTRA، کالیبراسیون، مخزن ماسه ای

ناهمگن

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

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

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

## مقدمه

در دهه‌های اخیر، با توجه به اینکه نواحی ساحلی به‌عنوان جاذبه‌هایی برای زیستن و تفریح، روز به روز بیشتر مورد توجه قرار می‌گیرند، اهمیت تحقیق پیرامون این آبخوان‌ها کاملاً ضروری است. با گسترش جمعیت در این مناطق، آبخوان‌های ساحلی به‌شدت در معرض آلودگی قرار گرفته‌اند (۶).

راستوگی و همکاران، پژوهشی پیرامون میزان آلاینده‌های آب شیرین ارائه دادند. طبق این پژوهش، آژانس حفاظت محیط زیست ایالات متحده آمریکا (Environmental Protection Agency)، محدودیت‌هایی برای میزان آلاینده‌های موجود در سیستم آبرسانی عمومی مطرح کرده است. با توجه به این محدودیت‌ها، میزان کل جامدات معلق (Total Suspended Solids) TSS موجود در آب آشامیدنی نباید از ۵۰۰ میلی‌گرم بر لیتر تجاوز کند. علاوه بر آن، میزان کل جامدات محلول (Total Dissolved Solids) TDS، در این منابع نباید از ۱۰۰۰ میلی‌گرم بر لیتر فراتر رود. ذکر این نکته ضروری است که اگر مقدار کمی آب شور با آب شیرین مخلوط شود، این آب، قابل شرب نخواهد بود و از استانداردهای مربوطه تجاوز خواهد کرد (۱۲).

جریان با چگالی متغیر و انتقال در محیط متخلخل در بسیاری از اشکال در هیدرولوژی آب‌های زیرزمینی رخ می‌دهد. برای مثال: الف- هجوم آب شور دریا به آبخوان‌های ساحلی (۲)، ب- بالا آمدگی مخروطی آب شور در سازند آبخوان‌ها (۳)، ج- تراوش قائم آب لب‌شور از کانال‌های باز (۱۶)، د- جابه‌جایی محلول‌های شورآب در گنبد‌های نمکی که به‌عنوان مخازن دفع زباله‌های هسته‌ای هدف قرار می‌گیرند (۷)، ه- نفوذ مایعات فاز آبی امتزاج‌پذیر (مخلوط‌شدنی سنگین) یا لایه امتزاج‌ناپذیر (۱۵).

پراکندگی مکانیکی یا هیدرولیکی، یک فرایند اختلاط مکانیکی است که به‌علت تغییرات محلی سرعت، نسبت به سرعت متوسط جریان اتفاق می‌افتد. به‌علت نامنظمی شکل دانه‌های جامد و منافذ، سرعت محلی سیال در داخل منافذ

منفرد با سرعت منفذی متوسط، متفاوت است. این تغییرات سرعت نه تنها باعث می‌شود که ماده محلول با نرخ‌های مختلف در جهت شیب پایین‌تر انتقال یابد، بلکه عامل یک فرایند اختلاط که در مقیاس ماکروسکوپی (کلان) شبیه به فرایند اختلاط ناشی از پخشیدگی ملکولی است، نیز است. این فرایند اختلاط را که عامل آن تغییرات محلی سرعت است پراکندگی مکانیکی گویند. در حقیقت ماده محلول در آب علاوه بر اینکه با سرعتی معادل با سرعت واقعی جریان در منافذ محیط حرکت می‌کند، به‌علت تأثیر پراکندگی مکانیکی، خارج از مسیر اصلی انتقال و در اطراف آن نیز پراکنده و پخش می‌شود. هنگامی که سرعت جریان سیال در محیط به‌اندازه کافی زیاد باشد، تأثیر نسبی پراکندگی مکانیکی از تأثیر پخشیدگی ملکولی به مراتب زیادتر است و بنابراین می‌توان از پخشیدگی ملکولی در انتقال ماده محلول صرف‌نظر کرد. همچنین وقتی که سیال در محیط ساکن باشد، پراکندگی مکانیکی هیچ نقشی در انتقال ماده محلول ندارد. مجموع پخشیدگی مولکولی و پراکندگی مکانیکی (هیدرولیکی) را پراکندگی هیدرودینامیکی یا به‌طور خلاصه پراکندگی می‌نامند. پراکندگی یک ماده شیمیایی یا آلاینده را در جهت اصلی جریان سیال در محیط، پراکندگی طولی (Longitudinal dispersion) می‌نامند. علاوه بر پراکندگی طولی پراکندگی عرضی یا جانبی (Transverse or Lateral dispersion) نیز اتفاق می‌افتد. زیرا همچنان که آب از مجراهای پریچ و خم اطراف دانه‌های جامد محیط متخلخل عبور می‌کند، به‌طور پیوسته تقسیم می‌شود و باز می‌پیوندد. پراکندگی ماده در جهت عمود بر جهت اصلی جریان پراکندگی عرضی یا جانبی می‌گویند. معمولاً پراکندگی طولی به‌مراتب از پراکندگی عرضی قوی‌تر است (۱۸).

از آنجایی که یکی از جنبه‌های بسیار مهم در فرایند انتقال ماده محلول پراکندگی هیدرودینامیکی است، دانشمندان بسیاری درباره این موضوع تحقیقاتی را ارائه دادند. پراکندگی هیدرودینامیکی باعث فرایندهای اختلاط (Mixing processes) مواد محلول در آب‌های زیرزمینی خواهد شد (۲، ۳، ۵ و ۲۳). یک ضریب پراکندگی برای توصیف فرایندهای اختلاط در

پراکنده‌پذیری‌های  $\alpha_L$ ،  $\alpha_{TH}$  و  $\alpha_{TV}$  دارای بعد طول و از ویژگی‌های محیط هستند. پراکنده‌پذیری طولی  $\alpha_L$  اثر ناهمگنی را در انتشار ماده محلول در جهت جریان افقی نشان می‌دهد. پراکنده‌پذیری جانبی افقی انتشار ماده را در جهت افق که عمود بر جهت جریان افقی است، می‌سنجد. پراکنده‌پذیری جانبی قائم، اثر ناهمگنی را در انتشار ماده در جهت قائم بیان می‌کند (۱۸).

پراکنندگی هیدرودینامیکی نتیجه ماکروسکوپیکی از ترکیب پراکنندگی مکانیکی و انتشار مولکولی است. مقدار ضریب پراکنده‌پذیری عرضی با توجه به رابطه (۱) و (۲) به دست خواهد آمد.

$$D_T = \alpha_T U + D^* \quad (1)$$

$$\alpha_T = \frac{D_T + D^*}{U} \quad (2)$$

در این رابطه  $U$  سرعت حقیقی یا تراوش یا منفذی،  $\alpha_T$  پراکنده‌پذیری عرضی،  $D^*$  ضریب پخشیدگی ظاهری است (۶).

با توجه به پیچیدگی فرایندهای جریان و انتقال ماده محلول، می‌توان اظهار داشت که تفسیر دقیق الگوریتم ریاضی پراکنندگی هیدرودینامیکی غیرممکن خواهد بود. دانشمندان مختلفی با استفاده از قوانین فیزیک، مدل‌های مربوط به فرایندهای جریان را در مقیاس ماکروسکوپیکی (Macroscopic) توسعه داده‌اند (۳). در این پژوهش، یک ضریب پراکنندگی به‌منظور تشریح فرایند اختلاط در مقیاس ماکروسکوپیکی معرفی شد که وابسته به ویژگی‌های سیال و محیط متخلخل (Porous medium) است. برخی از پدیده‌ها قابل توضیح توسط مدل‌های موجود نیستند، برای مثال، هاله آلودگی (Plume) آب شور با غلظت  $100000 \text{ ppm}$ ، حرکت بسیار کندی در قسمت تحتانی آبخوان‌ها داشته است و تغییر قابل توجهی نخواهد داشت (۴ و ۱۹).

به‌منظور انجام آزمایش‌های ردیاب دوبعدی (در یک صفحه قائم  $X-Z$ ) از پراکنندگی در مقیاس بزرگ در جریان وابسته به چگال (Density-dependent flow)، مخزن (تانک) پلکسی گلاس با مشخصات  $9/8 \text{ m}$  طول،  $1/225 \text{ m}$  ارتفاع و  $10 \text{ cm}$

مقیاس ماکروسکوپی معرفی می‌شود که این ضریب یک تانسور مرتبه دوم و مربوط به مشخصات سیال و محیط متخلخل است (۸). مدل‌های تصادفی از یک پراکنندگی در مقیاس بزرگ (Macrodispersion) توسط دانشمندان زیادی توسعه داده شده‌اند. در این مدل‌سازی‌ها فرض می‌شود که رفتار تصادفی هدایت هیدرولیکی فاکتور اصلی است که تأثیرگذار روی مدل‌های انتقال و جریان است. در مقایسه با هدایت هیدرولیکی، تغییرات متخلخل و پراکنندگی‌های محلی می‌تواند نادیده گرفته شود (۹).

گوئیرز-نری اثر متقابل فرایندهای جریان و انتقال را که بر پراکنده‌پذیری تأثیر می‌گذارند، بررسی کرد. او این واقعیت را دریافت که پراکنده‌پذیری عرضی وابسته به سرعت سیال و اختلاف چگالی است که این نتیجه با فرض اینکه پراکنده‌پذیری یک ثابت محیط متخلخل است، متناقض است (۱۳).

هدف از انجام این پژوهش، پیکربندی، کالیبراسیون، صحت و اعتبارسنجی مدل SUTRA برای سناریوهای مختلف انتقال ماده محلول در یک نمونه تانک ماسه ناهمگن در ضریب هدایت هیدرولیکی به‌منظور ارزیابی پراکنده‌پذیری عرضی است. همچنین هدف از این مطالعه تجزیه و تحلیل اثرات لایه‌بندی بر اساس چگالی (Density Stratification) و سرعت جریان روی پراکنندگی در مقیاس بزرگ است.

## مواد و روش‌ها

تاکنون پژوهش‌های گسترده‌ای پیرامون مفهوم پراکنده‌پذیری در محیط متخلخل به‌صورت آزمایش‌های متعدد و یا دیدگاه‌های تئوری صورت گرفته است. پراکنده‌پذیری در محیط متخلخل به‌صورت هم‌جهت با جریان اصلی (پراکنده‌پذیری طولی) و یا عمود بر جهت اصلی جریان (پراکنده‌پذیری عرضی) صورت می‌پذیرد. میزان پراکنده‌پذیری در دو جهت طولی و عرضی با یکدیگر برابر نیست، بنابراین پژوهشگران معمولاً این دو مفهوم را به‌صورت جداگانه بررسی و مطالعه می‌کنند. در این پژوهش، تمرکز اصلی روی مفهوم پراکنده‌پذیری عرضی خواهد بود.



شکل ۱. مدل تانک با ابعاد  $y = 0.1 \text{ m}$  و  $x = 9/8 \text{ m}$ ,  $z = 1/225 \text{ m}$  در آزمایشگاه هیدرولیک دانشگاه کاسل آلمان

بلوک‌های پیوسته در یک لایه منفرد، در نظر گرفته می‌شود. این بلوک‌ها «المان محدود» نام دارند.

تنها روش برای کنترل مناسب بودن سایز مش‌بندی عبارت است از شبیه‌سازی با یک مش‌بندی فرضی مناسب و سپس بسیار ریزتر کردن مش‌بندی و مقایسه نتایج با مش‌بندی جدید، بدین صورت که اگر تفاوت‌های مشخصی در نتایج وجود نداشت، شبیه‌سازی با مش‌بندی درشت‌تر مناسب است (۲۲). شبکه‌بندی مدل SUTRA شبیه هندسه تانک و با همان مشخصات تنظیم شد. به‌منظور تحلیل میدان نفوذپذیری تصادفی در تانک با توجه به شکل (۲)، هر بلوک ماسه به‌صورت المان‌های  $8 \times 2$  تعریف شد که منجر به تولید  $392 \times 98$  المان خواهد شد. هر المان به سایز  $\Delta x = 2/5 \text{ cm}$  در جهت  $x$  و  $\Delta z = 1/25 \text{ cm}$  و در جهت  $z$  است.

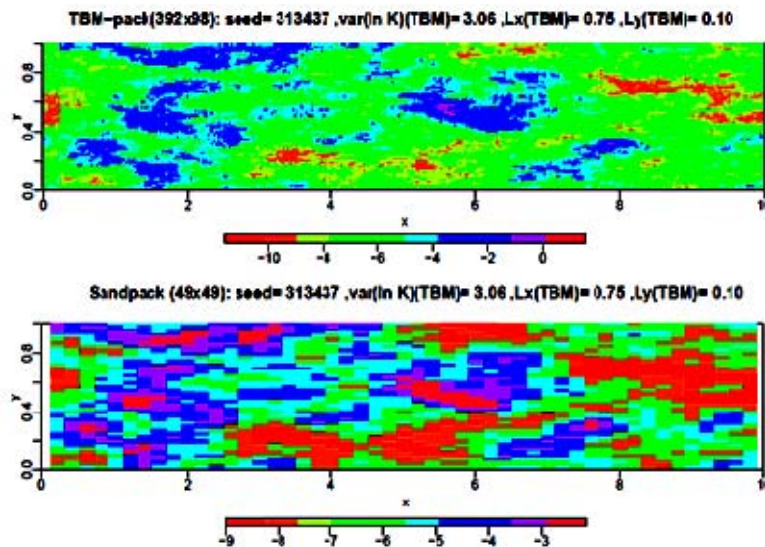
و موادی که در المان‌ها و گره‌های SUTRA مشخص می‌شوند شامل نفوذپذیری، تخلخل و پراکنده‌پذیری  $\alpha_L$  (در جهت طولی) و  $\alpha_T$  (در جهت عرضی) هستند. میزان تخصیص هر ویژگی به ساختار تانک محتوی نمونه پک ماسه (Sandpack) مربوط می‌شود. ویژگی‌های مذکور توسط پارامترهایی به نام Dataset تعریف می‌شوند. این پارامترها به عنوان مثال برای تخلخل در Dataset 14A و 14B و برای نفوذپذیری و پراکنده‌پذیری 15A و 15B تعریف می‌شوند. لازم به ذکر است Dataset 14 مربوط به گره‌ها و Dataset 15 مربوط

عرض که در آزمایشگاه هیدرولیک دانشگاه کاسل آلمان ساخته شده است، با هدف مدل‌سازی تصادفی محیط متخلخل ناهمگن مورد مطالعه و آزمایش قرار گرفت (شکل ۱). این آزمایش‌ها در شرایط پایدار هیدرودینامیکی (Hydrodynamically stable) case یعنی تزریق آب شور زیر یک لایه آب شیرین انجام شد. برای هدف‌های کالیبراسیون (Calibration) و اعتبارسنجی (Validation)، آزمایش‌ها با شبیه‌سازی‌های عددی انجام گرفته با مدل جریان و انتقال وابسته به چگال مدل SUTRA همراه شدند.

به‌دلیل 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 TBM (Turning Band Method)، ماتریس تصادفی متناظر با ضریب نفوذپذیری ماسه‌ها تعریف شد. اعدادی که به‌صورت کامپیوتری تولید می‌شوند از تئوری تصادفی (Stochastic Theory) تبعیت می‌کنند (۱۰).

#### مش‌بندی فضایی و زمانی مدل و تخصیص ویژگی مواد

صرف‌نظر از اینکه SUTRA، مدل را به‌صورت دوبعدی یا سه‌بعدی شبیه‌سازی می‌کند، همه این شبیه‌سازی‌ها در فضای سه‌بعدی تعریف می‌شوند. برای شبیه‌سازی دوبعدی، حجم محدود آبخوان در سه بعد که توسط مدل SUTRA به‌عنوان



شکل ۲. المان تولید شده در تعداد  $392 \times 98$  توسط TBM از  $\ln K$  برای نمونه ماسه (شکل بالا) و  $48 \times 48$  المان با مقیاس کاهش یافته برای نمونه ماسه نهایی

مدل جریان، مبنایی برای کالیبره بعدی مدل‌های انتقال ماده محلول است. کالیبره جریان موجود در مدل انتقال SUTRA بر مبنای آنالیز پیشرفت غلظت هاله آلودگی، در حالت وابسته به چگالی بسیار پیچیده است و اغلب اوقات نامشخص خواهد بود (۱۱).

در این پژوهش، برای کالیبره کردن مدل SUTRA، یکسان‌سازی توزیع غلظت بین مدل SUTRA و واقعیت (آزمایشگاه) انجام شد. علاوه بر آن، برای شبیه‌سازی آزمایش‌های تانک، جریان در حالت پایدار (برای غلظت ثابت) و در حالت بینابینی (Transient) (برای جریان‌های وابسته به چگال و انتقال ماده محلول) مدل شد، درحالی که انتقال ماده محلول همیشه در حالت بینابینی مدل می‌شود. به‌طور معمول، اولین گام در کالیبره این قبیل مدل‌ها، طراحی یک مدل به حالت پایدار است که توزیع غلظت به‌عنوان شرایط اولیه در شبیه‌سازی بینابینی بعدی استفاده می‌شود. به‌منظور تأیید دقت راه‌حل، ضروری است که غلظت‌های به‌صورت کامپیوتری محاسبه‌شده با غلظت‌های محاسبه شده در واقعیت (میدانی) با یکدیگر همخوانی داشته باشند. کالیبراسیون شامل تنظیم داده‌های ورودی (در این پژوهش پراکنده‌پذیری) تا زمانی است که

به المان‌ها هستند. بقیه ویژگی‌های مواد و سیال از قبیل تراکم‌پذیری آبخوان و سیال، غلظت و شیب معادله غلظت و ویسکوزیته سیال در Dataset9 قابل تعریف است. اگرچه ویسکوزیته به‌صورت ثابت در نظر گرفته می‌شود اما تا حدودی نیز به غلظت وابسته است.

شبیه‌سازی قطعی عددی (Numerical deterministic simulation) جریان وابسته به غلظت با استفاده از مدل‌سازی کامپیوتری SUTRA برای شبیه‌سازی دوبعدی جریان قابل اجرا است (۲۰ و ۲۱). مدل SUTRA یک مدل کامپیوتری پیچیده برای آنالیز اشباع و غیراشباع جریان آب زیرزمینی با غلظت‌های گوناگون است. این نرم‌افزار در سراسر دنیا معروف بوده و به‌صورت رایگان در دسترس عموم قرار گرفته است. در این مقاله از آخرین نسخه SUTRA که نسخه ۲/۲ است، استفاده شده است.

#### کالیبراسیون مدل

توجیه و تصحیح داده‌های اندازه‌گیری شده در آزمایشگاه و یا آزمایش‌های میدانی توسط کالیبره کردن تحقق می‌یابد. برای فرایندهای انتقال ماده محلول در آب زیرزمینی، کالیبره کردن

زمانی پرکاربرد است که ناهمگنی محیط متخلخل قابل شناسایی نباشد یا به صورت اشتباه فرض شده باشد. با این وجود، به دلیل اینکه در اغلب کدهای عددی جریان و انتقال مانند SUTRA، باعث ایجاد پدیده‌ای به نام پخشیدگی عددی در روش حل با غلظت می‌شوند که ممکن است مقادیر پراکنده‌پذیری، مقداری کمتر از مقدار به دست آمده به صورت تئوری در نظر گرفته شوند. بر طبق موارد گفته شده، آزمایش‌های عددی در غلظت  $C_0 = 250 \text{ ppm}$  با مقادیر  $\alpha_L$  و  $\alpha_T$  با روش سعی و خطا، زمانی به طور مؤثر کالیبره خواهند بود که  $\alpha_L/\alpha_T = 20$  در نظر گرفته شود. به عنوان مثال شکل (۳) کالیبره پروفیل‌های غلظت برای مقادیر مختلف پراکنندگی عرضی را نشان می‌دهد. به منظور کنترل کردن  $\alpha_T$  کالیبره شده، شبیه‌سازی باید با شرایط مرزی مختلفی اجرا شود و با نتایج مربوط به آزمایش‌های مربوط به تانک مقایسه شود.

در گام نخست، مقدار پراکنندگی عرضی ( $\alpha_T$ ) باید تعیین شود. برای رسیدن به این هدف، باید شبیه‌سازی با مقادیر مختلفی از  $\alpha_L$  و در محدوده‌ی  $10^{-2}$  تا  $10^{-8}$  متر فرض شود. روش تعیین  $10^{-2}$  به نسبت، دشوارتر از  $\alpha_T$  است. در مرحله اول مقدار  $0.003$  متر را برای پراکنندگی طولی  $10^{-2}$  در نظر گرفته شد، سپس با توجه به آن، مقادیر  $\alpha_T$  تعیین شد که این مقادیر در محدوده  $0.0002$  -  $0.00015$  متر قرار گرفتند. به منظور تأیید این مقدار، نتایج آزمایشگاهی با مقدار کالیبره شده  $\alpha_T$  مقایسه شده است. در مدل SUTRA برای دستیابی به بهترین  $\alpha_L$  و  $\alpha_T$  کالیبره شده، مدل باید با استفاده از شرایط مرزی معینی با مقادیر مختلف پراکنندگی طولی و عرضی اجرا شود. سپس مقدار به دست آمده در نمودار قائم غلظت  $C/C_0$  استخراج شده و با مقدار  $C/C_0$  مربوط به نتایج آزمایشگاهی مقایسه شد.

در نهایت مقدار  $\alpha_L$  و  $\alpha_T$  که بیشترین تناسب و تطابق با نتایج آزمایشگاهی دارند، انتخاب شدند. در نهایت در این تحقیق با توجه به نتایج آزمایش‌ها و دیگر مقایسه‌ها، مقادیر  $\alpha_T = 0.00015 \text{ m}$  و  $\alpha_L = 0.003 \text{ m}$  انتخاب شدند.

غلظت‌های محاسبه‌شده به صورت کامپیوتری با مقادیر اندازه‌های میدانی همخوانی پیدا کنند. در این حالت، اغلب بین ۲۰ تا ۵۰ شبیه‌سازی به روش سعی و خطا باید صورت گیرد تا کالیبراسیون، مورد قبول حاصل شود (۲۴).

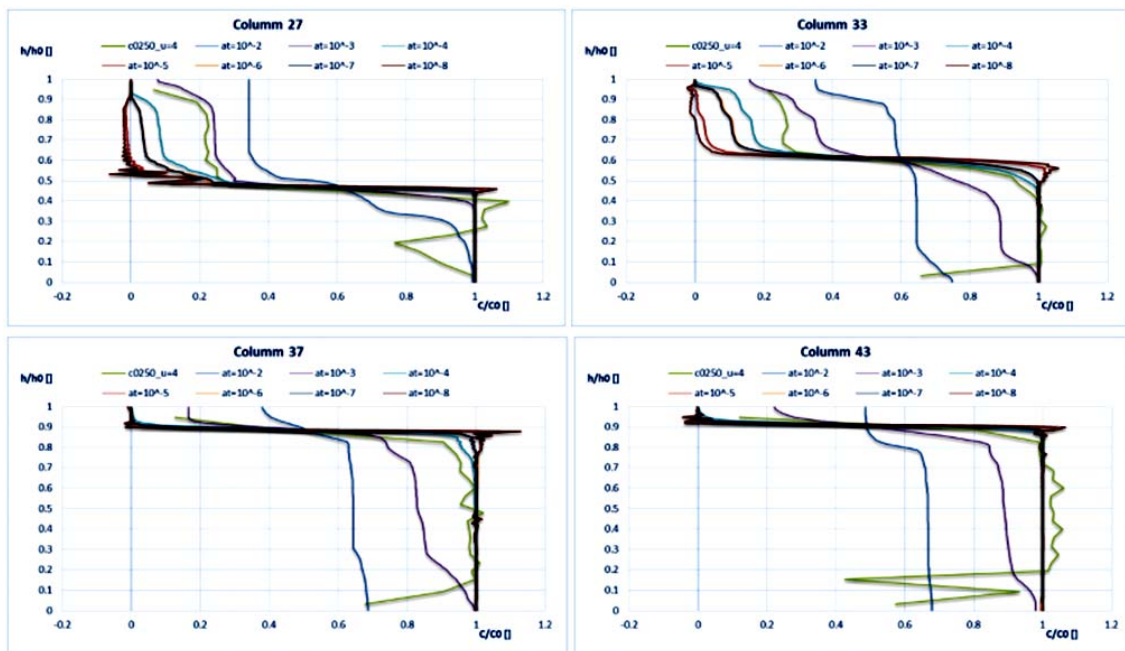
بعد از اینکه مدل‌های SUTRA به حالت پایدار و همگرا با گسسته‌سازی (Discretization) انتخاب شده فضایی (Spatial) و زمانی (Temporal) نائل شد، مدل با مقایسه غلظت‌های شبیه‌سازی و اندازه‌گیری شده آزمایشگاهی، کالیبره می‌شود و این عمل همراه با سرعت‌ها و غلظت‌های مختلف جریان در شرایط مرزی ورودی و خروجی تانک انجام شد.

به منظور کالیبره کردن مدل عددی SUTRA، مقادیر غلظت شبیه‌سازی شده و غلظت‌های اندازه‌گیری شده در مدل آزمایشگاهی با اجرا کردن (Run) مدل با داده ورودی پراکنده‌پذیری محلی در مقیاس کوچک (Macrodispersivity) طولی و عرضی ( $\alpha_L$  و  $\alpha_T$ ) و مقایسه با مدل آزمایشگاهی انجام پذیرفت. این مهم تا زمانی ادامه پیدا کرد که اختلاف مقادیر اندازه‌گیری شده و نتایج شبیه‌سازی شده به حداقل برسد. روشی دیگر برای کالیبره کردن مدل SUTRA، مقایسه بین پراکنندگی عرضی اندازه‌گیری شده با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی با پراکنده‌پذیری به دست آمده از نتایج شبیه‌سازی شده توسط SUTRA است.

## نتایج و بحث

### کالیبره ضریب پراکنده‌پذیری هیدرودینامیکی محلی $\alpha_L$ و $\alpha_T$

مقادیر پراکنده‌پذیری طولی و عرضی ( $\alpha_L$  و  $\alpha_T$ )، جزء مهم‌ترین پارامترهای ویژگی مواد هستند که در نرم‌افزار SUTRA مشخص خواهند شد. مقادیر  $\alpha_L$  و  $\alpha_T$  پارامترهای وابسته به مقیاس (Scale-dependent) هستند، به این معنی که به اندازه دامنه هاله آلودگی بستگی دارند. این مقادیر به این موضوع واقعیت می‌بخشند که مدل عددی به طور تقریبی، فرایند پراکنندگی وابسته به مقیاس را شبیه‌سازی می‌کند. این روش



شکل ۳. کالیبره پراکنده پراکنده پذیری عرضی بر اساس پروفیل‌های مختلف آزمایش تانک برای حالت ردياب با غلظت ۲۵۰ ppm و ۴ m/day

بررسی خواهد بود. در زمان شبیه‌سازی فرایندهای هیدرولوژیکی، به‌طور مثال هد آب‌های زیرزمینی و یا انتقال محلول، روش معمول به این صورت خواهد بود که مشاهدات و نتایج میدانی به دو گروه تقسیم شده‌اند، یک گروه برای کالیبره کردن مدل و دیگری برای تأیید مدل به‌کار می‌روند. درباره مدل SUTRA، موضوع تأیید کدها به‌صورت مکرر توسط مؤلفین متعددی از قبیل کخ (۱۷)، وس و کخ (۲۳) و دز و همکاران (۲۵) و مؤلف SUTRA (۲۱) آزمون شده است.

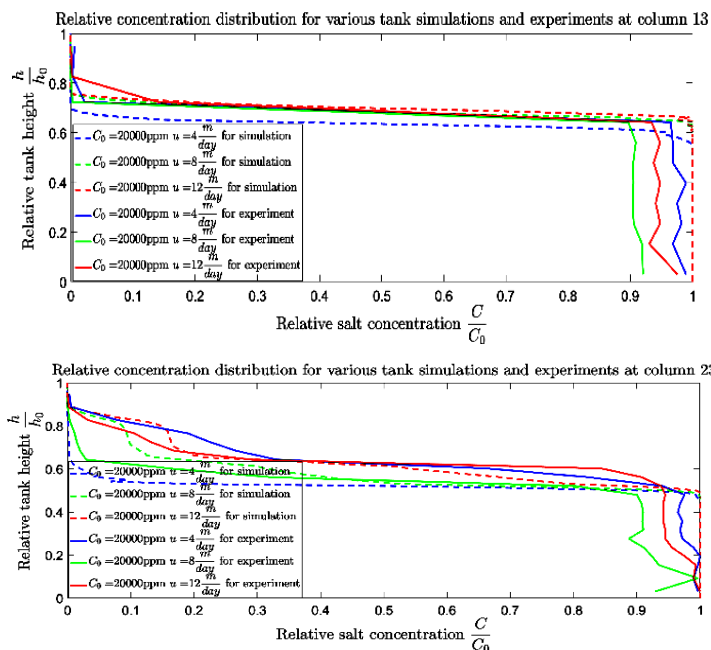
در این پژوهش ۱۵ سناریوی انتقال ماده محلول نمک (غلظت‌های ۲۵۰، ۱۰۰۰، ۵۰۰۰، ۲۰۰۰۰، ۳۵۰۰۰ میلی‌گرم بر کیلوگرم و سرعت‌های ۴، ۸ و ۱۲ متر بر ثانیه) در تانک ماسه با مدل SUTRA همراه با مدل آزمایشگاهی شبیه‌سازی شد. به منظور اعتبارسنجی (Validation) پروفیل‌های قائم غلظت در ۹ ستون مشاهده‌ای از تانک با نرم‌افزار متلب رسم شد. این پروفیل‌ها با پروفیل‌های متناظر آزمایشگاهی مقایسه شد. به‌عنوان مثال نمونه‌ای از آنها در شکل‌های (۴) و (۵) ارائه شده است در این شکل‌ها، تغییرات غلظت نرمال شده ( $C/C_0$ ) را بر حسب

به‌طور خلاصه می‌توان اظهار داشت که عرض ناحیه اختلاط (Width of the mixing zone) بین آب شور و شیرین به مقدار پراکنده‌پذیری طولی (Longitudinal dispersivity) و به ویژه پراکنده‌پذیری عرضی (Transverse dispersivity) بستگی دارد.

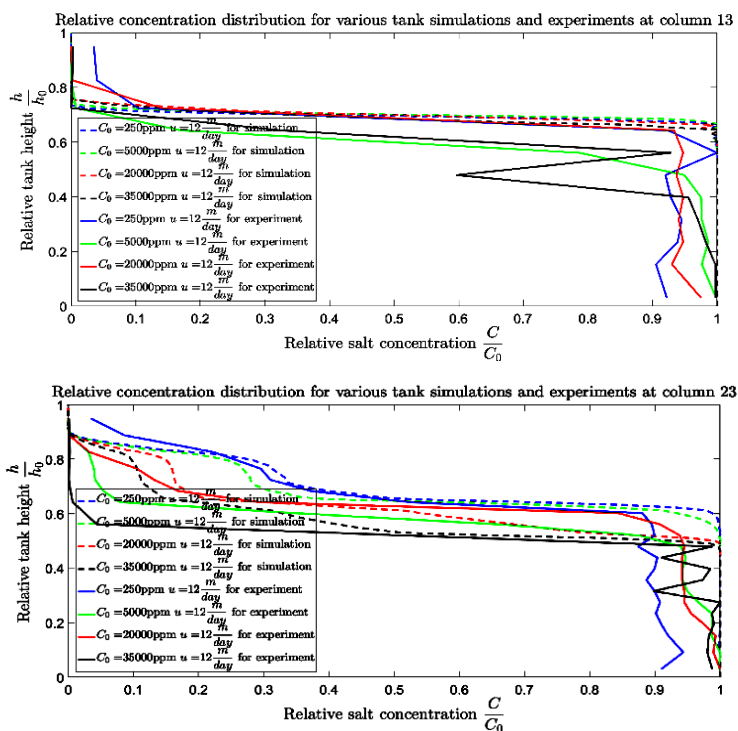
### صحت‌سنجی و اعتبارسنجی مدل

در تاریخچه مدل‌سازی، ابهاماتی در خصوص عبارت "صحت‌سنجی مدل عددی" وجود دارد (۱۲ و ۱۴). به این صورت که بعضی از مؤلفین بین صحت‌سنجی کد (Code verification) و صحت‌سنجی مدل (Model verification) تمایز قائل هستند. عبارت صحت‌سنجی کد، به فرایند ارائه یک کد کامپیوتری صحیح که قادر به حل دقیق معادلات دیفرانسیلی مربوط به آن مسئله به‌طور مثال، با مقایسه راه‌حل عددی با یک راه‌حل معروف تحلیلی، گفته می‌شود.

در مقابل برخی از پژوهشگران، صحت‌سنجی مدل را توانایی استفاده از یک مدل کالیبره‌شده برای استفاده در شبیه‌سازی‌های بعدی می‌نامند. بدین ترتیب کیفیت مدل کالیبره شده نیز قابل



شکل ۴. مقایسه پروفیل‌های غلظت نسبی برای  $C_0 = 20000 \text{ ppm}$  حاصل از نتایج به دست آمده از مدل آزمایشگاهی و شبیه‌سازی با SUTRA

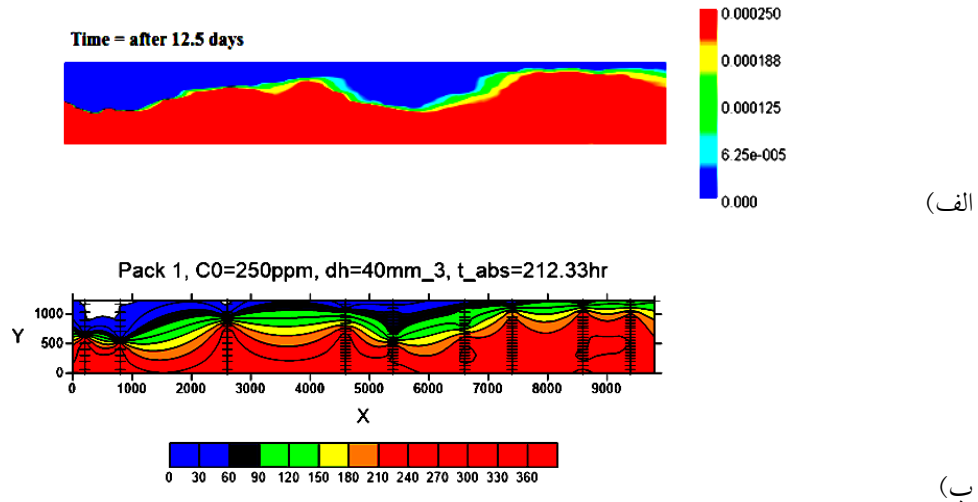


شکل ۵. مقایسه پروفیل‌های غلظت نسبی در سرعت  $12 \text{ m/day}$  حاصل از نتایج به دست آمده از مدل آزمایشگاهی و شبیه‌سازی با SUTRA

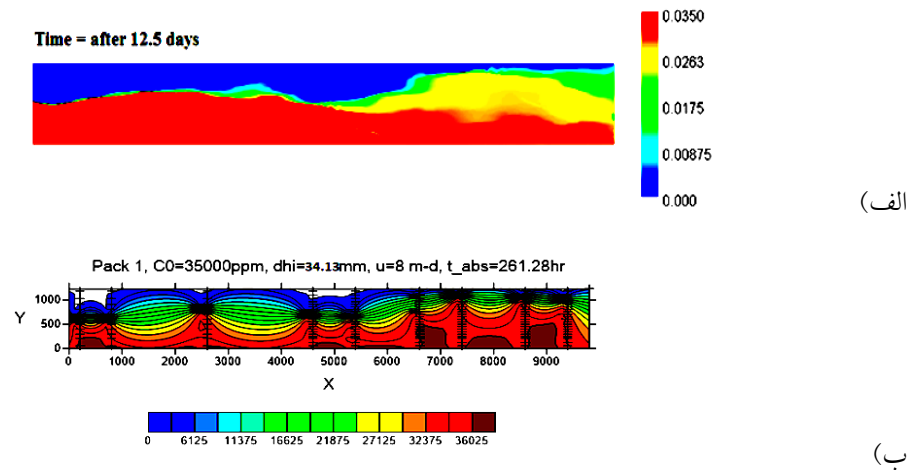
تغییرات عمودی مرکز هاله آلودگی و عرض منطقه پراکندگی تابعی از غلظت اولیه آب شور و همچنین سرعت ورودی است.

ارتفاع نرمال شده ( $h/h_0$ ) را در دو ستون نمونه‌گیری شماره ۱۳ و ۲۳ با استفاده از مدل SUTRA و داده‌های آزمایشگاهی نشان می‌دهد. مشابه با آنالیز داده‌های آزمایشگاهی، هر دو





شکل ۶. مقایسه نتایج شبیه‌سازی شده در مدل SUTRA: الف) با نتایج رسم شده آزمایشگاهی با نرم‌افزار SURFER و ب) در غلظت ۲۵۰ ppm و سرعت ۸ m/day

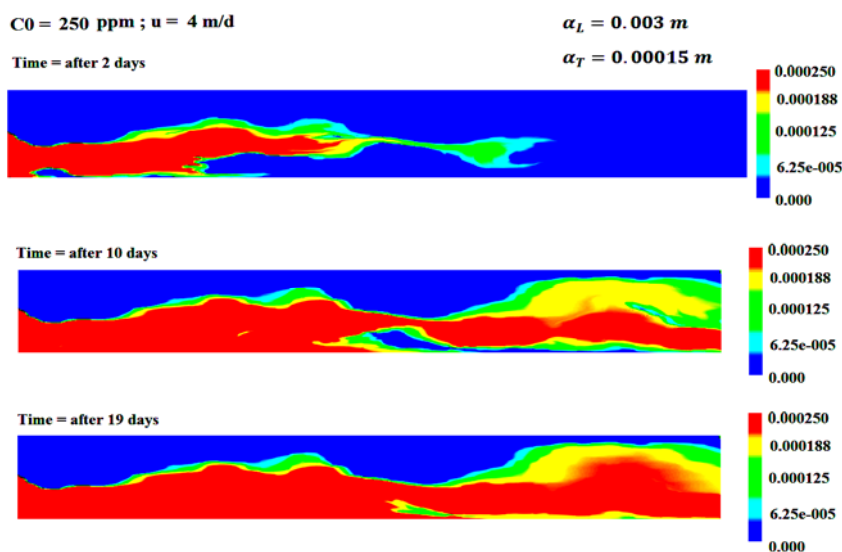


شکل ۷. مقایسه نتایج شبیه‌سازی شده در مدل SUTRA: الف) با نتایج رسم شده آزمایشگاهی با نرم‌افزار SURFER ب) در غلظت ۳۵۰۰۰ ppm و سرعت ۸ m/day

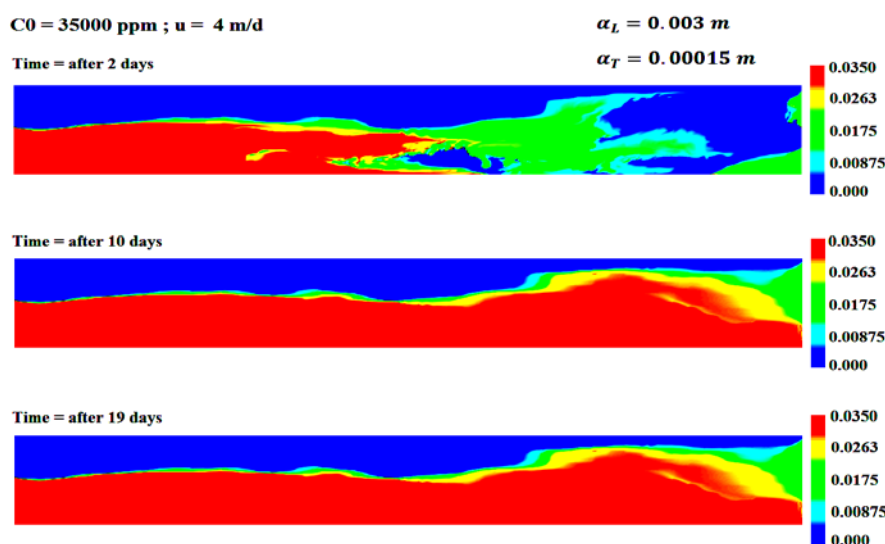
SURFER با روش درون‌یابی فضایی و تکنیک‌های زمین‌آماري و با استفاده از روش کریجینگ رسم شد. به‌عنوان مثال در شکل‌های (۶) و (۷) نمودارهای حاصل از نرم‌افزار SURFER و SUTRA برای دو غلظت اولیه متفاوت ۲۵۰ ppm و ۳۵۰۰۰ ppm در سرعت ۸ m/day مشاهده است. در نهایت با مقایسه این دو نمودار می‌توان دریافت که نتایج حاصل از شبیه‌سازی، تطابق قابل قبولی با نتایج آزمایشگاهی دارند.

پیش‌بینی توزیع غلظت هاله آلودگی آب شور و مقایسه با نتایج آزمایشگاهی

توزیع غلظت برای تعداد ۱۵ سناریوی متفاوت در غلظت اولیه شوری آب و سرعت تا زمانی که پراکنندگی به حالت پایداری برسد، با استفاده از مدل SUTRA شبیه‌سازی شد و به‌صورت موازی با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شد. نمونه‌گیری از تانک از تعداد ۱۵۹ دریچه واقع در ۹ ستون در طول مخزن انجام گرفت و در نهایت، توزیع غلظت برحسب مکان و زمان توسط نرم‌افزار



شکل ۸. مدل شبیه‌سازی شده توسط SUTRA در آزمایش تانک برای هاله آلودگی آب شور برای  $C_0 = 250$  ppm،  $u = 4$  m/day پس از گذشت ۲، ۱۰ و ۱۹ روز



شکل ۹. مدل شبیه‌سازی شده توسط SUTRA در آزمایش تانک برای هاله آلودگی آب شور برای  $C_0 = 35000$  ppm،  $u = 4$  m/day پس از گذشت ۲، ۱۰ و ۱۹ روز

و  $C_0 = 35000$  ppm که در تمامی حالات سرعت  $4$  m/day برای آنها در نظر گرفته شده است. مشابه با نتایج آزمایش‌ها، در روش عددی نیز پراکندگی غلظت‌های آب شور در هاله آلودگی بعد از گذشت حدود نوزده روز به حالت پایدار (Steady-state) رسیده است. نکته قابل توجه این است که فرونشست هاله آلودگی آب شور در آزمایش‌ها با غلظت کم حالت ردیاب

پیش‌بینی پایداری هاله آلودگی آب شور توسط مدل SUTRA شکل‌های (۸) و (۹)، سه تصویر از ارزیابی مدل شبیه‌سازی SUTRA در حالت بینابینی یا گذرا (Transient) برای هاله آب شور بعد از گذشت ۲، ۱۰ و ۱۹ روز را نشان می‌دهد. این شبیه‌سازی برای دو غلظت مختلف نمک در آزمایش‌های تانک به کار گرفته شده است. این غلظت‌ها عبارت‌اند از:  $C_0 = 250$  ppm

پایین افتادگی ناحیه اختلاط کاهش می‌یابد که این نتایج مطابق با یافته‌های آزمایشگاهی بود. ولی در غلظت بالای  $35000 \text{ ppm}$  برخلاف انتظار و نتایج آزمایشگاهی، با افزایش سرعت، کاهش در میزان پایین افتادگی مشاهده نشد.

۶. با توجه به اعتبارسنجی نتایجی که از شبیه‌سازی با مدل SUTRA حاصل شد و مقایسه بین نتایج به دست آمده از مدل آزمایشگاهی و مدل‌سازی SUTRA می‌توان نتیجه گرفت ارتباط نزدیکی بین پروفیل‌ها و کانتورهای مربوط به مدل آزمایشگاهی و همچنین شبیه‌سازی SUTRA وجود دارد و این موضوع برای تمامی غلظت‌های متفاوت آزمایش شده صادق است، بنابراین این مدل‌سازی عددی از نظر اعتبارسنجی و صحت‌سنجی نتایج قابل قبول است.

۷. می‌توان استنباط کرد کانتور غلظت مربوط به  $C_0 = 35000 \text{ ppm}$  زمان کمتری برای رسیدن به حالت پایدار پراکنندگی غلظت، نسبت به حالت ردیاب نیاز دارد. همچنین سرعت تکامل حالت بینابینی برای  $C_0 = 35000 \text{ ppm}$  بیشتر از غلظت حالت ردیاب  $C_0 = 250 \text{ ppm}$  است.

۸. بر خلاف روابط تئوری  $D_L = \alpha_L \cdot u$  و  $D_T = \alpha_T \cdot u$ ، در غلظت‌های پایین از جمله  $250 \text{ ppm}$ ،  $5000$  و  $20000$  با افزایش سرعت، عرض ناحیه اختلاط کاهش می‌یابد. ولی در غلظت بالای  $35000 \text{ ppm}$  افزایش سرعت باعث افزایش ناحیه اختلاط می‌شود. درحالی که طبق نتایج آزمایشگاهی و عددی اشتراک در غلظت‌های پایین با افزایش سرعت، عرض ناحیه اختلاط وسیع‌تر می‌شود و برای غلظت‌های بالای  $C_0 = 35000 \text{ ppm}$  خلاف این موضوع صحیح است.

### سپاسگزاری

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

$C_0 = 250 \text{ ppm}$  (Tracer)، بیشتر از غلظت‌های بالا  $C_0 = 35000 \text{ ppm}$  است.

تأثیری که غلظت بیشتر می‌تواند روی هاله آلودگی بگذارد در شکل (۹) قابل مشاهده است. علاوه بر آن، سرعت تکامل حالت بینابینی برای  $C_0 = 35000 \text{ ppm}$  بیشتر از غلظت حالت ردیاب  $C_0 = 250 \text{ ppm}$  خواهد بود. با توجه به ملاحظات مربوط به شکل‌های (۸) و (۹)، کانتور غلظت مربوط به  $C_0 = 35000 \text{ ppm}$  زمان کمتری برای رسیدن به حالت پایدار نسبت به حالت ردیاب نیاز دارد.

### نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با توجه به کالیبره کردن مدل عددی SUTRA و داده‌های مربوط به آزمایش‌های تانک، نتایج زیر قابل استنباط است:

۱. عرض ناحیه اختلاط بین آب شور و شیرین به مقدار پراکنده‌پذیری طولی و به ویژه پراکنده‌پذیری عرضی بستگی دارد.

۲. می‌توان اظهار داشت که در شبیه‌سازی با مدل SUTRA، پارامتر پراکنده‌پذیری عرضی بر هاله آلودگی تأثیر بیشتری دارد و تأثیر ناچیز پراکنده‌پذیری طولی قابل صرف نظر کردن است.

۳. برای همه سناریوهای مختلف انتقال ماده محلول، مدت زمان پیش‌بینی شده برای رسیدن پراکنندگی به حالت پایدار با مدل SUTRA با مدت زمان واقعی اندازه‌گیری شده در آزمایش‌ها، دقیقاً برابر بود.

۴. برخلاف اثر چگالی  $(\Delta \rho \propto C)$ ، در غلظت شوری کم (ردیاب)  $C_0 = 250 \text{ ppm}$ ، فرونشست مرکز اختلاط بینابینی بیشتر از فرونشست در غلظت شوری بالا  $C_0 = 35000 \text{ ppm}$  محاسبه شد درحالی که در نتایج اشتراک اثر چگالی با پایین آمدن مرکز ناحیه اختلاط با افزایش  $C_0$  به طور واضح مشخص است.

۵. نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان داد که در غلظت‌های  $250 \text{ ppm}$ ،  $5000$  و  $20000$  با افزایش سرعت، میزان

## منابع مورد استفاده

1. Anderson, M. P., W. W. Woessner and R. J. Hunt. 1997. Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport, Basel, Birkhauser Verlag.
2. Bear, J., A. Cheng, S. Sorek, D. Ouazar and I. Herrera. 1999. Seawater intrusion in coastal aquifers: concepts, methods and practices. Kluwer Academic Publishers, London.
3. Bear, J. 1972. Dynamics of Fluids in Porous Media. Dover publications, INC. New York. USA.
4. Dagan, G. 1984. Solute transport in heterogeneous porous formations *Journal of Fluid Mechanics* 145: 151-177.
5. De Josselin De Jong, G. 1958. Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits, *Transactions of the American Geophysical Union* 39(1): 67.
6. Freeze, R. and J. Cherry, 1979. Groundwater, pp. 604, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey 07632.
7. Herbert, A. W., C. P. Jackson and D. A. Lever. 1988. Coupled groundwater flow and solute transport with fluid density strongly dependent upon concentration. *Water Resources Research* 24(10): 1781-1795.
8. Garabedian, S. P., D. R. LeBlanc, L. W. Gelhar and M. A. Celia. May 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(5): 911-924.
9. Gelhar, L. W. and C. L. Axness. 1983. Three-dimensional stochastic analysis of macro dispersion in aquifers. *Water Resources Research* 19, 161-180.
10. Gelhar, L. W. 1993. Stochastic Subsurface Hydrology. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey 07632.
11. Gillham, R. W. and R. N. Farvolden. 1974. Sensitivity analysis of input parameters in numerical modeling of steady state regional groundwater flow. *Water Resources Research* 10(3): 529-538.
12. Gupta, V., A. Rastogi and A. Nayak. 2010. Adsorption studies on the removal of hexavalent chromium from aqueous solution using a low cost fertilizer industry waste material, *Journal of Colloid and Interface Science* 342(1): 135-141.
13. Gutierrez-Neri, M. 2009. Aspects of transverse dispersion in porous media. PhD Thesis. Utrecht University, Netherlands.
14. Karanjac, J., M. Altunkaynak and G. Ouvul. 1977. Mathematical model of uluova plain, turkey a training and management tool. *Journal of Ground Water* 15(5): 348-357.
15. Kimmel, G. and O. Braids. 1980. Leachate Plumes in Ground Water from Babylon and Islip landfills, Long Island, New York.
16. Koch, M. and G. Zhang. 1998. Numerical modeling and management of saltwater seepage from coastal brackish canals in Southeast Florida, *Transactions on Ecology and the Environment* 25: 1-10.
17. Koch, M. and G. Zhang. 1990. Numerical simulations of groundwater flow and solute transport by means of the SUTRA-model.
18. Mahmoodian Shooshtari, Mohammad, 1393, Hydraulics of Groundwater, Shahid Chamran University Press, Ahvaz, Iran (In Farsi).
19. Spitz, K. 1985. Dispersion in porösen medien: Einfluss von inhomogenitäten und dichteunterschieden. *Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart* 60:1-131.
20. Voss, C. 1984. A finite-element simulation model for saturated-unsaturated, fluid-density-dependent ground-water flow with energy transport or chemically-reactive single. U. S. Geological Survey, Colorado, U.S.
21. Voss, C. I., C. T. Simmons and N. I. Robinson. 2010. Three-dimensional benchmark for variable-density flow and transport simulation: matching semi-analytic stability modes for steady unstable convection in an inclined porous box, *Hydrogeology Journal* 18(1): 5-23.
22. Voss, C. I. and A. M. Provost, 2010. A Model for Saturated-Unsaturated, Variable-Density Ground-Water Flow with Solute or Energy Transport US Geological Survey Water Resources Investigation Reports 02-4231, Reston, Virginia, pp. 84-4369.
23. Voss, A. and M. Koch. 2001. Numerical simulations of topography-induced saltwater upconing in the state of Brandenburg, Germany, Phys. Chem. Earth, Part B Hydrol. *Oceans and Atmosphere* 26: 353-359.
24. Wang, H. and M. Anderson. 1995. Introduction to groundwater modeling: finite difference and finite element methods. Academic Press, California.
25. Woods, J. A., M. D. Teubner, C. T. Simmons and K. A. Narayan. 2003. Numerical error in groundwater flow and solute transport simulation, *Water Resources Research* 39(6): 1-10.

## Validation of SUTRA Model for Different Salinity Transport Scenarios in a Heterogeneous Sand Tank to Evaluate Transverse Dispersivity

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

(Received: September 21-2018 ; Accepted: December 22-2018)

### Abstract

Nowadays, with the increasing population in Iran, especially in arid and semi-arid areas, as a result of the growing importance of the quality of water resources, including groundwater, field experiments and many simulations have been conducted for the development of groundwater contamination through powerful and up-to-date software. However, in most cases, there is a tangible difference between the measured data in laboratories and the data produced with software; this is why the scientific validation and verification of the research results could be declined. In this study, in order to justify and correct these data, the calibration principle was used to minimize the error of testing and modeling. The purpose of this study was to validate and verify the SUTRA model for different scenarios of the solute transport in a sand tank with heterogeneous hydraulic conductivity to evaluate transverse dispersivity. In this study, coding was initially performed for the configuration and calibration of the SUTRA numerical model to simulate different scenarios of the solute transport in a heterogeneous sand Tank in the Hydraulic Laboratory of the University of Kassel, Germany, until acceptable values were obtained. Then the results were compared with the experimental model. In order to validate and verify the data obtained from the simulation with the SUTRA model, the relevant concentration profiles were compared with the results of the experimental model. The results of the numerical and laboratory models revealed the density effects by sinking the geometric center of the mixing zone for the low concentrations of salt,  $C_0 = 250$  ppm. The results also showed that the width of the mixing zone between salt and fresh water depended on the amount of longitudinal dispersivity, especially the transverse dispersivity. By analyzing the results of simulation and experiment, it was observed that with increasing the velocity, reducing the amount of sinking and raising the input concentration, the time needed to achieve the steady dispersion was decreased.

**Keywords:** Solute transport, Transverse dispersivity, Salt and fresh water mixing zone, SUTRA model, Calibration, Heterogeneous sand tank

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

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

\*: Corresponding author: mehran.iranpour.mo@gmail.com