

# مدل شبیه‌سازی کمی-کیفی اندرکنش آبراهه با سفره آب زیرزمینی

حمیدرضا صفوی<sup>۱</sup> عباس افشار<sup>۲</sup>  
عباس قاهری<sup>۳</sup> احمد ابریشم‌چی<sup>۴</sup>  
مسعود تجریشی<sup>۵</sup>

(دریافت ۸۵/۲/۳۱ پذیرش ۸۵/۱۲/۱)

## چکیده

شبیه‌سازی اندرکنش کمی و کیفی آبراهه با سفره آب زیرزمینی به عنوان ابزاری کارآمد برای مدیریت حوضه‌های آبریز مطرح می‌باشد و از آنجا که تاکنون مدل‌های توزیعی ارائه شده در مقیاسهای بزرگ به طور مجزا در نظر گرفته شده و در بیشتر موارد فقط اندرکنش‌های کمی اعمال گردیده، هدف اصلی این تحقیق تلفیق زیرمدل‌های چهارگانه به صورت توزیعی در مقیاسهای بزرگ می‌باشد. در این تحقیق جریان در آبراهه نادائمی، یک بعدی و در لایه آیدار اشباع سه بعدی و نادائمی فرض شده است. فرآیندهای انتقال، پخشیدگی، واکنش‌های شیمیایی و جذب به صورت پیوسته در محیط متخلخل و آبراهه در نظر گرفته شده است. براساس تحقیقاتی که تاکنون انجام شده، مدل اندرکنشی همزمان (مزدوج) جهت حل معادلات کیفی آبراهه با آبهای زیرزمینی ارائه نشده است و در این تحقیق نیز تلفیق کیفی این دو زیرمدل به صورت غیرمزدوج به صورت اعمال شرایط مرزی و اولیه حاصل از نتیجه اجرای مدل شبیه‌سازی کیفی آبراهه جهت اجرای مدل شبیه‌سازی کیفی آبهای زیرزمینی انجام گرفته شده است. مرحله تصدیق مدل نیز انجام و جوابهای مدل با جوابهای تحلیلی موجود مورد مقایسه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که تفاوت نسبی جوابهای تحلیلی با مدل کمتر از ۲ درصد می‌باشد.

**واژه‌های کلیدی:** آبراهه، سفره آب زیرزمینی، کیفیت آب، بهره‌برداری تلفیقی، حل عددی.

## A Quality-Quantity Simulation Model for Stream-Aquifer Interaction

Hamidreza Safavi<sup>1</sup> Abbas Afshar<sup>2</sup>  
Abbas Ghaheri<sup>3</sup> Ahmad Abrishamchi<sup>4</sup> Masoud Tajrishi<sup>5</sup>

(Received May 21, 2006 Accepted Feb. 20, 2007)

### Abstract

Traditional lumped and conceptual hydrological models are appropriate for dealing with certain aspects of a major portion of current water resources management. However, more advanced tools are required for integrated water resources management. In this research, an integrated model to account for qualitative and quantitative stream-groundwater interactions is developed for application in large-scale, integrated, water resources management. One of the challenges in understanding the interactions between stream and groundwater systems lies in their different time scales. In this paper, the stream quantity model is developed and is embedded into groundwater quantity model using the couple method. Then the stream quality model and the groundwater quality model are integrated using an uncouple approach, with mesh generation to ensure stability of the numerical method. Confirmation of the coupled-uncoupled model was examined using analytical solution from previous studies.

**Keywords:** Stream, Groundwater Aquifer, Water Quality, Interaction, Numerical Solution.

1- Assistant Professor of Civil Engineering, Isfahan University of Technology, hasafavi@cc.iut.ac.ir  
2- Professor of Civil Engineering, Iran University of Science and Technology  
3- Associate Professor of Civil Engineering, Iran University of Science and Technology  
4- Professor of Civil Engineering, Sharif University of Technology  
5- Associate Professor of Civil Engineering, Sharif University of Technology

۱- استادیار دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی اصفهان، hasafavi@cc.iut.ac.ir  
۲- استاد دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه علم و صنعت ایران  
۳- دانشیار دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه علم و صنعت ایران  
۴- استاد دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی شریف  
۵- دانشیار دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی شریف

اگرچه بخش اعظم کره زمین را آب فرا گرفته ولی به لحاظ کمی و کیفی و همچنین قابلیت دسترسی در زمان و مکان مورد نیاز، محدودیتهای فراوانی وجود دارد. رشد سریع جمعیت به ویژه در بین کشورهای در حال توسعه، از یک طرف سبب تقاضای بیشتر برای آب جهت انواع مصارف کشاورزی، شرب و صنعت شده و از طرف دیگر باعث توسعه روند آلوده‌سازی منابع آب و محیط زیست گشته است. مباحث کمی و کیفی آب، به ویژه در مناطقی که با محدودیت نسبی منابع آب رو به رو هستند، کاملاً با یکدیگر مرتبط بوده و در مدیریت منابع آب ناپیستی به طور مجزا و از دو منظر مختلف به این دو واقعیت نگریست. تاکنون آسیب‌های جدی در اثر نگرش مجزای کمی و کیفی به منابع آب کشور وارد گردیده که لزوم تفکر و مدل‌سازی تلفیقی را الزامی می‌نماید. عمده این آسیب‌ها به ویژه از نقطه نظر مسائل کیفیت آب بوده که از جمله می‌توان به پیشروی آب شور لایه‌های آبدار ساحلی خلیج فارس و دریای عمان به طرف آبهای شیرین این مناطق نظیر آبادان و خرمشهر، بندرعباس، بوشهر و چابهار و نیز آبهای شور زیرزمینی مناطق کویری به سمت لایه‌های آبدار شیرین مرکزی ایران اشاره نمود. از آنجا که مدل‌های موجود به تلفیق کمی آبهای سطحی و زیرزمینی در شرایط خاص نظیر دائمی بودن جریان سطحی پرداخته و مدل‌های کیفی نیز به طور مجزا برای آبهای سطحی و زیرزمینی توسعه یافته است، لذا اتصال هیدرودینامیکی این چهار زیرمدل شامل کمی و کیفیت آبهای سطحی و آبهای زیرزمینی از اهمیت خاصی برخوردار است. علت عمده عدم ارائه مدل‌های شبیه‌سازی اندرکنشی کمی-کیفی آبراهه‌ها با آبهای زیرزمینی در تفاوت آنها در مقیاسهای زمانی و مکانی است [۱]. حرکت آب در لایه‌های آبدار اشباع، اعم از آزاد یا تحت فشار، و پخش و توزیع آلودگی در آن در طی زمانهای طولانی و در منطقه محدود صورت می‌گیرد و این در حالی است که حرکت آب در آبراهه‌ها با سرعت زیاد و پخش و انتشار آلودگی در طی زمانهای کوتاه و در محدوده وسیع صورت می‌گیرد. لذا اتصال هیدرودینامیکی آنها با یکدیگر بایستی با رعایت کلیه محدودیتهای در زمینه پایداری روشهای حل عددی معادلات دیفرانسیلی حاکم صورت گیرد.

بررسی اثرات متقابل آبهای سطحی با آبهای زیرزمینی از دهه ۱۹۴۰ توسط هوبرت<sup>۱</sup> آغاز گردید که تأثیرات هیدرولیکی بارش یکنواخت و نفوذ ثابت بر روی سطح ایستابی آبهای زیرزمینی را بررسی نمود [۲]. توت<sup>۲</sup> در سال ۱۹۶۳ با توجه به نوع سیستم آب

سطحی و ابعاد آن تلفیق دو سیستم آب سطحی و زیرزمینی را به انواع محلی، متوسط و منطقه‌ای تقسیم‌بندی نمود [۳]. تلفیق با جزئیات هیدرولیکی و مشخصات ژئوهیدرولوژیکی در حالت‌های جریان دائمی آب سطحی یا تغذیه یکنواخت همراه با اعمال شرایط توپوگرافیکی با در نظر گرفتن مقیاسهای مختلف در دو دهه اخیر توسط آلن و استار<sup>۳</sup>، کلمس<sup>۴</sup>، اونیل<sup>۵</sup> و همکاران، گریم و فیشر<sup>۶</sup>، وو و لاکس<sup>۷</sup>، استانلی<sup>۸</sup> و همکاران، مورد بررسی قرار گرفته است [۴-۹]. به دلیل گستردگی فرآیندهای هیدرولیکی در اندرکنش آبهای سطحی با آبهای زیرزمینی، استفاده از مدل‌های توزیعی با پایه‌های فیزیکی به جای مدل‌های تجربی و توده‌ای از اوایل دهه ۱۹۸۰ آغاز گردید و تاکنون روند تکاملی آن ادامه دارد. مدل SHE<sup>۹</sup> در سال ۱۹۸۶ توسط ابوت<sup>۱۰</sup> و همکاران [۱۰] برای کاربرد در مقیاسهای بزرگ تهیه گردید که در آن جریان آب سطحی به صورت یک بعدی و در محیط آب زیرزمینی نیز در ناحیه غیراشباع به صورت یک بعدی و منطقه اشباع به صورت دوبعدی شبیه‌سازی می‌گردد. شبیه‌سازی جریان در این مدل به صورت مجزا و با گامهای زمانی متفاوت با استفاده از روش حل تفاضلات محدود صریح و غیرصریح در حل عددی معادلات دیفرانسیلی جزئی حاکم بر فیزیک جریان آبهای سطحی و نیز آبهای زیرزمینی صورت گرفته است. در سال ۱۹۹۲ گریسن<sup>۱۱</sup> و همکاران مدل THALES را جهت بررسی اندرکنش آبهای سطحی و زیرزمینی با در نظر گرفتن فرآیندهای هیدرولوژیکی به روش پارامترهای توزیعی ارائه نمودند که با محدودیت جریان دو بعدی آب زیرزمینی همراه بود، ولی فرآیندهای هیدرولوژیکی در سطح زمین را در مقیاسهای بزرگ مدل می‌نمود [۱۱]. در سال ۱۹۹۵ لاکس<sup>۱۲</sup> و همکاران مدل IRAS را برای بررسی تأثیر متقابل جریان آبراهه‌ها بر لایه‌های آبدار ارائه نمودند که با فرض جریان دائمی و یکنواخت آبراهه و معادل‌سازی آن به یک مقطع مستطیلی تهیه شده است. با استفاده از فرم ساده قانون داریسی، میزان نشست و تغذیه ثابت و متناسب با اختلاف ارتفاع آب در رودخانه با سطح آب زیرزمینی است [۱۲]. این مدل عمدتاً به منظور محاسبه میزان نشست از رودخانه به آبهای زیرزمینی یا بالعکس تهیه و مدل‌سازی جریان در آبهای زیرزمینی

<sup>3</sup> Allen and Starr

<sup>4</sup> Klemes

<sup>5</sup> O'Neill

<sup>6</sup> Grimm and Fisher

<sup>7</sup> Wu and Loucks

<sup>8</sup> Stanley

<sup>9</sup> System Hydrologique Europeen

<sup>10</sup> Abbott

<sup>11</sup> Grayson

<sup>12</sup> Loucks

<sup>1</sup> Hubbert

<sup>2</sup> Toth

را در نظر نمی‌گیرد و لذا به عنوان یک مدل توده‌ای قابل کاربرد است.

در سال ۱۹۹۷ کیورنر<sup>۱</sup> مدل MORGROW را به منظور شبیه‌سازی فرآیندهای هیدرولوژیکی آبهای سطحی اعم از یک بعدی یا دو بعدی در تلفیق با آبهای زیرزمینی ارائه نمود که با فرض جریان دائمی و یکنواخت با ارتفاع ثابت در رودخانه‌ها یا خورها و جریان سه بعدی در آبهای زیرزمینی و به صورت مدل توزیعی ارائه گردید [۱۳]. از جمله تواناییهای این مدل در بررسی فرآیندهای هیدرولوژیکی در مقیاسهای بزرگ می‌باشد. در بررسی جامعی که توسط سوفکلئوس<sup>۲</sup> در زمینه مدل‌سازی اندرکنش آبهای سطحی با آبهای زیرزمینی صورت گرفت [۱۴]، مکانیسم اندرکنش در مقیاسهای بزرگ با توجه به نحوه توزیع ضریب هدایت هیدرولیکی، سطح ایستابی در زیرزمین و سطح آب در آبراهه‌ها، موقعیت و توپوگرافی آبراهه نسبت به لایه آبدار ارائه گردید.

در سال ۲۰۰۱ کروتون و باری<sup>۳</sup> مدل WEC-C را جهت شبیه‌سازی توزیعی آبهای سطحی با آبهای زیرزمینی در مقیاس حوضه‌هایی که به ویژه تحت تأثیر آبیاری قرار دارند و آبراهه‌هایی نیز در آنها جریان دارد، ارائه نمودند. این مدل جهت ارزیابی تغییرات هیدرولوژیکی در مقیاسهای بزرگ نظیر حوضه‌ها بر منابع آب آنها قابل کاربرد است [۱۵]. نهایتاً در سال ۲۰۰۴ پاندی و هوياکورن<sup>۴</sup> مدلی با مبنای فیزیکی به روش توزیعی جهت ارزیابی تلفیقی آبهای سطحی و زیرزمینی ارائه نمودند که هدف عمده آن بررسی اندرکنش آبراهه با آبهای زیرزمینی بوده و در حالتهای ساده‌ای نیز این مدل تصدیق گردیده است [۱۶]. از تواناییهای این مدل در نظر گرفتن جریان در محیط غیر اشباع حفاصل سطح زمین تا لایه آبدار است. با توجه به حجم زیاد داده‌های مورد نیاز این مدل، کاربرد آن در مقیاسهای بزرگ به ویژه در سطوح حوضه‌های آبریز با محدودیتهای جدی رو به رو است.

## ۲- معادلات حاکم و توسعه مدل

معادلات حاکم شامل معادلات سن و نان حاکم بر جریان آبراهه‌ها و معادلات غیرخطی بوسینسک حاکم بر جریان آب زیرزمینی، معادلات کیفی جریان آب زیرزمینی مشتمل بر جابه‌جایی، پخشیدگی، کاهش و واکنش‌های شیمیایی و بیولوژیکی و نیز معادلات کیفی آبراهه‌ها شامل پخشیدگی، جابه‌جایی و واکنش‌های شیمیایی و بیولوژیکی است. محدودیتهای تلفیق این معادلات لحاظ شده و الگوریتم اجرای مدل تلفیقی بررسی گردیده است.

## ۲-۱- معادلات کمی جریان در آبراهه‌ها

معادلات دیفرانسیلی هیدرودینامیک جریان سطحی نادائمی و غیرفروپاشی در حالت یک بعدی (رودخانه‌های طویل) با فرض محور x در جهت طولی رودخانه به فرم معادلات سن و نان به صورت زیر بیان می‌گردد

$$\frac{\partial(AV)}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial t} \pm q = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \alpha \frac{Q^2}{A} \right] + \frac{\partial Q}{\partial t} + gA \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{n^2 g |Q| Q}{AR^{4/3}} \pm qu = 0 \quad (2)$$

که در آنها:

V: سرعت جریان ( $LT^{-1}$ )

Q: دبی ( $L^3T^{-1}$ )

A: سطح مقطع جریان ( $L^2$ )

q: دبی جانبی در واحد طول رودخانه ناشی از نشت یا نفوذ ( $L^2T^{-1}$ )

H: رقوم سطح آب از ارتفاع مبنا (L)

n: ضریب مانینگ ( $L^{1/3}S^{-1}$ )

R: شعاع هیدرولیکی (L)

u: سرعت نشت یا نفوذ جانبی ( $LT^{-1}$ )

g: شتاب جاذبه زمین ( $LT^{-2}$ )

## ۲-۲- معادله کیفی جریان در آبراهه‌ها

بررسی انتقال و انتشار آلودگی در آبراهه‌ها به مراتب ساده‌تر از انتشار آن در آبهای زیرزمینی است. به دلیل سرعت نسبتاً زیادتر جریان آب در آبراهه‌ها نسبت به حرکت آبهای زیرزمینی، انتقال آلودگی عمدتاً توسط جابه‌جایی<sup>۵</sup> صورت می‌گیرد.

معادله دیفرانسیلی یک بعدی انتقال و پخشیدگی آلودگی در آبراهه‌ها به صورت زیر بیان می‌گردد

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(cv) + \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial c}{\partial x} \right) + R_c \quad (3)$$

که در آن:

c: غلظت آلاینده ( $ML^{-3}$ )

D: ضریب پخشیدگی ( $L^2T^{-1}$ )

$R_c$ : چشمه یا چاه ( $ML^{-3}T^{-1}$ )

## ۲-۳- معادله کمی جریان آب زیرزمینی

حرکت آب در ناحیه اشباع لایه آبدار زیرزمینی به صورت سه بعدی فرض شده و لایه آبدار ناهمگن و شامل لایه‌های تحت فشار و یا

<sup>5</sup> Advection

<sup>1</sup> Querner

<sup>2</sup> Sophocleous

<sup>3</sup> Croton & Bari

<sup>4</sup> Pandey & Huyakorn

شامل ۹ المان با ۳۶ پخشیدگی<sup>۱</sup> است. فرم کلی تانسور پخشیدگی به شکل زیر ارائه گردیده است [۱۹]

$$D_{ij} = a_{ijmn} \frac{V_n V_m}{U} \quad (۶)$$

که در آن:

$a_{ijmn}$ : پخشیدگی محیط متخلخل (تانسور مرتبه چهارم)،  $V_m$  و  $V_n$  مؤلفه‌های سرعت و  $V$  مقدار یا اندازه بردار سرعت است. در حالت همرو<sup>۲</sup>، تانسور پخشیدگی،  $a_{ijmn}$  فقط بستگی به پخشیدگی طولی،  $\alpha_L$  و پخشیدگی عرضی،  $\alpha_T$  پیدا می‌کند و به فرم زیر ساده می‌گردد

$$a_{ijmn} = \alpha_T \delta_{ij} \delta_{mn} + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{2} (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm}) \quad (۷)$$

که در آن:

$\delta_{ij}$ : کروندلتا (اگر  $i=j$  آنگاه  $\delta_{ij}=1$  و اگر  $i \neq j$  آنگاه  $\delta_{ij}=0$ ) می‌باشد.

پنج ضریب پخشیدگی عمدتاً با انجام آزمایش یا بر اساس تجارب تعیین می‌گردند و همانند تعیین ضرایب هدایت هیدرولیکی در مقیاس واقعی دارای پیچیدگیهای عملی است. در مقیاسهای بزرگ<sup>۳</sup> نظیر حوضه‌های آبریز، این ضرایب عمدتاً با یک تخمین اولیه از محیط جریان و نوع آلاینده وارد مدل شده و سپس به عنوان عوامل کالیبراسیون مدل در طی مراحل مختلف تدقیق می‌گردد [۲۰]. بر اساس تحقیقات انجام شده مقادیر ضرایب پخشیدگی اندازه‌گیری شده در مقیاسهای واقعی و بزرگ، چندین برابر بیشتر از مقادیر اندازه‌گیری شده در مقیاسهای آزمایشگاهی است [۲۰ و ۲۱]. همچنین نشان داده شده است که در مقیاسهای بزرگ، ضرایب پخشیدگی با افزایش طول مسیر جابه‌جایی افزایش می‌یابند [۲۲ و ۲۳]. تاکنون تلاشهای زیادی جهت بررسی و تشریح تأثیر مقیاس در فرآیند پخشیدگی انجام گرفته که عمدتاً بر روی بررسی تأثیر غیرهمگنی هدایت هیدرولیکی متمرکز بوده است. در چندین تحقیق تأثیرات غیرهمگنی با استفاده از توزیعهای آماری مختلف بر روی تغییرات مکانی مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است [۲۴-۳۰]. همه این تحقیقات نشان می‌دهند که اختلاط با غیرهمگنی افزایش یافته و برخی نشان می‌دهد که فرآیندهای اختلاط با روابط انتقال کلاسیک فیک قابل بررسی نیست که البته این تحقیقات با فرضیات ساده‌کننده‌ای نظیر در نظر گرفتن لایه بندی و دوبعدی بودن همراه بوده است.

آزاد است. لذا معادله حرکت به فرم معادله کامل بوسینسک بیان می‌گردد که عبارت است از [۱۷]

$$\frac{\partial}{\partial x} (K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z}) - W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (۴)$$

که در آن:

$K_{xx}, K_{yy}, K_{zz}$ : ضرایب هدایت هیدرولیکی در جهت محورهای  $x, y, z$  ( $LT^{-1}$ )

$h$ : ارتفاع پیزومتريک ( $L$ )

$W$ : دبی حجمی تزریقی یا تخلیه‌ای در واحد حجم لایه آبدار ( $T^{-1}$ )

$S_s$ : ضریب ذخیره ویژه ( $L^{-1}$ )

این فرم از معادله حاوی مؤلفه اندرکنشی با آبهای سطحی بوده ( $W$ ) و لذا قابلیت تلفیق با معادلات جریان سطحی را داراست.

#### ۲-۴- معادله کیفی جریان آب زیرزمینی

معادله بقای آلاینده در ناحیه آبهای زیرزمینی با فرض انتقال، پخشیدگی، جذب، واکنش‌های شیمیایی و بیولوژیکی، تزریق و تخلیه به صورت زیر بیان می‌گردد [۱۸]

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x_i} (c v_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) - \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial c^*}{\partial t} + \left( \frac{\partial c}{\partial t} \right)_{\text{reac.}} + q_s c_s \quad (۵)$$

$i, j=1, 2, 3$

که در آن:

$c$ : غلظت آلاینده ( $ML^{-3}$ )

$D_{ij}$ : تانسور ضرایب پخشیدگی ( $L^2 T^{-1}$ )

$v_i$ : تانسور سرعت ( $LT^{-1}$ )

$\rho_b$ : دانسیته توده‌ای محیط متخلخل ( $ML^{-3}$ )

$\theta$ : تخلخل محیط (بدون بعد)

$c^*$ : جرم جذبی آلاینده در واحد وزن خشک خاک (بدون بعد)

$\left( \frac{\partial c}{\partial t} \right)_{\text{reac.}}$ : نشانگر واکنش‌های شیمیایی و بیولوژیکی آلاینده ( $ML^{-3} T^{-1}$ )

$q_s$ : دبی تزریق یا تخلیه از واحد حجم لایه آبدار (تزریق مثبت و تخلیه منفی) ( $T^{-1}$ )

$c_s$ : غلظت تزریق یا تخلیه ( $ML^{-3}$ )

پخش آلودگی به صورت سه بعدی صورت گرفته و با ضرایب پخشیدگی و با فرض تابعیت خطی این ضرایب با سرعت میانگین آلاینده به دست می‌آیند. در جریان سه بعدی با جهت اختیاری جریان در یک محیط غیرهمگن، تانسور ضرایب پخشیدگی،  $D_{ij}$ .

<sup>1</sup> Dispersivities

<sup>2</sup> Isotropic

<sup>3</sup> Macrodispersion

و  $i, j, k$ : نشانگر سطر  $i$  ام، ستون  $j$  ام و لایه  $k$  ام در شبکه بندی محیط جریان در پلان و مقطع است.

پارامتر ضریب هدایت  $C'_{i,j,k}$  تابعی از پارامترهای فیزیکی رودخانه است و به فرم زیر محاسبه می گردد

$$C'_{i,j,k} = \frac{WLK}{M} = WLC_{i,j,k} \quad (9)$$

که در آن:

$W$ : عرض متوسط رودخانه ( $L$ )

$L$ : طول رودخانه در سلول محاسباتی  $i, j, k$  ( $L$ )

$M$ : ضخامت از بستر رودخانه که میزان نشت از رودخانه در آن توسط قانون داریسی به دست آمده و خارج از آن میزان نشت ثابت است ( $L$ ).

در حالت کلی، اندازه گیری ضریب هدایت کار بسیار مشکلی است و عموماً به صورت تجربی با توجه به نوع مصالح کف رودخانه تخمین زده می شود و یکی از پارامترهای عمده در کالیبراسیون مدل می باشد [۳۲].

### ۳- تلفیق معادلات حاکم

با توجه به غیرخطی بودن معادلات حاکم بر جریان در آبراهه ها و آبهای زیرزمینی و نیز اندرکنش آنها، روش تفاضلات محدود به عنوان روش حل عددی در نظر گرفته شده است. شرایط پایداری روشهای عددی و محدودیتهای آن و همچنین ارتباط بین گامهای زمانی در حل معادلات از جمله مهم ترین عوامل در اجرای مدل تلفیقی می باشد.

حل عددی معادلات کمی پیوستگی و مومنتم به عنوان معادلات پایه جریان در آبراهه ها در تلفیق با معادلات جریان آب

در تحقیق جامعی که توسط گلهار<sup>۱</sup> و همکاران صورت گرفته مکانیسم واقعی فرآیندهای انتقال در شرایط سه بعدی در محیطهای غیرهمگن مورد بررسی و از پخشیدگی محلی استفاده گردیده است [۳۱]. نتایج این تحقیق نشان داد که قانون فیک در مقیاسهای بزرگ قابل کاربرد بوده و در موارد عملی نسبت پخشیدگی عرضی به پخشیدگی طولی می تواند از  $0/1$  تا حتی  $0/01$  در شرایط مختلف تغییر کند.

### ۲-۵- اندرکنش آبراهه با لایه آبدار زیرزمینی

به دلیل نوسانات سطح آب در آبراهه ها و نیز سطح ایستابی آب زیرزمینی، تبدلات بین این دو مؤلفه می تواند به صورت مستقیم صورت گیرد. این تبدلات می تواند توسط نشت از رودخانه به لایه آبدار و یا بالعکس، نشت از لایه آبدار زیرزمینی به رودخانه (فصول خشک یا کم آبی رودخانه) صورت گیرد. بر اساس معادله داریسی، میزان نشت به طور مستقیم متناسب با اختلاف ارتفاع بین سطح آب رودخانه با سطح پیزومتری می باشد و در حالتی که سطح ایستابی پایین تر از کف رودخانه باشد، میزان نشت متناسب با اختلاف ارتفاع بین سطح آب رودخانه با ارتفاع کف رودخانه است. (شکل ۱) و لذا در حالت کلی [۳۲]

$$\begin{aligned} W_{i,j,k} &= C'_{i,j,k} (H_{RIV} - h_{i,j,k}) & \text{هرگاه } h_{i,j,k} > H_{BOT} \\ W_{i,j,k} &= C'_{i,j,k} (H_{RIV} - H_{BOT}) & \text{هرگاه } h_{i,j,k} < H_{BOT} \end{aligned} \quad (8)$$

که در آن:

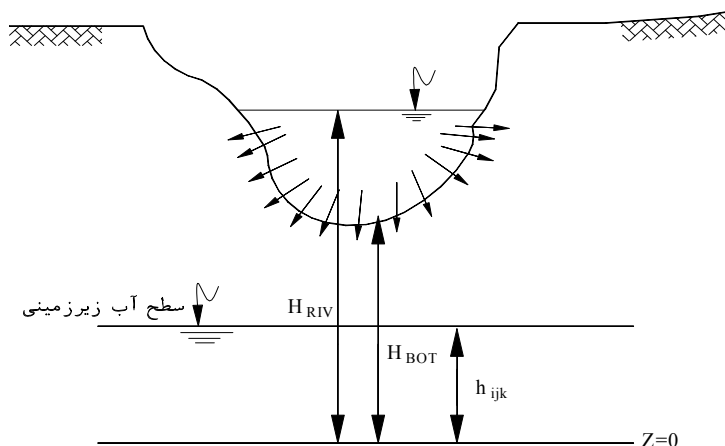
$W_{i,j,k}$ : دبی تغذیه لایه آبدار ( $L^3T^{-1}$ )

$C'_{i,j,k}$ : ضریب هدایت کف رودخانه ( $L^2T^{-1}$ )

$H_{RIV}$ : ارتفاع هیدرولیکی در رودخانه ( $L$ )

$H_{BOT}$ : ارتفاع بستر رودخانه از مبنا ( $L$ )

<sup>1</sup> Gelhar



شکل ۱- شمایی از اندرکنش آبراهه با لایه آبدار زیرزمینی

زیرزمینی به روش تفاضلات محدود به طور همزمان با استفاده از روش کرانک-نیکلسون صورت گرفته است که موتور عددی آن مدل INTRACT می‌باشد [۳۳]. همچنین معادله دیفرانسیلی بوسینسک به روش تفاضلات محدود حل شده است که موتور عددی آن مدل MODFLOW است [۳۲].

حل عددی معادله دیفرانسیلی کیفی جریان آب زیرزمینی با فرض انتقال، پخشیدگی، جذب، واکنش‌های شیمیایی و بیولوژیکی، تزریق و تخلیه با استفاده از روش تفاضلات محدود صورت گرفته است که از موتور عددی MT3DMS استفاده شده است [۳۴].

حل عددی معادله کیفی جریان در آبراه‌های یک بعدی همراه با انتقال و پخشیدگی آلودگی به روش تفاضلات محدود صریح به شیوه لاکس<sup>۱</sup> اصلاح شده انجام شده است و در این زمینه از موتور عددی MIKE11-WQ استفاده شده است [۳۵].

شایان ذکر است که اصولاً فرم معادلات انتقال آلودگی در آبراه‌ها و آبهای زیرزمینی یکی است ولی انتقال آلاینده در آبراه‌ها عمده‌تاً توسط ترم انتقال صورت می‌گیرد، در حالی که در آبهای زیرزمینی ترم پخشیدگی<sup>۲</sup> عامل اصلی است. همچنین ضرایب پخشیدگی در جریانهای سطحی تابعی از نحوه توزیع سرعت جریان در مقطع آبراه است و به عنوان پخشیدگی متلاطم<sup>۳</sup> مطرح می‌شود، در حالی که ضرایب پخشیدگی در جریان آب زیرزمینی تابعی از متوسط سرعت جریان بوده و به عنوان پخشیدگی مولکولی مطرح می‌شود که تفاوت بنیادی با یکدیگر دارند.

تبادلات کیفی بین جریان در آبراه و آبهای زیرزمینی به صورت غیرمزدوج<sup>۴</sup> بوده و به عنوان شرایط اولیه و مرزی از حل جداگانه معادلات دیفرانسیلی آنها حاصل می‌گردد؛ بدین مفهوم که یکبار معادلات دیفرانسیلی انتقال آلودگی در آبراه حل و نتایج آن به صورت شرایط مرزی و اولیه روی شبکه جریان آب زیرزمینی قرار می‌گیرد. این بار معادلات دیفرانسیلی کیفی جریان آب زیرزمینی حل و نتایج آن به صورت ترم‌های چشمه و چاه بر روی شبکه آبراه قرار می‌گیرد و این روند تکرار می‌گردد. بدین مفهوم هیچ‌گونه حل همزمان معادلات صورت نگرفته و معادلات هیدرودینامیک انتقال به طور مجزا با گامهای زمانی متفاوت حل می‌شوند. از آنجا که در غالب موارد، رودخانه‌ها تغذیه کننده آبهای زیرزمینی به لحاظ کمی و کیفی هستند، لذا عموماً مؤلفه‌های کیفی

جریان از آبراه‌ها به عنوان شرایط مرزی و اولیه بر روی شبکه جریانی آبهای زیرزمینی قرار می‌گیرند.

فرآیند انتقال آلودگی در آبراه‌ها به مراتب سریع‌تر از حرکت آن در آبهای زیرزمینی است، لذا انتخاب گامهای زمانی جهت حل عددی معادلات دیفرانسیلی با عنایت به پایداری روش حل و نیز زمان اجرای برنامه از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. اعداد کورانت و پکلت نقش اساسی در رابطه با انتخاب مناسب گامهای زمانی جهت حل عددی دارند. لذا گامهای زمانی حل معادله حرکت آب زیرزمینی را به عنوان بازه تنش<sup>۵</sup> و در آب سطحی به عنوان گام زمانی<sup>۶</sup> با یکدیگر متمایز کرده که در هر بازه تنش آب زیرزمینی در مدل آب سطحی چند گام زمانی اجرا می‌گردد.

همچنین مدل کیفی آب زیرزمینی با گامهای زمانی انتقال آب زیرزمینی و مدل کیفی آب سطحی با گامهای زمانی کوتاه‌تر به عنوان گامهای زمانی انتقال آب سطحی حل می‌گردد. نحوه تلفیق و اجرای مدل در طی یک دوره شبیه‌سازی در شکل ۲ نشان داده شده است.

#### ۴- تصدیق مدل تلفیقی

اصولاً مدل تصویری از واقعیت است، از اینرو جهت کاربرد آنها نیاز به تصدیق<sup>۷</sup> می‌باشد. تصدیق مدل که قبلاً به آن اعتبار سنجی<sup>۸</sup> یا صحت سنجی<sup>۹</sup> گفته می‌شد، به نوعی اثبات کاربردی بودن مدل را در شرایط مختلف بیان می‌کند. براساس نظر ریچکوف<sup>۱۰</sup> و چاپرا<sup>۱۱</sup>، اعتبارسنجی یا تحقیق پیرامون درست بودن، با منطق تحقیقات علمی سازگار نیست [۳۶]. به نظر ایشان عملکرد مدل‌های علمی یک فرآیند قیاسی<sup>۱۲</sup> است. بدین مفهوم که با فرضیات صحیح بتوان با احتمال بالا جوابهای مناسبی از مدل دریافت کرد. بنابراین اصطلاحات تصدیق مدل یا تأیید مدل مناسب‌تر خواهد بود [۳۶ و ۳۷].

هدف از تصدیق مدل اثبات درستی آن نیست، بلکه اطمینان از این است که پیش‌بینی‌های مدل به اندازه کافی برای تصمیم‌گیران قابل اعتماد هستند [۳۸]. این حقیقت که مدل هرگز نمی‌تواند به طور مطلق معتبر باشد در عمل بسیار مهم است. از نظر کاربردهای عملی، تصدیق مدل در دو مرحله انجام می‌گیرد: نیکویی برازش<sup>۱۳</sup> و آزمون‌های مورد نیاز<sup>۱۴</sup>.

<sup>5</sup> Stress Period

<sup>6</sup> Time Step

<sup>7</sup> Confirmation

<sup>8</sup> Validation

<sup>9</sup> Verification

<sup>10</sup> Reckhow

<sup>11</sup> Chapra

<sup>12</sup> Inductive Process

<sup>13</sup> Goodness of Fit

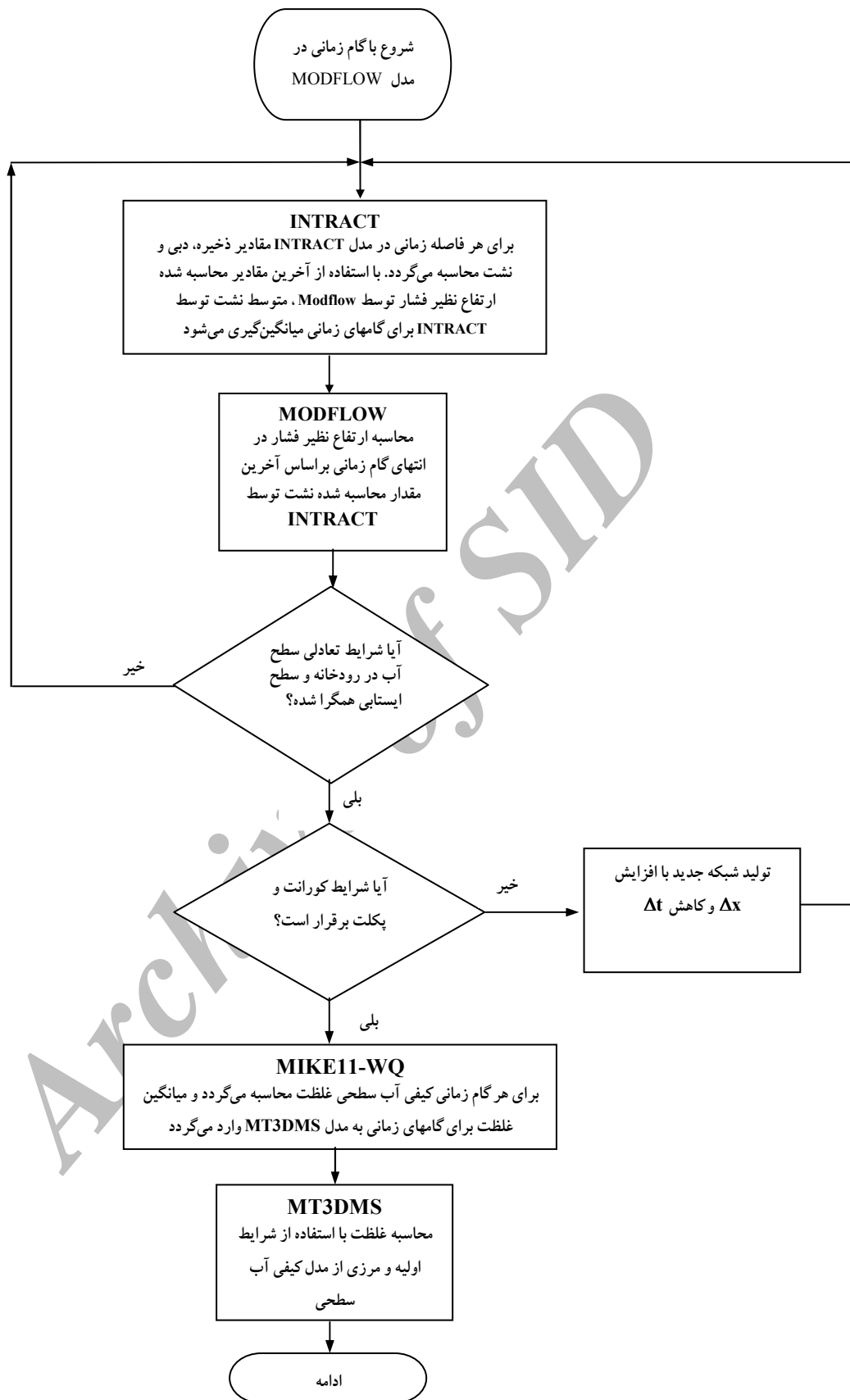
<sup>14</sup> Required Tests

<sup>1</sup> Lax

<sup>2</sup> Dispersion

<sup>3</sup> Turbulent

<sup>4</sup> Uncouple



شکل ۲- نحوه اجرای مدل تلفیقی در طی یک دوره شبیه سازی

با محاسبه سطوح بین منحنیها و محاسبه سطح کل زیر منحنیها به صورت وزنی با وزن غلظت متوسط بین دو منحنی در شکل ۵، مشخص گردید که در شکل (a) سطح زیر منحنیها ۳۹/۵۵، در شکل (b) معادل ۳۹/۴۲ و در شکل (c) معادل ۳۹/۳۶ است که براساس سطح اولیه ۴۰/۰ نشانگر ارضای قابل قبول معادله بقای جرم در طی دوره‌های ۸، ۱۲ و ۲۰ سال و تفاوت نسبی کمتر از ۲ درصد می‌باشد.

## ۵- جمع بندی و نتیجه گیری

در این مقاله یک مدل شبیه سازی اندرکنشی کمی-کیفی آبراهه با آبهای زیرزمینی به صورت مزدوج-غیرمزدوج ارائه گردید. با طراحی نحوه اندرکنش چهار مدول کمی، کیفی، آبراهه و آب زیرزمینی، حداکثر استفاده از موتورهای عددی موجود صورت گرفت. مدل INTRACT جهت حل موج دینامیکی معادلات سن ونان تهیه گردید. از مدل MODFLOW جهت شبیه سازی کمی جریان آب زیرزمینی استفاده شد. در بخش شبیه سازی کیفی آبراهه از مدل MIKE11-WQ استفاده شد. همچنین جهت شبیه سازی کیفیت آبهای زیرزمینی مدل MT3DMS به کار گرفته شد. یک موتور تولید کننده و کنترل کننده ابعاد سلولها جهت کنترل شرایط پایداری حل عددی تفاضلات محدود صریح معادلات دیفرانسیلی تهیه گردید. نکته اساسی در تلفیق مدولهای مختلف، تفاوت مقیاسهای زمانی و مکانی بود که با یک موتور تولید شبکه پایداری روشهای حل عددی کنترل گردید. مدل تلفیقی نسبت به پارامترهای هدایت پذیری رودخانه و دیسپرسیویته حساس است و لذا دقت در تخمین و تعیین آنها در دقت نتایج مدل بسیار مهم است. تصدیق مدل اندرکنشی با مقایسه نتایج آن با نتایج تحلیلی موجود انجام گرفته و کاملاً تأیید شده است. در استفاده بزرگ مقیاس مدل تلفیقی به ویژه در مدل آب زیرزمینی در بخش کمی آن، مقدار و رفتار ضریب هدایت هیدرولیکی و در بخش کیفی مقدار و رفتار ضرایب پخشیدگی از جمله مواردی است که تابع مقیاس کاربردی آنها بوده و لذا استوکستیک فرض کردن این پارامترها مناسب تر است. در مجموع مدل اندرکنشی ارائه شده می‌تواند ابزار مناسبی جهت مدیریت در مقیاسهای بزرگ باشد که از طرفی با فرآیندهای سریع و کوتاه مدت نظیر جریانهای سطحی و از طرف دیگر با فرآیندهای کند و درازمدت نظیر جریانهای زیرزمینی رو به رو است و نیاز به تصمیم گیریهای دراز مدت دارد. هر چند مدل ارائه شده یک مدل شبیه سازی است ولی می‌تواند پایه‌ای برای مدل‌های بهینه سازی جهت مدیریت یکپارچه در مقیاسهای بزرگ قرار گیرد.

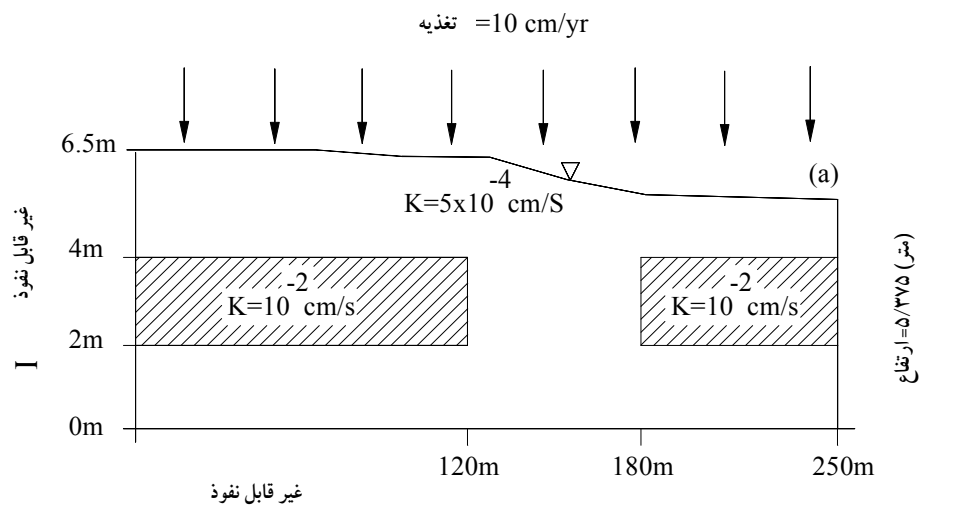
برای تصدیق مدل تلفیقی ارائه شده در این مقاله با توجه به کاربرد بزرگ مقیاس آن و نیز فرآیندهای انتقال و پخشیدگی در آبهای زیرزمینی که در طی زمانهای بسیار طولانی در حد چند ده سال به طول می‌انجامد، عملاً استفاده از روش آزمایشگاهی به طور منطقی قابل قبول نبوده و روش میدانی نیز به دلیل عدم دسترسی به اطلاعات و داده‌های جامع مورد نیاز و نیز طولانی بودن فرآیندهای انتقال و پخشیدگی در آبهای زیرزمینی امکان عملی نداشت. همان گونه که ذکر شد به دلیل توزیعی بودن مدل تلفیقی ارائه شده، از مقایسه نتایج مدل با نتایج تحلیلی موجود جهت تصدیق آن استفاده شد.

برای این منظور نتایج مدل با نتایج تحلیلی که توسط سودیکی<sup>۱</sup> ارائه گردیده مقایسه شده است [۳۹]. شرایط محیط جریان انتقال دهنده آلودگی بدین صورت فرض شده که در روی یک لایه آبدار آزاد به طول ۲۵۰ متر و عمق ۶/۵ متر که از جنس سیلت و ماسه ریز می‌باشد، دو لایه غیرمتجانس از جنس ماسه متوسط-درشت مطابق شکل ۳، وجود دارد. ضرایب هدایت هیدرولیکی برای لایه آبدار و لایه‌های غیرمتجانس به ترتیب  $K = 5 \times 10^{-4}$  cm/s و  $K = 10^{-4}$  cm/s می‌باشد و میزان تغذیه از سطح (cm/yr) به طور یکنواخت فرض شده است. آبراهه‌ای مطابق شکل ۳، در عرض لایه آبدار آن را تغذیه می‌نماید و غلظت نسبی آن در طی ۵ سال اول  $C=1$  و پس از آن صفر می‌باشد (در عرض  $x = 0$  (m) تا  $x = 80$  (m) همچنین آلاینده بدون واکنش در نظر گرفته شده است. شرایط مرزی و اولیه جریان روی شکل ۳، نشان داده شده است. تخلخل مؤثر محیط ۰/۳۵ و ضرایب پخشیدگی طولی ( $\alpha_L$ ) و عرضی ( $\alpha_{TV}$ ) به ترتیب ۰/۵ و ۰/۰۰۵ متر است و ضریب انتقال مؤثر  $1/34 \times 10^{-5}$  cm<sup>2</sup>/s در نظر گرفته شده است. سطح زمین دارای توپوگرافی مطابق شکل ۳ می‌باشد و از رقوم ۶/۵ متر به ۵/۳۷۵ متر کاهش می‌یابد. هدف، بررسی روند آلودگی در آب زیرزمینی از طریق نشست آب سطحی در طی ۸ سال، ۱۲ سال و ۲۰ سال پس از شروع نشست می‌باشد. در شکل ۴، نتایج تحلیلی در طی این سه دوره که توسط سودیکی به دست آمده نشان داده شده است.

جهت اجرای مدل، با فرض ۵۰ ستون ۵ متری و ۵۰ سطر ۵ متری در پلان و ۲۶ لایه ۲۵ سانتی متری در عمق اقدام به مدل سازی گردید. با اعمال شرایط مرزی و اولیه فوق و رعایت شرایط همگرایی در ابعاد سلولها و گامهای زمانی، نتایج اجرای مدل برای مدت ۸ سال، ۱۲ سال و ۲۰ سال پس از آغاز نشست آلودگی از طریق سطح به آبهای زیرزمینی مطابق شکل ۵ به دست آمده که به طور دقیقی مشابه نتایج تحلیلی می‌باشد و در حدود ۲ درصد تفاوت نسبی دارد.

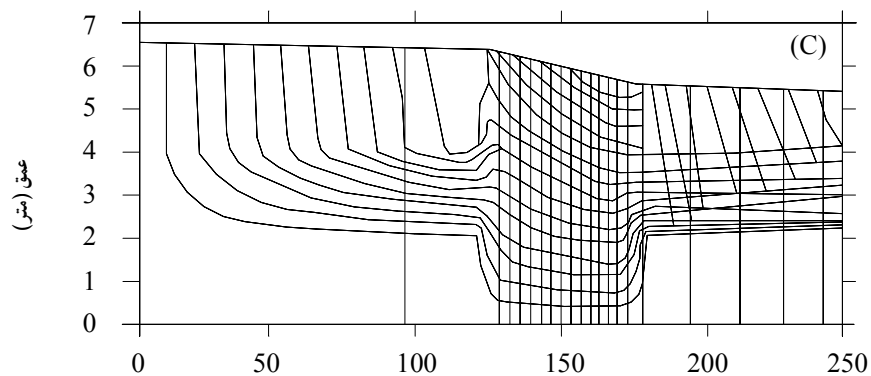
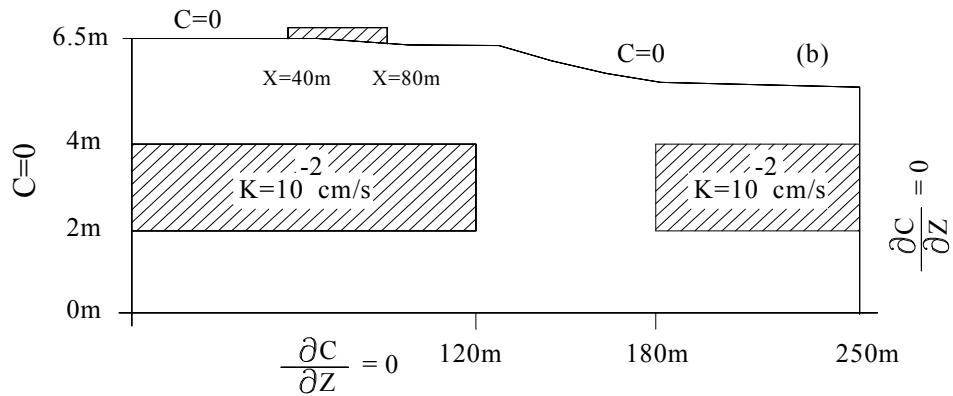
<sup>1</sup> Sudicky





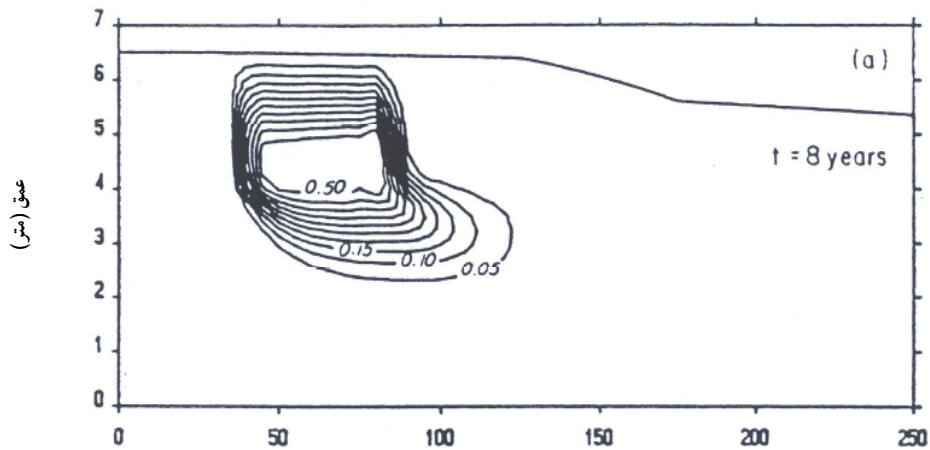
$$C = 1, t < 5 \text{ years}$$

$$C = 0, t > 5 \text{ years}$$

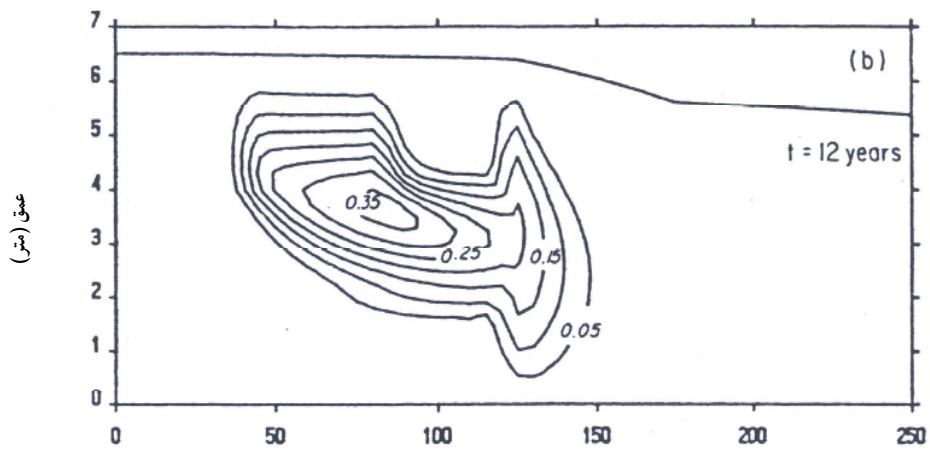


فاصله در جهت جریان (متر)

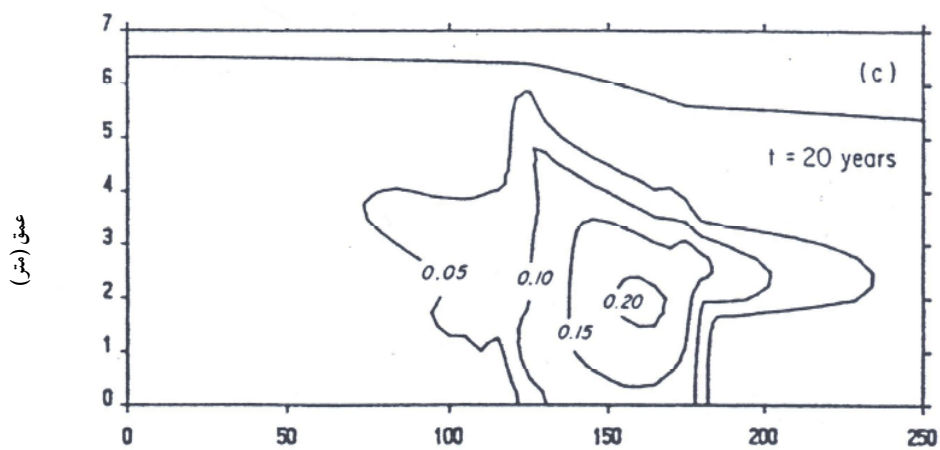
شکل ۳- شرایط مرزی و اولیه و مشخصات لایه آبدار (سودیکی، ۱۹۸۹)



فاصله در جهت جریان (متر)

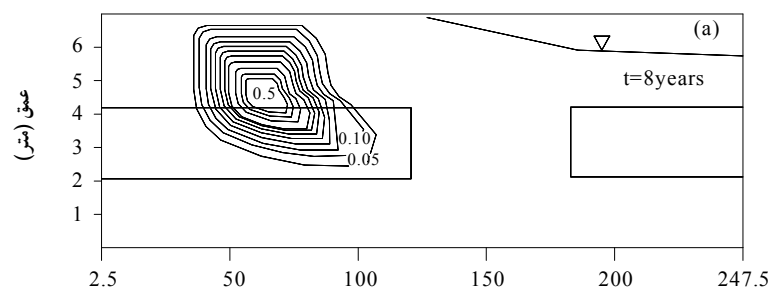


فاصله در جهت جریان (متر)

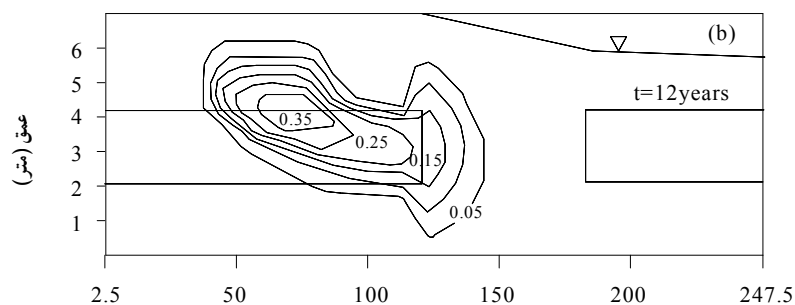


فاصله در جهت جریان (متر)

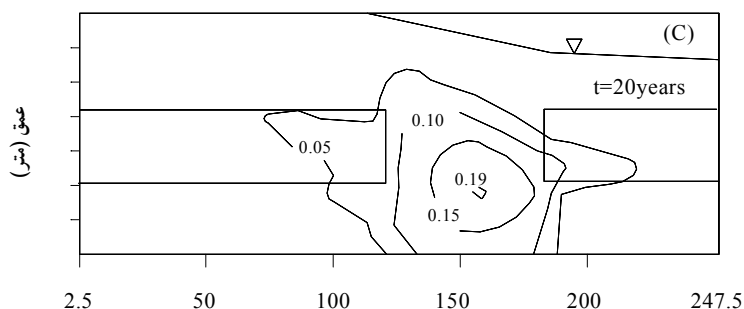
شکل ۴- نتایج پیش بینی تحلیلی هاله آلودگی در طی سه دوره زمانی (سودیکی، ۱۹۸۹)



فاصله در جهت جریان (متر)



فاصله در جهت جریان (متر)



فاصله در جهت جریان (متر)

شکل ۵- نتایج اجرای مدل تلفیقی در طی سه دوره زمانی

## ۶- مراجع

- 1- Atkinson, J.F., and Gupta, S.K. (1998). "Linking hydrodynamic and water quality models with different scales." *J. Water Resources Research*, 31(5), 857-867.
- 2- Hubbert, M.K. (1940). "The theory of groundwater motion." *J. Geol.*, 48, 785-944.
- 3- Toth, J. (1963). "A theoretical analysis of groundwater flow in small drainage basin." *J. Geophys. Res.*, 68, 4785-4812.
- 4- Allen, T.F.H., and Starr, T.B. (1982). *Hierarchy perspective for ecological complexity*, University of Chicago press, Chicago.
- 5- Klemes, V. (1983). "Conceptualization and scale in hydrology." *J. Hydro.*, 65, 1-23.

- 6- O'Neill, R.V., DeAngelis, D.L., and Waide, J. B. (1986). *A hierarchical concept of ecosystems*, Princeton University Press, Princeton.
- 7- Grimm, N.B., and Fishers, S.G. (1991). *Responses of arid-land streams to changing climate*, Springer Berlin Heidelberg, New York, 211-233.
- 8- Wu, J., and Loucks, O.L. (1995). "From balance-of- nature to hierarchical patch dynamics: A paradigm shift in ecology." *Quarterly Rev. Biol.*, 70, 439-466.
- 9- Stanley, E. H., Fisher, S.G., and Grimm, N. B. (1997). "Ecosystem expansion and contraction in streams." *Bioscience*, 47 (7), 427-435.
- 10- Abbott, M. B., Bathurst, J.C., Cunge, J.A., and O'Connell, P.E. (1986). "An introduction to the European Hydrological System, SHE, 2: structure of physically-based distributed modeling system." *J. Hydrology*, (87), 61-77.
- 11- Grayson, R.B., Moore, I.D., and McMahon, T.A. (1992). "Physically based hydrologic modeling. 1.A Terrain-based model for investigative purposes." *Water Resources Research*, 28 (10), 2639-2658.
- 12- Loucks, D.P., French, P.N., and Taylor, M.R. (1995). *Interactive river-aquifer simulation model: program description*, Cornell University, Ithaca, NY.
- 13- Querner, E.P. (1997). "Description and application of the combined surface and groundwater flow model MOGROW." *J. Hydrol.*, 192, 158-188.
- 14- Sophocleous, M. (2002). "Interactions between groundwater and surface water: the state of the science." *Hydrogeology Journal*, 10, 52-67.
- 15- Croton, J.T., and Bari, M.A. (2001). "WEC-C: a distributed, deterministic catchment model- theory, formulation and testing." *J. Environmental Modeling and Software*, 16, 583-599.
- 16- Pandey, S., and Huyakorn, P. S. (2004). "A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface-subsurface flow." *J. Advances in Water Resources*, 27, 361- 382.
- 17- Kashef, A. A. I. (1987). *Groundwater engineering*, McGraw-Hill Inc., New York.
- 18- Fetter, C. W. (1993). *Contaminant hydrogeology*, Macmillan Publishing Company, New York.
- 19- Bear, J., and Verruijt, A. (1987). *Modeling groundwater flow and transport*, D. Reidel Pub. Co., Dordrecht, Holland.
- 20- Fried, J. J. (1975). *Groundwater pollution*, Elsevier, New York.
- 21- Anderson, M. P. (1979). *Models to simulate the movement of contaminants through groundwater flow systems*, CRC Cirt. Rev. Environ. Control, 9, 97-156.
- 22- Sudicky, E. A., and Cherry, J. A. (1997). "Field observations of tracer dispersion under natural flow conditions in an unconfined sandy aquifer." *Water Polut. Res. Can.*, 14, 1-17.

- 23- Dieulin, A., Beaudoin, B., and De Marsily, G. (1980). *Sur le transfert de' elements en solution dans un aquifere alluvionnaire structure*, C. R. Hebd. Seances Acad. Sci. Ser. D, 805-808.
- 24- Warren, G. E., and Skiba, F. F. (1964). "Macroscopic dispersion." *Trance. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng.*, 231, 215-230.
- 25- Heller, J. P. (1972). "Observations of mixing and diffusion in porous media." *Proc. Symp. Fundam. Transp. Phenom. Porous Media, 2<sup>nd</sup>*, Alberta, 1, 1-26.
- 26- Schwartz, F. W. (1977). "Macroscopic dispersion in porous media: the controlling factors." *Water Resources Research*, 13(4), 743-752.
- 27- Gelhar, L. W., Gutjahr, A. L., and Naff, R.L. (1979). "Stochastic analysis of macrodispersion in a stratified aquifer." *Water Resources Research*, 15(6), 1387-1397.
- 28- Smith, L., and Schwartz, F.W. (1980). "Mass transport, 1. A stochastic analysis of macroscopic dispersion." *Water Resources Research*, 16(2), 303-313.
- 29- Matheron, G., and Demarsily, G. (1980). "Is transport in porous media always diffusive a counter example." *Water Resources Research*, 16(5), 901-917.
- 30- Dagan, G., (1982). "Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities, 2. The solute transport." *Water Resources Research*, 18(4), 835-848.
- 31- Gelhar, L.W., and Axness, C.L. (1983). "Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers." *Water Resources Research*, 19(1), 161-180.
- 32- McDonald, M.G., and Harbaugh, A.W. (1988). *A modular three-dimensional finite-differences groundwater flow model*, US Geological Survey, Techniques of Water Resources Investigations, Book 6, Ch. A1, 586.
- 33- Safavi, H.R., Afshar, A., Marino, M.A., and Ghaheri, A. (2004). "A coupled surface-water and groundwater flow model." *Iranian J. of Scis. and Tech.*, 28, B1, 137-144.
- 34- Zheng, Ch., and Wang, P.P. (1998). *MT3DMS documentation and user's guide*, University of Alabama, Tuscaloosa, Alabama.
- 35- Abbott, M.B., and Cunge, J.A. (1982). *Engineering applications of computational hydraulics*, Pitman Advanced Publ. Program, London.
- 36- Reckhow, K.H., and Chapra, S.C. (1983). "Confirmation of water quality models." *Ecol. Modell.*, 20, 111-133.
- 37- Oresjes, N., Shrader-Frechette, K., and Belitz, K. (1994). "Verification, validation, and confirmation of numerical models in the earth sciences." *Sciences*, 263, 641-646.
- 38- Chapra, S. C. (2003). "Engineering water quality models and TMDLs." *J. of water Res. Plan. and Manag.*, 247-256.
- 39- Sudicky, E.A. (1989). "The Laplace transform Galerkin technique: a time-continuous finite element theory and application to mass transport in groundwater." *Water Resources Research*, 25 (8), 1833-1846.