

## ارایه روابطی جدید برای ضریب زوال جهت مدل سازی فلزات سنگین سرب و کادمیوم در سیستم های رودخانه ای

علی روشنفر<sup>۱\*</sup>

سید محمد حمود کاشفی پور<sup>۲</sup>

نعمت الله جعفرزاده<sup>۳</sup>

تاریخ پذیرش: ۸۶/۱۲/۴

تاریخ دریافت: ۸۶/۱۰/۲۰

### چکیده

انتقال آلودگی و رسوب از مهمترین مسائل و مشکلات موجود در سیستم های رودخانه ای، خلیج و دریا بوده و باعث تأثیر منفی بر زندگی منطقه می شود. فلزات سنگین یکی از آلاینده های خطرناک برای زندگی بشر است، به همین دلیل مدل سازی این پدیده در رودخانه ها و در نقاط نزدیک به محل زندگی انسان ها، از اهمیت بالایی برخوردار است. به طور کلی فلزات سنگین در طبیعت به صورت زوال پذیر بوده و میزان غلظت آن ها بر حسب  $pH$  یا شوری قابل تغییر می باشد. هدف اصلی این تحقیق ارایه روابط جدیدی برای ضریب زوال فلزات سنگین محلول سرب و کادمیوم با توجه به تغییر  $pH$  و  $EC$  در سیستم های رودخانه ای است.

در این مقاله ابتدا اطلاعاتی در مورد معادلات حاکم بر حرکت فلزات سنگین محلول در سیستم های رودخانه ای ارایه گردیده است.

سپس مدل FASTER که از آن جهت پیش بینی حریان و غلظت فلزات سنگین در پایین دست استفاده شد معرفی گردیده است. در مدل حاضر از حل معادله یک بعدی دینامیکی پخش و انتشار به کمک روش عددی جدیدی که ترکیبی از روش ULTIMATE و QUICKEST و یک روش ضمنی تفاضل محدود مرکزی ( $FTCS^F$ ) می باشد، استفاده شده است. این روش به کمک یک مثال استاندارد تأیید و سپس برای پیش بینی غلظت فلزات سنگین در سیستم رودخانه ای کارون مورد استفاده قرار گرفت. جهت صحت سنجی و واسنجی هیدرودینامیک مدل، ابتدا مدل در بازه ملاتانی - فارسیات رودخانه کارون اجرا و با استفاده از داده های مشاهداتی ایستگاه اهواز کالیبره گردید.

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد سازه های آبی، دانشکده مهندسی علوم آب، دانشگاه شهید چمران اهواز<sup>\*</sup> (مسئول مکاتبات)

۲- دانشیار گروه سازه های آبی، دانشکده مهندسی علوم آب، دانشگاه شهید چمران اهواز

۳- دانشیار گروه بهداشت محیط، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی جندی شاپور اهواز

در انتهای معادلاتی برای ضریب زوال متغیر دو فلز سنگین سرب و کادمیوم ارایه گردید و این معادلات جهت اجرا وارد اصل مدل شد و سپس این مدل برای ۵ ضریب زوال مختلف که شامل: ۱- ضریب زوال برابر با صفر، ۲- ضریب زوال ثابت، ۳- ضریب زوال متغیر با  $pH$  ۴- ضریب زوال متغیر با  $EC$  ۵- ضریب زوال متغیر با  $pH$  و  $EC$  می‌باشد برای دو فلز سرب و کادمیوم اجرا شد.

نتایج حاصل واسنجی و صحتسنجی فلزات سنگین برای هر دو فلز سرب و کادمیوم نشان داد که انتخاب ضریب زوال متغیر، دقیق مدل‌سازی را تا اندازه زیادی بالا می‌برد. انتخاب ضریب زوال متغیر با  $EC$  و  $pH$  توانست که دقیق مدل را برای مدل‌سازی سرب و کادمیوم به ترتیب تا ۹۱٪ و ۹۷٪ افزایش دهد. پس می‌توان از این معادلات و مدل توسعه یافته به عنوان ابزاری مناسب جهت مدیریت زیست محیطی رودخانه استفاده نمود.

**واژه‌های کلیدی:** رودخانه کارون، مدل‌سازی فلزات سنگین، سرب، کادمیوم، ضریب زوال متغیر

## مقدمه

عددی جریان و آلودگی آب جهت نشان دادن شرایط آب رودخانه نیاز است تا مدل با استفاده از ضرایب تجربی واسنجی گردد، اما این ضرایب در هنگام واسنجی نباید از محدوده مورد انتظار تجاوز کنند.

در این مطالعه اطلاعاتی در مورد معادلات حاکم و مدل توسعه یافته جهت مدل‌سازی پخش غلظت فلزات سنگین و ضرایب زوال متغیر ارایه گردید و سپس مدل با استفاده از یک مثال استاندارد در رودخانه کارون مورد واسنجی و صحبت سنجی قرار گرفت (۲).

### معادلات حاکم

معادلات حاکم بر دینامیک فلزات سنگین در یک بعد، معادلات دیفرانسیل جزیی غیر خطی می‌باشند که بیشتر برای مدل‌سازی سیستم‌های رودخانه‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرند. این معادلات عبارتند از: معادلات سنت ونانت و معادله انتقال-پخش که به شرح زیر می‌باشند (۳):

### معادلات هیدرودینامیکی حاکم بر جریان

در اغلب مطالعات مدل‌های سیستم رودخانه و یا دهانه رودخانه‌ها که در آن‌ها بتوان فرض نمود تأثیر لایه‌های آب بر روی یکدیگر قابل صرف نظر باشند، از سیستم یک بعدی برای مدل‌سازی جریان استفاده می‌شود که معادلات آن به صورت زیر است:

در سال‌های اخیر نگرانی‌های زیادی در سطح بین‌المللی در مورد آلودگی آب و بهطور خاص آلودگی آب رودخانه‌ها به وجود آمده است. این افزایش نگرانی مربوط به موارد اکولوژیکی و محیط زیستی باعث شده است که مهندسان رودخانه، محققان و مدیران در مقابل آلودگی آب و اهمیت مدل‌سازی هیدرولیک محیط زیست گرد هم آیند. هم اکنون مهندسان رودخانه و محققان در بسیاری از کشورها اثرات آلودگی بر محیط زیست را مورد مطالعه و ارزیابی قرار داده‌اند (۱).

افزایش هشدار عمومی و نگرانی‌ها در مورد مسایل هیدرولیک محیط زیست و نوع آلودگی آب باعث به وجود آمدن یک رشته مسئولیت‌ها برای مهندسان رودخانه شده است. به عنوان مثال مهندس رودخانه جهت مطالعه اثر منبع شونده در هیدرواکولوژی یک سیستم رودخانه به طور بسیار زیاد نیاز به ابزار هیدروانفورماتیکی دارد تا نتایج پیچیده مدل سازی فرایند هیدرودینامیک، رسوبات و ژئوشیمی را با استفاده از این ابزار محاسبه کند.

در مدل‌سازی سیستم‌های رودخانه، حل واقعی معادلات جریان و انتقال آلاینده بستگی به دقیق حل معادلات مدل، شرایط مرزی، ضرایب تجربی (مانند: ضریب زبری، توربولنس، ضریب پخشیدگی و ...) و خود معادلاتی که در مدل استفاده می‌شود، دارد که باعث انعکاس شرایط هیدرودینامیک واقعی و بیوشیمی سیستم رودخانه می‌شوند. در مدل‌سازی

خروجی جانی (غلظت/زمان) و (۵): مبنع کاهش دهنده یا افزایش دهنده آلودگی (غلظت/زمان) می‌باشد (۳).

اگرچه روابط تجربی و نظری بسیاری جهت تخمین مقدار  $D_L$  پیشنهاد شده است. با وجود این، مطالعات بسیاری نیز برروی این ضریب در حال انجام است.

با توجه به این که در مدل سازی آلودگی، پخشیدگی طولی و پارامترهای افزایش دهنده و کاهش دهنده آلودگی از اهمیت زیادی برخوردار می‌باشند و دقت حل معادله (۴) وابسته به انتخاب روابط تجربی و نظری این پارامترها دارد، کافی‌پور و Falconer در سال ۲۰۰۲ با استفاده از ۸۰ سری داده اندازه‌گیری شده از ۳۰ رودخانه در آمریکا، رابطه دیگری برای رودخانه‌ها به صورت زیر ارایه نمودند:

$$D_L = \left[ 7.428 + 1.775 \left[ \frac{W}{H} \right]^{0.62} \left[ \frac{U_*}{U} \right]^{0.572} \right] H U \left[ \frac{U}{U_*} \right] \quad (5)$$

در رابطه فوق:  $H$ = عمق جریان،  $U$ = سرعت بررشی،  $\tau_o$ = تنش بررشی بدنه،  $\rho$ = چگالی سیال،  $U$ = سرعت جریان،  $W$ = عرض بالای سطح آب می‌باشد (۴).

$S_0^p$  ترم ورود و خروج فلز سنگین محلول می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$S_0^d = \frac{Q_L C_L}{\Delta x} \quad (6)$$

که در آن:  $C_L$ = غلظت جریان ورودی یا خروجی،  $Q_L$ = دبی جریان ورودی یا خروجی و  $\Delta x$ = فاصله بین دو سطح مقطع می‌باشد.

در مدل سازی آلودگی آب‌های سطحی بخشی به نام منبع کاهش دهنده یا افزایش دهنده آلودگی ( $S_t^d$ ) برای پارامترهای زوال پذیر مورد استفاده قرار می‌گیرد. جهت تعیین منبع کاهش دهنده یا افزایش دهنده غلظت فلزات سنگین محلول و آلاینده‌ها معمولاً از عکس العمل درجه اول شیمیایی استفاده می‌گردد که به صورت زیر می‌باشد:

$$S_t^d = -\kappa C A \quad (7)$$

(۱) معادله پیوستگی<sup>۱</sup>

$$T \frac{\partial \xi_R}{\partial t} + \frac{\partial Q_R}{\partial x} = 0$$

(۲) معادله اندازه حرکت<sup>۲</sup>

$$\underbrace{\frac{\partial Q_R}{\partial t}}_1 + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left( \beta \frac{Q_R^2}{A} \right)}_2 + \underbrace{g A \frac{\partial \xi_R}{\partial x}}_3 + \underbrace{g \frac{Q_R |Q_R|}{C_z^2 A R}}_4 = 0$$

که در آن:  $T$ = عرض سطح آب،  $\xi_R$ = ارتفاع سطح آب بالای خط مبدأ،  $Q_R$ = شتاب ثقل،  $A$ = مساحت مقطع عرضی خیس شده،  $R = \frac{A}{P}$ = شعاع هیدرولیکی،  $P$ = محیط خیس شده مقطع عرضی،  $\beta$ = ضریب اندازه حرکت و  $C_z$ = ضریب شزی می‌باشد. در معادله (۲): ترم (۱) عبارتست از: شتاب محلی، (۲): شتاب جابجایی، (۳): گرادیان فشار و (۴): مقاومت کف.

در این معادلات جهت برآورد ضریب شزی از معادله زیر استفاده شده است:

$$C_z = \frac{I}{n} R^{\frac{1}{6}} \quad (3)$$

که در آن:  $n$ = ضریب زبری مائینگ می‌باشد (۳).

معادله انتقال-پخش حاکم بر جریان

شاخص‌های آلودگی را معمولاً با استفاده از معادله انتقال-پخش توسط روش‌های عددی می‌توان شبیه‌سازی نمود. که به صورت زیر می‌باشد:

$$\underbrace{\frac{\partial C A}{\partial t}}_1 + \underbrace{\frac{\partial Q_R C}{\partial x}}_2 - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left[ A D_L \frac{\partial C}{\partial x} \right]}_3 = S_0^d + S_t^d \quad (4)$$

که در این رابطه:  $C$ = غلظت فلز سنگین محلول مورد نظر متغیر در مقطع،  $Q_R$ = دبی جریان،  $A$ = سطح مقطع جریان و  $D_L$ = ضریب پخشیدگی طولی می‌باشد. در این رابطه ترم (۱): عبارت است از: تأثیر محلی، (۲): انتشار به وسیله جابجایی، (۳): انتشار به وسیله پخشیدگی، (۴) مقدار آلاینده ورودی و یا

است. روش عددی مورد استفاده یک روش ضمنی<sup>۲</sup> بوده که همیشه پایدار می‌باشد. اما برای بالابردن دقت در تخمین مقادیر، پیشنهاد می‌شود عدد کورانت کوچک‌تر از پنج نگهداشته شود.

در این مدل معادله انتقال-پخش با استفاده از ادغام الگوی تفاضل مرکزی *Crank-Nicolson* و *ULTIMATE* حل شده است. این روش نهایت<sup>۱</sup> به صورت ضمنی حل می‌گردد که بدون شرط پایدار است و بهدلیل کاربرد روش *UQ* در آن، به خصوص برای اعداد کورانت زیر یک بسیار بالا می‌باشد.

برای اطمینان از نتایج مدل لازم است واسنجی و صحبت‌سنجدی انجام پذیرد. در ابتدا باید مدل هیدرودینامیکی با قرار دادن شرایط مرزی در بالا و پایین دست مورد بررسی قرار گیرد. مواردی که در مدل هیدرودینامیکی واسنجی و صحبت‌سنجدی می‌شوند دبی و سطح آب می‌باشد. برای اجرای مدل انتقال آلودگی تنها شرایط مرزی بالادست کافی است و مدل می‌تواند خود مرز پایین دست را محاسبه نماید. همچنین می‌توان نتایج مدل را در پایین دست با مقادیر اندازه‌گیری شده مقایسه نموده و سپس آن‌ها را مورد واسنجی و صحبت‌سنجدی قرار داد (۷ و ۸).

### انتخاب ضریب زوال متغیر

غلظت فلزات سنگین محلول و همچنین زوال آن‌ها به میزان شوری و *pH* آب رودخانه بستگی دارد<sup>(۶)</sup>. کاشفی‌پور و همکاران در سال ۲۰۰۶ با انتخاب ضریب زوال متغیر با زمان برای کلیفرم مدفوعی و کل به نتایج قابل قبولی از مدل‌سازی دست پیدا کردند. با توجه به این‌که زوال فلزات سنگین محلول به میزان شوری و *pH* در آب بستگی دارد در این تحقیق با استفاده از روش کاشفی‌پور و همکاران<sup>(۲۰۰۶)</sup> به انتخاب و محاسبه ضرایب زوالی جدید جهت مدل‌سازی فلزات سنگین سرب و کادمیوم پرداخته شده است. به علت فقدان اطلاعات کافی در مورد شوری از *EC* به عنوان تابعی از شوری در

در این رابطه:  $C = \text{غلظت فلز سنگین محلول}, A = \text{سطح مقطع جریان} \text{ و } K = \text{ضریب زوال (day}^{-1})$  می‌باشد. مقدار این ضریب برای فلزات سنگین محلول تابعی از عوامل محیطی مانند *pH* شوری، دما و ... است (۵) که به صورت زیر نیز می‌توان آن را نشان داد:

$$\kappa = f(\text{Temperature}, pH, \text{Salinity}, \dots) \quad (8)$$

در بعضی از مدل‌ها ضرایب مورد استفاده وابسته به درجه حرارت هستند. برای این منظور ضرایب در  $20^{\circ}\text{C}$  وارد شده و سپس جهت کاربرد با فرمول استریتر فلیپس برای دمای موردنظر تصحیح می‌شوند.

$$\kappa_T = \kappa_{20} \times \theta^{(T-20)} \quad (9)$$

در رابطه فوق:  $\kappa_T = \text{میزان ضریب زوال وابسته به درجه حرارت محلی}, \kappa_{20} = \text{میزان ضریب در درجه حرارت استاندارد}, \theta = \text{ثابت تجربی برای ضریب واکنش و } T = \text{درجه حرارت می‌باشد} \text{ و } ۷\text{ و } ۶\text{.}$

### روش تحقیق

#### روش حل عددی و معرفی مدل 'FASTER'

در این تحقیق از مدل یک بعدی *FASTER* که به منظور شبیه‌سازی جریان، انتقال املاح و پارامترهای کیفی در رودخانه‌ها و خلیج بسط داده شده بود، استفاده گردید. این مدل قادر به شبیه‌سازی جریان و انتقال رسوب و املاح در سیستم‌های رودخانه‌ای و خلیج در شرایط غیر دائمی و زیر بحرانی می‌باشد که برای اولین بار توسط کاشفی‌پور در سال ۲۰۰۱ بسط داده شد و در این تحقیق با افزودن چندین زیر برنامه، توانایی مدل‌سازی آلاینده‌ها و فلزات سنگین را پیدا کرد. از این مدل می‌توان برای شرایطی که رودخانه تحت تأثیر جزر و مد باشد استفاده نمود. در این مدل برای حل عددی معادلات پیوستگی و اندازه حرکت از الگوی *Crank-Nicolson* به همراه روش *Staggered* با اندازه شبکه متغیر استفاده شده

### منطقه مورد مطالعه

به علت وجود صنایع فلزی مختلف در نزدیکی شهر اهواز و ورود فاضلاب این کارخانجات به رودخانه کارون مدل-سازی غلظت فلزات سنگین در نزدیکی این شهر از اهمیت بالایی برخوردار است. جهت تحلیل بهتر پخش غلظت فلزات سنگین در شهر اهواز بازه ملاتانی تا فارسیات جهت مدل سازی پخش غلظت فلزات سنگین انتخاب گردید (۱۰).

منطقه مورد مطالعه شامل ایستگاه‌های هیدرومتری ملاتانی، اهواز، شکاره و فارسیات رودخانه کارون می‌باشد که در ایستگاه‌های ملاتانی و شکاره، اندازه‌گیری فلزات سنگین صورت می‌گیرد. در مدل ایستگاه ملاتانی به عنوان شرایط مرزی بالادست با مقطع شماره ۱۱۳، ایستگاه فارسیات برای شرایط مرزی پایین دست با مقطع شماره ۱، ایستگاه اهواز به عنوان ایستگاه شاخص با مقطع شماره ۴۹ برای واسنجی و مقایسه نتایج شبیه‌سازی هیدرومتریک و ایستگاه شکاره با مقطع شماره ۳۶ جهت واسنجی و مقایسه نتایج فلزات سنگین انتخاب گردید. اطلاعات مقاطع رودخانه در بخش هیدرومتریکی مدل مورد نیاز می‌باشد. محدوده طرح در این تحقیق حدوداً ۱۱۰ کیلومتر می‌باشد و اطلاعات ۱۱۳ مقطع رودخانه از سازمان آب و برق خوزستان تهیه گردیده است. در شکل ۱ (الف تا ج) مقاطع مورد استفاده در مدل، محل ورودی آلاینده‌های جانبی به رودخانه و منطقه مورد مطالعه نشان داده شده است. در این تحقیق غلظت فلزات سنگین محلول سرب و کادمیوم با استفاده از روش جذب اتمی اندازه‌گیری شده که این اطلاعات از سازمان آب و برق خوزستان تهیه گردید (۱۰).

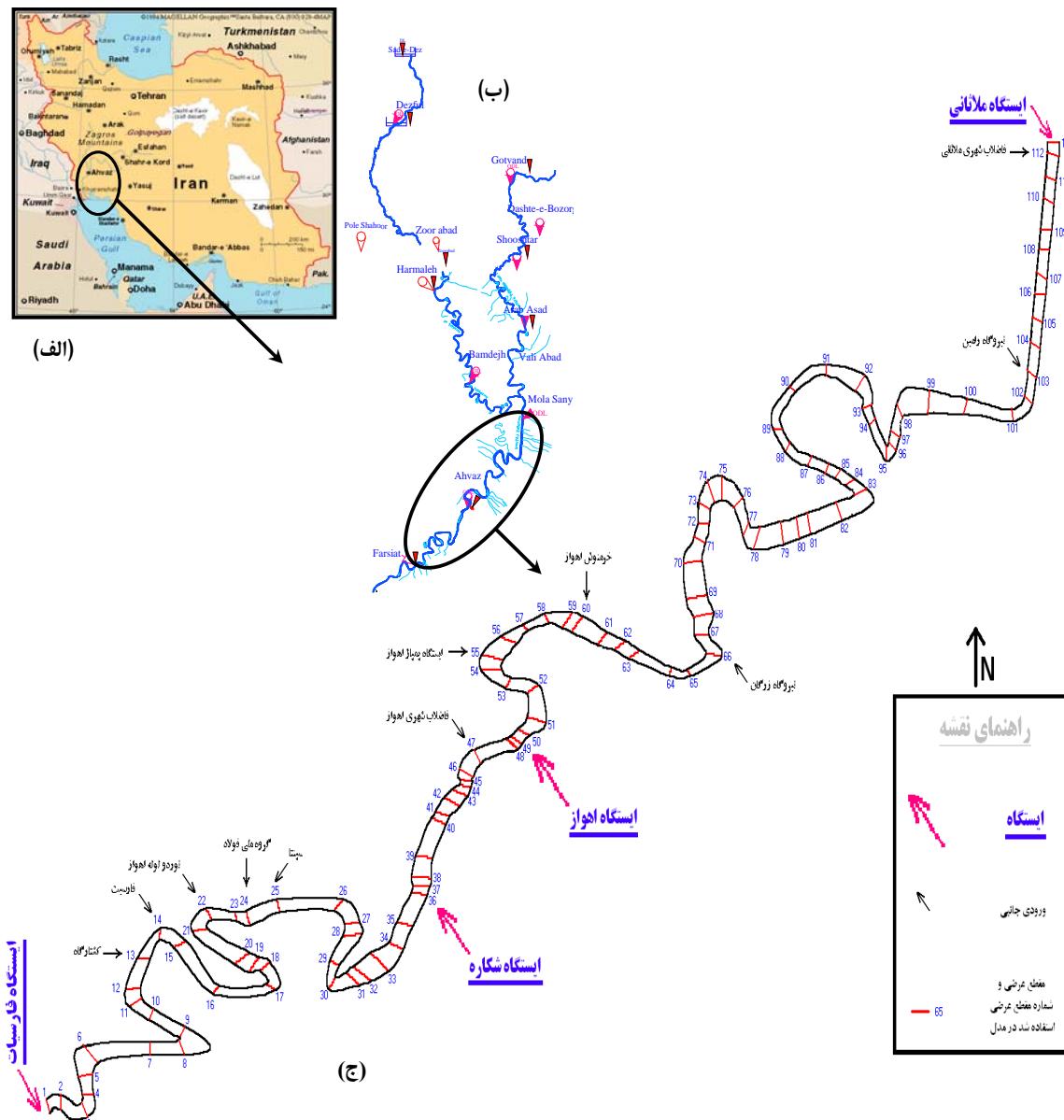
انتخاب ضریب زوال متغیر استفاده گردید. همچنین از ۵ ضریب زوال مختلف انتخابی برای مدل‌سازی این دو فلز استفاده شده که به صورت زیر می‌باشند:

- ۱- ضریب زوال صفر (ماده زوال ناپذیر)
- ۲- ضریب زوال ثابت
- ۳- ضریب زوال متغیر با زمان به عنوان معادله‌ای از  $pH$
- ۴- ضریب زوال متغیر با زمان به عنوان معادله‌ای از  $EC$
- ۵- ضریب زوال متغیر با زمان به عنوان معادله‌ای از  $pH$  و  $EC$

روش کار و محاسبه هر کدام از ضرایب زوال متغیر جدید (موارد ۳ تا ۵) به صورت زیر می‌باشد.

پس از واسنجی و صحتسنجی مدل هیدرومتریک در ابتدا مدل برای هر کدام از داده‌های اندازه‌گیری شده فلز سنگین محلول اجرا می‌گردد و با انتخاب و تغییر ضریب زوال سعی بر همپوشانی کامل بین داده شبیه‌سازی شده با داده واقعی (در یک زمان خاص) می‌شود. سپس با داشتن پارامتر متغیر (نظیر  $pH$  یا  $EC$  یا هر دو) و همچنین ضریب زوال در زمانی که داده‌های مشاهداتی موجود باشند، سعی به برآورد بهترین رابطه بین ضریب زوال محاسبه شده (برای هر زمان خاص) و پارامترهای موجود می‌شود. با استفاده از این روش می‌توان یک ضریب زوال متغیر برای فلز سنگین محلول مورد نظر به دست آورد (۹).

در این راستا پس از اجرای مدل و تعیین ضرایب زوال برای هر زمان خاص روابطی بین ضریب زوال و  $EC$  و  $pH$  برای فلزات سنگین محلول سرب و کادمیوم در رودخانه کارون به دست آمد که در ادامه به نتایج حاصل اشاره شده است. در نهایت این روابط به عنوان ضریب زوال متغیر در مدل جهت واسنجی و صحتسنجی مورد استفاده قرار گرفتند.



شکل ۱- (الف) موقعیت حوضه آبریز کارون و دز، (ب) شبکه رودخانه‌ای حوضه کارون و دز و (ج) منطقه مورد مطالعه، محل آلاینده‌های ورودی و جانمایی ایستگاه‌ها

#### نتایج و بحث

در ابتدا مدل هیدرودینامیکی مورد بررسی قرار گرفت. مواردی که در مدل هیدرودینامیکی واسنجی و صحتسنجی می‌شوند دبی و سطح آب می‌باشد. بدین منظور از اطلاعات ماهه‌ای فروردین و اردیبهشت سال ۱۳۸۲ در ایستگاه ملائکی، اهواز و فارسیات استفاده شده است. این ماهها به علت این که تغییرات

پس از اطمینان از کار مدل لازم است که نتایج مدل مورد واسنجی و صحتسنجی قرار گیرد. در ادامه ضمن برآورد ضریب زوال متغیر به واسنجی و صحتسنجی مدل در منطقه مورد مطالعه پرداخته شد و مقادیر و ضرایب ثابت برای قسمت هیدرودینامیک و آلودگی مشخص گردید.

(ایستگاه فارسیات) تا مقطع ۲۹، قسمت ۲: از مقطع ۳۰ تا مقطع ۵۴، قسمت ۳: از مقطع ۵۵ تا مقطع ۱۰۱، قسمت ۴: از مقطع ۱۰۲ تا مقطع ۱۱۳ (ایستگاه ملاثانی). مقدار ضریب زبری مانینگ برای قسمتهای ۱، ۲، ۳ و ۴ محدوده طرح به ترتیب برابر با  $0,026$ ،  $0,050$ ،  $0,040$  و  $0,031$  براورد گردید. همچنین از اطلاعات شش ماهه اول سال ۱۳۸۲ جهت واسنجی مدل استفاده شد. نتایج حاصل در جدول ۱، و شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است.

دبی و سطح آب در آن‌ها زیاد می‌باشد انتخاب شده است. هیدروگراف ورودی در ایستگاه ملاثانی به عنوان مرز بالادست و اطلاعات اشل-زمان در ایستگاه فارسیات به عنوان مرز پایین دست برای مدل معرفی شده و برای مقایسه نتایج از اطلاعات ایستگاه اهواز استفاده شده است. ضریب زبری مانینگ تنها پارامتر برای واسنجی مدل هیدرودینامیکی می‌باشد. برای این کار با توجه به شرایط منطقه مورد مطالعه محدوده به چهار قسمت تقسیم شده که عبارتند از: قسمت ۱: از مقطع ۱

جدول ۱- خلاصه نتایج آماری شبیه‌سازی هیدرودینامیک جریان

| صحت‌سنجدی |                |        |        | واسنجی              |                   |                  |                       | مدل هیدرودینامیکی |
|-----------|----------------|--------|--------|---------------------|-------------------|------------------|-----------------------|-------------------|
| RMSE      | R <sup>2</sup> | A      | %Error | RMSE <sup>(a)</sup> | R <sup>2(b)</sup> | a <sup>(c)</sup> | %Error <sup>(d)</sup> |                   |
| ۰,۳۰۲۳    | ۰,۹۶۴          | ۰,۹۹۰۰ | ۲,۲۷   | ۰,۲۸۶۸              | ۰,۹۵۵             | ۱,۰۰۶۳           | ۱,۸۴                  | سطح آب            |
| ۱۲۱,۵۳    | ۰,۹۷۷۲         | ۱,۱۰۳۸ | ۱۲,۸۹  | ۲۰۲,۳۲              | ۰,۹۵۶             | ۱,۱۲۰۷           | ۱۶,۲۶                 | دبی               |

**(a) Root Mean Square Error**

$$RMSE = \left[ \sum_{i=1}^n \frac{(X_{ip} - X_{im})^2}{n} \right]^{0.5}$$

**(b) Coefficient of Determination (r-Square)**

$$R^2 = \frac{\left( \sum_{i=1}^n X_{ip} X_{im} \right)^2}{\sum_{i=1}^n X_{ip}^2 \sum_{i=1}^n X_{im}^2}$$

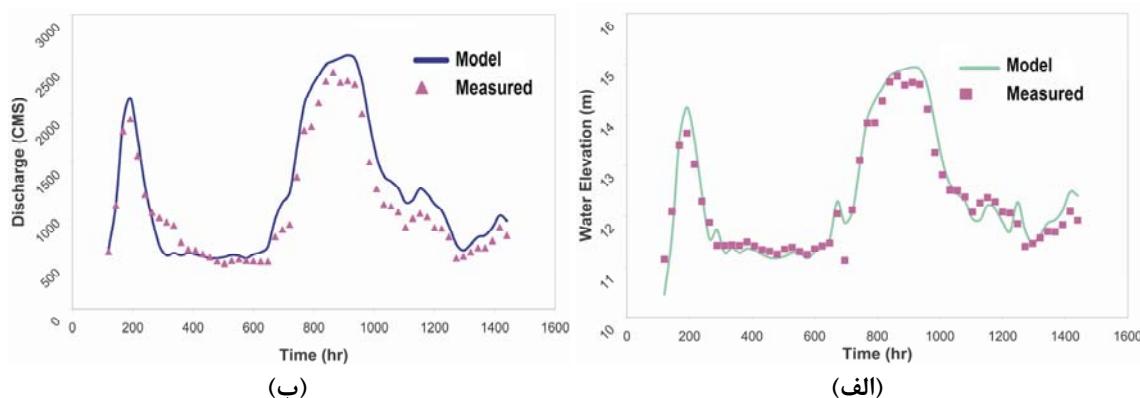
**(c) Line Slope**

$$a = \frac{X_{ip}}{X_{im}}$$

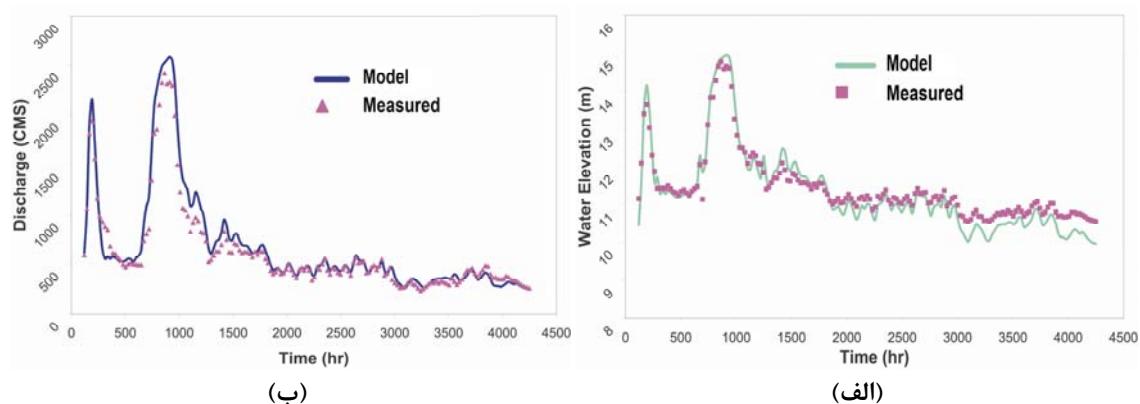
**(d) Average Absolute Error**

$$\%Error = \frac{\sum_{i=1}^n |X_{ip} - X_{im}|}{\sum_{i=1}^n X_{im}} \times 100$$

که در آن:  $X_{ip}$  = داده شبیه‌سازی شده،  $X_{im}$  = داده اندازه‌گیری شده و  $n$  = تعداد داده‌ها می‌باشد (۱۱).



شکل ۲-الف) واسنجی سطح آب رودخانه در مقطع اهواز، ب) واسنجی دبی رودخانه در مقطع اهواز



شکل ۳-الف) صحتسنجی سطح آب رودخانه در مقطع اهواز، ب) صحتسنجی دبی رودخانه در مقطع اهواز

با توجه به اهمیت فلزات سنگین سرب و کادمیوم برای هر کدام از این فلزات ۵ ضریب زوال مختلف جهت شبیه‌سازی نتایج حاصل، انتخاب گردید. ۲ ضریب زوال دیگر در این تحقیق ثابت در نظر گرفته شده که یکی از آن‌ها صفر و دیگری عددی ثابت جهت مدل‌سازی می‌باشد. در این تحقیق ضریب زوال ثابت برای فلزات سنگین سرب و کادمیوم به ترتیب  $0.12 \pm 0.38$  برآورد شد. همان‌گونه که قبلاً توضیح داده شد سعی گردید که با اجرای مدل بهترین رابطه برای ۳ ضریب زوال متغیر انتخابی برآورده شود، که نتایج حاصل در جداول ۲ و ۳ ارایه گردیده است.

برای اجرای مدل انتقال آلودگی تنها شرایط مرزی بالا دست کافی است و مدل می‌تواند خود مرز پایین دست را محاسبه نماید. اطلاعات آلودگی ایستگاه ملاتانی به عنوان داده‌های ورودی برای مرز بالا دست مورد استفاده قرار گرفته است. در بخش آلودگی با استفاده از اطلاعات ماههای مرداد و شهریور سال ۱۳۸۳ در ایستگاه ملاتانی مدل برای واسنجی مدل آلودگی اجرا شده است. همچنین از اطلاعات شش ماه اول سال ۱۳۸۳ در ایستگاه ملاتانی، برای صحتسنجی مدل شوری استفاده شده و نتایج مدل در ایستگاه شکاره با مقادیر اندازه‌گیری شده مقایسه شده است.

جدول ۲- ضرایب زوال جدید به دست آمده جهت مدل‌سازی فلز سنگین محلول سرب در رودخانه کارون

| ضریب زوال انتخابی                  | معادله ضریب زوال انتخابی                                |
|------------------------------------|---|
| ضریب زوال صفر (ماده زوال ناپذیر)   | $\kappa = 0 \text{ or } S_T = 0$                        |
| ضریب زوال ثابت ( $= 0.12$ )        | $\kappa = Const.$                                       |
| ضریب زوال معادله‌ای از $pH$        | $\kappa = -0.1646 \times pH + 1.4934$                   |
| ضریب زوال معادله‌ای از $EC$        | $\kappa = -0.00023 \times EC + 0.581$                   |
| ضریب زوال معادله‌ای از $pH$ و $EC$ | $\kappa = 0.160 \times pH - 0.000402 \times EC - 0.401$ |
| $R^2 = 1.000$                      |   |

جدول ۳- ضرایب زوال جدید به دست آمده جهت مدل‌سازی فلز سنگین محلول کادمیوم در رودخانه کارون

| ضریب زوال انتخابی                  | معادله ضریب زوال انتخابی                                 |
|------------------------------------|--|
| ضریب زوال صفر (ماده زوال ناپذیر)   | $\kappa = 0 \text{ or } S_T = 0$                         |
| ضریب زوال ثابت ( $= 0.38$ )        | $\kappa = Const.$  |
| ضریب زوال معادله‌ای از $pH$        | $\kappa = -0.2462 \times pH + 2.3738$                    |
| ضریب زوال معادله‌ای از $EC$        | $\kappa = -0.000201 \times EC + 0.7286$                  |
| ضریب زوال معادله‌ای از $pH$ و $EC$ | $\kappa = -0.1231 \times pH - 0.0001 \times EC + 1.5512$ |
| $R^2 = 0.560$                      |  |

واسنجی و صحتسنجی قرار گرفتند، که در جداول ۴ و ۵ و

شکل‌های ۴ و ۵ نشان داده شده است.

پس از به دست آوردن ضرایب زوال متغیر جدید، نتایج حاصل

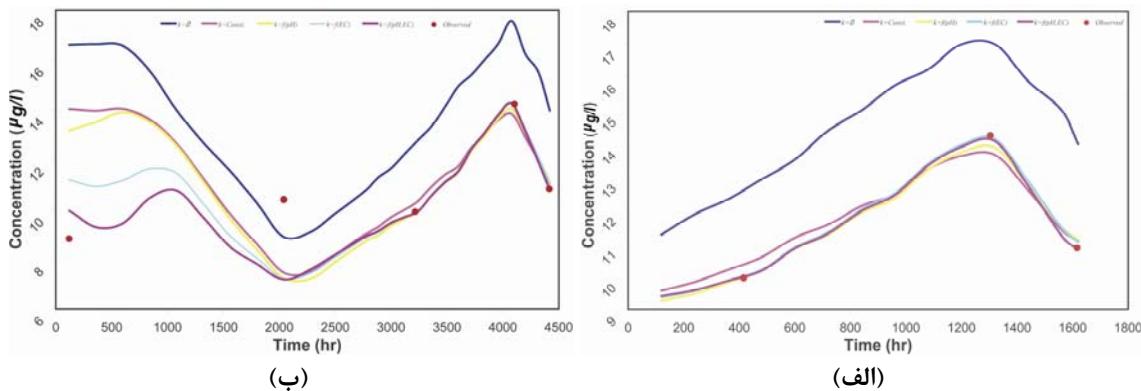
برای فلزات سنگین سرب و کادمیوم در مقطع شکاره مورد

جدول ۴- خلاصه نتایج آماری شبیه‌سازی فلز سنگین محلول سرب

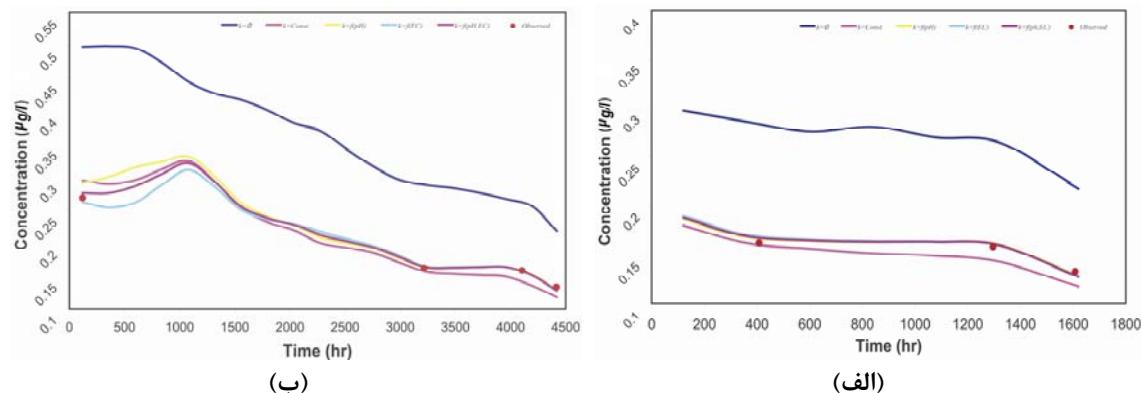
| صحتسنجی |       |        |            | واسنجی |       |        |        | ضریب زوال انتخابی                                       | نتایج مدل |
|---------|-------|--------|------------|--------|-------|--------|--------|---|-----------|
| RMSE    | $R^2$ | $a$    | %Err<br>or | RMS    | $R^2$ | $a$    | %Error |   |           |
| ۴,۲۰۷۲  | ۰,۱۱۳ | ۱,۲۵۸۲ | ۳۳,۳۰      | ۲,۹۵۴۴ | ۰,۹۸۹ | ۱,۲۴۷۲ | ۲۵,۲۴  | $\kappa = 0$  |           |
| ۲,۶۸۵۵  | ۰,۰۵۷ | ۱,۰۲۳۳ | ۱۷,۱۳      | ۰,۴۰۶۴ | ۰,۹۹۹ | ۰,۹۹۷۸ | ۳,۳۵   | $\kappa = Const.$                                       |           |
| ۲,۳۹۸۴  | ۰,۱۴۳ | ۱,۰۰۵۶ | ۱۴,۹۷      | ۰,۲۶۳۳ | ۰,۹۸۸ | ۰,۹۹۶۵ | ۱,۸۹   | $\kappa = -0.1646 \times pH + 1.4934$                   |           |
| ۱,۷۸۰۷  | ۰,۴۰۴ | ۰,۹۸۲۴ | ۱۰,۷۷      | ۰,۱۳۹۶ | ۰,۹۹۶ | ۱,۰۰۴۷ | ۰,۸۴   | $\kappa = -0.00023 \times EC + 0.581$                   |           |
| ۱,۵۳۲۹  | ۰,۵۶۹ | ۰,۹۵۷۸ | ۸,۲۹       | ۰,۰۶۷۱ | ۰,۹۹۹ | ۰,۹۹۵۹ | ۰,۳۵   | $\kappa = 0.160 \times pH - 0.000402 \times EC - 0.401$ |           |

جدول ۵- خلاصه نتایج آماری شبیه‌سازی فلز سنگین محلول کادمیوم

| صحت‌سنگی |                |        |        | واسنجی |                |        |        | ضریب زوال انتخابی<br>$\kappa$                        | نتایج مدل |
|----------|----------------|--------|--------|--------|----------------|--------|--------|--|-----------|
| RMSE     | R <sup>2</sup> | a      | %Error | RMSE   | R <sup>2</sup> | a      | %Error |  |           |
| ۰,۱۴۸۳   | ۰,۹۹۹          | ۱,۷۸۵۵ | ۷۶,۴۲  | ۰,۱۰۸۶ | ۰,۹۹۱          | ۱,۷۱۵۳ | ۷۱,۱۱  | $\kappa = 0$   |           |
| ۰,۰۱۷۱   | ۰,۹۹۷          | ۱,۰۱۳  | ۸,۴۷   | ۰,۰۱۲۶ | ۰,۹۴۷          | ۰,۹۲۵۶ | ۷,۶۷   | $\kappa = Const.$                                    |           |
| ۰,۰۱۱۴   | ۰,۹۹۹          | ۱,۰۴۳۹ | ۴,۱۶   | ۰,۰۰۲۸ | ۰,۹۹۶          | ۱,۰۰۳۲ | ۱,۷۸   | $\kappa = -0.2462 \times pH + 2.3738$                |           |
| ۰,۰۰۵۰   | ۰,۹۹۳          | ۰,۹۸۸۷ | ۲,۵۶   | ۰,۰۰۴۱ | ۱,۰۰           | ۱,۰۰۲۴ | ۲,۵۴   | $\kappa = -0.000201 \times EC + 0.7286$              |           |
| ۰,۰۰۴۶   | ۰,۹۹۸          | ۱,۰۱۴۴ | ۲,۲۹   | ۰,۰۰۳۵ | ۰,۹۹۹          | ۱,۰۰۱۹ | ۲,۱۸   | $\kappa = -0.1231 \times pH - 0.0001 \times EC + 1.$ |           |



شکل ۴- (الف) واسنجی غلظت سرب رودخانه در مقطع شکاره، (ب) صحت‌سنگی غلظت سرب رودخانه در مقطع شکاره



شکل ۵- (الف) واسنجی غلظت کادمیوم رودخانه در مقطع شکاره، (ب) صحت‌سنگی غلظت کادمیوم رودخانه در مقطع شکاره

## نتیجه‌گیری

- coefficient in natural channels*, water research, vol. 36, pp. 1596-1608
5. Wu, Y., Falconer, R.A., and Lin, B., (2001), "Hydro-environmental modelling of heavy metal fluxes on an estuary", In: Proceedings of XXIX IAHR Congress, Theme b: Environmental Hydraulics, pp. 732-739.
  6. Nassehi, V. and Bikangaga, J.H., 1993. A mathematical model for hydrodynamics and pollutant transport in long and narrow tidal rivers, Appl. Math Modelling journal, Vol. 17, pp. 415-422
  7. Kashefipour, S.M., 2001, "Modeling Flow, Water Quality and Sediment Transport Processes in Riverine Basins", Ph.D. Thesis, Department of Civil Engineering, Cardiff University, UK., 295 pp.
  8. Kashefipour, S.M., Falconer R.A., and Lin, B., 1999. FASTER model reference manual. Environmental Water Management Research Centre Report, Cardiff University
  9. Kashefipour, S.M., Lin, B., and Falconer, R.A., 2006, Modelling the fate of faecal indicators in a coastal basin, Journal of water research, Vol. 40, pp. 1413-1425
  10. جاماب(مهندسین مشاور)، ۱۳۷۸، "طرح جامع آب کشور - حوزه آبریز دز و کارون".
  11. Azmathullah, H.Md., Deo, M.c. and Deolalikar, P.B., 2005. Neural networks for estimating the scour downstream of a ski-jump bucket, Journal of hydraulic engineering, Vol. 131, No. 10, pp. 898-908

نتایج نشان داد که ضریب زوال ثابت در منطقه مورد نظر برای فلزات سرب و کادمیوم به ترتیب  $0.12 \pm 0.08$  و  $0.18 \pm 0.09$  می‌باشد. با توجه به معادلات ضریب زوال متغیر ارایه شده در جداول ۲ و ۳ و مقادیر اندازه‌گیری شده  $pH$  و  $EC$  دامنه تغییرات ضریب زوال برای سرب به ترتیب  $0.18 \pm 0.11$  و  $0.43 \pm 0.10$  و برای کادمیوم به ترتیب  $0.40 \pm 0.31$  و  $0.48 \pm 0.31$  برآورد گردید.

با توجه به انتخاب این ضرایب زوال میزان خطای متوسط برای فلز سنگین سرب از  $29\% \pm 4\%$  و برای فلز سنگین کادمیوم از  $74\% \pm 2\%$  کاهش یافت. با انتخاب ضریب زوال متغیر جهت مدل‌سازی فلزات سرب و کادمیوم دقت نتایج به اندازه زیادی بالا می‌رود. همچنین باید خاطر نشان کرد که ضرایب زوال معرفی شده در این پژوهش با توجه به آمارهای به کار برده شده در مدل فقط برای رودخانه کارون قابل استفاده می‌باشند، اما از روش معرفی شده در این تحقیق می‌توان جهت محاسبه ضریب زوال متغیر برای دیگر رودخانه‌ها و فلزات نیز استفاده نمود.

## منابع

1. کارآموز، م. و کراجچان، ر.، (۱۳۸۲)، "برنامه‌ریزی و مدیریت کیفی سیستم‌های منابع آب"، انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر، چاپ اول.
2. توکلی‌زاده، ا.، ۱۳۸۵، "مدل سازی عددی هیدرودینامیکی و کیفی سیستم‌های رودخانه‌ای"، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، گروه سازه‌های آبی، دانشگاه شهید چمران اهواز.
3. Wu, Y., Falconer, R.A., and Lin,B., 2005. Modelling trace metal concentration distributions in estuarine waters, Journal of Estuarine, costal and shelf science 64 pp. 699-709
4. Kashefipour, S.M., and Falconer, R.A., 2002, Longitudinal dispersion