



مدل‌سازی جابجایی آلاینده‌های آب بر مبنای الگو فرارفت - انتشار - واکنش با کد پایتون

رامین زارع*

گروه بهداشت، دانشگاه آزاد اسلامی واحد اراک، دانشگاه آزاد اسلامی، اراک، ایران

چکیده مبسوط

مقدمه: امنیت آب به طور فزاینده‌ای در سراسر جهان در خطر است. اثربخشی در مدیریت منابع آب، مقابله با آلودگی‌های زیست‌محیطی، و آماده‌سازی برای تغییرات آب‌وهوایی، به توانایی در پایش، مدل‌سازی و کاهش انواع مخاطرات آب بستگی دارد. تجزیه و تحلیل داده‌ها در بخش آب و محیط‌زیست، اکتشاف علمی، استفاده از فناوری و در نظر گرفتن پدیده‌های طبیعی را یکپارچه می‌کند. با این حال، تجزیه و تحلیل داده‌ها در بخش آب و محیط‌زیست بدون چالش نیست. این چالش‌ها مستلزم اصلاح مداوم روش‌ها و تکنیک‌ها، با تأکید بر ماهیت پویا و در حال تحول این رشته است.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۱۱/۱۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۲/۲۸

مواد و روش‌ها: ابتدا پایتون به عنوان یکی از محبوب‌ترین زبان‌ها برای کاربرد در هیدرولوژی و محیط‌زیست توصیف می‌شود. سپس انواع داده‌های هیدرولوژیکی شامل داده مکانی، زمانی، ویژگی‌ها و داده نهایی یا خروجی مدل ارائه می‌شوند. در ادامه به مدل‌سازی داده‌های هیدرولوژیکی با استفاده از پایتون پرداخته می‌شود و مدل جابجایی آلاینده‌ها - مدل دو بعدی فرارفت - انتشار - واکنش به عنوان نمونه برنامه‌نویسی و اجرا می‌شود.

نتایج و بحث: نتایج نشان داد مدل واکنش - انتشار، افزایش مداوم مقدار غلظت را نشان می‌دهد که مقدار میانگین دارای شیب مثبت است و به سرعت تا حدود ۰/۳ افزایش می‌یابد. بزرگی‌ها در مدل فرارفت - واکنش، به وضوح بالاتر از مدل فرارفت تعمیم‌یافته - انتشار - واکنش است.

واژه‌های کلیدی: هیدرولوژی، پایتون، مدل‌سازی فرارفت، انتشار، واکنش، آلاینده‌ها

نتیجه‌گیری: در این مطالعه، یک مدل انتشار، فرارفت آلاینده نشان داده شد که در آن آلاینده‌ها تحت فرارفت، انتشار و واکنش قرار گرفتند. کدهای مدل فرارفت - انتشار - واکنش قابل اجرا می‌باشد. این فایل‌ها فرمت‌های فایل منبع باز هستند که می‌توانند بارگذاری شوند. این مدل با تغییراتی در سایر محیط‌های آبی در مکان‌ها، زمان‌ها و ویژگی‌های مختلف نیز قابل اجرا می‌باشد.

نویسنده مسئول: رامین زارع

نشانی: گروه بهداشت، دانشگاه آزاد اسلامی واحد اراک، دانشگاه آزاد اسلامی، اراک، ایران | تلفن: ۰۹۱۸۳۶۱۸۲۹۷ | پست الکترونیکی: ramin1zare@gmail.com

استناد: زارع رامین. مدل‌سازی جابجایی آلاینده‌های آب بر مبنای الگو فرارفت - انتشار - واکنش با کد پایتون. پژوهش‌های نوین در مهندسی محیط زیست. ۱۴۰۳؛ ۲(۸): ۲۷-۴۳.
حقوق نویسندگان محفوظ است. این مقاله با دسترسی آزاد و تحت مجوز مالکیت خلاقانه <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0> در فصلنامه پژوهش‌های نوین در مهندسی محیط زیست منتشر شده است. هرگونه استفاده غیرتجاری فقط با استناد و ارجاع به اثر اصلی مجاز است.



مقدمه

امنیت آب به طور فزاینده‌ای در سراسر جهان در خطر است. آب زیاد سیلاب‌ها را ایجاد می‌کند، کم‌آبی باعث خشکسالی می‌شود یا کیفیت پایین آب که بر سلامتی تأثیر می‌گذارد و غیره، می‌تواند زندگی، اقتصاد و اکوسیستم‌ها را به خطر بیندازد. به منظور شناسایی، نظارت و کاهش این مشکلات متنوع در آب و محیط‌زیست، به اطلاعات قابل اجرا بر اساس داده‌ها نیاز است. تجزیه و تحلیل داده‌ها بخش مهمی از درک روابط پیچیده و چند بعدی بین سیستم‌های آبی و محیط‌های اطراف آن‌ها است. این روابط از طریق ترکیبی از علم، مهندسی و فناوری بررسی می‌شود که به کشف اطلاعات جدید مرتبط با تأثیر آب و محیط‌زیست بر زندگی انسان کمک می‌کند. اثربخشی در مدیریت منابع آب، مقابله با آلودگی‌های زیست‌محیطی و آماده‌سازی برای تغییرات آب‌وهوایی، به توانایی در نظارت، مدل‌سازی و کاهش انواع مخاطرات آب بستگی دارد.

آب، حیات را حفظ می‌کند و یکی از ارزش‌ترین منابع کره زمین است. این به‌عنوان یک حلقه جدایی‌ناپذیر در زنجیره وسیع اکوسیستم عمل می‌کند که به زندگی امکان تداوم، رشد و بالندگی می‌دهد. عوامل محیطی مختلف، مانند سازندهای زمین‌شناسی و فعالیت‌های انسانی، بر کیفیت در دسترس بودن و توزیع آب تأثیر می‌گذارند. این تبادلات منجر به یک اکوسیستم دائماً در حال تکامل می‌شود که نظارت مداوم بر این رابط آب و محیط را ضروری می‌سازد. درک الگوها، روندها و روابط در داده‌ها می‌تواند در استنتاج وضعیت و عملکرد سیستم‌های آب و محیط‌زیست، تعاملات آن‌ها و اثرات بالقوه تغییرات در یک سیستم بر سیستم دیگر کمک کند. تجزیه و تحلیل داده‌ها کمک می‌کند اثرات نشت نفت بر روی آب‌های ساحلی ارزیابی شوند، تغییرات فصلی در جریان رودخانه مورد مطالعه قرار گیرند، یا سناریوهای آینده افزایش سطح دریا را به‌دلیل گرمایش جهانی مدل‌سازی شوند.

تجزیه و تحلیل داده‌ها در بخش آب و محیط‌زیست شامل ترکیبی از روش‌ها و فن‌آوری‌ها، از تکنیک‌های آماری سنتی تا الگوریتم‌های پیشرفته یادگیری ماشین است. کاوش و تفسیر پدیده‌های پیچیده مرتبط با آب و محیط‌زیست، به داده‌های به‌دست آمده از منابع مختلف، مانند تصاویر ماهواره‌ای، ایستگاه‌های هواشناسی، شبکه‌های حسگر و پایگاه‌های داده‌های اجتماعی-اقتصادی وابسته است. با استفاده از قدرت محاسباتی و الگوریتم‌ها، می‌توان حجم وسیعی از داده‌ها را پردازش و تجزیه و تحلیل کرد که منجر به بینش‌های عملی برای دانشمندان،

سیاست‌گذاران و ذی‌نفعان می‌شود. تجزیه و تحلیل داده‌ها کمک می‌کند تا تأثیر فعالیت‌های انسانی مانند آلودگی صنعتی، جنگل‌زدایی، صید بی‌رویه و شهرنشینی کنترل نشده بر آب و محیط‌زیست را درک کرد. چنین بینش‌هایی به تدوین سیاست‌های بهتر و استراتژی‌های موثر برای توسعه پایدار، مدیریت آب و حفاظت از محیط‌زیست کمک می‌کند. تجزیه و تحلیل داده‌ها به بهینه‌سازی منابع و مدل‌سازی پیش‌بینی برای سناریوهای آینده کمک می‌کند. بنابراین تجزیه و تحلیل داده‌ها باعث می‌شوند توانایی پیش‌بینی و کاهش خطرات فراهم شود، از فرصت‌ها برای رشد پایدار استفاده کرد و تعادل بهتری بین نیازهای انسانی و حفظ محیط‌زیست ایجاد نمود. با این حال، تجزیه و تحلیل داده‌ها در بخش آب و محیط‌زیست بدون چالش نیست. کیفیت و یکپارچگی داده‌ها، پیچیدگی سیستم‌های محیطی، عدم قطعیت ذاتی در بسیاری از انواع داده‌های زیست‌محیطی و نیاز به رویکردهای چند رشته‌ای از جمله بسیاری از مسائلی است که تحلیل‌گران باید با آن دست و پنجه نرم کنند. این چالش‌ها مستلزم اصلاح مداوم روش‌ها و تکنیک‌ها، با تأکید بر ماهیت پویا و در حال تحول این رشته است. با توجه به قابلیت‌های پایتون در محاسبات آماری، انتظار می‌رود طراحی و اجرای مدل‌های هیدرولوژیکی و حمل‌ونقل آلاینده‌های آبی با کدهای پایتون روند روزافزونی داشته باشند، هرچند تاکنون تحقیقات اندکی در این مورد صورت گرفته است. در یک مطالعه، حمدی *ا.* (۲۰۰۷)، یک طرح عددی مبتنی بر ترکیب چند جمله‌ای لوکاس و فیبوناچی برای معادلات فرارفت - انتشار - واکنش غیرخطی یک‌بعدی و دو بعدی ارائه کردند. در ابتدا، معادله دیفرانسیل جزئی داده شده (PDE)^۱ با استفاده از روش تفاضل محدود و طرح وزنی به‌شکل گسسته کاهش می‌یابد. پس از آن، توابع مجهول با چند جمله‌ای لوکاس تقریب و مشتقات آن‌ها با چند جمله‌ای فیبوناچی تقریب شده‌اند. با کمک این تقریب‌ها، PDE غیرخطی به سیستمی از معادلات جبری تبدیل می‌شود که به راحتی قابل حل است. همگرایی روش به‌صورت تئوری و همچنین عددی بررسی شد. عملکرد روش پیشنهادی با کمک برخی از مشکلات تست تایید شد. کارایی تکنیک از نظر ریشه میانگین مربع (RMS)^۲ و هنجارهای خطا مورد تایید قرار گرفت. در مطالعه دیگر علی *آی* و همکاران (۲۰۲۱) مشکل تعیین منابع آلودگی در یک رودخانه را با استفاده از اندازه‌گیری‌های مرزی مورد بررسی قرار دادند. مدل ریاضی یک معادله فرارفت - انتشار

۱- Partial Differential Equations

۲- Root Mean Square

نتایج نشان داد که هرچه تعداد تقسیم بندی های رودخانه بیشتر باشد، دقت حل بالاتر می رود و دو حل تحلیلی و عددی دارای انطباق خوبی با یکدیگر هستند. تجزیه و تحلیل داده ها در بخش آب و محیط زیست، اکتشاف علمی، استفاده از فناوری و در نظر گرفتن پدیده های طبیعی را یکپارچه می کند. این فرآیند شامل ورود به مجموعه داده های چالش برانگیز و کشف جزئیات فرآیندهای محیطی است. این یک سفر اکتشافی، حل مشکل و ایجاد تأثیر است که در عصری که با تغییرات محیطی، تغییرات آب و هوایی، کاهش منابع و افزایش نیازهای انسانی مشخص شده، حیاتی است.

- واکنش دو بعدی در حالت ثابت است. قابلیت شناسایی و نتایج پایداری محلی Lipschitz ایجاد شد. یک تابع هزینه که مسئله معکوس را به یک بهینه سازی تبدیل می کند، پیشنهاد شد. این تابع هزینه نشان دهنده تفاوت بین دو راه حل محاسبه شده از داده های تجویز شده و اندازه گیری شده است. نتایج عددی برای یک دامنه مستطیلی انجام شد و با نتایج به دست آمده با استفاده از روش کلاسیک منظم شده حداقل مربعات مقایسه گردید. در داخل کشور نیز فردادی و همکاران (۱۴۰۰) مطالعه ای با هدف انتقال آلودگی در رودخانه ها توسط معادله دیفرانسیل جزئی جابجایی - پراکندگی - واکنش (ADRE)^۲ انجام داد. در این مطالعه با حل دستگاه معادلات، مقدار غلظت آلاینده محاسبه شد.

مواد و روش ها

پایتون

پایتون به عنوان یکی از محبوب ترین زبان ها برای کاربرد در هیدرولوژی، محیط زیست و آب و هوا ظاهر شده است. در این تحقیق، ابتدا اصول پایتون، مزایای آن، اهمیت محیط های برنامه نویسی یکپارچه مانند ژوپیتر^۴، توزیع آناکوندا پایتون^۵ و قوانین نوشتاری درون یک زبان برنامه نویسی یا سینتکس^۶ اصلی برنامه نویسی مرتبط با قابلیت های عملکردی پایتون و آمادگی آن برای مدیریت چندین ساختار داده بیان می شود. همچنین به قابلیت های دستکاری داده های ارائه شده توسط کتابخانه همه کاره پایتون - پانداس^۷ به همراه تصویری از کتابخانه قدرتمند و جامع گرافیکی مت پلات لایب^۸ اشاره می گردد. در ادامه فرآیند مدل سازی آماری در محیط زیست ارائه می گردد. در این مورد می توان از کتابخانه هایی مانند اسکاپی^۹، استاتس مدلز^{۱۰} و سایکیت لرن^{۱۱} برای انجام برازش منحنی، تحلیل رگرسیون و برازش مدل های سری زمانی استفاده نمود. پایتون محبوب ترین زبان برنامه نویسی در دنیای تجزیه و تحلیل داده است و اهمیت روزافزون داده ها، تسلط بر پایتون را به مهارتی مهم تبدیل کرده

است. به دلیل سادگی و خوانایی کد، پایتون یک انتخاب محبوب در بین مبتدیان و حرفه ای ها است. مجموعه گسترده ای از کتابخانه ها آن را به ابزاری عالی برای کارهایی از تجزیه و تحلیل داده ها و یادگیری ماشینی گرفته تا تجسم و توسعه وب تبدیل می کند. شروع کار با پایتون مستلزم راه اندازی یک محیط مناسب است. مبتدیان ممکن است آناکوندا^{۱۲} را ترجیح دهند، پلتفرمی که به راحتی پایتون را با بسیاری از کتابخانه های علوم داده ترکیب می کند. منابع آنلاین، مانند اسناد رسمی پایتون، دانش زیادی را برای خودآموزان ارائه می دهد. برای یک تجربه یادگیری ساختاریافته، چندین دوره آنلاین در پلتفرم هایی مانند کورسرا^{۱۳} و ایدکس^{۱۴} در دسترس هستند. تمرین های کدنویسی عملی در وبسایت هایی مانند هکر رنک^{۱۵} و کدکیمای^{۱۶} نیز می تواند مفید باشد. خوانایی پایتون و پشتیبانی گسترده از جامعه، مسیر یادگیری را قابل مدیریت و ارزشمند می کند. ناگفته نماند که تمرین مداوم همراه با پروژه های عملی برای تسلط بر پایتون بسیار مهم است. آماده سازی یک محیط پایتون مستلزم نصب پایتون، انتخاب یک محیط توسعه یکپارچه^{۱۷} (IDE) و نظارت بر مدیریت بسته است. پایتون را می توان از طریق پلتفرم آناکوندا و وبسایت رسمی آن

۳- Advection - Dispersion - Reaction

۴- Jupyter

۵- Anaconda Python

۶- Syntax

۷- Python - Pandas

۸- Matplotlib

۹- SciPy

۱۰- Statsmodels

۱۱- Scikit-Learn

۱۲- Anaconda

۱۳- Coursera

۱۴- edX

۱۵- HackerRank

۱۶- Codecademy

۱۷- Integrated Development Environment

نصب کرد. محیط‌های توسعه یکپارچه پای چرم^{۱۸} یا ژوپیتیر نوت‌بوک^{۱۹} غنی از ویژگی‌هایی هستند که عملکردهای قوی برای توسعه نرم‌افزار ارائه می‌دهند. ابزارهای مدیریت بسته، مانند پایپ^{۲۰} و کوند^{۲۱}، به مدیریت وابستگی‌ها^{۲۲} در سراسر کتابخانه‌ها کمک می‌کنند. محیط‌های مجازی پایتون برای حفظ وابستگی‌های خاص، ایزوله‌سازی در سطح پروژه را فراهم می‌کنند و عملکرد بدون خطا را تضمین می‌کنند. قدرت پایتون در مدل‌سازی عددی در سناریوهای مختلف مشخص شده است. شبیه‌سازی جریان تراوش و شبیه‌سازی جریان آب زیرزمینی نمونه‌هایی هستند که می‌توان با استفاده از کتابخانه‌های محدود^{۲۳} فرمول مسئله عددی را ساده کرد. همچنین کتابخانه نام پای^{۲۴} در انجام شبیه‌سازی جریان کانال و حل معادلات آب کم‌عمق دوبعدی کارآمد است. کتابخانه‌های گرافیکی مانند پای ویستا^{۲۵} و مت پلات لایب^{۲۶} در ترسیم نتایج و ایجاد تجسم‌های سه‌بعدی در مراحل مختلف کارآمد و مفید هستند. کتابخانه‌های محدود، تطبیق‌پذیری خود را در حل مشکلات حمل‌ونقل آلاینده‌ها نشان داده است. در فرمول‌بندی مسائل جابجایی دوبعدی آلاینده‌های زیست‌محیطی شامل فرارفت، انتشار و واکنش و ترکیب آن‌ها تحقیقاتی صورت گرفته است. تطبیق‌پذیری مولد شبکه‌های محدود سه‌بعدی خودکار GMSH^{۲۷} نیز هنگام ایجاد حوزه‌های محاسباتی برای شبیه‌سازی‌های مختلف تایید شده است. این بسته می‌تواند شبکه‌های محاسباتی بدون خطا و آماده برای استفاده توسط یک برنامه‌اف‌ای ام^{۲۸} ایجاد کند. ترکیبی از مستندات عمیق و طبیعت منبع باز، پایتون را به انتخابی بی‌نظیر برای مقابله با چالش‌های پیچیده در علوم محیط‌زیست تبدیل می‌کند. تمرکز بر مدیریت پایدار محیط‌زیست در سطح جهانی برجسته‌تر می‌شود.

محیط توسعه یکپارچه (IDE)

محیط توسعه یکپارچه (IDE) و محیط‌های مجازی دو جزء حیاتی برنامه‌نویسی پایتون هستند. آن‌ها ابزارهای کلیدی در جعبه ابزار توسعه‌دهنده پایتون هستند که به ساده‌سازی فرآیند توسعه، افزایش بهره‌وری و اطمینان از قابلیت اطمینان و تکرارپذیری کد

کمک می‌کنند. محیط توسعه یکپارچه یک نرم‌افزار کاربردی است که امکانات جامعی را برای برنامه‌نویسان برای توسعه نرم‌افزار فراهم می‌کند. برای توسعه‌دهندگان پایتون، استفاده از یک محیط توسعه یکپارچه مانند پای چرم، ژوپیتیر نوت‌بوک یا ویژوال استودیو کد مزایای بی‌شماری دارد. یکی از مزایای کلیدی این است که چندین ابزار و ویژگی‌های مورد نیاز برای کدگذاری را در یک رابط واحد ترکیب می‌کند. این شامل ویرایش‌گرهای متن برای نوشتن و ویرایش کد، اشکال‌زدا برای یافتن و رفع خطاها، استفاده از قواعد جمله‌سازی برای خوانایی بهتر و ویژگی‌های تکمیل خودکار است که با پیشنهاد تکمیل نام توابع، کلمات کلیدی و متغیرها در زمان صرفه‌جویی می‌کند. علاوه بر این، بسیاری از محیط‌های توسعه یکپارچه پشتیبانی داخلی برای سیستم‌های کنترل نسخه مانند گیت^{۲۹} ارائه می‌دهند که به توسعه‌دهندگان اجازه می‌دهد تغییرات را ردیابی کنند، به نسخه‌های قبلی کد بازگردند و به‌طور موثر با توسعه‌دهندگان دیگر همکاری کنند. محیط‌های توسعه یکپارچه با توابعی برای بازسازی کد، آزمایش و پروفایل‌سازی ساخته شده‌اند که برای نوشتن کدهای تمیز، بدون خطا و کارآمد ضروری هستند.

محیط‌های واقعیت مجازی^{۳۰}

محیط‌های واقعیت مجازی، محیط‌های ایزوله‌ای هستند که بسته‌های پایتون را می‌توان بدون تداخل با پروژه‌ها و تاسیسات دیگر نصب کرد. این به توسعه‌دهنده اجازه می‌دهد تا محیط‌های مجزا برای پروژه‌های مختلف ایجاد کند که می‌تواند با توسعه‌دهندگان دیگری که می‌توانند محیط توسعه دقیق آن پروژه‌ها را بازسازی کنند، ارتباط برقرار کند. بدون محیط‌های واقعیت مجازی، نصب نسخه‌های مختلف یک بسته برای پروژه‌های مختلف می‌تواند منجر به تضاد و ناسازگاری شود و اشتراک‌گذاری یا استقرار کد را دشوار کند. محیط‌های مجازی ایجاد فضاهای ایزوله برای هر پروژه که می‌توان وابستگی‌های لازم را بدون خطر تداخل در آن نصب کرد، این مشکل را حل می‌کند.

۱۸- PyCharm

۱۹- Jupyter Notebook

۲۰- Pip

۲۱- Conda

۲۲- Dependency

۲۳- FEniCS

۲۴- Numpy

۲۵- PyVista

۲۶- Matplotlib

۲۷- Finite-Element Mesh Generator

۲۸- FEM

۲۹- Git

۳۰- Virtual Environments

هیدرولوژی، نمونه هایی از داده های زمانی شامل دما، ضخامت برف، سطح آب های زیرزمینی، میزان بارش و تبخیر هستند. تجهیزات زمینی، ایستگاه های هواشناسی و ماهواره ها می توانند این اندازه گیری های هیدرولوژیکی را جمع آوری کنند. داده های سری زمانی برای شناسایی الگوهای سالانه و فصلی، درک تأثیر تغییرات آب و هوا و پیش بینی سناریوهای هیدرولوژیکی در آینده بسیار مهم هستند.

- داده ویژگی^{۳۲}: از سوی دیگر، داده های GIS دو بخش دارند که شامل عارضه ها و ویژگی ها هستند. ویژگی ها، داده های سازمان یافته درباره هر عارضه هستند. ویژگی به عنوان یک داده، توصیف کیفی است که زمینه اضافی را در مورد داده های مکانی و زمانی فراهم می کند. به عنوان مثال، ممکن است شامل داده هایی در مورد تراکم جمعیت و شاخص های اجتماعی-اقتصادی در منطقه مورد مطالعه باشد که می تواند بینش هایی در مورد تأثیرات انسانی بر سیستم هیدرولوژیکی ارائه دهد. به طور معمول، ویژگی ها با استفاده از اندازه گیری های میدانی، تجزیه و تحلیل آزمایشگاهی، پایگاه های داده عمومی و بررسی های مستقیم جمع آوری می شوند. این داده های مکانی، زمانی و ویژگی ها اغلب با یکدیگر هم پوشانی دارند و به مجموعه داده های غنی و چند لایه ای منجر می شوند که می توانند از دیدگاه های مختلف مورد بررسی قرار گیرند. برای مثال، پارامترهای کیفیت آب (داده های ویژگی) ممکن است در طول زمان (داده های زمانی) و در مکان های مختلف (داده های مکانی) در یک حوضه اندازه گیری شوند. چنین مجموعه داده ای را می توان برای درک چگونگی تغییر کیفیت آب در یک منطقه به صورت مکانی و همچنین زمانی بررسی کرد. به طور فزاینده ای، در هیدرولوژی، مشکلات به اندازه ای پیچیده شده اند که نیاز به استفاده از داده های بزرگ و یادگیری ماشینی برای ایجاد بینش عمیق تر در مجموعه داده های بزرگ، پیچیده و چند بعدی دارد. با ادغام داده ها از منابع مختلف، هیدرولوژیست ها می توانند پویایی پیچیده آب در محیط را کشف کنند و به تدوین استراتژی های مدیریت آب مؤثر و شیوه های پایدار کمک کنند.

- داده نهایی - خروجی مدل هیدرولوژیکی: این ها داده های تولید شده از مدل های هیدرولوژیکی محاسباتی را تشکیل می دهند که جنبه های مختلف چرخه آب، از دینامیک بارندگی - رواناب و تبخیر و تعرق تا مهاجرت آب خاک، و الگوهای رودخانه را شبیه سازی می کنند. مدل ها از ورودی های داده های مکانی و

محیط های واقعیت مجازی نیز به تکرارپذیری کد پایتون کمک می کنند. حفظ یک رکورد از نسخه های دقیق بسته های مورد استفاده در یک پروژه، به برنامه نویسان و سیستم های دیگر اجازه می دهد تا محیط را بازسازی کنند و کد را در شرایط یکسان اجرا کنند. این امر به ویژه در محاسبات علمی و تجزیه و تحلیل داده ها، که در آن وابستگی بسته یک نیاز اساسی است، مهم است. هم محیط های توسعه یکپارچه (IDE) و هم محیط های واقعیت مجازی نقش مهمی در برنامه نویسی پایتون دارند. در حالی که این محیط ها کارایی و کیفیت کد را با ادغام ابزارها و ویژگی ها در یک رابط یکپارچه افزایش می دهند، محیط های واقعیت مجازی با اطمینان از وابستگی ها و جداسازی پروژه، قابلیت اطمینان و تکرارپذیری کد پایتون را تضمین می کنند. آن ها با هم فرآیند کدنویسی را با ارائه یک چارچوب همه کاره برای برنامه نویسی پایتون ساده می کنند و آن را لذت بخش تر می کنند.

انواع داده های هیدرولوژیکی

هیدرولوژیست ها توزیع، حرکت و ذخیره آب در محیط را مطالعه می کنند که به مقادیر زیادی داده در رشته های مختلف علمی و مهندسی نیاز دارد. داده های جمع آوری شده در هیدرولوژی به طور کلی شامل داده مکانی، زمانی، ویژگی ها و داده نهایی یا خروجی مدل است.

- داده های مکانی: داده هایی هستند که اطلاعاتی درباره اشیاء، رویدادها، ناهمواری ها و پدیده های مرتبط با سطح زمین به صورت سه بعدی ارائه می دهند. این ها شامل توپوگرافی، کاربری زمین، نوع خاک، پوشش گیاهی، و غیره است. به عنوان مثال، یک مدل رقمی ارتفاع^{۳۱} (DEM)، داده های توپوگرافی را ارائه می دهد که برای درک ویژگی های حوضه آبریز، جهت جریان، و تجمع جریان در مدل سازی هیدرولوژیکی ضروری است. داده های کاربری اراضی و نوع خاک، نرخ نفوذ، تبخیر و تولید رواناب را مشخص می کند. داده های پوشش گیاهی می تواند به تعیین میزان تعرق کمک کند. این داده ها به طور کلی به صورت فرمت های شطرنجی یا برداری در سیستم های اطلاعات جغرافیایی (GIS) برای تحلیل و مدل سازی هیدرولوژیکی نشان داده می شوند.

- داده های زمانی: هنگامی که داده های عددی در طول زمان ردیابی می شوند، داده های زمانی نامیده می شوند. استخراج بینش های ارزشمند در مورد روندها، الگوها و تغییرات در ویژگی های زمانی به عنوان داده کاوی زمانی شناخته می شود. در

^{۳۱}- Digital Elevation Model

^{۳۲}- Attribute Data

این رابطه مفید است. یک مثال می‌تواند مقایسه میزان بارندگی با نرخ جریان رودخانه برای درک تغییرات رواناب با بارش باشد. تحلیل دو متغیره می‌تواند از تکنیک‌های تحلیل رگرسیون برای تعیین کمیت قدرت و ماهیت رابطه بین دو متغیر استفاده کند.

۳- مجموعه داده‌های چند متغیره در هیدرولوژی: مجموعه داده‌های چند متغیره از مشاهدات بیش از دو متغیر تشکیل شده است. در هیدرولوژی، چنین مجموعه داده‌هایی بسیار رایج هستند، زیرا فرآیندهای آب تحت تأثیر عوامل متعددی قرار دارند. به عنوان مثال، یک مجموعه داده ممکن است شامل بارش، دما، تبخیر، رواناب و رطوبت خاک باشد که همه در طول زمان در یک مکان خاص ثبت می‌شوند. تجزیه و تحلیل چند متغیره امکان کاوش تعاملات و روابط بین چندین متغیر را به طور همزمان فراهم می‌کند. این می‌تواند در درک فرآیندها و سیستم‌های هیدرولوژیکی پیچیده بسیار مهم باشد. تکنیک‌های مورد استفاده می‌تواند شامل رگرسیون چندگانه، تحلیل عاملی و تحلیل خوشه‌ای و غیره باشد. انتخاب تجزیه و تحلیل تک‌متغیره، دو متغیره یا چندمتغیره در هیدرولوژی تا حد زیادی به سوال تحقیق و داده‌های موجود بستگی دارد. صرف نظر از رویکرد، هر یک بینش‌های ارزشمندی را در مورد ویژگی‌ها و رفتار متغیرهای هیدرولوژیکی ارائه می‌کنند، بنابراین به درک و مدیریت منابع آب کمک می‌کنند.

- موارد درونی و پرت در داده‌های هیدرولوژیکی
ناهنجاری‌ها در داده‌ها یا مقادیر پرت، مقداری هستند که به طور قابل توجهی از سایر مشاهدات موجود در یک مجموعه داده منحرف می‌شوند. ناهنجاری‌های داده می‌تواند به دلایل زیادی مانند خطاهای اندازه‌گیری، رویدادهای هیدرولوژیکی نادر و نقاط داده از دست رفته ایجاد شود. ناهنجاری‌ها می‌تواند در مجموعه داده‌های تک‌متغیره و چندمتغیره رخ دهند. اگرچه آن‌ها گاهی اوقات می‌تواند بینش عمیق‌تری در مورد رویدادهای مهم به دست آورند، اما همچنین می‌تواند تحلیل‌ها را تحریف کنند که منجر به مدل‌های اشتباه و نتیجه‌گیری‌های گمراه کننده شود. بنابراین، پیش پردازش داده‌ها ضروری می‌شود. اکنون، مجموعه‌ای از تکنیک‌های آماری را برای رسیدگی به ناهنجاری‌ها در داده‌ها ارائه می‌کنیم. در زمینه داده‌های هیدرولوژی، نقاط داده را می‌توان به صورت درونی یا پرت طبقه‌بندی کرد. درونی‌ها به عنوان خطاهایی در مشاهدات تعریف می‌شوند که بر اساس یک مدل آماری فرضی در محدوده مورد انتظار قرار دارند. از سوی دیگر، نقاط پرت نقاط داده‌ای هستند که انحرافات قابل توجهی را از بقیه مشاهدات نشان می‌دهند. به عنوان مثال، نقاط پرت آن نقاط

زمانی و خروجی‌های عملکرد مانند جریان، رواناب، شاخص‌های رطوبت خاک و سطوح آب زیرزمینی استفاده می‌کنند. این داده‌ها اغلب برای یادگیری درمورد فرآیندهای هیدرولوژیکی مرتبط، پیش‌بینی رویدادهای مرتبط با آب در آینده و تصمیم‌گیری عاقلانه در مورد مدیریت آب استفاده می‌شوند. در ادامه به مدل‌سازی داده‌های هیدرولوژیکی با استفاده از پایتون پرداخته می‌شود. تجزیه و تحلیل سری زمانی و مدل‌سازی عددی متغیرهای آب مانند جریان، سطح آب و فشار اتمسفر را بررسی می‌شود و نشان داده می‌شود که چگونه می‌توان از کتابخانه‌های قدرتمند پایتون برای مدل‌سازی تصادفی و قطعی و تشخیص روند استفاده کرد. همچنین استفاده از پایتون برای حل معادلات دیفرانسیل جزئی در زمینه جریان آب زیرزمینی و مدل‌سازی انتقال املاح نشان داده می‌شود و یک نمونه میدانی از فرآیند توصیف شده ارائه می‌گردد. درحالی‌که این نوع داده‌ها معمولاً مورد استفاده قرار می‌گیرند، مهم است که تشخیص دهیم هیدرولوژی یک زمینه چند وجهی و بین رشته‌ای است. اغلب نیاز به ترکیب داده‌ها از حوزه‌های مختلف دیگر مانند هواشناسی، زمین‌شناسی و اکولوژی دارد. این مجموعه فرصت‌هایی را برای توسعه رویکردهای جدید برای تجزیه و تحلیل داده‌ها، مدل‌سازی داده‌ها و تفسیر ارائه می‌کند. با توجه به اهمیت آب در حفظ حیات و سیستم‌های زیستی، مطالعه و درک این نوع داده‌ها برای مقابله با چالش‌های مختلف مرتبط با آب که جهان امروز با آن مواجه است، بسیار مهم است. بسته به تعداد متغیرهایی که دارند، مجموعه داده‌ها را می‌توان به تک متغیره، دو متغیره یا چند متغیره نیز طبقه‌بندی کرد. هر یک از این دسته‌بندی‌ها، بینش‌ها و رویکردهای تحلیلی مجزایی را ارائه می‌دهند.

۱- مجموعه داده‌های تک‌متغیره در هیدرولوژی: مجموعه داده‌های تک‌متغیره در هیدرولوژی شامل مشاهدات یک متغیر منفرد در طول زمان یا مکان است. نمونه‌های معمولی اندازه‌گیری بارش روزانه در یک مکان خاص، اندازه‌گیری دبی رودخانه در طول زمان در یک نقطه مشخص در امتداد رودخانه، یا سطوح رطوبت خاک در اعماق مختلف در یک مکان خاص اندازه‌گیری می‌شوند. تجزیه و تحلیل تک متغیره امکان کمی سازی گرایش مرکزی، گسترش و توزیع متغیر ثبت شده را فراهم می‌کند و اغلب برای شناسایی روندها، الگوها و ناهنجاری‌ها در یک متغیر واحد استفاده می‌شود.

۲- مجموعه داده‌های دو متغیره در هیدرولوژی: مجموعه داده‌های دو متغیره از مشاهدات دو متغیر مجزا تشکیل شده است. اغلب برای درک این‌که آیا دو متغیر با هم مرتبط هستند و ماهیت

است. با استفاده از تقریب های موج سینماتیکی، محققان و مهندسان می توانند تعادلی بین کارایی محاسباتی و دقت مدل ایجاد کنند و از ارائه راه حل های قابل اعتماد برای چالش های مدیریت آب اطمینان حاصل کنند.

تجزیه و تحلیل سری زمانی هیدرولوژیکی:

پیش بینی یک سری زمانی در آینده یکی از رایج ترین کاربردهای مدل سازی آماری در هیدرولوژی است. به طور معمول، هیدرولوژیست ها علاقه مند به پیش بینی جریان و سیل هستند، که خود یک پدیده غیر خطی پیچیده است که توسط عوامل هواشناسی و ژئومورفولوژیکی کنترل می شود. جدای از جریان، هیدرولوژیست ها معمولاً سعی می کنند رطوبت خاک، سطح آب زیرزمینی و پارامترهای کیفیت آب را نیز پیش بینی کنند. روش های آماری سری های زمانی مختلف را می توان برای یک رکورد طولانی از مشاهدات به منظور کشف روندها، الگوها و چرخه ها به کار برد. آگاهی از این الگوهای زمانی به دو دلیل ضروری است. اول، درک مکانیسم های اساسی حاکم بر روابط بین متغیرهای مختلف هیدرولوژیکی، و دوم، پیش بینی شرایط هیدرولوژیکی آینده بر اساس درک از الگوهای گذشته. به عنوان مثال، می توان از سوابق تاریخی بارش، دما و داده های جریان برای مدیریت منابع آب، پیش بینی سیل و برنامه ریزی برای خشکسالی استفاده کرد. در این دوره از تغییرات آب و هوایی، چنین مدل های پیش بینی کننده ورودی مهمی برای ارزیابی اثرات بالقوه بر در دسترس بودن آب و استراتژی های سازگاری است. یکی از این تکنیک ها، میانگین مدل سازی یکپارچه خودکار رگرسیون^{۳۳} است، یک روش استاندارد که برای تجزیه و تحلیل سری های زمانی هیدرولوژیکی استفاده می شود. توانایی آن ها در ضبط فصلی، همبستگی خودکار، و روند در داده های سری زمانی، آن ها را برای کاربردهای متنوع مناسب می کند. به عنوان مثال، می توان با استفاده از مشاهدات گذشته، بارندگی ماهانه را با مدل میانگین مدل سازی یکپارچه خودکار رگرسیون پیش بینی کرد، در حالی که پارامترهای مدل آن میزان فصلی بودن یا تداوم را نشان می دهد. حوزه دیگری که در آن تحلیل سری های زمانی اهمیت فزاینده ای دارد، تأثیر فعالیت های انسانی بر سیستم های هیدرولوژیکی است. مقایسه داده های سری زمانی قبل و بعد از یک رویداد خاص یا مداخله انسانی (مانند تغییر کاربری زمین یا ساخت سد) نیز می تواند تأثیر آن را بر سطح آب های زیرزمینی، جریان رودخانه یا کیفیت آب نشان دهد.

داده ای هستند که با رویدادهای سیل شدید در یک رکورد جریان رودخانه مطابقت دارند، زیرا به طور محسوسی با مقادیر جریان معمولی متفاوت هستند. رسیدگی به موارد پرت بسیار مهم است زیرا آن ها می توانند تأثیر قابل توجهی بر ویژگی های آماری مجموعه داده مانند میانگین و انحراف استاندارد داشته باشند. عدم رسیدگی به آن ها می تواند تأثیر مخربی بر عملکرد مدل های داده محور داشته باشد. با این حال، تعیین این که آیا یک نقطه پرت نشان دهنده یک خطا است یا یک مشاهده واقعی اما شدید ضروری است. نقاط دور افتاده واقعی می توانند بینش های ارزشمندی در مورد رفتار سیستم های هیدرولوژیکی در شرایط شدید ارائه دهند و باید در تحلیل به دقت مورد توجه قرار گیرند. مهم است که به یاد داشته باشید که طبقه بندی نقاط داده به عنوان درونی یا پرت اغلب به زمینه و سوال مورد بررسی بستگی دارد. درک ویژگی های اساسی داده های هیدرولوژیکی کلید انجام تجزیه و تحلیل داده های مناسب و معنی دار است. در انتخاب تکنیک های آماری مناسب، تفسیر نتایج، و در نهایت، ایجاد بینش قابل اعتماد در مورد پدیده های هیدرولوژیکی کمک می کند. هر کسی که در حال توسعه یک مدل پیش بینی برای رویدادهای سیل، مطالعه تأثیرات تغییر اقلیم بر منابع آب، آلودگی های آب و نحوه گسترش آن یا برنامه ریزی برای مدیریت پایدار آب باشد، درک دقیق این ویژگی های داده ضروری است. در این تحقیق مجموعه داده های چند متغیره در هیدرولوژی شامل فرارفت، انتشار و واکنش در نظر گرفته می شوند.

- مدل های جریان سطحی

مدل های جریان سطحی نقشی محوری در درک و پیش بینی فرآیندهای هیدرولوژیکی ایفا می کنند، به طور قابل توجهی بر مدیریت منابع آب، ارزیابی خطر سیل و طراحی سیستم های زه کشی شهری تأثیر می گذارند. این مدل ها درک الگوهای مکانی و زمانی جریان آب را تسهیل می کنند و به تعاملات پیچیده بین جو، سطح زمین و زیرسطح می پردازند. در سال های اخیر، اهمیت مدل های جریان سطحی به دلیل افزایش شهرنشینی، اثرات تغییرات آب و هوا و نیاز به مدیریت پایدار منابع آب افزایش یافته است. با ورود به دنیای مدل های جریان سطحی، تقریب های موج سینماتیکی به عنوان یک ابزار ضروری برای ساده سازی مدل سازی فرآیندهای جریان ظاهر می شوند. این رویکرد امکان شبیه سازی کارآمد و دقیق را فراهم می کند، به ویژه در موقعیت های جریان کانال باز، جایی که درک حرکت و ذخیره سازی آب برای برنامه ریزی زیرساخت موثر و حفاظت از محیط زیست ضروری

مدل جابجایی آلاینده‌ها - مدل دو بعدی فرارفت^{۳۴} - انتشار - واکنش

در این تحقیق، یک مدل فرارفت - انتشار - واکنش تعمیم یافته برنامه‌نویسی و اجرا می‌شود. در این مورد به‌طور مشخص سناریویی مدل‌سازی می‌شود که در آن یک آلاینده واکنشی تحت

فرارفت و انتشار قرار می‌گیرد درحالی‌که با سرعتی متناسب با غلظت تجزیه می‌شود. [u] به این معنی که سرعت واکنش از یک سینتیک مرتبه اول پیروی می‌کند. شکل قوی معادلات حاکم برای این مدل عبارت‌است از:

$$\frac{\partial [u]}{\partial t} + w \times \nabla [u] + \nabla (D \nabla [u]) = f - R[u] \quad (۱)$$

که در آن [u] غلظت آلاینده، w سرعت جریان، D ضریب انتشار، و R سرعت واکنش است.

$$\int_{\Omega} \frac{1}{dt} (u - u_n, v) dx + \int_{\Omega} (w \cdot \nabla u, v) dx + \int_{\Omega} D (\nabla u, \nabla v) dx = \int_{\Omega} (fv - Ru v) dx \quad (۲)$$

فرمول متغیر یک شرط مرزی همگن نویمان را در کل دامنه

اعمال می‌کند و بنابراین، در کدهای برنامه‌نویسی، هیچ اشاره‌ای به شرایط مرزی نشده است.

نتایج و بحث

برنامه نویسی مدل با کد پایتون

جدول ۱، برنامه‌نویسی و کدگذاری کامل مدل فرارفت - انتشار - واکنش را نشان می‌دهد. این برنامه پس از نصب تمام کتابخانه‌های لازم در یک محیط مشخص شده کوندا^{۳۵}، آماده اجرا است. در اینجا بخش‌هایی از برنامه که بسیار مهم تلقی می‌شوند، توضیح داده می‌شوند.

در ردیف ۱، کتابخانه‌های لازم برای برنامه بارگذاری می‌شود. در ردیف ۲، نام شبیه‌سازی، مسیر فایل مش خارجی، مسیر فایل داده سرعت، و مسیری به پوشه نتایج که فایل‌های راه‌حل ذخیره می‌شوند تعیین می‌کنیم. این می‌تواند توسط کاربر به مکان‌های مناسب، به‌صورت محلی اصلاح شود.

از ردیف ۳، مشی که با استفاده از نرم‌افزار جی‌مش^{۳۶} تولید و ذخیره شده بود بارگذاری می‌شود. در همین ردیف و زیر ردیف ۳-۱، فایل مش، تگ‌های سلولی و اشیاء تگ‌فاست را بارگذاری می‌کنند. در مش هیچ برچسب سلولی وجود ندارد. فقط تگ‌های وجهی هستند و باید مرزها را برای تنظیم شرایط مرزی شناسایی کرد. بنابراین ابعاد وجوه باید ۱ کمتر از بعد مش باشد، زیر ردیف ۳-۲ در ردیف ۴، پارامترهای گسسته‌سازی زمانی مانند اولیه و نهایی و مراحل محاسبه راه‌حل تعریف می‌شود. مشخص می‌شود که ۱۵۰۰ محاسبه در بازه زمانی ۰ تا ۳ ثانیه انجام شده است.

۳۴- Advection

۳۵- Conda

۳۶- GMSH

جدول ۱ - برنامه پایتون - کدگذاری کامل مدل فرارفت - انتشار - واکنش

ردیف	کد پایتون	زیرردیف	زیرردیف
	<pre> """ Program to solve advection, diffusion, reaction equations for modeling the contaminant transport problem. Given the location and strength (concentration) of the source function, we study the spread concentration of the reactant as a function of space and time. To make the visualizations appealing we load the velocity data from the Navier- Stokes simulation output. """ # We first load the necessary libraries import h5py import numpy as np from mpi4py import MPI from petsc4py import PETSC import ufl from dolfinx import fem, nls, io from ufl import (dot, dx, grad) from dolfinx.io import XDMFFile from dolfinx.io.gmshio import read_from_msh import tqdm.autonotebook </pre>		
	<pre> """ File handling block """ simulationName = "Adv_Diff_React-2D" meshName = "aquifer2D" meshPath = "./meshes_gmsh/" + meshName + ".msh" velocityDataPath = "./result/" \ "Stream_NS-2D/velocity_timeseries.h5" resultPath = "./result/" + simulationName + "/" </pre>		
	<pre> """ We load the same mesh, generated externally using GMSH which was also used for the Navier-Stokes simulation. """ </pre>		
	<pre> domain, cell_tags, ft io.gmshio.read_from_msh (filename=meshPath, comm=MPI.COMM_WORLD, rank=0, gdim=2) </pre>	۳۱	۳
	<pre> gdim = domain.topology.dim # domain dimension fdim=gdim-1 # facet dimension </pre>	۳۲	
	<pre> """ We define the start and stop time of the simulation. The values are same as that used in the Navier-Stokes because we want to read the velocity data it. """ </pre>		
	<pre> t_start = 0.0 t_stop = 3.0 delta_t = 1 / 1500 n_steps = int((t_stop - t_start) / delta_t) # N steps </pre>		۴

ردیف	کد پایتون	زیرردیف	زیرردیف
	<pre> """ These constants are defined as they are to be used in the weak form of the PDE. """ dt_inv = fem.Constant (domain=domain, c=PETSc.ScalarType (1 / delta_t)) Rate = fem.Constant (domain=domain, c=PETSc.ScalarType (0.9)(D_coeff = fem.Constant) domain=domain, c=PETSc.ScalarType(0.03)) </pre>		۵
	<pre> """ Here, we define the element type and the function space to solve for the concentration of the reactant. """ P1 = ufl. FiniteElement (family="Lagrange", cell-domain.ufl_cell(), degree=1) V = fem. FunctionSpace (mesh=domain, element=P1) v1 = ufl.TestFunction(function_space=V) u1 fem.Function (V=V) u1n fem. Function (V=V) u1.name = "concentration" u1n.name = "concentration" </pre>		۶
	<pre> """ Here, we define a vector element and a corresponding function space, function for loading the velocity (a vector) data from the NS simulation. """ Pvec = ufl. VectorElement (family="Lagrange", cell-domain.ufl_cell(), degree=2) W = fem.FunctionSpace (mesh=domain, element=Pvec) w = fem. Function (V=W) </pre>		۷
	<pre> class SourceExpression: """ We define the source location and its magnitude that would go into the weak form. The (x, y) location is specified using 'ptSrc_xy' argument. The magnitude is specified as 10.0. """ def __init__(self, t, ptSrc_xy): self.t = t self.ptSrc_xy = ptSrc_xy def eval(self, x): values = np.full(x.shape[1], 0.0) idx = ((x[0] - self.ptSrc_xy[0])** 2) + \ (x[1] - self.ptSrc_xy[1])** 2) < 0.05 ** 2 values [idx] = 100.0 #Strength of the source return values print("Done!") </pre>	۸	۸

زیرردیف	زیرردیف	کد پایتون	ردیف
		<pre> # Inheriting from the source function class definition source = SourceExpression(t_=0.0, ptSrc_xy=[0.25, 0.75]) # Interpolating into a function f = fem. Function (V=V) f.interpolate (u=source.eval) </pre>	۹
۹۱		<pre> """ Here, we define the weak formulation of the partial differential equation. 'w' is a function defined on a vector function space 'W' that holds the value of the velocity field. This velocity is taken from a previous Navier-Stokes simulation. """ F = ((ul - uln) * dt_inv) * v1 * dx F = F + dot (w, grad(u1)) * v1 * dx F = F + D_coeff* dot (grad (ul), grad(v1)) * dx F = F + Rate ul * v1 * dx F = F - f * v1 * dx </pre>	۱۰
	۱۱	<pre> The current advection reaction equation, although solvable by a linear solver, we deliberately do away with a nonlinear solver because one may wish to model a case where the rate of decomposition of the contaminant may at times be proportional to a nonlinear expression of the concentrations of the reactants. Newton solver is good with them. """ </pre>	
		<pre> problem = fem.petsc.Nonlinear Problem (F=F, u=u1) solver = nls.petsc.NewtonSolver (comm=MPI.COMM_WORLD, problem=problem) solver.rtol = 1e-6 solver.report = True </pre>	۱۱
		<pre> """ We use the open file format '.xdmf' to store the results of the simulation. We first write the mesh followed by the function. The mesh is written just once; in the time loop we only write the function values as the mesh gets shared during visualization. """ xdmfu = XDMFFile (comm-domain.comm, filename=resultPath + simulationName + ".xdmf" , file_mode="w" , encoding=XDMFFile.Encoding.HDF5) xdmfu.write_mesh(mesh=domain) xdmfu.write_function (</pre>	۱۲
	۱۲۱	<pre> u=u1 , </pre>	
۱۲۱۱		<pre> t=t_start) """ </pre>	

ردیف	کد پایتون	زیرردیف	زیرردیف
	We load the velocity data file from the Navier-Stokes simulation. The velocity vector (u_i, u_j) is used to realize the advection part of the equation. Because the data was stored in HDF5 format, we employ h5py library to load the data. This is done just before 'solving' the equation.		
	"""		
	with h5py. File (	۱۳۱	
	name=velocityDataPath, mode='r') as fr:		
	print("Name of the velocity variable is {}".format (		
	list(fr.keys ())))		
	# Time stepping and solving	۱۳۲	
	progress = tqdm.autonotebook.tqdm (		
	desc="Solving nonlinear system", total=n_steps		
	)		
	t = t_start		۱۳
	for n in range (n_steps):		
	print("Doing {}/{} step".format(n, n_steps))		
	t = t + delta_t		
	u_data = fr['u'] [n]	۱۳۳	
	w.vector.array = u_data	۱۳۴	
	r = solver.solve(u=u1)	۱۳۵	
	u1n.x.array[:] = u1.x.array		
	xdmfu.write_function (		
	u=u1,		
	t=t)		
	xdmfu.close()		
	fr.close()		
	print("Done!")		

هستند. همچنین یک نام مناسب "غلظت" به این توابع داده می‌شود.

در ردیف ۷، انواع المان محدود و خانواده برای مش بارگذاری شده تعریف می‌شود. مش بارگذاری شده قبلاً حاوی عناصر "مثلثی" است و به‌طور مناسب توسط "domain.ufl_cell" به آن اشاره می‌شود. توابع شکل پایه لاگرانژ درجه ۲ مشخص شده است. درجه بالاتر به معنای دقت بالاتر به قیمت محاسبات اضافی است. "W" و "w" "فضای تابع" و "تابع" را در دامنه تعریف می‌کنند. "V" در اینجا یک آرگومان است که انتظار یک فایل "FunctionSpace" را دارد. کد "Pvec" به‌عنوان یک بردار تعریف شده است زیرا هدف این است که داده‌های سرعت (بردار) از پیش ذخیره شده از شبیه‌سازی Navier-Stokes در آن بارگذاری شوند.

در ردیف ۸، یک کلاس برای تابع منبع تعریف می‌شود. یک کلاس تعریف منبع وابسته به زمان را تسهیل می‌کند. روش "__init__" برای تعیین مقدار اولیه زمان و مختصات مکان منبع استفاده می‌شود. روش "__eval__" برای ارزیابی ارزش منبع استفاده می‌شود. اگر شعاع کمتر از ۰/۰۵ باشد، زیر ردیف ۸-۱،

در ردیف ۵، ثابت‌هایی تعریف می‌شود که بعداً در برنامه استفاده شوند. در اینجا، "fem" نام مستعار برای کتابخانه "dolfinx" است که در آن کلمه کلیدی "Constant" یک ثابت را برای "دامنه" یا مش بارگذاری شده تعریف می‌کند. "c" مقدار ثابت را مشخص می‌کند و یک نوع "PETSc.ScalarType" دارد. این نوع داده، بومی کتابخانه PETSc است که به‌صورت داخلی توسط "dolfinx" برای حل مسئله غیرخطی استفاده می‌شود. در ردیف ۶، انواع المان محدود و خانواده برای مش بارگذاری شده تعریف می‌شود. مش بارگذاری شده قبلاً حاوی عناصر "مثلثی" است و به‌طور مناسب توسط "domain.ufl_cell" به آن اشاره می‌شود. توابع شکل پایه لاگرانژ^{۳۷} درجه ۱ مشخص شده است، مناسب برای کار با داده‌های نوع اسکالر متغیر غلظت هستند.

فایل "V" برای ذخیره "FunctionSpace" استفاده می‌شود که در آن عناصر P1 از نوع "لاگرانژ" تعریف شده است. فضاهای تابع، در مدل‌های المان محدود، راهی برای ارتباط سلول‌های مش با نوع عنصر است (در اینجا لاگرانژ). " v_1, u_1, u_{1n} " یک تابع آزمایشی، تابع و تابعی که در فضای تابع "V" تعریف شده است،

"حل" برای حل "u1" فراخوانی می شود. که راه حل آن در مرحله بعدی در "u1n" ذخیره می شود. سپس این "u1n" برای ارائه مقدار غلظت برای مرحله بعدی در حلقه عمل می کند. در نهایت، اشیاء فایل بسته می شوند تا داده ها در هارد دیسک ذخیره شوند.

پس پردازش

تمامی مراحل پس از پردازش در نرم افزار پاراوو^{۳۸} اجرا شده است. برنامه پاراوو نتایج را در قالب "xdmf" ذخیره می کند. این فایل ها فرمت های فایل منبع باز هستند که می توانند به راحتی توسط پاراوو بارگذاری شوند. این فایل حاوی داده های شبیه سازی شده برای هر مرحله زمانی از t برابر صفر تا t برابر ۳ در ۱۵۰۰ گام زمانی است. این مشابه شبیه سازی ناویر-استوکس است. شکل ۱ با انتخاب نمایش نوع سطح و رنگ آمیزی شده بر حسب بزرگی متغیر در مش بارگذاری شده، ترسیم شده است. شکل ۱ (a-f) با انتخاب مقادیر زمان مناسب از منوی کشویی "Time" در نرم افزار ایجاد شده است. برنامه پاراوو به طور پیش فرض از نقشه رنگی "Cool to Warm" استفاده می کند. یک جایگزین بهتر، نقشه رنگی "Turbo" است. می توان انتشار آلاینده را حتی در مقادیر پایانی مشاهده کرد. شکل ۲ با انتخاب نمایش "Surface With Edges" و تنظیم گزینه "Coloring" روی "Solid Color" ترسیم شد.

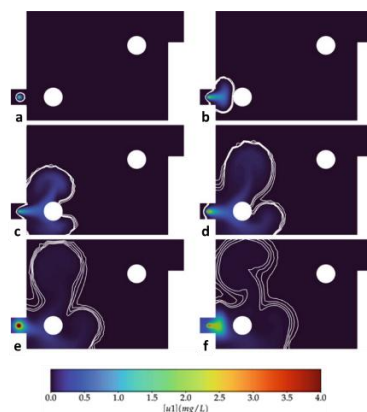
گره های صورتی رنگ در پنجره پردازش تصویری شده برای مش تولید می شوند. این گره ها کرانه سمت چپ بالای آبخوان را نشان می دهند و برای استخراج مقادیر غلظت برای تمام مراحل زمانی استفاده می شوند. بنابراین داده های هر یک از این گره ها یک سری زمانی هستند که محاسبات بیشتر را ممکن می سازد. شکل ۳ با انجام نتایج محاسبات آماری شامل چارک اول و سوم، میانگین، حداکثر و حداقل را نشان می دهد.

مختصات را به عنوان «درست» مشخص می کند که به تعیین منبع دایره ای بزرگ تر کمک می کند. اگر شاخص هایی که منبع درست است، مقدار ۱۰۰ تخصیص داده می شود. در ردیف ۹، کلاس منبع با مقدار زمانی اولیه ۰/۰ و مختصات مکان پراکنش چپ ۰/۲۵ کاما ۰/۷۵ راست (۰/۲۵، ۰/۷۵) فراخوانی می شود.

در ردیف ۹-۱، یک تابع در فضای تابع "V" تعریف می شود و از روش interpolate برای اختصاص مقدار ۱۰۰ در مختصات تعیین شده (شاخص = True) استفاده می شود. در ردیف ۱۰، فرمول تغییری برای مسئله فرارفت، انتشار، واکنش تعریف می شود. در ردیف ۱۱، فایل حل کننده تنظیم می شود. زیرردیف ۱۱-۱، نوع مشکل را مشخص می کند، "NonlinearProblem". شکل متغیر، F F بالایی و متغیر وابسته ای که برای حل آن استفاده می شود، u Baseline u1.

ردیف ۱۲، عملیات خروجی فایل را با مشخص کردن گزینه "w" عملیات نوشتن تعریف می کنند. "domain.comm" مربوط به پردازش موازی است (در حال حاضر برای عملیات سریال تنظیم شده است). رمزگذاری فرمت فایل را برای ذخیره داده های متغیر فیلد مشخص می کند (در این جا، فرمت داده سلسله مراتبی باینری یا HDF5). ابتدا فایل مش به دنبال مقدار تابع و مرحله زمانی مرتبط در زیرردیف ۱۲-۱، نوشته می شود. از ردیف ۱۳، حلقه زمانی برای حل مسئله به صورت متوالی مشخص می شود. در زیرردیف ۱۳-۱، از مدیر زمینه "with" برای خواندن (r) فایل داده سرعت در فایل "fr" استفاده می شود.

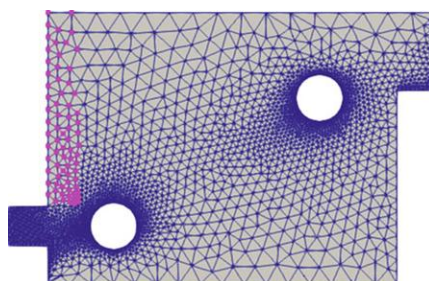
زیرردیف ۱۳-۲، برای نمایش نوار پیشرفت استفاده می شود. در خط، زمان با مقدار "delta_t" افزایش داده می شود زیرا تابع مربوط به "t_initial" قبلاً در زیرردیف ۱۲-۱ نوشته شده است. در زیرردیف ۱۳-۳، مقدار را در n عادی t h n ام استخراج می شود. از یک فایل از نوع دیکشنری با کلید "u" گام بردارید. این مقدار به تابع "w" در زیرردیف ۱۳-۴، نسبت داده می شود. هنگامی که بردار سرعت بارگذاری شد، در زیرردیف ۱۳-۵، روش



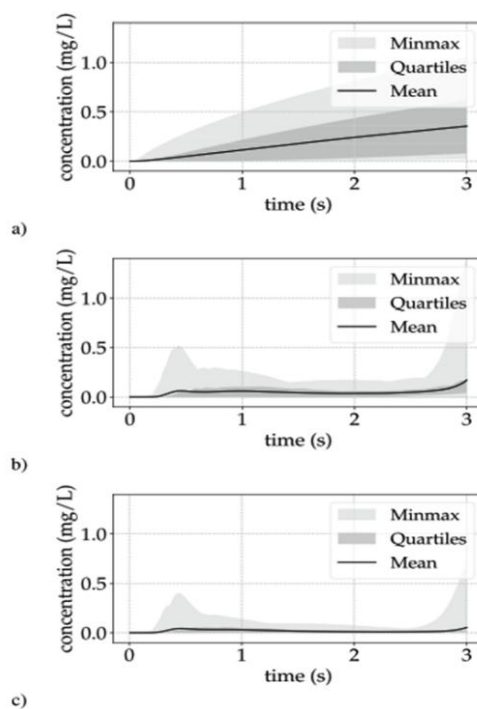
شکل ۱ - محدوده غلظت در ۶ زمان مختلف، شامل ۰/۰۳، ۰/۳۳، ۱، ۱/۶۶، ۲/۳۳ و ۳ ثانیه

اطراف تحمیل می‌کنند. گره های انتخاب شده برای انجام محاسبات آماری به رنگ صورتی نشان داده شده‌اند.

می‌توان الگوهای ویژه ناشی از وجود دو جزیره دایره‌ای شکل را مشاهده کرد که شرایط مرز بدون لغزش را به همراه مرزهای



شکل ۲ - نتایج ثبت داده‌های غلظت آلودگی در کرانه سمت چپ بالای دامنه در طول زمان



شکل ۳ - آمار داده‌های غلظت برای سه مدل انتقال آلاینده

حداکثر غلظت ثبت شده در گره ها را نشان می دهد. گره های انتخاب شده در شکل ۲ نشان داده شده است.

a: واکنش-انتشار، b: انتشار - فرارفت، و c: واکنش- فرارفت-انتشار. نوارهای رنگی داخلی (خاکستری تیره) نشان دهنده چارک ۱ و ۳ است. نوارهای رنگی بیرونی (خاکستری روشن) حداقل و

نتیجه گیری و پیشنهادها

همراه دارد و بالعکس. به همین ترتیب، منابع متعدد با نقاط قوت متفاوت را می توان در دامنه مشخص کرد.

پایش روند تغییرات غلظت آلاینده به عنوان تابعی از زمان اغلب مورد توجه است. همانطور که در شکل ۲ مشاهده می شود، روند تغییرات غلظت آلاینده در گره های محاسباتی ارائه شده است. همچنین در شکل ۳، آمار مقادیر غلظت ثبت شده با توجه به سه مدل نشان داده شده است.

در شکل ۳(a)، مدل واکنش - انتشار، افزایش مداوم مقدار غلظت را نشان می دهد. مقدار میانگین دارای شیب مثبت است و به سرعت تا حدود ۰/۳ افزایش می یابد. بخش های (b) و (c) به دلیل مقدار متوسط نرخ واکنش، الگوی مشابهی را در آمار خود نشان می دهند، اگرچه هنوز می توان متوجه شد که بزرگی ها در مدل فرارفت - واکنش در بخش (b)، به وضوح بالاتر از مدل فرارفت-تعمیم یافته - انتشار - واکنش (c) است.

در این مطالعه، یک مدل انتشار، فرارفت آلاینده نشان داده شد که در آن آلاینده ها تحت فرارفت، انتشار و واکنش قرار گرفتند. نتیجه در شکل ۱ (a-f) نشان داده شده است. در هر نمودار غلظت u در یک صفحه دوبعدی نشان داده شده است. منبع آلودگی در قسمت (۰/۲۵، ۰/۷۵) قرار داده شده است (به کد ردیف های ۱۳۱ و ۱۳۰ در برنامه پایتون مراجعه شود). این برنامه انتقال آلاینده را به قسمت های دیگر دامنه از این محل منبع شبیه سازی می کند. می توان مشاهده کرد که با گذشت زمان خطوط ثبت شده منطقه بزرگ تری را پوشش می دهند که شکل آن ها توسط بردار سرعت کنترل می شود. این سرعت به جزء فرارفتی فرآیند حمل و نقل ترکیبی آلاینده کمک می کند.

علاوه بر محل منبع، بزرگی منبع نیز مشخص شده است (به ردیف ۸ در برنامه پایتون مراجعه شود). این مسئول مقدار آلاینده اضافه شده در محل است. یک مقدار بالاتر افزایش غلظت آلاینده را به

References

1. Guerrini F, Mari L, Casagrandi R. The dynamics of microplastics and associated contaminants: data-driven Lagrangian and Eulerian modelling approaches in the Mediterranean Sea. *Science of the Total Environment*. 2021 Jul 10;777:145944.
2. Radha R, Singh RK, Singh MK. Pollutant dispersion with an intermediate source in a semi-infinite aquifer. *Modeling Earth Systems and Environment*. 2024 Feb;10(1):1077-93.
3. Fardadi Shilsar, Mohammad Javad, Mazaheri, Mehdi, Mohammad Vali Samani, Jamal. (1400). 'Analytical solution of the pollution transfer equation with variable coefficients in a river using Laplace transform', *Water and Irrigation Management*, 11(4), pp. 683-698. doi: 10.22059/jwim.2021.329149.911
4. Hamdi, A. (2007). Identification of point sources in two-dimensional advection-diffusion-reaction equation: application to pollution sources in a river. Stationary case. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 15(8), 855-870.
5. Ali, I., Haq, S., Nisar, K. S., & Arifeen, S. U. (2021). Numerical study of 1D and 2D advection-diffusion-reaction equations using Lucas and Fibonacci polynomials. *Arabian Journal of Mathematics*, 10(3), 513-526.
6. Fardadi Shilsar MJ, Mazaheri M, Mohammad Vali Samani J. Analytical solution of the pollution transport equation with variable coefficients in river using the Laplace Transform. *Water and Irrigation Management*. 2022 Jan 21;11(4):683-98.
7. Shaffer T, Chard K, Thain D. An empirical study of package dependencies and lifetimes in binder Python containers. In 2021 IEEE 17th International Conference on eScience (eScience) 2021 Sep 20 (pp. 215-224). IEEE.
8. Maji AK, Gorenstein L, Lentner G. Demystifying Python Package Installation with conda-env-mod. In 2020 IEEE/ACM International Workshop on HPC User Support Tools (HUST) and Workshop on Programming and Performance Visualization Tools (ProTools) 2020 Nov 18 (pp. 27-37). IEEE.
9. Kumar A, Saharia M. *Python for Water and Environment*. Springer; 2024.
10. Rasquin M, Bauer A, Hillewaert K. Scientific post hoc and in situ visualisation of high-order polynomial solutions from massively parallel simulations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*. 2019 Apr 21.



Modeling the transport of water pollutants based on the advection-diffusion-reaction model with Python code

Ramin Zare*

Department of Health, Arak Branch, Islamic Azad University, Arak, Iran

Received: 31 Jan 2025

Accepted: 18 Mar 2025

Keywords: Hydrology, Python, advection, diffusion, reaction modeling, pollutants

Extended Abstract

Introduction: Water security is increasingly at risk worldwide. Effectiveness in managing water resources, combating environmental pollution, and preparing for climate change depends on the ability to monitor, model, and mitigate a variety of water hazards. Data analysis in the water and environmental sector integrates scientific discovery, the use of technology, and consideration of natural phenomena. However, data analysis in the water and environmental sector is not without challenges. These challenges require continuous refinement of methods and techniques, emphasizing the dynamic and evolving nature of the field.

Materials and Methods: First, Python is described as one of the most popular languages for use in hydrology, environment, and climate. Then, types of hydrological data are presented, including spatial, temporal, attribute, and final or model output data. Next, hydrological data modeling is discussed using Python, and the pollutant transport model - two-dimensional advection - diffusion - reaction model is programmed and implemented as an example.

Results and Discussion: The results showed that the reaction-diffusion model shows a continuous increase in the concentration value, which has a positive slope and increases rapidly to about 0.3. The magnitudes in the advection-reaction model are clearly higher than those in the generalized advection-diffusion-reaction model.

Conclusion: In this study, a pollutant diffusion-advection model was demonstrated in which pollutants underwent advection, diffusion, and reaction. The advection-diffusion-reaction model codes are executable. These files are open source file formats that can be downloaded. This model can also be applied with modifications to other aquatic environments at different locations, times, and characteristics.

Corresponding author: Ramin Zare

Address: Department of Health, Islamic Azad University, Arak Branch **Tel:** +989183618297 **Email:** Ramin1zare@gmail.com

Citation: Zare R. Modeling the transport of water pollutants based on the advection-diffusion-reaction model with Python code. Journal of New Researches in Environmental Engineering. 2025; 2(8): 27-43



© 2024, This article published in Journal of New Researches in Environmental Engineering (JNREE) as an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>). Non-commercial use, distribution and reproduction of this article is permitted in any medium, provided the original work is properly cited.