

# توسعه مدل CE-QUAL-W2 برای شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار در سامانه رودخانه-مخزن

فرزانه فیضی<sup>۱</sup>، عباس افشار<sup>۲</sup>، مطهره سعادت‌پور<sup>۳</sup>، الهام فرجی<sup>۴</sup>

۱- دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

(نویسنده مسئول) ۷۷۴۶۹۳۴۳ (۰۲۱) farzaneh.feizii@gmail.com

۲- استاد، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

۳- استادیار، دانشکده محیط زیست، دانشگاه محیط زیست، کرج

۴- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

پذیرش ۹۳/۱۰/۲۴

(دریافت ۹۳/۳/۸)

## چکیده

در این تحقیق مدل دو بعدی هیدرودینامیک و انتقال جرم، CE-QUAL-W2، برای شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار در پیکره‌های آبی در حال جریان و ساکن توسعه داده شده و در سامانه رودخانه-مخزن کرخه استفاده شد. برای دستیابی به این هدف، زیربرنامه‌ای در کد برنامه‌نویسی اصلی مدل CE-QUAL-W2 گنجانده شد که فرایند فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی در سرنوشت ماده آلی فرار را تشریح می‌نماید. به منظور ارزیابی درستی عملکرد مدل توسعه داده شده CE-QUAL-W2، معادله پیوستگی جرم ماده آلی فرار در سامانه رودخانه-مخزن کرخه مورد آزمون قرار گرفت و درستی عملکرد زیر برنامه توسعه داده شده در شبیه‌سازی سرنوشت و انتقال این آلودگی تایید شد. در ادامه، پاسخ سامانه رودخانه-مخزن کرخه در اثر ورود ناگهانی آلودگی ترکیبات آلی فرار با شاخص MTBE شبیه‌سازی شد و تأثیر نحوه بهره‌برداری (میزان و محل برداشت آب از مخزن) بر فرایندهای هیدرودینامیکی و انتقال جرم در مخزن مورد بررسی قرار گرفت. بررسی نتایج نشان می‌دهد منظور نمودن اثر تبخیر (فراریت) ماده آلی فرار در مدل توسعه یافته CE-QUAL-W2، منجر به کاهش غلظت آلاینده MTBE در منابع آبی مورد مطالعه نسبت به حالت قبل از توسعه مدل شده است. همچنین تأثیر پارامترهای محیطی مانند سرعت باد، دمای آب و دمای هوا مورد آنالیز حساسیت قرار گرفت. نتایج حاصل از تحلیل حساسیت‌های صورت گرفته نشان می‌دهد که افزایش سرعت باد و دمای آب منجر به افزایش شدت تبخیر ماده آلی فرار و کاهش زمان بازپروری مخزن می‌شود و کاهش دمای هوا باعث کاهش نرخ تبخیر ماده آلی فرار و در نتیجه افزایش غلظت آلاینده می‌شود.

**واژه‌های کلیدی:** آلودگی ناگهانی پیکره‌های آبی، ترکیبات آلی فرار، مدل دو بعدی هیدرودینامیک، کیفیت آب MTBE، CE-QUAL-W2

## ۱- مقدمه

مدل‌های شبیه‌سازی در حقیقت پاسخ پیکره‌های آبی را در اثر اتخاذ تصمیمات مختلف، برای ارزیابی در روش‌های تصمیم‌گیری، برآورد می‌کنند. لذا داشتن مدل شبیه‌سازی متناسب با خصوصیات هیدرودینامیکی پیکره آبی که توانایی شبیه‌سازی فرایندهای مؤثر بر سرنوشت آلودگی مربوطه را داشته باشد، ضروری است. برای مثال آلاینده‌هایی نظیر MTBE<sup>۱</sup>، بنزن و به‌طور کلی مواد نفتی در دامنه آلودگی‌هایی قرار می‌گیرند که مدل‌های شبیه‌سازی آب‌های سطحی محدودی قادر به شبیه‌سازی آنها هستند. این در حالی است که در دهه‌های اخیر در کشور، پیکره‌های آبی مانند مخزن قشلاق، مخزن

در چند دهه اخیر با افزایش روز افزون جمعیت بشر، پیشرفت تمدن و ارتقاء سطح فرهنگ، نیازهای آبی و به تبع آن بار آلودگی ورودی به منابع آب بیشتر شده است. از طرفی با گذشت زمان استانداردهای مربوط به تأمین کیفیت آب سخت‌گیرانه‌تر می‌شود. از این رو همواره پایش و بررسی آلودگی‌ها در رودخانه‌ها و مخازن و شناخت پیکره‌های آبی به منظور مقابله با آلودگی‌ها ضروری است. این شناخت، شامل مقدار و نوع آلودگی ورودی و همچنین چگونگی پاسخ پیکره آبی به انواع تصمیمات اتخاذ شده است.

<sup>1</sup> Methyl Tert-Butyl Ether (MTBE)

امیرکبیر، رودخانه زاینده‌رود و روخانه کرخه در معرض آلودگی‌های نفتی قرار گرفتند. بنابراین توسعه مدل‌هایی که قادر به شبیه‌سازی فرایندهای فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی مؤثر بر سرنوشت آلودگی‌های نفتی باشند و همچنین قابلیت شبیه‌سازی هیدرودینامیک و انتقال جرم این نوع آلودگی‌ها را دارا باشند، برای بررسی چنین بحران‌هایی حائز اهمیت است. به‌طور کلی می‌توان گفت، دستیابی به اطلاعاتی در خصوص رخداد، ماندگاری، توزیع زمانی و مکانی آلودگی به‌منظور ارائه برنامه بهره‌برداری بهینه از مخازن و مدیریت منابع آبی مورد نیاز است [۱].

سرنوشت مواد آلی فرار<sup>۱</sup> در پیکره‌های آبی خصوصاً مخازن لایه‌بندی شده بسیار پیچیده بوده و بسیار متأثر از الگوهای چرخش جریان‌های هیدرولوژیکی فصلی است. بنابراین مدلی ریاضی که قادر به شبیه‌سازی دقیق فرایندهای هیدرودینامیکی و شیمیایی واکنش‌ها باشد تا توزیع زمانی و مکانی این آلاینده‌ها را نمایش دهد، ضروری است. CE-QUAL-W2 مدل دو بعدی هیدرودینامیک و انتقال جرم برای شبیه‌سازی دما و سایر پارامترهای کیفی (اکسیژن محلول و مواد مغذی) است که در بسیاری از پیکره‌های آبی مانند رودخانه، مخزن و خور مورد استفاده قرار گرفته است. این مدل تنها قادر به شبیه‌سازی انتقال و فرایند پخش ماده آلی فرار به صورت ماده‌ای پایستار در پیکره‌های آبی است اما امکان شبیه‌سازی سرنوشت این ترکیبات آلاینده متأثر از فرایند تبخیر ماده آلی را دارا نیست. بر این اساس در این تحقیق، مدل CE-QUAL-W2 برای شبیه‌سازی سرنوشت ترکیبات آلی فرار (انواع ترکیبات آلی فرار با جرم‌های مولکولی و ضرایب هنری متفاوت) با در نظر گرفتن فرآیند تبخیر ماده آلی فرار توسعه داده شد.

اولین مطالعات در خصوص سرنوشت و انتقال مواد آلی فرار در آبهای سطحی توسط اندرسون در سال ۱۹۹۷، مکورد و شالدو در سال ۱۹۹۸ و استوکینگ و کاواناگ در سال ۲۰۰۰ ارائه شده است [۲، ۳ و ۴]. همه آنها برای برآورد میزان آلودگی در هر نقطه از محدوده مورد مطالعه، از دو فاکتور انتقال هیدرودینامیکی و تبخیر (فرآیند) آلاینده از سطح استفاده کردند. اما هیلد و همکاران در سال ۲۰۰۵ نشان دادند استفاده از این فاکتورها نتایج درستی تولید نمی‌کنند و همواره میزان آلودگی بیشتر تخمین زده می‌شود [۵]. لذا آنان با توجه به اینکه ترکیبات آلی فرار همگی زوال‌پذیری دارند و به مرور زمان در اثر واکنش‌های بیولوژیکی در آب‌ها زوال می‌پذیرند، معادلات زوال درجه اول را به معادلات پیشین افزودند و مدل جدیدی برای شبیه‌سازی سرنوشت و انتقال ترکیبات آلی فرار توسعه دادند. بندر و همکاران در سال ۲۰۰۳ اظهار داشتند که

مقدار تبخیر (فرآیند) آلاینده‌های آلی فرار از سطح آب مخازن را می‌توان بر اساس نظریه پخشودگی دو نواره محاسبه کرد [۶]. این نظریه توسط لویس و ویتمن در سال ۱۹۲۴ برای حرکت مولکول‌های یک ماده بین دو فاز مایع و گاز مطرح شده بود [۷] و [۸]. چانگ و گو در سال ۲۰۰۹ با توسعه مدل CE-QUAL-W2 امکان شبیه‌سازی سرنوشت ترکیبات سمی متأثر از فرایندهای ته‌نشینی، جذب رسوبات، تبخیر و زوال بیولوژیکی را به این مدل افزودند. سپس آنان تأثیر دما، شدت نور خورشید و فعالیت‌های میکروارگانیسم‌ها را بر سرنوشت این مواد سمی در مخزنی واقع در آیووا<sup>۲</sup> مورد بررسی قرار دادند [۹].

هدف از این تحقیق، توسعه مدل CE-QUAL-W2 برای شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار در سامانه رودخانه-مخزن بود. برای این منظور از سامانه رودخانه-مخزن کرخه و ورود ناگهانی آلودگی MTBE به‌عنوان مورد مطالعاتی استفاده شد. در همین راستا تحلیل حساسیت‌هایی بر روی پارامترهای محیطی مؤثر بر تبخیر ماده آلی فرار مانند سرعت باد، دمای آب و دمای هوا صورت گرفت. همچنین تأثیر بهره‌برداری از مخزن (مقدار و محل برداشت آب) بر سرنوشت و انتقال MTBE به‌عنوان شاخص ترکیبات آلی فرار مورد بررسی قرار گرفت.

## ۲- مواد و روش‌ها

### ۲-۱- توسعه مدل

مدل CE-QUAL-W2 مدلی دوبعدی است که برای حل معادلات مومنوم افقی، انتقال جرم، تراز سطح آزاد آب، فشار هیدرواستاتیکی، پیوستگی و چگالی از روش عددی تفاضل محدود بهره می‌برد. تراز سطح آب، فشار، چگالی، سرعت افقی و عمودی و غلظت، پارامترهای کیفی متغیرهای حالت در پیکره‌های آبی هستند که توسط این مدل شبیه‌سازی می‌شوند.

در مدل CE-QUAL-W2، سرنوشت و انتقال مواد آلی فرار در پیکره‌های آبی به‌صورت انتقال جرم ماده‌ای پایستار تعریف شده است. در این مطالعه، زیربرنامه شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار به‌کد برنامه‌نویسی اصلی مدل دوبعدی هیدرودینامیک و کیفیت آب CE-QUAL-W2 نسخه ۳/۵ افزوده شد تا امکان شبیه‌سازی فرایندهای شیمیایی حاکم بر سرنوشت مواد آلی فرار توسط مدل فراهم شود. ضرایب واکنش‌ها و معادلات مورد استفاده در شبیه‌سازی سرنوشت مواد آلی فرار با مراجعه به منابع علمی معتبر و مقادیر ارائه شده در آنها انتخاب شد. زیربرنامه شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار، فرایندهای زوال مواد آلاینده آلی فرار مانند تبخیر

<sup>2</sup> Iowa

<sup>3</sup> Subroutine

<sup>1</sup> Volatile Organic Compounds (VOC)

(فرآریت)، هیدرولیز و یا اکسیداسیون را همراه با زوال بیولوژیکی (گنجانده شده در کد اصلی برنامه‌نویسی CE-QUAL-W2) شبیه‌سازی می‌نماید. زوال ناشی از هیدرولیز و یا اکسیداسیون همانند زوال بیولوژیکی به صورت واکنش‌هایی با ماهیت مرتبه اول، امکان تعریف می‌یابند. خصوصیات فیزیکی و شیمیایی ماده آلی فرآر و ضرایب واکنش‌ها نیز در قالب فایل داده‌های ورودی به زیربرنامه شبیه‌سازی ماده آلی فرآر ارائه می‌شود.

## ۲-۱-۱- ورود و سرنوشت MTBE در منابع آب

مشاهده غلظت MTBE در منابع آب سطحی مانند مخازن و رودخانه‌ها تهدیدی برای سلامتی بشر محسوب می‌شود. آلودگی منابع آب سطحی به MTBE ناشی از فعالیت‌های قایق‌های موتوری تفریحی، نقص سیستم‌های انتقال و حمل سوخت شامل لوله‌ها، تانک‌های ذخیره و حمل و غیره است [۴ و ۵]. در این کار تحقیقاتی از میان مواد آلی فرآر، MTBE به‌عنوان شاخص مورد مطالعه قرار گرفت. ولی معادلات گنجانده شده در زیربرنامه توسعه داده شده شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرآر به صورت کلی بوده و برای هر نوع ماده آلی فرآر قابل استفاده است.

سرنوشت MTBE در منابع آب سطحی می‌تواند متأثر از فرایندهای تجزیه بیولوژیکی هوازی-بی‌هوازی، تبخیر (فرآریت)، جذب، اکسیداسیون، تجزیه شیمیایی ناشی از نیروی تابشی و هیدرولیز باشد. با توجه به ماهیت رفتاری MTBE که تمایل زیادی برای انحلال در محیط‌های آبی دارد، ضریب هنری نسبتاً پایین و تمایل بسیار ضعیفی که برای جذب توسط رسوبات دارد، می‌توان نتیجه گرفت تبخیر (فرآریت) و تجزیه بیولوژیکی از جمله فرایندهای مؤثر زوال این ماده می‌باشند [۴، ۵ و ۱۰].

با توجه به ماهیت پایستار MTBE که تنها متأثر از فرایندهای تبخیر و تجزیه بیولوژیکی بوده و تمایل انحلال بالایی در آب دارد، این پارامتر کیفی در گروه آلاینده‌های ژنریک در مدل CE-QUAL-W2 طبقه‌بندی شد. بر اساس روابط و معادلات حاکم در مدل CE-QUAL-W2، این مدل برای هر نوع پارامتر کیفی ژنریک ترم‌های ته‌نشینی و زوال مرتبه صفر و یک را در نظر می‌گیرد. معادله موجود در این مدل به صورت رابطه ۱ است [۱۱]

$$S_{\Phi} = K_0 \theta_g^{(T-20)} - K_1 \theta_g^{(T-20)} \Phi_g - \omega_g \frac{\partial \Phi_g}{\partial z} \quad (1)$$

که در این رابطه

$K_0$ ,  $K_1$ ,  $\Phi_g$ ,  $\theta_g$ ,  $\omega_g$  به ترتیب ضریب تجزیه بیولوژیکی مرتبه صفر، ضریب تجزیه بیولوژیکی مرتبه یک، غلظت ماده ژنریک، ضریب تعدیل واکنش متناسب با دما و سرعت ته‌نشینی است. با توجه به

معادلات و روابط حاکم بر مدل CE-QUAL-W2، ترم تبخیر (فرآریت) MTBE از لایه سطحی آب در نظر گرفته نشد. با توجه به ماهیت فرآر MTBE که از خانواده ترکیبات آلی فرآر است، شبیه‌سازی این ماده مستلزم افزودن ترم تبخیر (فرآریت) آلاینده به معادلات و روابط زوال موجود در مدل CE-QUAL-W2 است. برای این منظور، ترم تبخیر یا ترم انتقال گاز در سطح آب به مجموعه معادلات پارامترهای کیفی ژنریک در مدل دوبعدی عددی و هیدرودینامیک CE-QUAL-W2 اضافه شد. به‌منظور شبیه‌سازی سرنوشت ترکیبات آلی فرآر، معادلات و تئوری‌هایی به شرح زیر در زیربرنامه گنجانده شده در مدل CE-QUAL-W2 مورد استفاده قرار گرفتند.

## ۲-۱-۲- مدل‌سازی انتقال مواد گازی در سطح آب

بر اساس فرایندهای طبیعی انتقال مواد، هرگاه آب در مجاورت اتمسفر قرار گیرد، ترکیبات گازی مانند اکسیژن و دی‌اکسیدکربن در لایه آب و هوا تبادل می‌شوند. این فرایند تا زمانی ادامه می‌یابد که میان غلظت ماده گازی در آب و فشار جزئی گاز در هوا، موازنه‌ای ایجاد شود. این موازنه بر اساس قانون هنری مطرح می‌شود. به‌منظور مدل‌سازی این فرایند در محیط مبادله هوا و آب، رابطه موازنه جرمی به شرح رابطه ۲ استخراج می‌شود [۴، ۶، ۱۲ و ۱۳]

$$\frac{dC}{dt} = \frac{K_{OL} A (C_S - C)}{V} \quad (2)$$

که در این رابطه

$C_S$  غلظت آلاینده در حال اشباع در آب بر حسب گرم بر مترمکعب،  $C$  غلظت آلاینده در سطح آب بر حسب گرم بر مترمکعب،  $K_{OL}$  سرعت انتقال کل بر حسب متر بر ثانیه،  $A$  سطح مقطع بر حسب مترمربع و  $V$  حجم بر حسب مترمکعب است.

## ۲-۱-۳- تئوری دو لایه‌ای ویتمن<sup>۲</sup>

با در نظر گرفتن مدل ساده انتقال گاز دو لایه‌ای<sup>۳</sup> ارائه شده توسط ویتمن فرض بر این است که پیکره اصلی فاز مایع و گاز دارای ویژگی پخشیدگی کامل و یکنواخت است. بر اساس مدل دو لایه‌ای، ماده در حال حرکت بین دو فاز با مقاومت بالایی در لایه مرزی

<sup>1</sup> Overall Air-Water Transfer Velocity

<sup>2</sup> Whitman

<sup>3</sup> Two Film

ورقه‌ای<sup>۱</sup> مواجهه بوده و انتقال جرم از طریق فرایند پخشیدگی مولکولی<sup>۲</sup> است. انتقال از لایه مایع به شرح زیر نمایش داده می‌شود [۱۳ و ۱۴]

ورقه‌ای<sup>۱</sup> مواجهه بوده و انتقال جرم از طریق فرایند پخشیدگی مولکولی<sup>۲</sup> است. انتقال از لایه مایع به شرح زیر نمایش داده می‌شود [۱۳ و ۱۴]

## ۲-۱-۴- مدل جایگزینی سطح<sup>۵</sup>

به منظور مدل‌سازی تبادل گاز در لایه هوا-مایع باید دیدگاهی متفاوت از تئوری انتقال دو لایه‌ای در نظر گرفت. به جای در نظر گرفتن لایه‌ای راکد، سیستم به صورت مجموعه‌ای از قطعات آب که به سطح آب حمل می‌شوند، در نظر گرفته می‌شود. وقتی تبادل در سطح صورت می‌پذیرد، قطعه آب از سطح جدا شده و با لایه حجمی آب<sup>۶</sup> تماس و اختلاط پیدا می‌کند. برای این منظور، تئوری نفوذ<sup>۷</sup> برای تخمین شار گاز انتقالی در لایه آب-هوا مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱۳ و ۱۴]

$$J = \sqrt{\frac{D_1}{\pi t}} (c_s - c_1) \quad (6)$$

که در این رابطه  $t^*$  متوسط زمان تماس قطعه مایع در سطح آب است. رابطه ۶ به تنهایی ارزش بالایی ندارد زیرا تخمین زمان تماس بسیار دشوار است. روابط بالا اگر تئوری نفوذ برقرار باشد حاوی اطلاعات ارزشمندی هستند؛ در این صورت سرعت انتقال جرم، با مجذور ضریب پخشیدگی مولکولی متناسب است. یک تفاوت مهم میان تئوری انتقال دو لایه‌ای و تئوری تجدید سطحی در نحوه فرمول‌بندی شدت انتقال گاز و مایع در لایه تماس هوا-آب است. تئوری دو لایه‌ای برای پیکره‌های آبی با ماهیت آب‌های ساکن و تئوری تجدید سطحی برای پیکره‌های آبی با جریان آشفته توسعه داده شده‌اند. ضریب تبخیر (فرآیت) ماده آلی فرآر به جرم مولکولی ماده مورد مطالعه، ضریب هنری متناظر با آن و ضرایب انتقال از فازهای مایع و گاز بستگی دارد [۱۳].

## ۲-۱-۵- محاسبه ضریب انتقال از فاز مایع: $K_1$

$K_1$  در واقع سرعت انتقال از لایه ورقه‌ای مایع است و به جنس ماده مورد مطالعه بستگی دارد. در مواردی ضرایب مورد نظر برای یک ماده مورد مطالعه با ضرایب فرایندهای متداول تخمین زده می‌شوند. برای مثال ضریب انتقال از سطح مایع با ضریب اکسیژن‌گیری تصحیح می‌شود [۱۳]

$$K_1 = K_{1,02} \left( \frac{32}{M} \right)^{0.25} \quad (7)$$

$$J_1 = K_1 (c_i - c_1) \quad (3)$$

که در این رابطه  $J_1$  شار انتقالی از حجم مایع به لایه تماس ( $\text{mole m}^{-2} \text{d}^{-1}$ )،  $K_1$  سرعت انتقال جرم از لایه ورقه‌ای مایع ( $\text{md}^{-1}$ )،  $c_i$  غلظت آلودگی در محیط تماس آب-هوا و  $c_1$  غلظت آلودگی در محیط سیال مایع ( $\text{mole m}^{-3}$ ) است. به طور مشابه برای انتقال از لایه گازی رابطه ۴ صادق است [۱۳]

$$J_g = \frac{K_g}{RT_a} (p_g - p_i) \quad (4)$$

که در این رابطه  $J_g$  شار انتقالی از حجم گاز به لایه تماس ( $\text{mole m}^{-2} \text{d}^{-1}$ )،  $K_g$  سرعت انتقال جرم از لایه ورقه‌ای گاز ( $\text{md}^{-1}$ )،  $p_i$  فشار گاز در محیط تماس آب-هوا و  $p_g$  فشار گاز در محیط سیال گاز بر حسب اتمسفر است. بر اساس قانون هنری و وجود موازنه جرمی در لایه سطحی تبادل، رابطه زیر مطرح می‌شود [۱۲ و ۱۳]

$$\frac{1}{K_{OL}} = \frac{1}{K_L} + \frac{RT_w}{HK_g} \quad (5)$$

که در این رابطه  $K_1$  سرعت انتقال برای فاز مایع<sup>۳</sup> بر حسب متر بر ثانیه،  $K_g$  سرعت انتقال هوا<sup>۴</sup> بر حسب متر بر ثانیه،  $R$  ثابت جهانی گازها،  $T_w$  دمای آب بر حسب درجه کلوین و  $H$  ضریب هنری مربوط به MTBE بر حسب  $\text{m}^3 \cdot \text{atm} / \text{mole}$  است. بر اساس رابطه ۵ ضریب انتقال تابعی از خصوصیات فاز مایع، فاز گاز و پارامتر ثابت هنری است. این ضریب در واقع سرعت تبخیر یا انتقال جرم است. مقدار  $K_g$  در مخازن بین ۱۰۰ تا ۱۲۰۰۰ متر بر روز قرار می‌گیرد. نسبت  $K_1$  به  $K_g$  میان اعداد ۰/۰۰۱ تا ۰/۰۱ قرار دارد. نسبت بالاتری در مخازن کوچک گزارش شده که ناشی از کمتر بودن  $K_g$  به دلیل ضریب پوشش باد است [۱۳]. به طور کلی، تئوری انتقال گاز دو لایه‌ای ارائه شده، در مخازن و پیکره‌های آبی راکد بسیار مناسب

<sup>1</sup> Laminar Boundary Layer

<sup>2</sup> Molecular Diffusion

<sup>3</sup> Water-side Transfer Velocity

<sup>4</sup> Air-side Transfer Velocity

<sup>5</sup> Surface Renewal Model

<sup>6</sup> Bulk Volume

<sup>7</sup> Penetration Theory

درجه سلسیوس برابر با  $10^{-6} \times 8$  است که با مقدار مشاهده شده در مطالعه هانگ در سال ۲۰۰۵ همخوانی دارد [۱۶].

۱-۲-۶- محاسبه ضریب انتقال از فاز گازی؛  $K_g$   
 $K_g$  سرعت انتقال از لایه ورقه‌ای گاز است و به سرعت باد و جنس ماده مورد مطالعه بستگی دارد. برای محاسبه ضریب انتقال از فاز گاز، روابط متعددی ارائه شده است. یکی از این روابط، اصلاح ضریب انتقال گازی با انتقال تبخیری از بخار آب است [۱۳]

$$K_g = 168U_w \left(\frac{18}{M}\right)^{0.25} \quad (11)$$

که در این رابطه  $U_w$  سرعت باد بر حسب متر بر ثانیه و  $K_g$  بر حسب متر بر روز است. رابطه بالا بر اساس ضریب انتقال لایه گازی برای بخار آب ارائه شده است. برای محاسبه  $K_g$  در مخازن، بندر و همکاران در سال ۲۰۰۳ و هیلد و همکاران در سال ۲۰۰۵ روابط زیر را ارائه نموده‌اند [۵ و ۶]

$$K_G = \left[\frac{D_G(\text{VOC})}{D_G(\text{H}_2\text{O})}\right]^{2/3} (0.0015U_{10}) \quad (12)$$

که در این رابطه  $D_G(\text{H}_2\text{O})$  و  $D_G(\text{VOC})$  به ترتیب ضریب پخشیدگی فاز هوا-آب و هوا-VOC است که برای نسبت این ضرایب، آتکین رابطه‌ای ۱۳ را ارائه نموده است [۱۷]

$$\frac{D_G(\text{VOC})}{D_G(\text{H}_2\text{O})} = \sqrt{\frac{M_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{VOC}}}} \left(\frac{T}{293.16}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (13)$$

که در این رابطه  $M_{\text{H}_2\text{O}}$  وزن مولکولی آب برابر با ۱۸ گرم بر مول و  $M_{\text{VOC}}$  وزن مولکولی MTBE برابر با ۸۸/۱۵ گرم بر مول است. همچنین استوکینگ و کاوانگ در سال ۲۰۰۰ برای محاسبه  $K_g$  در مخازن رابطه‌ای به شرح زیر ارائه نموده‌اند [۴]

$$K_g = 801U_g \text{Area}^{-0.05} \quad (14)$$

که در این رابطه  $U_g$  و  $\text{Area}$  به ترتیب سرعت باد در ارتفاع ۸ متری از سطح آب و مساحت مخزن در تراز مورد نظر هستند.

که در این رابطه

$M$  جرم مولکولی ترکیب مورد مطالعه و  $K_{1,02}$  ضریب انتقال اکسیژن است. ضریب انتقال اکسیژن در سطح آب با روابط مربوط به ضریب هواگیری اصلاح می‌شود. دیمانسیون  $K_1$  در رابطه فوق متر بر ثانیه است. روابط ضریب هواگیری (انتقال اکسیژن) در رودخانه، مخازن و سایر آب‌های ساکن به فراوانی در مراجع ارائه شده است [۱۱ و ۱۳]. رابطه دیگری برای محاسبه  $K_1$  توسط بندر و همکاران در سال ۲۰۰۳ در مخازن ارائه شده است [۶]

$$K_1 = 1.25 \times 10^{-6} \sqrt{\frac{600D_L}{v}} U_{10}^{1.64} \quad (8)$$

که در این رابطه

$v$  لزجت سینماتیک آب بر حسب سانتی‌متر مربع بر ثانیه،  $D_L$  ضریب پخشیدگی مولکولی<sup>۱</sup> بر حسب سانتی‌متر مربع بر ثانیه و  $U_{10}$  سرعت باد در ارتفاع ۱۰ متر بر حسب متر بر ثانیه است. همچنین هیلد و همکاران در سال ۲۰۰۰a نیز برای محاسبه  $K_1$  در مخازن رابطه ۹ را ارائه داده‌اند [۱۲]

$$K_1 = 0.45 \sqrt{\frac{600D_L}{v}} U_{10}^{1.64} \quad (9)$$

با توجه به روابط ارائه شده توسط هیلد و بندر، مقدار عدد حاصل از رابطه بندر برای محاسبه  $K_1$  به مقادیر گزارش شده در مراجع در مرتبه  $10^{-6}$  بسیار نزدیک بوده است [۴ و ۱۳]. لذا در این کار تحقیقاتی از رابطه بندر و همکاران در سال ۲۰۰۳ در مخزن استفاده شد. محاسبه  $K_1$  در رودخانه از رابطه ۷ و با تصحیح ضریب اکسیژن‌خواهی صورت پذیرفت [۶]. برای محاسبه  $D_L$ ، هیلد و همکاران در سال ۲۰۰۰ نیز رابطه‌ای به صورت زیر ارائه کرده‌اند [۱۵]

$$D_L = \frac{7.48 \times 10^{-8} \sqrt{2.26M_{\text{H}_2\text{O}}T_w}}{\mu V_M^{0.6}} \quad (10)$$

که در این رابطه

$T_w$  دمای آب بر حسب درجه کلون و  $\mu$  لزجت دینامیکی آب است که در رابطه هیلد و همکاران بر حسب سانتی پویز است و  $V_M$  حجم مولار MTBE در نقطه جوش بر حسب سانتی‌متر مکعب بر مول است که از تقسیم وزن مولی بر چگالی MTBE به دست می‌آید. مقدار به دست آمده برای  $D_L$  با توجه به رابطه ۱۰ برای دمای ۲۵

<sup>1</sup> Aqueous-Phase Molecular Diffusivity

در این پژوهش برای محاسبه  $K_H$  در رودخانه و مخزن به ترتیب روابط ۱۱ و ۱۲ استفاده شدند.

با توجه به قانون دالتون و رابطه ارائه شده توسط بندر و همکاران در سال ۲۰۰۳ به صورت زیر محاسبه می شود [۶]

$$P_A = 1 \times 10^{-9} C_A P_{atm} \quad (18)$$

که در این رابطه  $C_A$  غلظت MTBE موجود در اتمسفر بر حسب  $\mu\text{ppbv}$  و  $P_{atm}$  فشار اتمسفریک کل<sup>۳</sup> است که در معادلات CE-QUAL-W2 محاسبه می شود. به این ترتیب غلظت اشباع MTBE به دست می آید. بر اساس مقادیر ارائه شده در مراجع، مقدار اولیه اشباع این پارامتر کیفی 2 ppbv در این کار تحقیقاتی در نظر گرفته شد.

### ۲-۱-۹- ضرایب ته نشینی و تجزیه بیولوژیکی

با توجه به ماهیت MTBE، سرنوشت این ماده فرار متأثر از فرایندهای تجزیه بیولوژیکی و تبخیر HSJ. MTBE تمایل به انحلال در آب داشته و در برابر واکنشها مقاوم است. در مواردی از این ماده به عنوان ردیاب نیز استفاده می شود. بر اساس اطلاعات مراجع متعدد، ضریب تجزیه بیولوژیکی این ماده در این پژوهش ۰/۰۱۴ بر حسب یک بر روز در نظر گرفته شد. همچنین با توجه به تمایل به انحلال پذیری زیاد MTBE در آب و عدم گرایش به جذب و ته نشینی از ترم ته نشینی در فرایند سرنوشت و انتقال این ماده صرف نظر شد [۴، ۵، ۱۰، ۱۸ و ۲۲].

### ۳- نتایج و بحث

۳-۱- کاربرد مدل توسعه یافته در سامانه رودخانه-مخزن کرخه در این تحقیق زیر برنامه شبیه سازی سرنوشت ترکیبات آلی فرار در پیکره های آبی ساکن و در حال جریان به کد اصلی برنامه نویسی نرم افزار CE-QUAL-W2 افزوده شد. این تحقیق با به کارگیری تئوری ها و معادلات حاکم بر سرنوشت ترکیبات آلی فرار در آب های ساکن و در حال جریان، قابلیت شبیه سازی این نوع آلاینده ها را به مدل دوبعدی هیدرودینامیک افزود. برنامه نویسی در محیط اینتل و ویژوال فرترن و کد اصلی برنامه نویسی مدل CE-QUAL-W2 نسخه ۳/۵ صورت پذیرفت.

در زیر برنامه افزوده شده به کد اصلی برنامه نویسی مدل CE-QUAL-W2، ترم های زوال مرتبه صفر، زوال مرتبه یک و ته نشینی همانند آلاینده های ژنریک منظور شد. با توجه به ماهیت ساختاری ترکیبات آلی فرار، ترم تبخیر (فراپیت) نیز در سرنوشت این نوع آلاینده ها منظور و در معادلات توازن جرم این آلاینده در

### ۲-۱-۷- ضریب هنری<sup>۱</sup>

ضریب هنری به عنوان یک نتیجه حاصله در زمان تعادل دو فاز گاز و مایع تعریف می شود. در واقع نسبت تعادلی غلظت یک ماده بین فاز گاز و فاز مایع می باشد. برای محاسبه ضریب هنری در مطالعات گذشته نیز روابطی ارائه شده است [۱۸ و ۱۹].  
مقادیر بی بعد ضریب هنری دارای مقادیری در رتبه  $10^{-2} \times 1/69$  در دمای ۲۰ درجه سلسیوس است [۲۰ و ۲۱]

$$H' = 10^{(A - \frac{B}{T})} \quad (15)$$

که در این رابطه A و B به ترتیب ۹/۰۷ و ۳۱۷۸ برای دمای بین ۰ تا ۴۰ درجه سلسیوس، T دما بر حسب درجه کلین و  $H'$  ضریب هنری بی بعد است. برای بعددار کردن ضریب هنری از رابطه زیر استفاده می شود [۱۳]

$$H = H' \times R \times T \quad (16)$$

که در این رابطه  $H'$  ضریب هنری بی بعد، R ثابت جهانی گازها و H ضریب هنری بر حسب  $\text{m}^3 \cdot \text{atm} / \text{mol}$  است. مقادیر بعددار ضریب هنری در مرتبه  $10^{-4} \times 4$  در دمای ۲۰ درجه سلسیوس است که در مراجع بسیاری به این عدد اشاره شده است. در این پژوهش از رابطه ۱۶ برای محاسبه ضریب هنری استفاده شد.

### ۲-۱-۸- محاسبه میزان غلظت اشباع MTBE در آب

بر اساس قانون هنری و تبادل گازها رابطه ۱۷ مطرح می شود [۱۳]

$$H = \frac{P_A}{C_S} \rightarrow C_S = \frac{P_A}{H} \quad (17)$$

که در این رابطه PA فشار نسبی MTBE در اتمسفر، H ضریب هنری بر حسب  $\text{m}^3 \cdot \text{atm} / \text{mole}$  و  $C_S$  غلظت اشباع MTBE در آب بر حسب مول بر مترمکعب است. بدیهی است هر چه میزان فشار نسبی بیشتر باشد، مقدار بیشتری MTBE در آب حل می شود.  $P_A$  نیز بر حسب اتمسفر

<sup>2</sup> Parts Per Billion by Volume (ppbv)

<sup>3</sup> Total Atmospheric Pressure

<sup>1</sup> Henrys Law Coefficient

زیربرنامه اصلاحی گنجانده شد. با توجه به تأثیر هیدرودینامیک آبهای ساکن و در حال جریان بر معادلات سرنوشت ترکیبات آلی فرار، در زیربرنامه شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار معادلات بر اساس نوع پیکره‌آبی تعریف شد.

شبیه‌سازی سامانه رودخانه-مخزن کرخه در مدل CE-QUAL-W2 با تعریف ۱۱۴ بازه (۴۸ بازه رودخانه و ۶۶ بازه مخزن) و ۵۵ لایه تعریف شد. طول هر یک از بازه‌ها ۱۰۰۰ متر و عمق لایه‌ها بین ۱ تا حداکثر ۳ متر در نظر گرفته شد. سازه‌های آبگیر کشاورزی و نیروگاه در آخرین بازه فعال مخزن برای مدل CE-QUAL-W2 تعریف شدند. در کیلومتر ۹۴ نیز سازه تونل دشت عباس امکان برداشت از مخزن را داشته و سرریزی نیز در بازه انتهایی مخزن در تراز ۲۲۰ متر ارتفاع از سطح دریا (تراز نرمال مخزن کرخه) تعریف شد. اطلاعات مربوط به دبی ورودی و خروجی از مخزن کرخه با استفاده از داده‌های هیدرولوژیکی ایستگاه پل زال و اطلاعات شرکت توسعه منابع آب و نیروی ایران استخراج شد. داده‌های هواشناسی نیز در مقیاس ساعتی از ایستگاه دزفول (نزدیکترین ایستگاه سینوپتیک به محل طرح) استخراج شد. کالیبراسیون و صحت‌سنجی هیدرودینامیک، دما و شرایط تغذیه‌گرایی سامانه رودخانه-مخزن کرخه در دانشگاه علم و صنعت ایران انجام پذیرفت. دسترسی به جزئیات بیشتر در این خصوص با مراجعه به تحقیقات ارائه شده توسط علی‌کیا در سال ۱۳۸۲ و محمدی در سال ۱۳۸۲ امکان‌پذیر است [۲۳ و ۲۴].

به دلیل عدم دسترسی به اطلاعاتی در خصوص داده‌های واقعی ترکیبات آلی فرار به سامانه مخزن و/یا رودخانه-مخزن، کنترل درستی مدل‌سازی ترکیبات آلی فرار تنها با استفاده از کنترل معادله پیوستگی جرم در مدل صورت پذیرفت. بر اساس معادله پیوستگی جرم، مجموع جرم ترکیبات آلی فرار موجود در سامانه رودخانه-مخزن، جرم ترکیبات آلی فرار موجود در دبی خروجی از مخزن (سازه‌های آبگیر کشاورزی، نیروگاه و تونل دشت عباس)، جرم ترکیبات آلی تبخیر یافته، جرم ترکیبات آلی فرار زوال یافته ناشی از واکنش‌های بیولوژیکی با میزان جرم آلودگی ترکیبات آلی فرار ورودی از سامانه رودخانه-مخزن با خطای ناچیزی برابر است

(جدول ۱). به عبارتی جرم خروجی محاسبه شده توسط مدل با مقدار محاسبه شده بر اساس رابطه پیوستگی جرم با یکدیگر مقایسه شدند که نتایج، نشان از درستی قرارگیری معادلات گنجانده شده در زیربرنامه توسعه داده شده دارد. نکته دیگری که باید مورد توجه قرار داد، این است که توزیع زمانی و مکانی ترکیبات آلی فرار متأثر از ضرایب واکنش و پارامترهای مؤثر بر دما، هیدرودینامیک و سرنوشت این نوع آلاینده است. ضرایب و پارامترهای مؤثر در دما و هیدرودینامیک سامانه رودخانه-مخزن کرخه در فرایند کالیبراسیون و صحت‌سنجی توسط علی‌کیا در سال ۱۳۸۲ و محمدی در سال ۱۳۸۲ تدقیق شدند [۲۳ و ۲۴]. اما تدقیق سایر ضرایب واکنش و پارامترهای مؤثر در فرایند زوال بیولوژیکی و زوال ناشی از فرآیند ترکیبات آلی فرار در صورت دسترسی به داده‌های میدانی امکان‌پذیر است. برای دسترسی به این مهم (کاهش خطای تقریب غلظت مکانی و زمانی ترکیبات آلی فرار)، در این تحقیق، انتخاب این ضرایب بر اساس مقادیر موجود در مراجع معتبر علمی صورت پذیرفت (جدول ۱).

به منظور ارائه نتایج شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار توسط مدل توسعه یافته دو بعدی هیدرودینامیک و کیفیت آب، CE-QUAL-W2، سناریوی رخداد آلودگی ناگهانی MTBE به میزان ۲۰۰ مترمکعب در کیلومتر ۹۰ سامانه رودخانه-مخزن مورد بررسی قرار گرفت. ورود آلودگی نیز در روز سوم شبیه‌سازی و در فصل بهار سال ۱۳۸۲ صورت پذیرفت. در گزینه ارائه شده در این مقاله، امکان برداشت از آبگیرهای پایینی و/یا بالایی مخزن کرخه و تونل دشت عباس میسر است.

بررسی نتایج نشان می‌دهد با منظور نمودن ترم تبخیر، غلظت آلاینده MTBE در شبیه‌سازی با مدل توسعه یافته نسبت به حالت قبل کاهش می‌یابد. شکل‌های ۱ و ۲ تغییرات غلظت MTBE را قبل و بعد از اصلاح مدل در سامانه رودخانه-مخزن کرخه در برداشت آب از دریچه پایینی و بالایی به ترتیب نشان می‌دهند. همان‌طور که مشاهده می‌شود با توسعه مدل CE-QUAL-W2 در شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار، غلظت آلاینده‌های آلی فرار در اثر ترم تبخیر (فرآیند) ترکیب آلی کاهش یافته است. علاوه بر آن با برداشت

جدول ۱- اطلاعات مربوط به معادله توازن جرم در مدل CE-QUAL-W2 در آلودگی سامانه رودخانه-مخزن به مواد آلی فرار: (اعداد بر حسب گرم)

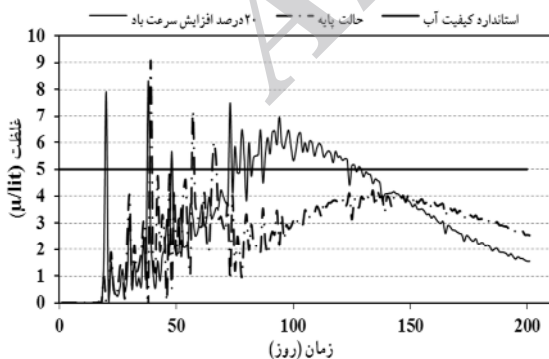
جرم خروجی	جرم خروجی از آبگیرهای کشاورزی و نیروگاه	جرم خروجی از تونل دشت عباس	جرم باقیمانده در مخزن	جرم نابود شده در اثر زوال بیولوژیکی و زوال فراریت	جرم خروجی کل (قرائت شده از مدل)	جرم ورودی به مخزن
۴۰۹۷۵۸۶	۱۴۷۷۱۶۹	۲۶۱۹۴۹۹	۳۸۹۹۸۴۶۸	۱۰۹۶۷۳۹۴۶	۴۰۹۶۶۶۸	۱۵۲۷۷۰۰۰۰

(دمای هوا، دمای آب و سرعت وزش باد) بر میزان فراریت ترکیبات آلی فرار میسر است. بر این اساس، بررسی تغییرات شرایط آب و هوایی بر پاسخ سامانه رودخانه-مخزن به ورود آلودگی ناشی از ترکیبات آلی فرار مورد مطالعه قرار گرفت.

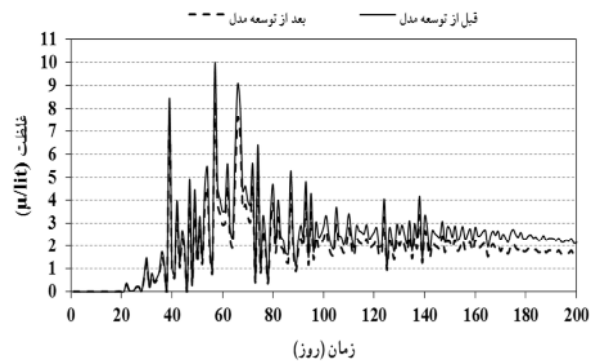
### ۳-۲-۱- سرعت وزش باد

برای بررسی اثر سرعت وزش باد بر میزان غلظت آلودگی ترکیبات آلی فرار در جریان خروجی مخزن، این پارامتر ۲۰ درصد نسبت به حالت پایه افزایش داده شد. تغییرات غلظت MTBE با افزایش سرعت باد همانند شکل ۳ است. با افزایش سرعت باد، آلاینده آلی فرار ۲۰ روز سریع تر و با غلظت بالاتر نسبت به سناریوی پایه به نقطه خروجی مخزن رسید. افزایش سرعت باد منجر به افزایش نرخ تبخیر مواد آلی فرار در روزهای اولیه پس از رخداد ناگهانی تریق آلودگی MTBE می شود. در نتیجه کاهش غلظت MTBE در لایه های سطحی منجر به تسریع فرایند پخشیدگی طولی در مخزن ناشی از تغییرات طولی غلظت می شود. به تدریج و با گذشت زمان با تداوم برداشت آب از لایه های زیرین مخزن، آلودگی وارد لایه های پایینی مخزن شده و در نتیجه نرخ حذف آلودگی از طریق فرایند تبخیر کاهش می یابد. همانگونه که اشاره شد در مجموع افزایش سرعت باد منجر به افزایش شدت تبخیر مواد آلی فرار می شود، به گونه ای که با افزایش ۲۰ درصدی سرعت باد، زمان بازپروری مخزن (زمانی که ۹۰ درصد جرم آلودگی ورودی به مخزن از سیستم خارج می شود) از ۱۹۱ روز در سناریوی پایه به ۱۶۶ روز می رسد یعنی مخزن ۲۵ روز سریع تر به حالت عادی قبل از رویداد بر می گردد. پس می توان گفت سرعت باد یک عامل مهم تأثیرگذار بر سرنوشت و انتقال آلاینده MTBE می باشد.

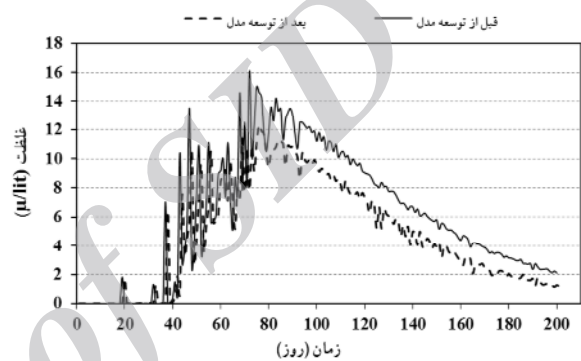
به عبارتی استفاده از عواملی چون هوادهی یا تولید باد مصنوعی در کاهش غلظت آلاینده آلی فرار و بهبود شرایط پیکره های آبی بسیار تأثیرگذار است (شکل ۳).



شکل ۳- تغییرات غلظت MTBE در اثر افزایش سرعت باد در نقطه خروجی مخزن



شکل ۱- تغییرات غلظت MTBE در خروجی مخزن قبل و بعد از توسعه مدل؛ برداشت آب از دریچه پایینی (ورود ناگهانی ۲۰۰ متر مکعب ماده آلی فرار در کیلومتر ۹۰ مخزن کرخه)



شکل ۲- تغییرات غلظت MTBE در خروجی مخزن قبل و بعد از توسعه مدل در برداشت آب از دریچه بالایی (ورود ناگهانی ۲۰۰ متر مکعب ماده آلی فرار در کیلومتر ۹۰ مخزن کرخه)

آب از دریچه بالایی، تأثیر بیشتری بر کاهش غلظت ترکیبات آلی فرار در خروجی مخزن نسبت به برداشت آب از آبگیر پایینی مشاهده می شود. زیرا با برداشت آب از آبگیر بالایی عملاً برداشت ها از لایه های بالایی مخزن انجام می شود. چون فرایند تبخیر ترکیب آلی فرار در لایه سطحی تماس آب با هوا انجام و تأثیر آن در لایه های بالایی مجاور مشهودتر است، در نتیجه تفاوت غلظت نیز قابل ملاحظه تر می شود. نکته دیگر اینکه با برداشت از آبگیر بالایی، سرعت پخشیدگی طولی در این بازه ها نیز افزایش و امکان پخشیدگی قائم کمتر می شود، لذا جرم بیشتری از آلودگی در لایه سطحی و در تماس با هوا تبخیر می شود. این در حالی است که با برداشت از آبگیر پایینی، پخشیدگی قائم افزایش یافته و با هدایت مسیر آلودگی به لایه های پایینی امکان تبخیر ترکیب آلی فرار کاهش می یابد (شکل های ۱ و ۲).

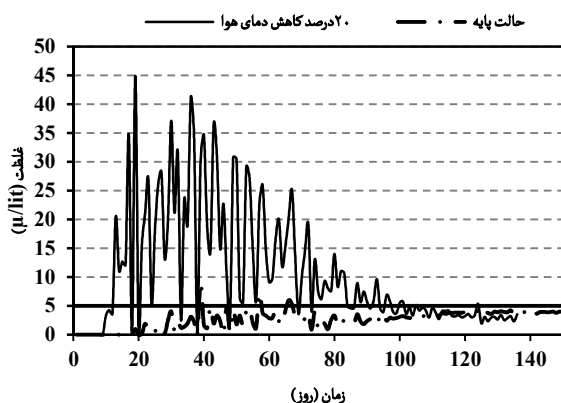
### ۳-۲- تحلیل حساسیت

با توسعه مدل CE-QUAL-W2 و افزودن توانایی شبیه سازی ترکیبات آلی فرار، امکان بررسی تأثیرات شرایط آب و هوایی



### ۳-۲-۲- دمای آب

می‌شود. پس به‌طور کلی می‌توان گفت کاهش دمای هوا باعث کاهش سرعت انتقال کل، کاهش نرخ تبخیر ماده آلی فرار و در نتیجه افزایش غلظت آلاینده می‌شود. با توجه به شکل ۵، کاهش دمای هوا به‌طور کلی منجر به افزایش غلظت آلاینده می‌شود و همچنین آلاینده ۲۶ روز زودتر نسبت به حالت پایه به غلظتی بیشتر از حد استاندارد در نقطه خروجی می‌رسد و ۵۷ روز دیرتر به کمتر از حد مجاز می‌رسد. با کاهش دمای هوا نیز جرم آلودگی باقیمانده در مخزن نسبت به حالت پایه افزایش می‌یابد (شکل ۵).



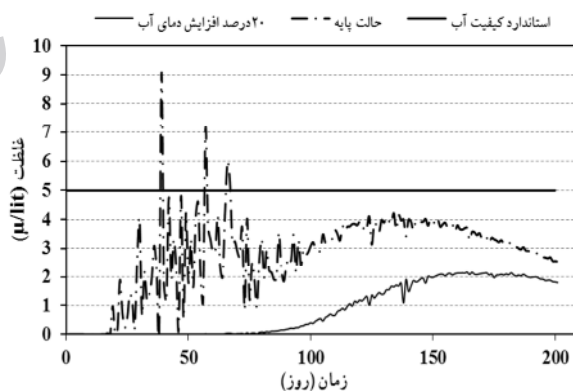
شکل ۵- تغییرات غلظت MTBE در اثر کاهش دمای هوا در نقطه خروجی مخزن

مقایسه کلی تأثیر شرایط محیطی بر سرنوشت و انتقال ماده آلی فرار MTBE در جدول ۲ ارائه شد. با توجه به نتایج جدول، با افزایش سرعت باد و در پی آن افزایش نرخ تبخیر ماده آلی فرار، به‌طور کلی غلظت بیشینه ماده آلی فرار در آبگیر خروجی نسبت به سناریوی شرایط پایه کاهش می‌یابد. اما با توجه به اینکه با افزایش سرعت باد، نرخ تبخیر ماده آلی فرار و حذف آلودگی در مخزن افزایش می‌یابد، فرایند پخشیدگی طولی تسریع می‌شود و آلودگی سریع‌تر به نقطه خروجی می‌رسد. در نتیجه، زمان بازپروری مخزن نسبت به سناریوی شرایط پایه کاهش می‌یابد. همچنین نوسانات غلظت خروجی ماده آلی فرار متأثر از تشدید نوسانات سرعت باد، نسبت به سناریوی شرایط پایه افزایش می‌یابد.

با افزایش دمای آب، میانگین، بیشینه و انحراف از استاندارد غلظت MTBE در آبگیر خروجی مخزن نسبت به سناریوی شرایط پایه کاهش می‌یابد. افزایش دمای آب ورودی مخزن منجر به افزایش دمای آب مخزن و به تبع آن، افزایش نرخ تبخیر ماده آلی فرار شده و در نتیجه غلظت آلودگی ماده آلی فرار در مخزن و آبگیر خروجی مخزن کاهش می‌یابد. با کاهش میزان غلظت MTBE خروجی از آبگیر، میزان نوسانات غلظت در این حالت نسبت به حالت پایه نیز کاهش می‌یابد. کاهش دمای هوا نیز میانگین، بیشینه

برای بررسی اثر دمای سطحی آب رودخانه-مخزن بر میزان غلظت آلودگی خروجی از مخزن، این پارامتر ۲۰ درصد نسبت به حالت پایه افزایش داده شد. تغییرات غلظت MTBE با افزایش دمای آب نسبت به حالت پایه به‌صورت شکل ۴ است. با افزایش ۲۰ درصدی دمای سطح آب، غلظت آلاینده کاهش می‌یابد زیرا افزایش دمای آب نرخ تبخیر ماده آلی فرار (MTBE) را در سطح مخزن افزایش می‌دهد و همین امر باعث کاهش غلظت آلودگی می‌شود. همچنین افزایش دمای آب منجر به کاهش زمان بازپروری مخزن (زمانی که ۹۰ درصد جرم آلودگی ورودی به مخزن از سیستم خارج می‌گردد) می‌شود و در اینجا زمان باز پروری را ۲۰ روز نسبت به سناریوی پایه کاهش می‌دهد. بر اساس نتایج حاصل، جرم آلودگی موجود در مخزن در پایان دوره شبیه‌سازی نیز نسبت به حالت پایه کاهش می‌یابد.

بررسی نتایج در سناریوهای مورد بررسی نشان می‌دهد با گذشت زمان از وقوع ورود ناگهانی آلودگی، نقش تبخیر ماده آلی فرار در حذف آلودگی در طی زمان کاهش می‌یابد. دلیل این رویداد، پخش و انتقال آلودگی به عمق مخزن است. روند کاهش شدت تبخیر ماده آلی فرار، خصوصاً در سناریوهای برداشت آب از آبگیر/آبگیرهای تحتانی صورت می‌گیرد، بیشتر است (شکل ۴).



شکل ۴- تغییرات غلظت MTBE در اثر افزایش دمای آب در نقطه خروجی مخزن

### ۳-۲-۳- دمای هوا

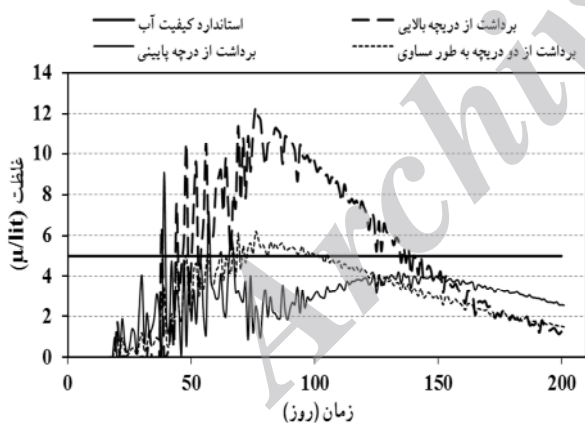
در این قسمت برای بررسی اثرات دمای هوا بر روی توزیع زمانی و مکانی غلظت آلاینده MTBE، دمای هوا ۲۰ درصد کاهش داده شد. با توجه به روابط ارائه شده، دمای هوا رابطه مستقیم با سرعت انتقال فاز گاز ( $K_g$ ) دارد و کاهش دمای هوا منجر به کاهش سرعت انتقال فاز گازی می‌شود و در نتیجه سرعت انتقال کل ( $K_{OL}$ ) نیز کاهش می‌یابد. از طرفی کاهش دمای هوا منجر به کاهش دمای آب نیز

جدول ۲- مقایسه مقادیر توابع آماری از غلظت MTBE خروجی از مخزن در شرایط متفاوت آب و هوایی با شرایط پایه

سناریو	میانگین	انحراف استاندارد	بیشینه	زمان بازپروری مخزن
سناریوی شرایط پایه	۲/۷۸	۱/۰۹	۹/۰۸	۱۹۱
افزایش سرعت باد	۳/۳۱	۱/۶۸	۸/۳۲	۱۶۶
افزایش دمای آب	۰/۸۵	۰/۸۳	۲/۱۶	۱۷۰
کاهش دمای هوا	۷/۳۳	۷/۶۳	۴۴/۹	۱۸۳

آلودگی در لایه‌های سطحی خصوصاً در دوره‌های ابتدایی تزریق آلودگی، هنوز این آلودگی به لایه‌های پایینی وارد نشده و در نتیجه غلظت آلودگی خروجی از مخزن کاهش می‌یابد. به این ترتیب جرم آلودگی باقیمانده در مخزن و زمان بازپروری آن بیش از حالتی است که برداشت کاملاً از آبگیر بالایی صورت می‌پذیرد.

با برداشت همزمان هر دو آبگیر فوقانی و تحتانی، موازنه‌ای میان غلظت خروجی از مخزن و زمان بازپروری مخزن پدید می‌آید. به عبارتی روشن‌تر در گزینه‌ای که برداشت مساوی از هر دو آبگیر صورت می‌پذیرد، زمان بازپروری مخزن نسبت به گزینه‌ای که برداشت کاملاً از آبگیر پایینی صورت می‌پذیرد، کاهش می‌یابد اما تعداد تخطی از غلظت استاندارد افزایش می‌یابد (شکل ۶). جدول ۳ اطلاعات مربوط به جرم باقیمانده در مخزن، جرم خارج شده از طریق آبگیرهای برداشت آب مخزن و زمان بازپروری مخزن در حالت‌های برداشت انتخابی از آبگیرهای مخزن ارائه شده است.



شکل ۶- تغییرات غلظت MTBE در آبگیر خروجی مخزن؛ سناریوی برداشت انتخابی از آبگیرهای مختلف

### ۳-۲-۵- میزان رهاسازی از مخزن

یکی دیگر از عواملی که در میزان غلظت آلودگی خروجی از مخزن تأثیر دارد، عامل میزان رهاسازی از مخزن است. با افزایش میزان دبی خروجی از مخزن، سرعت انتقال طولی و در نتیجه پخشیدگی طولی افزایش می‌یابد. در نتیجه جرم آلودگی در بازه زمانی

و انحراف استاندارد را افزایش می‌دهد. کاهش دمای هوا منجر به کاهش دمای آب ورودی به مخزن و در نتیجه دمای آب موجود در مخزن می‌شود. با کاهش دمای آب و همچنین دمای هوا، نرخ تبخیر ماده آلی فرار کاهش و در نتیجه غلظت آلاینده آلی فرار افزایش می‌یابد. همانگونه که نتایج جدول ۲ نشان می‌دهد، کاهش دمای هوا منجر به افزایش غلظت ماده آلی فرار در مخزن و در نتیجه افزایش غلظت خروجی آبگیر مخزن می‌شود.

در ادامه به منظور بررسی تأثیر نحوه بهره‌برداری بر کیفیت آب خروجی، دو عامل محل و میزان برداشت آب از مخزن نیز مورد بررسی قرار گرفت.

### ۳-۲-۴- برداشت انتخابی از آبگیرهای مخزن

در حالت سناریوی پایه، برداشت آب تنها از دریچه پایینی صورت می‌گیرد اما در این قسمت با برداشت آب از دریچه‌های مختلف به بررسی تأثیر نحوه رهاسازی از مخزن بر میزان آلودگی خروجی پرداخته شد.

بررسی سناریوهای تراز برداشت آب بر غلظت آب خروجی مخزن و زمان بازپروری آن در کرخه نشان می‌دهد که با برداشت آب از آبگیر بالایی مخزن کرخه، غلظت آلودگی در نقطه خروجی با سرعت بالاتری نسبت به سایر سناریوهای تراز برداشت آب به خروجی رسیده و غلظت در خروجی به بیش از مقدار استاندارد می‌رسد. در این سناریو به دلیل برداشت مداوم آب از لایه‌های بالایی، آلودگی موجود در این لایه‌های محاسباتی (لایه‌های فوقانی مخزن) فرصت تبخیر نیافته و از طریق خروجی آبگیر از مخزن خارج می‌شوند. زمان بازپروری مخزن در این سناریو ۵ روز کوتاه‌تر از حالتی است که برداشت آب کاملاً از آبگیر پایینی صورت می‌پذیرد. همچنین جرم آلودگی باقیمانده در مخزن در این سناریو نسبت به سناریوی برداشت از آبگیر پایینی مخزن ۸ درصد کمتر است.

هنگامی که برداشت آب از آبگیر پایینی صورت می‌پذیرد در واقع به آلودگی‌های (مواد آلی فرار) واقع در لایه سطحی امکان و فرصت تبخیر بیشتری داده شده و در نتیجه امکان تبخیر MTBE بیشتر فراهم می‌شود. از طرف دیگر به دلیل مسیر طبیعی حرکت

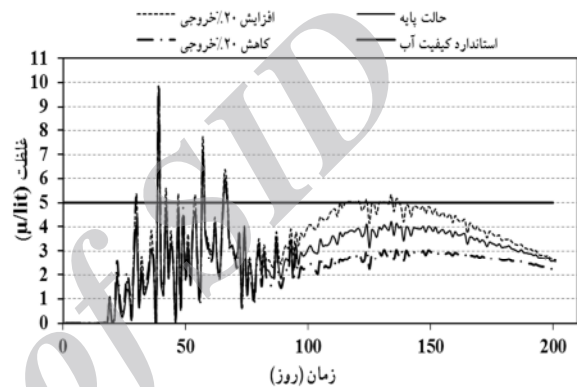
جدول ۳- اطلاعات مربوط به جرم آلودگی و زمان بازپروری در برداشت از دریچه‌های مختلف

سناریو	جرم خروجی از آبگیرهای بدنه (گرم)	جرم باقیمانده در مخزن (گرم)	زمان بازپروری مخزن (روز)
برداشت از آبگیر فوقانی	۵۵۹۰۸۱۳	۲۹۶۶۳۸۹	۱۸۵
برداشت مساوی از هر دو آبگیر مخزن	۳۴۸۴۴۶۳	۳۴۱۹۶۵۸	۱۸۹
برداشت از آبگیر تحتانی	۳۲۴۴۶۶۵	۳۲۲۳۵۷۷	۱۹۰

جدول ۴- اطلاعات مربوط به جرم آلودگی و زمان بازپروری در میزان رهاسازی مختلف

سناریو	جرم خروجی از آبگیرهای بدنه (گرم)	جرم باقیمانده در مخزن (گرم)	زمان بازپروری مخزن (روز)
۲۰ درصد افزایش در دبی خروجی مخزن	۴۵۸۳۸۵۵	۲۸۰۰۹۱۰	۱۸۹
۲۰ درصد کاهش در دبی خروجی مخزن	۲۱۸۲۴۴۷	۳۵۶۱۹۲۱	۱۹۱
شرایط پایه	۳۲۴۴۶۶۵	۳۲۲۳۵۷۷	۱۹۰

CE-QUAL-W2 برای شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرآر در پیکره‌های آبی ساکن و متحرک (مخزن و رودخانه) توسعه داده شد. به‌منظور ارزیابی عملکرد مدل، از رابطه توازن جرم، مقادیر جرم خروجی از مخزن با مقدار شبیه‌سازی شده توسط مدل مورد مقایسه قرار گرفت که نشان از درستی معادلات و روابط توسعه داده شده در مدل داشت. در این مطالعه، پاسخ سامانه رودخانه-مخزن کرخه در اثر ورود ناگهانی ۲۰۰ مترمکعب MTBE (واژگونی ناگهانی کامیون‌های حاوی MTBE) و نیز تأثیر بهره‌برداری از مخزن (میزان و محل برداشت آب) و شرایط محیطی (دمای هوا، سرعت وزش باد و دمای آب) بر کیفیت آب خروجی مخزن، مورد بررسی قرار گرفت. به‌دلیل قابلیت‌های مدل دوبعدی هیدرودینامیک و کیفیت آب CE-QUAL-W2 در شبیه‌سازی پارامترهای کیفی متعدد، در نظر گرفتن اندرکنش میان پارامترهای کیفی، منظور نمودن شرایط بی‌هوازی و دارا بودن الگوریتم برداشت انتخابی در آبگیرها و سازه‌های هیدرولیکی مخازن و پیکره‌های آبی، توسعه این مدل در این کار تحقیقاتی مورد توجه قرار گرفت. اگرچه به دلیل عدم دسترسی به داده‌های میدانی امکان کالیبراسیون و صحت‌سنجی توسعه مدل شبیه‌سازی ممکن نشد، اما با استفاده از رابطه پیوستگی جرم و محاسبه جرم خروجی ماده آلی فرآر از مخزن و مقایسه آن با خروجی مدل و نیز انتخاب پارامترهای کالیبراسیون بر اساس مراجع معتبر، درستی به‌کارگیری معادلات و اصلاحات صورت پذیرفته در کد برنامه‌نویسی نرم‌افزار مورد آزمون قرار گرفت و صحت این معادلات و روابط تأیید شد. در ادامه این مطالعات، توسعه مدل CE-QUAL-W2 برای شبیه‌سازی سایر فرایندهای مؤثر در سرنوشت آلاینده‌های آلی فرآر چون جذب به رسوبات، اکسیداسیون، هیدرولیز و غیره به‌صورت معادلاتی مجزا و مستقل در فرایند زوال توصیه می‌شود. همچنین افزودن قابلیت شبیه‌سازی سایر ترکیبات نفتی به مدل CE-QUAL-W2 نیز می‌تواند از گزینه‌های پیش روی تحقیقات آتی باشد.



شکل ۷- تغییرات غلظت MTBE در آبگیر خروجی مخزن؛ سناریوی تغییر در دبی خروجی مخزن

کوتاه‌تری به نقطه خروجی مخزن رسیده و غلظت خروجی افزایش می‌یابد. از طرف دیگر خروج جرم بیشتر آلودگی از مخزن منجر به کاهش زمان بازپروری مخزن شده و نیز فرصت فرایند تیخیر برای جرم آلودگی ناشی از ماده آلی فرآر نیز کاهش می‌یابد. با افزایش میزان دبی خروجی نسبت به حالت پایه، جرم آلودگی بیشتری به لایه‌های عمقی مخزن هدایت شده و در نتیجه غلظت و نیز جرم خروجی از تونل دشت عباس نیز افزایش می‌یابد. در جدول ۴، جزئیات اطلاعات مربوط به جرم خروجی از آبگیرها، تونل دشت عباس، زمان بازپروری و غیره ارائه شده است (شکل ۷).

#### ۴- نتیجه‌گیری

با توجه به اینکه در دهه‌های اخیر ورود ترکیبات آلی فرآر به پیکره‌های آبی در کشور به‌صورت تصادفی افزایش پیدا کرده است، لزوم استفاده از مدل‌های شبیه‌سازی کیفیت آب با قابلیت شبیه‌سازی شرایط هیدرودینامیک و کیفیت مخازن و سایر پیکره‌های آبی ضروری به‌نظر می‌رسد. از این رو در این کار تحقیقاتی مدل دوبعدی هیدرودینامیک و کیفیت آب

1. Saadatpour, M., and Afshar, A. (2013). "Multy objective simulation-optimization approach in pollution spill response management model in reservoirs." *Water Resource Managemnt*, 27, 1851-1856.
2. Anderson, M. (1997). *Predicted MTBE concentrations in the eastside reservoir*, Report to the Metropolitan Water District of Southern California; University of California: Riverside, CA.
3. Mc Card, S.A., and Schladow, S.G. (1998). *Health and environmental assessment of MTBE*, Report to the Governor and Legislature of the State of California as sponsored by SB 521, University of California and US Toxic Substances Research and Teching Program, Davis, CA, Vol. 1V, Part 5.
4. Stocking, A. J., and Kavanaugh, M. C. (2000). "Modeling volatilization of MTBE from standing surface waters." *J. Environ. Eng.*, 126 (12), 1131-1136.
5. Heald, P., Schladow, S. G., Reuter, J., and Allen, B. (2005). "Modeling MTBE and BTEX in lakesand reservoirs used for recreational boating." *Environ. Sci. Technol*, 39, 1111-1118.
6. Bender, D. A., Asher, W. E., and Zogorski, J. S. (2003). *LakeVOC-A deterministic model to estimate volatile organic compound concentrations in reservoirs and lakes*, U.S. Geological survey Open-File Report 03-212U, 283 P., USA.
7. Lewis, W.K., and Whitman, W.G. (1924). "Principles of gas adsorption." *Industiral Engineering Chemistry*, 16(12), 1215-1220.
8. Shokri, A. (2011). "Multi-objective quantity-quality reservoir operation in sudden pollution." MSc Thesis, Dept. of Irrigation and Reclamution, University of Tehran, Tehran. Iran. (In Persian)
9. Chung, S. W., and Gu, R. R. (2009). "Prediction of the fate and transport processes of atrazine in a reservoir." *Environmental Management*, 44, 46-61.
10. Robbins, G. A., and Gilbert, E. J. (2000). "MTBE: A conservative tracer for estimating biodégradation and hydrodynamic dispersion at underground storage tank sites." *Tracers and Modelling in Hydrogeology Proceedings of the Tram'2000 Conference*, IAHS Pub., Belgium, 262, 235-240.
11. Cole, T.M., and Wells, S.A. (2008). *User's guide for CE-QUAL-W2: A two-dimensional, laterally averaged, Washington, DC. hydrodynamic and water quality model, Version 3.5*. U.S. Army Corps of Eng, Draft File Report, 20314-1000.
12. Heald, P.C., Schladow, S.G., Reuter, J.E., and Allen, B.C. (2000). "Modeling MTBE and BTEX in lakes and reservoirs used for recreational boating." *Environmental Science and Technology*, ES035141Q, Supporting Information Appendix 1
13. Chapra, S.D. (1997). *Surface water quality modeling*, 1<sup>th</sup> Ed., Mc Graw-Hill, Inc., New York.
14. Socolofsky, S. A., and Jirka, G. H. (2005). *Special topics in mixing and transport processes in the environment*, 5<sup>th</sup> Ed., Coastal and Ocean Engineering Division, Texas A&M University, College Station, TX 77843-3136.
15. Heald, P.C., Schladow, S.G., Reuter, J.E., and Allen, B.C. (2000b). "Modeling MTBE and BTEX in lakes and reservoirs used for recreational boating." *Environmental Science and Technology ES035141Q*, Supporting Information Appendix 2.

16. Hung H. W. (2005). "Remediation of MTBE contaminated groundwater using adsorbent based permeable reactive barriers." Doctorial Dissertation in National Cheng Kun University, Tainan, Taiwan.
17. Atkins, P.W. (1986). *Physical chemistry*, W.H. Freeman and Co., New York.
18. Rathbun, R. E. (2000). "Transport, behavior, and fate of volatile organic compounds in streams." *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 30, 129-295.
19. Robbins, G.A., Wang, S., and Stuart, J. D. (1993). "Using the static headspace method to determine Henry's Law constants." *Anal.Chem.*, 65, 3113-3118.
20. Fischer, A., Muller, M., and Klasmeier, J. (2004). "Determination of henry's law constant for methyl tert-butyl ether (MTBE) at groundwater temperatures." *Chemosphere*, 54, 689-694.
21. Staudinger, J., and Roberts, P. V. (2001). "A critical compilation of Henry's law constant temperature dependence relations for organic compound in dilute aqueous solutions." *Chemosphere*, 44, 561-576.
22. Kinner, N. E. (2001). *Fate, transport and remediation of MTBE*, Testimony before the United States Senate Committee on Environment and Public Works, Salem NH.
23. Alikia, H. (2002). "Rever-reservoir water quality simulation model to analyse total maximum daily loads, Karkheh system as case study." MSc Thesis, Dept. of Civil Engineering, Iran University of Science and Tech., Tehran, Iran. (In Persian)
24. Mohamadi, H. (2002). "Two dimalional reservoir eutrophication modeling." MSc Thesis, Dept. of Civil Engineering, Iran University of Science and Tech., Tehran, Iran. (In Persian)