



دانشگاه علوم کشاورزی
و منابع طبیعی ساری

مدل سازی انتقال و پراکندگی املاح در رودخانه‌ها و آبراهه‌ها با OTIS



مترجم:

دکتر محمد میرناصری

هیات علمی گروه مهندسی آب دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری

مدل سازی انتقال و پراکندگی املاح در رودخانه‌ها و آبراهه‌ها با OTIS

نویسنده: Robert L. Runkel

مترجم: دکتر محمد میرناصری

استادیار گروه مهندسی آب

دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری

صفحه حقوقی (شناسنامه کتاب)

سرشناسه	: رانکل، رابرت ال.
عنوان و نام پدیدآور	: Runkel, Robert L.
مشخصات نشر	: مدل‌سازی انتقال و پراکنندگی املاح در رودخانه‌ها و آبراهه‌ها با OTIS / نویسنده رابرت ال رانکل؛ مترجم محمد میرناصری.
مشخصات ظاهری	: ساری: دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری، معاونت پژوهشی، ۱۴۰۴.
شابک	: ۱۴۸ ص.
وضعیت فهرست نویسی	: 978-622-8490-15-1
یادداشت	: قیبا
موضوع	: عنوان اصلی: One-dimensional transport with inflow and storage (OTIS) : a solute transport ... 1998.
	: رسوب -- انتقال -- الگوهای ریاضی
	: جریان رودخانه -- الگوهای ریاضی
	: Streamflow -- Mathematical models
شناسه افزوده	: میرناصری، محمد، ۱۳۴۷-
شناسه افزوده	: دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری. معاونت پژوهشی
رده بندی کنگره	: GB۷۰۱
رده بندی دیویی	: ۵۵۳/۷
شماره کتابشناسی ملی	: ۱۰۰۵۸۰۲۲
اطلاعات رکورد کتابشناسی	: قیبا

United States Geological Survey

Rob Runkel
Research Hydrologist

runkel@usgs.gov
<https://www.usgs.gov/staff-profiles/robert-runkel>

October 24, 2024

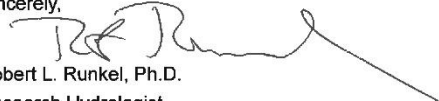
Sari University of Agricultural Sciences and Natural Resources
Sari, Mazandaran, I.R. of Iran

Re: Translation of OTIS software documentation

To whom this may concern:

I was recently contacted by Dr. Mohammad Mirnaseri in regard to the OTIS solute transport model, a software product distributed by the United States Geological Survey. Dr. Mirnaseri informed me that it is his intent to translate the software documentation from English to Persian so the software can be used by non-english speaking scientists. We have corresponded in regard to his translation, and I have agreed to post the Persian version of the document on the software website. After he completes the translation, the document will be posted at <https://water.usgs.gov/software/OTIS/>

Sincerely,



Robert L. Runkel, Ph.D.
Research Hydrologist

تقدیم به

فرشتگان زندگی ام

همسرِ مهربان

و

کارنِ عزیزم؛

همراهانِ بی چشم داشتِ این مسیر

پیشگفتار مترجم

در عصری که پیچیدگی چالش‌های زیست‌محیطی و مدیریت منابع آبی به یکی از مهم‌ترین دغدغه‌های جامعه علمی تبدیل شده است، نیاز به ابزارهای دقیق و کاربردی برای مدلسازی و تحلیل رفتار آلاینده‌ها در سیستم‌های آبی بیش از پیش احساس می‌شود. مدل عددی OTIS که توسط متخصصان برجسته سازمان زمین‌شناسی ایالات متحده (USGS) توسعه یافته است، به عنوان یکی از پیشرفته‌ترین و کارآمدترین ابزارهای موجود در این حوزه شناخته می‌شود. این اثر که با دقت و وسواس علمی قابل توجهی ترجمه و تدوین شده است، نه تنها راهنمای جامع و کاملی برای استفاده از این مدل را ارائه می‌دهد، بلکه با افزودن فصل پیوستی غنی و کاربردی حاوی مباحث نظری عمیق و مثال‌های عملی متنوع، می‌تواند به منبعی مناسب برای جامعه دانشگاهی و پژوهشی کشور تبدیل گردد. این کتاب به صورت ویژه برای استفاده در دروس زیر در مقاطع کارشناسی ارشد و دکتری توصیه می‌شود:

در رشته مهندسی آب:

- مهندسی رودخانه
- کیفیت آب
- هیدرولیک محیط‌های متخلخل
- مدل‌سازی کیفی آب‌های سطحی
- مبانی انتقال، انتشار و مدلسازی آلاینده‌ها در محیط‌های آبی
- مدیریت یکپارچه منابع آب
- انتقال آلاینده‌ها در منابع آب

در رشته مهندسی عمران:

- هیدرولیک پیشرفته
- مهندسی محیط زیست و منابع آب
- مدلسازی سیستم‌های هیدرولیکی

در رشته مهندسی محیط زیست:

- مدلسازی کیفیت آب
- دینامیک انتقال و پخش آلاینده‌ها
- ارزیابی اثرات زیست‌محیطی پروژه‌های آبی
- پایش و کنترل کیفیت آب

این کتاب نه تنها به عنوان یک منبع درسی برای دوره‌های تحصیلات تکمیلی قابل استفاده است، بلکه می‌تواند به عنوان راهنمای عملی جامع برای انجام پروژه‌های تحقیقاتی، اجرایی، پایان‌نامه‌های کارشناسی ارشد، رساله‌های دکتری و مطالعات میدانی نیز مورد استفاده قرار گیرد. اساتید محترم می‌توانند از مثال‌های کاربردی و مسائل عملی ارائه شده در این کتاب برای غنی‌سازی محتوای درسی و طراحی پروژه‌های آموزشی بهره ببرند. همچنین دانشجویان عزیز با مطالعه این اثر می‌توانند مهارت‌های عملی خود را در زمینه مدلسازی کیفی منابع آب به سطح قابل توجهی ارتقا دهند.

خوانندگان گرامی می‌توانند با مراجعه به وب‌گاه سازمان زمین شناسی آمریکا به آدرس: https://water.usgs.gov/cgi-bin/otis_download.cgi نسبت به بارگیری اصل نرم‌افزار به‌صورت رایگان اقدام نمایند. در پایان، امیدوارم این اثر بتواند گامی مؤثر در جهت ارتقای دانش مدلسازی کیفی منابع آب در کشور باشد و مورد استفاده و بهره‌برداری

دانشجویان، پژوهشگران، اساتید دانشگاه‌ها و متخصصان حوزه آب و محیط زیست قرار گیرد. از آنجا که هیچ اثری خالی از نقص نیست، از تمامی خوانندگان گرامی تقاضا دارم نظرات، پیشنهادات و انتقادات سازنده خود را از طریق نشانی الکترونیکی با اینجانب در میان بگذارند تا در ویرایش‌های آتی مورد توجه قرار گیرد. امید است این تلاش علمی بتواند زمینه‌ساز پژوهش‌های کاربردی بیشتر در حوزه مدیریت کیفیت منابع آب کشور باشد.

با آرزوی توفیق

دکتر محمد میرناصری
استادیار گروه مهندسی آب
دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری
m.mirnaseri@sanru.ac.ir

بهار ۱۴۰۴

فهرست مطالب

فصل اول	۱
مقدمه	۱
مقدمه	۲
۱- معرفی مدل	۳
۱-۱- پیشرفت‌های مدل	۳
فصل دوم	۶
تئوری و معادلات	۶
۱-۲- مدل نگهداشت موقت (TSM)	۷
۲-۲- معادلات دیفرانسیل حاکم	۹
۱-۲-۲- فرآیند و فرضیات مدل	۹
۱-۱-۲-۲- فرضیات مدل در ناحیه اصلی جریان	۱۰
۲-۱-۲-۲- فرضیات مدل در ناحیه نگهداشت	۱۰
۲-۲-۲- معادلات متغیر زمانی	۱۱
۳-۲-۲- معادلات پایدار زمانی	۱۳
۳-۲- تعریف فیزیکی مدل	۱۴
۴-۲- حل عددی - معادلات متغیر زمانی	۱۵
۱-۴-۲- تفاضلات محدود	۱۵
۲-۴-۲- روش کرانک-نیکلسون	۱۶

۱۷ غلظت املاح ناحیه اصلی جریان
۱۹ غلظت‌های املاح در ناحیه نگهداشت و رسوب بستر
۲۰ مجزا کردن روابط ناحیه اصلی جریان، ناحیه نگهداشت و ناحیه بستر رسوبی
۲۲ ۵-۲- حل عددی معالات حالت پایدار زمانی
۲۳ ۶-۲- شرایط مرزی
۲۳ ۱-۶-۲- شرایط مرزی بالادست
۲۴ ۲-۶-۲- شرایط مرزی پاییندست
۲۵ ۷-۲- تخمین پارامترها
۳۱ فصل سوم
۳۱ راهنمای کاربر
۳۲ ۳- راهنمای کاربر
۳۲ ۱-۳- محدوده کاربرد مدل OTIS
۳۳ ۲-۳- ویژگی‌های مدل
۳۳ ۱-۲-۳- شرایط متغیر زمانی و پایدار زمانی
۳۳ ۲-۲-۳- مدل سازی برای املاح واکنشی یا غیر واکنشی
۳۴ ۳-۲-۳- رژیم‌های جریان
۳۵ ۴-۲-۳- تخمین پارامترها با استفاده از الحاقیه OTIS-P
۳۶ ۳-۳- سیستم مفهومی بازبینی شده
۳۸ ۴-۳- ساختار تعریف ورودی‌ها و خروجی‌های مدل
۳۸ ۱-۴-۳- مدل عددی OTIS

۳-۴-۲- مدل عددی OTIS-P ۳۹

۳-۵- قالب ورودی داده‌ها ۴۱

۳-۵-۱- واحدها ۴۱

۳-۵-۲- شخصی‌سازی برنامه‌های اجرایی ۴۲

۳-۵-۳- پوشه کنترل ۴۲

۳-۵-۳-۱- پوشه کنترل OTIS ۴۲

۳-۵-۳-۲- پوشه کنترل OTIS-P ۴۳

۳-۵-۳-۴- پوشه پارامتر ۴۴

۳-۵-۳-۱- ردیف (۱)- مدت‌زمان شبیه‌سازی ۴۴

۳-۵-۳-۲- ردیف (۲) و (۳)- پارامترهای چاپ نتایج ۴۴

۳-۵-۳-۳- ردیف (۴)، (۵) و (۶)- پارامترهای زمان ۴۵

۳-۵-۳-۴- ردیف (۷)- فاصله از مرز بالادست ۴۵

۳-۵-۳-۵- ردیف (۸)- شرایط مرزی پایین‌دست ۴۵

۳-۵-۳-۶- ردیف (۹)- تعداد بازه‌ها ۴۶

۳-۵-۳-۷- ردیف (۱۰)- پارامترهای انتقال آلودگی هر بازه ۴۷

۳-۵-۳-۸- ردیف (۱۱)- تعداد املاح و گزینه‌های ژئوشیمی جریان ۴۸

۳-۵-۳-۹- ردیف (۱۲)- تعیین ضرایب زوال مرتبه اول (اختیاری) ۴۸

۳-۵-۳-۱۰- ردیف (۱۳)- تعیین ضرایب جذب (اختیاری) ۴۹

۳-۵-۳-۱۱- ردیف (۱۴) و (۱۵)- مکان‌های چاپ ۵۰

۳-۵-۳-۱۲- ردیف (۱۶) و (۱۷)- شرایط مرزی بالادست ۵۱

۳-۵-۳-۵- پوشه جریان ۵۴

۳-۵-۳-۱- پوشه جریان- رژیم جریان پایدار ۵۵

۳-۵-۳-۱-۱- ردیف (۱)- گزینه تغییرات در مقدار جریان ۵۶

۵۶ ۳-۵-۱-۲- ردیف (۲) و (۳) - متغیرهای جریان
۵۸ ۳-۵-۲- پوشه جریان - رژیم جریان ناپایدار
۵۸ ۳-۵-۲-۱- ردیف (۱) - گزینه تغییرات در مقدار جریان
۵۹ ۳-۵-۲-۲- ردیف‌های (۲) و (۳) - مکان‌های جریان
۶۰ ۳-۵-۲-۳- ردیف‌های (۴) تا (۷) - جریان‌های جانبی، جریان‌ها و مساحت‌ها
۶۲ ۳-۵-۶- پوشه داده‌ها (صرفاً مدل عددی OTIS-P)
۶۲ ۳-۵-۱-۶- ردیف (۱) - تعداد داده‌های مشاهداتی
۶۳ ۳-۵-۲-۶- ردیف (۲) - مقادیر غلظت‌های مشاهداتی
۶۵ ۳-۵-۷- پوشه ورودی STARPAC (صرفاً مدل عددی OTIS-P)
۶۵ ۳-۵-۱-۷- ردیف‌های (۱) تا (۷) - تنظیمات محاسباتی برای تخمین پارامترها
۶۷ ۳-۵-۲-۷- ردیف‌های (۸) - تخمین پارامترها
۶۹ فصل چهارم
۶۹ مسائل کاربردی
۷۰ ۴- برنامه‌های کاربردی مدل
۷۰ ۴-۱- مثال کاربردی اول - انتقال املاح غیر واکنشی (OTIS)
۷۵ ۴-۲- مثال کاربردی دوم - انتقال همراه با جذب (OTIS)
۷۸ ۴-۳- مثال کاربردی سوم - انتقال با زوال مرتبه اول
۷۹ ۴-۴- مثال کاربردی چهارم - انتقال املاح غیر واکنشی در جریان‌های غیردائمی (OTIS)
۸۲ ۴-۵- مثال کاربردی پنجم - شرایط مرزی پیوسته و تخمین پارامترها (OTIS-P)
۸۸ ۴-۶- مثال کاربردی ششم - شبیه‌سازی حالت پایدار و تخمین پارامترها

فصل پنجم	۹۲
خطاهای نرم افزار	۹۲
۱-۵- راهنمای نرم افزار	۹۳
۲-۵- بررسی خطاها	۹۴
منابع	۹۸
فصل ششم	۱۰۲
پیوست‌ها	۱۰۲
۱-۶- مقدمه	۱۰۳
۲-۶- آلودگی در مجاری باز	۱۰۳
۳-۶- فرآیند حرکت آلاینده‌ها	۱۰۴
۱-۳-۶- پخشیدگی	۱۰۴
۱-۱-۳-۶- پخشیدگی مولکولی	۱۰۴
۲-۱-۳-۶- پخشیدگی متلاطم	۱۰۵
۳-۱-۳-۶- پراکندگی (طولی)	۱۰۶
۴-۶- معادله حاکم بر فرآیند پخشیدگی	۱۰۷
۵-۶- معادله پخشیدگی - جابجایی:	۱۰۸
۱-۵-۶- حل تحلیلی معادله جابجایی-پراکندگی (ADE)	۱۰۹
۶-۶- ناحیه هایپریک	۱۱۰
۷-۶- فرم بستر	۱۱۱

۱۱۲.....	۸-۶- مدل نگهداشت موقت (TSM)
۱۱۵.....	۹-۶- جمع بندی
۱۱۵.....	۱۰-۶- مثال کاربردی
۱۱۸.....	۱-۱۰-۶- پوشه‌های ورودی‌ها
۱۱۸.....	۱-۱-۱۰-۶- تعریف پوشه کنترل
۱۱۸.....	۲-۱-۱۰-۶- تعریف پوشه پارامتر
۱۲۳.....	۳-۱-۱۰-۶- تعریف پوشه جریان
۱۲۴.....	۴-۱-۱۰-۶- تعریف پوشه داده‌ها
۱۲۷.....	۵-۱-۱۰-۶- تعریف پوشه ورودی STARPAC
۱۲۹.....	۶-۱-۱۰-۶- اجرای مدل عددی
۱۳۲.....	۲-۱۰-۶- پوشه‌های خروجی
۱۳۲.....	۱-۲-۱۰-۶- پوشه echo.out
۱۳۳.....	۲-۲-۱۰-۶- پوشه star.out
۱۳۴.....	۲-۲-۱۰-۶- پوشه‌های solute.out و params.out
۱۳۸.....	۱۱-۶- منابع
۱۴۰.....	فهرست نمایه‌ها
۱۴۴.....	فهرست واژگان

فهرست جدول‌ها

- جدول ۳-۱- مشخصات انواع رژیم‌های هیدرولوژیکی قابل تعریف در مدل OTIS ... ۳۵
- جدول ۳-۲- پوشه کنترل OTIS ۴۳
- جدول ۳-۳- پوشه کنترل OTIS-P ۴۳
- جدول ۳-۴- پوشه پارامتر- ردیف‌های (۱) تا (۹) ۴۶
- جدول ۳-۵- پوشه پارامتر- ردیف (۱۰)* ۴۷
- جدول ۳-۶- پوشه پارامتر- ردیف (۱۱) ۴۸
- جدول ۳-۷- پوشه پارامتر- ردیف (۱۲)* ۴۹
- جدول ۳-۸- پوشه پارامتر- ردیف (۱۳)* ۵۰
- جدول ۳-۹- پوشه پارامتر- ردیف (۱۴) و (۱۵) ۵۱
- جدول ۳-۱۰- پوشه پارامتر- ردیف (۱۶) ۵۲
- جدول ۳-۱۱- پوشه پارامتر- ردیف (۱۷)* ۵۳
- جدول ۳-۱۲- پوشه جریان پایدار- ردیف (۱) ۵۶
- جدول ۳-۱۳- پوشه جریان پایدار- ردیف (۲) ۵۶
- جدول ۳-۱۴- پوشه جریان پایدار- ردیف (۳)* ۵۷
- جدول ۳-۱۵- پوشه جریان ناپایدار- ردیف (۱) ۵۹

- جدول ۳-۱۶- پوشه جریان ناپایدار- ردیف (۲)* و (۳) ۶۰
- جدول ۳-۱۷- پوشه جریان ناپایدار- ردیف (۴) تا (۷)* ۶۱
- جدول ۳-۱۸- پوشه داده‌ها- ردیف (۱) ۶۳
- جدول ۳-۱۹- پوشه داده‌ها- ردیف (۲)* برای حالت پایدار زمانی ۶۳
- جدول ۳-۲۰- پوشه داده‌ها- ردیف (۲)* برای حالت متغیر زمانی ۶۴
- جدول ۳-۲۱- پوشه ورودی STARPAC- ردیف‌های (۱) تا (۷)* ۶۶
- جدول ۳-۲۲- پوشه ورودی STARPAC- ردیف (۸)* ۶۸
- جدول ۴-۱- تخمین پارامترها برای بازه دوم ۸۷
- جدول ۵-۱- حداکثر ابعاد پیش‌فرض برای متغیرها (فایل fmodules.inc) ۹۴
- جدول ۵-۲- حداکثر ابعاد پیش‌فرض برای متغیرها (فایل fmodules2.inc) صرفاً برای
OTIS-P ۹۴
- جدول ۵-۳- پیام‌های خطا در مدل‌های OTIS و OTIS-P ۹۵
- جدول ۵-۴- پیام‌های خطا صرفاً در مدل OTIS-P ۹۶

فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۲ - مکانیسم‌های نگهداشت موقت - نگهداشت موقت به‌طور کلی، در دو حالت رخ می‌دهند: (الف) زمانی که املاح وارد محیط‌های کوچک آب با حرکت آهسته می‌شوند و (ب) زمانی که املاح از ناحیه اصلی جریان خارج می‌شوند و وارد محیط متخلخل بستر و کناره‌های کانال آبراهه می‌شوند. (رانکل و بنکالا، ۱۹۹۵)..... ۸
- شکل ۲-۲ - فرآیندهای مؤثر بر انتقال املاح در مدل نگهداشت موقت ۹
- شکل ۳-۲ - تعریف یک مدل فیزیکی تقسیم‌شده به چند بخش مجزا (حجم‌های کنترل) ۱۴
- شکل ۴-۲ - طرح شماتیک تقسیم‌بندی مورد استفاده برای پیاده‌سازی حل عددی مدل ۱۵
- شکل ۵-۲ - شرایط مرزی بالادست (C_{bc}) در بخش اول سیستم مدل‌سازی شده ... ۲۴
- شکل ۶-۲ - شرایط مرزی پایین‌دست برحسب تعریف یک مقدار ثابت برای شار پراکنده غلظت ۲۵
- شکل ۷-۲ - فرآیند تکرار برای تخمین پارامترها در OTIS-P ۳۰
- شکل ۱-۳ - سیستم مفهومی در مدل OTIS شامل بازه‌ها و بخش‌ها ۳۶
- شکل ۲-۳ - اولین بازه در سیستم مفهومی و متغیرهای ورودی موردنیاز ۳۷

- شکل ۳-۳- پوشه‌های ورودی و خروجی مدل عددی OTIS ۳۹
- شکل ۴-۳- پوشه‌های ورودی و خروجی مدل عددی OTIS-P ۴۰
- شکل ۵-۳- انواع حالات تعریف شرایط مرزی بالادست ۵۵
- شکل ۱-۴- پوشه کنترل برای مثال کاربردی اول ۷۱
- شکل ۲-۴- پوشه پارامتر برای مثال کاربردی اول ۷۳
- ادامه شکل ۲-۴- پوشه پارامتر برای مثال کاربردی اول ۷۳
- ادامه شکل ۲-۴- پوشه پارامتر برای مثال کاربردی اول ۷۴
- شکل ۳-۴- پوشه جریان برای مثال کاربردی اول ۷۴
- شکل ۴-۴- غلظت‌های شبیه‌سازی شده و مشاهداتی در ۱۰۵ و ۴۳۳ متری ۷۵
- شکل ۵-۴- بخشی از پوشه پارامتر برای برنامه کاربردی دوم ۷۶
- شکل ۶-۴- غلظت‌های شبیه‌سازی شده و مشاهداتی در ۳۸ و ۲۸۱ متری ۷۷
- شکل ۷-۴- غلظت‌های شبیه‌سازی شده استرانسیوم در بستر رسوبی در هر پنج بازه ۷۷
- شکل ۸-۴- بخشی از پوشه پارامتر برای برنامه کاربردی سوم ۷۸
- شکل ۹-۴- مقایسه نتایج شبیه‌سازی OTIS و روش حل تحلیلی ۷۹
- شکل ۱۰-۴- پوشه جریان ناپایدار برای برنامه کاربردی چهارم ۸۱
- ادامه شکل ۱۰-۴- پوشه جریان ناپایدار برای برنامه کاربردی چهارم ۸۱

- شکل ۴-۱۱- غلظت‌های مشاهداتی و شبیه‌سازی شده لیتیوم در مکان اندازه‌گیری
چهارم (۴۵۷ متری از بالادست) ۸۲
- شکل ۴-۱۲- پوشه کنترل برای مثال کاربردی پنجم ۸۳
- شکل ۴-۱۳- پوشه داده برای مثال کاربردی پنجم ۸۵
- شکل ۴-۱۴- پوشه STARPAC برای مثال کاربردی پنجم ۸۶
- شکل ۴-۱۵- نتایج شبیه‌سازی مثال کاربردی پنجم ۸۸
- شکل ۴-۱۶- پروفیل مکانی غلظت آهن محلول در آبراهه سنت کوین گلچ ۹۰
- شکل ۴-۱۷- فهرست بخشی از پوشه داده برای برنامه مثال کاربردی ششم ۹۱
- ادامه شکل ۴-۱۷- فهرست بخشی از پوشه داده برای برنامه مثال کاربردی ششم ۹۱
- شکل ۶-۱- پخش مولکولی در آب ساکن (محمودیان شوشتری، ۱۳۸۷) ۱۰۵
- شکل ۶-۲- پخشیدگی متلاطم در جریان بدون شیب سرعت (محمودیان شوشتری،
۱۳۸۷) ۱۰۶
- شکل ۶-۳- پخشیدگی متلاطم در جریان با شیب سرعت (محمودیان شوشتری،
۱۳۸۷) ۱۰۷
- شکل ۶-۴- نمونه‌ای از تبدلات هایپریک در اثر تزریق ماده رنگی در ناحیه اصلی
جریان به صورت آزمایشگاهی (یکمن و همکاران، ۲۰۰۴) ۱۱۱
- شکل ۶-۵- نمای شماتیک تبدلات هایپریک در حضور فرم بستر خیزاب-چالاب
(موحدی و همکاران، ۱۳۹۸) ۱۱۲

- شکل ۶-۶- نمای شماتیک تبدلات هایپریک در حضور فرم بستر تلماسه (گرنیت و همکاران، ۲۰۱۸)..... ۱۱۲
- شکل ۶-۷- تصویرسازی شماتیک انتقال املاح در یک آبراهه همراه با ذخیره موقت در نواحی هایپریک..... ۱۱۴
- شکل ۶-۸- شکل گیری نواحی هایپریک در مسیر جریان یک آبراهه..... ۱۱۴
- شکل ۶-۹- نمای شماتیک از کانال آزمایشگاهی با فرم بستر خیزاب- چالاب..... ۱۱۷
- شکل ۶-۱۰- پوشه کنترل تعریف شده..... ۱۱۸
- شکل ۶-۱۱- پوشه پارامتر تعریف شده..... ۱۲۰
- شکل ۶-۱۲- پوشه جریان تعریف شده..... ۱۲۳
- شکل ۶-۱۳- پوشه داده‌ها تعریف شده (ویژه OTIS-P)..... ۱۲۶
- شکل ۶-۱۴- تعریف ردیف ۱۸ پوشه STARPAC (ویژه OTIS-P)..... ۱۲۸
- شکل ۶-۱۵- تعریف ردیف‌های ۱ الی ۷ پوشه STARPAC (ویژه OTIS-P)..... ۱۲۹
- شکل ۶-۱۶- پوشه‌های ورودی به همراه نرم افزار OTIS-P..... ۱۲۹
- شکل ۶-۱۷- ایجاد صفحه سیاه پس از اجرای نرم افزار OTIS یا OTIS-P..... ۱۳۰
- شکل ۶-۱۸- پوشه‌های ورودی به همراه پوشه‌های خروجی تولید شده پس از اجرای نرم افزار OTIS-P..... ۱۳۱
- شکل ۶-۱۹- پیام خطا هنگام اجرای نرم افزار در ویندوزهای نسخه ۱۰ به بالا..... ۱۳۲

- شکل ۶-۲۰- نمونه‌ای از محتویات پوشه params.out برای بازه اول ۱۳۵
- شکل ۶-۲۱- نحوه فراخوانی پوشه solute.out در نرم‌افزار EXCEL ۱۳۶
- شکل ۶-۲۲- تنظیمات نرم‌افزار EXCEL پس از فراخوانی پوشه solute.out ۱۳۷
- شکل ۶-۲۳- نتایج نهایی شبیه‌سازی توسط مدل عددی OTIS-P ۱۳۸

فصل اول

مقدمه

مقدمه

OTIS^۱ یک مدل شبیه‌سازی ریاضی است که برای توصیف سرنوشت و انتقال املاح موجود در آب رودخانه‌ها و آبراهه‌ها استفاده می‌شود. معادله انتقال-پراکندگی^۲، معادله حاکم بر این مدل با در نظر گرفتن عبارات اضافی برای محاسبه نگهداشت موقت، جریان‌های جانبی، زوال مرتبه اول و جذب است. این معادله و معادلات مرتبط با آن در زمینه نگهداشت موقت و جذب با استفاده از روش تفاضلات محدود^۳ کرانک-نیکلسون^۴ حل می‌شوند.

OTIS ممکن است همراه با داده‌های آزمایش‌های ماده ردیاب^۵ در مقیاس میدانی^۶ برای تعیین کمیت پارامترهای هیدرولوژیکی مؤثر بر انتقال املاح استفاده شود. این کاربرد معمولاً شامل یک رویکرد همراه با آزمون و خطا^۷ است که در آن تخمین پارامترها طوری تنظیم خواهند شد تا یک تطابق قابل قبول بین غلظت‌های ماده ردیاب شبیه‌سازی شده از طریق مدل و هم‌چنین، غلظت‌های مشاهده شده به دست آیند. از دیگر کاربردهای این مدل می‌توان به تجزیه و تحلیل املاح واکنشی^۸ در معرض فرآیندهای شیمیایی جذب یا زوال مرتبه اول اشاره کرد.

OTIS-P، نسخه اصلاح شده OTIS، حل معادله حاکم را با روش‌های رگرسیون غیرخطی^۹ مرتبط می‌سازد و مجموعه‌ای بهینه^۱ از تخمین پارامترها را تعیین می‌کند که مربع تفاضلات^۲ بین غلظت‌های شبیه‌سازی شده و مشاهده شده را به حداقل رسانده، در نتیجه، فرآیند تخمین پارامترها را خودکار می‌کند.

¹ One-Dimensional Transport with Inflow and Storage

² Advection-Dispersion Equation

³ Finite-Difference

⁴ Crank-Nicolson

⁵ Tracer

⁶ Field-Scale

⁷ Trial-and-Error

⁸ Nonconservative Solute

⁹ Nonlinear Regression

در این کتاب سعی شده تا توسعه و معادلات حاکم بر مدل‌های OTIS و OTIS-P و هم‌چنین کاربرد آن‌ها در انتقال املاح در رودخانه‌ها، آبراهه‌ها و نهرها بررسی گردد. بخش‌های مختلف کتاب به تشریح تئوری حاکم بر مسئله، مشخصات اطلاعات و فایل‌های ورودی یا خروجی، برنامه‌های کاربردی، نحوه دسترسی به مدل و دستورالعمل‌های نصب خواهد پرداخت.

۱- معرفی مدل

این کتاب به تشریح راهنمای نحوه استفاده از مدل عددی OTIS^۳ در انتقال یک‌بعدی املاح در آبراهه‌ها و مجاری باز همراه با جریان‌های جانبی و نگهداشت می‌پردازد. نسخه اولیه مدل انتقال املاح OTIS از سوی رانکل و بروشرز^۴ (۱۹۹۱) مستند شده بود که بعدها توسط رانکل^۵ (۱۹۹۸) به‌روزرسانی شد. این کتاب بر مبنای آخرین نسخه راهنمای تهیه‌شده توسط رانکل (۱۹۹۸) تهیه گردید. این مدل عددی توسط سازمان زمین‌شناسی آمریکا^۶ ارائه شده و استفاده از آن به‌صورت کاملاً رایگان بوده و دسترسی به‌تمامی بخش‌های آن به‌صورت آزاد در اختیار کاربران است. خوانندگان کتاب می‌توانند از طریق تارنمای سازمان زمین‌شناسی آمریکا: <https://water.usgs.gov/software/OTIS/> علاوه بر دسترسی به نسخه انگلیسی و اسپانیایی راهنمای استفاده از نرم‌افزار، به آخرین نسخه نرم‌افزار نیز به‌صورت مستقیم دسترسی داشته باشند.

۱-۱- پیشرفت‌های مدل

چندین ویژگی و گزینه به مدل انتقال املاح OTIS از زمان انتشار اولیه توسط رانکل و بروشرز^۷ (۱۹۹۱) اضافه شده است که خلاصه‌ای کوتاه از این پیشرفت‌های مدل در زیر ارائه شده است:

- الگوریتم‌های جذب: مدل اصلی OTIS در درجه اول برای املاح غیر واکنشی^۸ مانند مواد ردیابی که در معرض تبدیل شیمیایی^۹ یا بیولوژیکی^{۱۰} نیستند، توسعه داده شد. رفتار واکنشی از طریق مشخص

¹ Optimal Set

² Squared Differences

³ One-Dimensional Transport with Inflow and Storage (OTIS)

⁴ Runkel and Broshears (1991)

⁵ Runkel (1998)

⁶ USGS (The United States Geological Survey)

⁷ Runkel and Broshears (1991)

⁸ Conservative Solute

⁹ Chemical Transformation

¹⁰ Biological Transformation

کردن نرخ تولید یا زوال مرتبه اول مدل سازی شد. در حال حاضر، این مدل با در نظر گرفتن معادلات جذب و روش های حل، قادر به شبیه سازی جذب در بستر جریان آبراهه یا رودخانه است. الگوریتم های جذب جنبشی^۱ بر اساس مطالعات بنکالا^۲ (۱۹۸۳) (مراجعه به بخش ۲-۲) در نظر گرفته شدند.

تخمین خودکار پارامترها: مدل OTIS معمولاً علاوه بر استفاده به عنوان روندیابی غلظت ماده ردیاب در آبراهه یا رودخانه، برای تخمین چند پارامتر که هیدرودینامیک^۳ جریان را مشخص می کنند، نیز استفاده می گردد. فرآیند تخمین پارامترها به طور سنتی، یک روش آزمون و خطا بوده که در آن پارامترهای مدل به صورت دستی در طول یک شبیه سازی تنظیم می گردند تا تطابق قابل قبولی بین مقادیر شبیه سازی شده و مشاهداتی به دست آید. OTIS-P یک نسخه اصلاح شده از OTIS است که امکان تخمین خودکار پارامترها با استفاده از روش رگرسیون غیرخطی را فراهم می کند (بخش ۲-۷).

خروجی حالت پایدار زمانی^۴: همان طور که در بخش ۳-۷-۱ توضیح داده خواهد شد، در حال حاضر قابلیت مدل سازی حالت پایدار زمانی برای هر بخش یک بازه از آبراهه یا رودخانه وجود دارد.

گزینه های شرایط مرزی: مدل در حال حاضر، سه گزینه برای مشخص کردن شرایط مرزی بالادست^۵ ارائه می دهد: الف) پروفیل غلظت پله ای^۶، ب) شار ورودی پله ای^۷ و ج) یک پروفیل غلظت پیوسته^۸ که این گزینه ها در بخش ۳-۵-۴ توضیح داده خواهند شد.

گزینه درون یابی: کاربران می توانند در هر مکانی از مدل شبیه سازی درخواست خروجی نمایند. در مدل اولیه، غلظت در هر محل مشخص شده توسط کاربر با درون یابی تعیین شده بود، اما اکنون این قابلیت وجود دارد که غلظت در یک مکان معین برابر با نزدیک ترین بخش بالادست هر بازه تنظیم شود (مراجعه به بخش ۳-۵-۴).

مستندات فایل ورودی: بعضاً کاربران می خواهد در هنگام شبیه سازی یک پروژه در فایل های ورودی نکاتی را برای استفاده شخصی در آینده یادداشت کنند یا مطابق مستندات پروژه، نام و سایر مشخصات آبراهه یا رودخانه مدنظر را وارد نمایند تا در مراجعه بعدی هنگام اجرای مدل از آن ها استفاده نمایند، لذا در حال حاضر، این امکان در فایل های ورودی OTIS وجود دارد که کاربران نظرات خود را برای مستند

¹ Kinetic Sorption

² Bencala (1983)

³ Hydrodynamics

⁴ Steady State

⁵ Upstream Boundary Condition

⁶ Step - Concentration

⁷ Step - Flux

⁸ Continuous - Concentration

کردن کار خود وارد نمایند. هر ردیف ورودی با علامت # در ستون شماره ۱ یک نظر تلقی شده و توسط زیر برنامه‌های ورودی نادیده گرفته می‌شود (مراجعه به بخش ۳-۵-۲).
تغییرات ورودی و خروجی: دو تغییر مربوط به ورودی و خروجی مدل شامل: قالب ورودی جدید برای نرخ‌های زوال مرتبه اول (مراجعه به بخش ۳-۵-۴) و حذف گزینه اجرای چندگانه (مراجعه به بخش ۳-۵-۳) است.

فصل دوم

تئوری و

معادلات

۲-۱- مدل نگهداشت موقت^۱ (TSM)

مدل OTIS بر اساس مدل نگهداشت موقت (TSM) که توسط بنکالا و والترز^۲ (۱۹۸۳) مطرح شده، پایه‌گذاری شده است. نگهداشت موقت به نگهداری موقت املاح در گرداب‌های کوچک و راکد یا همان محیط‌های آبی که نسبت به آب‌های دارای سرعت مرکز رودخانه ثابت هستند، اشاره دارد (شکل ۲-۱، الف). علاوه بر این، بخش‌های قابل توجهی از جریان ممکن است از طریق شن درشت بستر و نواحی متخلخل در رودخانه حرکت کند (شکل ۲-۱، ب). مدت‌زمان انتقال برای املاح از طریق این مناطق متخلخل ممکن است به‌طور قابل توجهی، بیش‌تر از محلول‌هایی باشد که در داخل ستون آب حرکت می‌کنند. همان‌طور که در شکل ۲-۱ نشان داده شده است، این حفره‌های آب و نواحی متخلخل بستر رودخانه، دو ناحیه‌ای هستند که در نگهداشت موقت نقش دارند.

مدل نگهداشت موقت با نوشتن معادلات موازنه جرم برای ناحیه اصلی جریان و ناحیه نگهداشت موقت ایجاد می‌گردد. ناحیه اصلی جریان به آن قسمت از جریان اطلاق می‌شود که در آن انتقال^۳ و پراکندگی^۴ مکانیسم‌های غالب جابجایی^۵ هستند. ناحیه نگهداشت موقت نیز به بخشی از جریان اطلاق می‌شود که به نگهداشت موقت کمک می‌کند (بخش‌های آب راکد و مناطق متخلخل در بستر آبراهه، شکل ۲-۱).

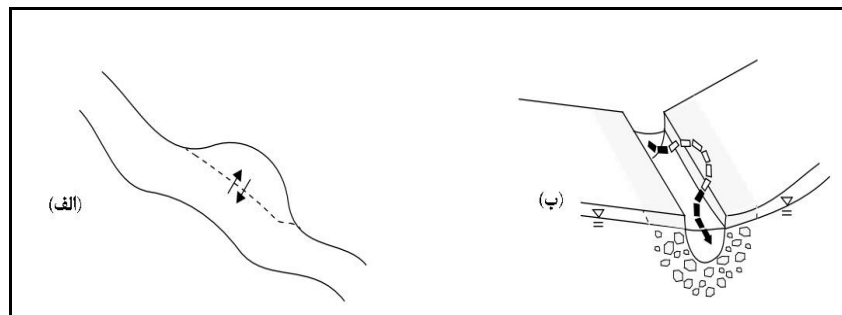
¹ Transient Storage Model (TSM)

² Benkala and Walters (1983)

³ Advection

⁴ Dispersion

⁵ Transport



شکل ۲-۱- مکانیسم‌های نگهداشت موقت- نگهداشت موقت به‌طور کلی، در دو حالت رخ می‌دهند: (الف) زمانی که املاح وارد محیط‌های کوچک آب با حرکت آهسته می‌شوند و (ب) زمانی که املاح از ناحیه اصلی جریان خارج می‌شوند و وارد محیط متخلخل بستر و کناره‌های کانال آبراهه می‌شوند. (رانکل و بنکالا، ۱۹۹۵).

شکل ۲-۲ فرآیندهایی را نشان می‌دهد که بر غلظت املاح در ناحیه اصلی جریان و ناحیه نگهداشت موقت^۲ تأثیر می‌گذارد. در ناحیه اصلی جریان، املاح توسط انتقال و پراکندگی به پایین‌دست منتقل می‌شوند. فرآیندهای انتقال و پراکندگی در نواحی نگهداشت نقش مؤثری ندارند و در واقع، در این مکان‌ها جابجایی املاح به پایین‌دست ناچیز است. جریان جانبی ورودی^۳ نشان‌دهنده ورود آب‌های اضافی جریان‌های زمینی، جریان‌های درونی و تخلیه آب‌های زیرزمینی به کانال اصلی است. جریان جانبی خروجی^۴ نیز نشان‌دهنده تخلیه آب از کانال اصلی به آبخیز اطراف است. ناحیه اصلی جریان و ناحیه نگهداشت موقت از طریق فرآیند نگهداشت موقت به هم مرتبط هستند. تبادل جرم املاح بین ناحیه اصلی و ناحیه نگهداشت موقت به‌عنوان یک فرآیند انتقال جرم مرتبه اول^۵ مدل‌سازی می‌شود. همچنین، لازم به ذکر است که در جابجایی املاح واکنش‌پذیر، انواع واکنش‌های شیمیایی^۶ در ناحیه اصلی و همچنین ناحیه نگهداشت موقت در نظر گرفته می‌شود.

¹ Runkel and Bencala (1995)

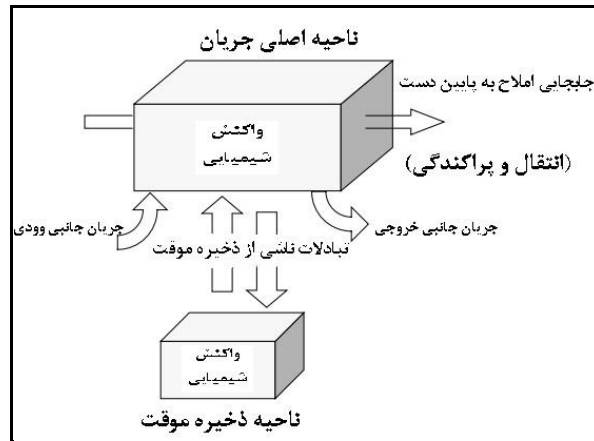
² Storage Zone

³ Lateral Inflow

⁴ Lateral Outflow

⁵ Mass First-Order Mass Transfer Process

⁶ Chemical Reactions



شکل ۲-۲- فرآیندهای مؤثر بر انتقال املاح در مدل نگهداشت موقت

توضیحات بیشتر در خصوص نگهداشت موقت و بررسی معادلات حاکم بر آن را می‌توان در پژوهش‌های تاکستون و کرنکل^۱ (۱۹۶۷)، تاکستون و شنل^۲ (۱۹۷۰)، ولنتاین و وود^۳ (۱۹۷۷)، نوردین و تروتمن^۴ (۱۹۸۰)، جکمن و همکاران^۵ (۱۹۸۴)، رادرفورد^۶ (۱۹۹۴) و هاروی و همکاران^۷ (۱۹۹۶) مطالعه کرد. در بخش ۲-۲ معادلات ریاضی حاکم بر مدل نگهداشت موقت بررسی خواهد شد.

۲-۲- معادلات دیفرانسیل حاکم

۲-۲-۱- فرآیند و فرضیات مدل

معادلات زیربنایی مدل انتقال املاح OTIS در ابتدا از سوی بنکالا^۸ (۱۹۸۳)، بنکالا و والترز^۹ (۱۹۸۳) و رانکل و بروشرز^{۱۰} (۱۹۹۱) ارائه شدند. فرض اولیه مورد استفاده در مشتق معادلات دیفرانسیل حاکم بر انتقال املاح در مدل OTIS این است که غلظت املاح صرفاً در جهت طولی تغییر می‌کند (غلظت املاح

¹ Thackston and Krenkel (1967)

² Thackston and Schnelle (1970)

³ Valentine and Wood (1977)

⁴ Nordin and Troutman (1980)

⁵ Jackman et al. (1984)

⁶ Rutherford (1994)

⁷ Harvey et al. (1996)

⁸ Bencala (1983)

⁹ Bencala and Walters (1983)

¹⁰ Runkel and Broshears (1991)

۲-۲-۲- معادلات متغیر زمانی

در نظر گرفتن فرآیندهای فیزیکی شرح داده شده در بخش ۲-۲-۱ منجر به جفت معادلات دیفرانسیل برای ناحیه اصلی جریان و ناحیه نگهداشت خواهد شد (رانکل و بروشیرز^۱، ۱۹۹۱):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{Q}{A} \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(AD \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{q_{LIN}}{A} (C_L - C) + \alpha (C_S - C) \quad (1-2)$$

$$\frac{dC_S}{dt} = \alpha \frac{A}{A_S} (C - C_S) \quad (2-2)$$

که در آن^۲:

A- مساحت مقطع عرضی ناحیه اصلی جریان [L²]

A_S- مساحت مقطع عرضی ناحیه نگهداشت [L²]

C- غلظت املاح ناحیه اصلی جریان [M/L³]

C_L- غلظت املاح جریان جانبی ورودی [M/L³]

C_S- غلظت املاح ناحیه نگهداشت [M/L³]

D- ضریب پراکندگی [L²/T]

Q- دبی جریان حجمی [L³/T]

q_{LIN}- دبی جریان جانبی ورودی [L³/T-L]

t- زمان [T]

x- فاصله مکانی [L]

α- ضریب تبادل ناحیه نگهداشت [T]

روابط (۱-۲) و (۲-۲) فرآیندهای فیزیکی مؤثر بر انتقال املاح در یک سیستم آبی را می‌توانند به خوبی شبیه‌سازی کنند، بنابراین برای املاح غیر واکنش‌پذیر مانند ردیاب‌ها قابل استفاده هستند، اما برای استفاده از این معادلات در انتقال املاح واکنش‌پذیر ممکن است با افزودن یک سری عبارات اضافه به روابط (۱-۲) و (۲-۲) به منظور در نظر گرفتن انواع واکنش‌های شیمیایی در طی فرآیند انتقال در نظر گرفته شوند. در اینجا دو نوع واکنش شیمیایی، جذب جنبشی و زوال مرتبه اول، در نظر گرفته می‌شوند. جذب ممکن است به‌طور مستقیم، در بستر آبراهه یا رودخانه یا در نواحی نگهداشت صورت پذیرد. اضافه

¹ Runkel and Broshears (1991)

^۲ واحدهای اساسی جرم [M]، طول [L] و زمان [T] در این بخش استفاده می‌شوند و واحدهای خاص در فصل سوم معرفی شده‌اند.

کردن عباراتی به روابط (۱-۲) و (۲-۲) می‌تواند نشان‌دهنده میزان جذب و زوال در انتقال آلودگی‌های واکنش‌پذیر باشد:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = L(C) + \rho \hat{\lambda} (C_{sed} - K_d C) - \lambda C \quad (۳-۲)$$

$$\frac{dC_s}{dt} = S(C_s) + \hat{\lambda}_s (\hat{C}_s - C_s) - \lambda_s C_s \quad (۴-۲)$$

که در آن:

\hat{C}_s - غلظت پایه املاح در ناحیه نگهداشت^۱ $[M/L^3]$

C_{sed} - غلظت املاح جذب‌شده توسط رسوب بستر رودخانه^۲ $[M/M]$

K_d - ضریب پخش^۳ $[L^3/M]$

λ - ضریب زوال مرتبه اول ناحیه اصلی جریان $[/T]$

λ_s - ضریب زوال مرتبه اول نواحی نگهداشت $[/T]$

$\hat{\lambda}$ - ضریب جذب ناحیه اصلی جریان $[/T]$

$\hat{\lambda}_s$ - ضریب جذب نواحی نگهداشت $[/T]$

ρ - جرم رسوب قابل دسترس به حجم آب^۴ $[M/L^3]$

در روابط بالا، $L(C)$ و $S(CS)$ به ترتیب نشان‌دهنده فرآیندهای فیزیکی در ناحیه اصلی جریان و ناحیه نگهداشت (در واقع سمت راست روابط (۱-۲) و (۲-۲)) می‌باشند. خوانندگان این کتاب می‌توانند برای آشنایی کامل‌تر با پارامترهای جذب معرفی‌شده (\hat{C}_s ، K_d ، $\hat{\lambda}$ ، $\hat{\lambda}_s$ و ρ) به نتایج مطالعات بنکالا^۵ (۱۹۸۳) مراجعه نمایند. همچنین لازم به ذکر است که عبارت C_{sed} در رابطه (۳-۲) به معرفی یک متغیر غلظت سومی می‌پردازد که برای برقراری تعادل جرم^۶ املاح در یک بازه آبراهه یا رودخانه لازم است. در واقع، C_{sed} غلظت املاح جذب‌شده توسط رسوب بستر رودخانه بوده که به صورت رابطه (۵-۲) به دست می‌آید:

¹ Background Storage Zone Solute Concentration

² Sorbate Concentration on the Streambed Sediment

³ Distribution Coefficient

⁴ Mass of Accessible Sediment/Volume water

⁵ Bencala (1983)

⁶ Mass Balance

$$\frac{dC_{sed}}{dt} = \hat{\lambda}(K_d C - C_{sed}) \quad (5-2)$$

برای حل روابط (۳-۲) تا (۵-۲) برای حالت کلی که پارامترها در زمان و مکان متفاوت هستند باید از تکنیک‌های حل عددی استفاده شود. روش‌های عددی برای حل معادلات متغیر زمانی در بخش ۴-۲ توضیح داده خواهد شد.

۳-۲-۲- معادلات پایدار زمانی^۱

معادلات دیفرانسیل حاکم و تکنیک‌های حل عددی مربوطه را می‌توان در صورتی که یک حالت پایدار زمانی موردنظر باشد، ساده‌سازی کرد. شرایط حالت پایدار زمانی با ثابت نگه‌داشتن پارامترهای مدل، متغیرهای جریان و شرایط مرزی (مراجعه به بخش ۶-۲) برای مدت‌زمان نامحدود ایجاد خواهد شد. در این شرایط، تمامی بازه‌های تعیین‌شده در سیستم به حالت تعادلی خواهند رسید که در آن‌ها غلظت‌ها با زمان تغییر نمی‌کنند.

در واقع، اگر در روابط (۳-۲) تا (۳-۲) مقادیر تغییرات غلظت‌ها در ناحیه اصلی جریان، ناحیه نگهداشت و ناحیه بستر رسوبی برابر صفر تنظیم گردد ($\frac{\partial C}{\partial t} = 0, \frac{dC_S}{dt} = 0, \frac{dC_{sed}}{dt} = 0$)، در این شرایط روابط (۶-۲) تا (۸-۲) ایجاد می‌شوند:

$$0 = L(C) + \rho \hat{\lambda}(C_{sed} - K_d C) - \lambda C \quad (6-2)$$

$$0 = S(C_S) + \hat{\lambda}_S(\hat{C}_S - C_S) - \lambda_S C_S \quad (7-2)$$

$$0 = \hat{\lambda}(K_d C - C_{sed}) \quad (8-2)$$

روابط (۷-۲) و (۸-۲) برای مقادیر غلظت ناحیه نگهداشت و ناحیه بستر رسوبی حل شده و روابط (۹-۲) و (۱۰-۲) شکل می‌گیرند:

$$C_S = \frac{\alpha A C + \hat{\lambda}_S A_S \hat{C}_S}{\alpha A + \lambda_S A_S + \hat{\lambda}_S A_S} \quad (9-2)$$

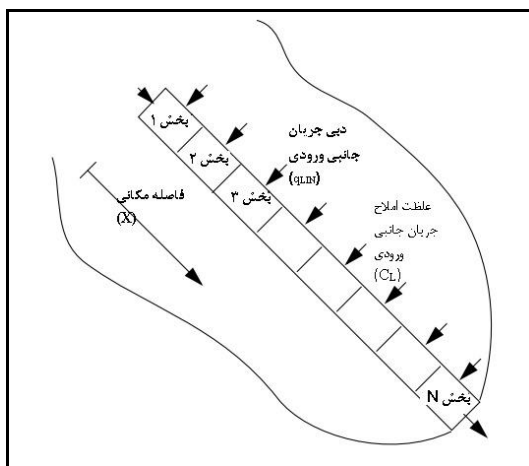
$$C_{sed} = K_d C \quad (10-2)$$

¹ Steady-State Equations

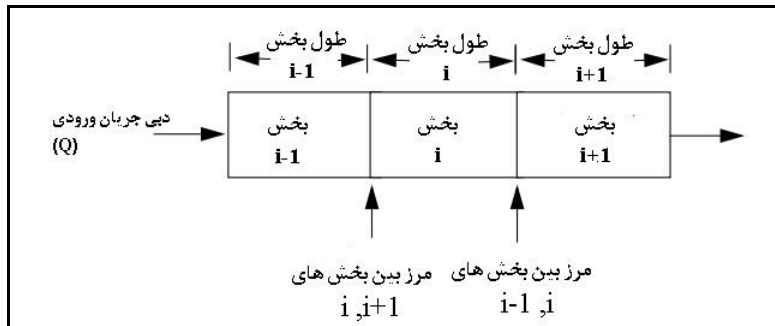
غلظت ناحیه اصلی جریان در این شرایط (معادلات پایدار زمانی) که در قالب رابطه (۲-۶) است نیز در بخش ۲-۵ تشریح خواهد شد.

۲-۳- تعریف فیزیکی مدل

برای پیاده‌سازی یک طرح حل عددی شبیه‌سازی انتقال آلودگی در مجاری باز، ابتدا می‌بایست سیستم فیزیکی آن را تعریف کنیم. شکل ۲-۳ یک سیستم فرضی را نشان می‌دهد که در آن جریان به تعدادی از بخش‌های گسسته تقسیم می‌شود. بنابراین روابط (۲-۳) تا (۲-۵) برای هر یک از این بخش‌ها در سیستم مدل‌سازی شده اعمال می‌گردد. شکل ۲-۴ نشان‌دهنده سه بخش دلخواه از این سیستم فرضی است. زیرنویس‌های i ، $i-1$ و $i+1$ غلظت‌ها و پارامترها را در مرکز هر بخش نشان می‌دهند و از سوی دیگر، زیرنویس‌های $(i-1, i)$ و $(i, i+1)$ مقادیر را در مرزهای بین بخش‌ها مشخص می‌کنند. همچنین، طول هر بخش نیز با Δx معرفی می‌گردد. از این تعاریف در بخش ۲-۴ به‌منظور تشریح نحوه حل عددی مدل برای شبیه‌سازی انتقال آلودگی استفاده خواهد شد.



شکل ۲-۳- تعریف یک مدل فیزیکی تقسیم‌شده به چند بخش مجزا (حجم‌های کنترل)



شکل ۲-۴- طرح شماتیک تقسیم‌بندی مورد استفاده برای پیاده‌سازی حل عددی مدل

۲-۴- حل عددی - معادلات متغیر زمانی

۲-۴-۱- تفاضلات محدود^۱

به دلیل وجود مشتقات زمانی و مکانی، رابطه (۲-۳) یک معادله دیفرانسیل جزئی^۲ (PDE) است. یک روش رایج برای حل PDE تا، تقریب مشتقات مکانی ($\partial/\partial x$) با استفاده از تفاضلات محدود است. روش‌های استاندارد (به‌عنوان مثال: روش اویلر^۳، رانگ کوتا^۴ و کرانک-نیکولسون^۵) ممکن است اجرا شوند.

تقریب تفاضل محدود مورد استفاده برای مشتقات مکانی در ضمیمه (ب) مطالعات رانکل و بروشرز^۶ (۱۹۹۱) توسعه یافته است. با استفاده از این تقریب‌ها، رابطه (۲-۳) به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$\frac{dC}{dt} = L[C] + \frac{qLIN}{A_i} (C_l - C_i) + \alpha(C_S - C_i) + \rho\lambda(C_{sed} - K_d C_i) - \lambda C_i \quad (11-2)$$

که در آن $L[C]$ تقریب تفاضل محدود مربوط به انتقال و پراکندگی است که با رابطه زیر مشخص می‌شود:

¹ Finite Difference
² Partial Differential Equation
³ Euler's Method
⁴ Runge Kutta
⁵ Crank-Nicolson
⁶ Runkel and Broshears (1991)

$$L[C] = -\left(\frac{Q}{A}\right)_i \left(\frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x}\right) +_{A_i} \left\{ \frac{(AD)_{i,i+1}(C_{i+1} - C_i) - (AD)_{i-1,i}(C_i - C_{i-1})}{\Delta x^2} \right\} \quad (12-2)$$

زیرنویس‌های Δx و i در رابطه (۱۲-۲) همان‌گونه هستند که در بخش ۲-۳ و همچنین شکل ۲-۴ تعریف شده‌اند. همچنین مجدداً تأکید می‌شود که رابطه (۱۲-۲) برای حالت خاص دارای اندازه بخش‌های مساوی یعنی $(\Delta x_{i-1} = \Delta x_i = \Delta x_{i+1})$ است. ضمیمه (ب) مطالعات رانکل و بروشرز^۱ (۱۹۹۱) ممکن است برای موارد کلی که طول بخش‌ها متغیر بوده، دارای توضیحات کامل‌تری است.

۲-۴-۲- روش کرانک-نیکلسون

مطابق آنچه در بخش‌های قبل بیان شد، معادلات دیفرانسیل معمولی همچون روابط (۲-۴)، (۲-۵) و (۲-۱۱) را می‌توان با استفاده از روش‌های عددی همچون روش‌های صریح^۲ و ضمنی^۳ حل کرد. در خصوص این دو روش می‌توان به‌طور خلاصه، بیان داشت که: الف) روش‌های صریح راه‌حل را با استفاده از مقادیر متغیر وابسته (مثلاً غلظت املاح) در سطح زمانی فعلی ارائه می‌کنند، درحالی‌که ب) روش‌های ضمنی از مقادیر هر دو سطح زمانی فعلی و آینده استفاده برای رسیدن به جواب استفاده خواهند کرد (برای اطلاعات بیشتر در مورد روش‌های حل ضمنی و صریح به چاپرا و کانالی^۴ (۱۹۸۸) مراجعه شود). در مدل عددی OTIS به دلایل: الف) دقت، ب) کارایی و ج) پایداری، از روش ضمنی کرانک-نیکولسون^۵ برای شبیه‌سازی انتقال املاح در مجاری باز استفاده شده است. درواقع، وجود این مزیت‌ها و همچنین موارد زیر منجر به انتخاب این روش حل برای مدل عددی OTIS شده است: الف) روش کرانک-نیکولسون شامل گام زمانی و مکانی با دقت مرتبه دوم است (چاپرا و کانالی، ۱۹۸۸)، ب) ماهیت یک‌بعدی انتقال املاح در مدل منجر به تشکیل یک دستگاه معادلات سه‌قطری^۶ شده که آن را می‌توان با استفاده از روش کارآمد تجزیه ماتریس LU^۷ حل کرد و ج) مهم‌ترین مزیت روش کرانک-نیکولسون این است که بدون قید و شرط پایدار بوده و با افزایش گام زمانی، راه‌حل دچار ناپایداری نخواهد

¹ Runkel and Broshears (1991)

² Explicit Method

³ Implicit Method

⁴ Chapra and Canale (1988)

⁵ Implicit Crank-Nicolson Method

⁶ Tridiagonal Coefficient Matrix

⁷ LU Decomposition (Low-Up)

شد، لذا در بحث انتقال املاح که بعضاً، مدت‌زمان شبیه‌سازی طولانی خواهد بود، این روش حل همچنان دارای پایداری در رسیدن به جواب نهایی حل مسئله خواهد بود. در دو بخش زیر کاربرد رویکرد کرانک-نیکلسون در روابط (۲-۴)، (۲-۵) و (۲-۱۱) تشریح خواهد شد. توسعه دقیق راه‌حل کرانک-نیکلسون در ضمیمه (ج) مطالعات رانکل و بروشرز^۱ (۱۹۹۱) ارائه شده است.

۲-۴-۳- غلظت املاح ناحیه اصلی جریان

در الگوریتم روش حل کرانک-نیکلسون، سمت راست رابطه (۲-۱۱) هم در زمان جاری (زمان j) و هم در زمان آینده (زمان $j+1$) ارزیابی می‌شود. هم‌چنین، سمت چپ رابطه که در واقع مشتق زمانی $\left(\frac{dC}{dt}\right)$ بوده نیز با استفاده از تقریب تفاضل مرکزی تخمین زده می‌شود:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} \quad (2-13)$$

که در این رابطه:

Δt : گام زمانی [T]

j : مقدار یک پارامتر یا متغیر را در زمان جاری نشان می‌دهد.

$j+1$: مقدار یک پارامتر یا متغیر را در زمان بعدی نشان می‌دهد.

رابطه (۲-۱۱) به فرم زیر تبدیل خواهد شد:

$$\frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} = \frac{G[C, C_S, C_{sed}]^{j+1} + G[C, C_S, C_{sed}]^j}{2} \quad (2-14)$$

که در این رابطه:

$$G[C, C_S, C_{sed}] = L[C] + \frac{q_{LIN}}{A_i} (C_L - C_i) + \alpha(C_S - C_i) + \rho\lambda(C_{sed} - K_d C_i) - \lambda C_i \quad (2-15)$$

از آنجایی که رابطه (۲-۱۴) شامل غلظت املاح در بخش‌های مجاور در سطح زمانی بعدی (C_{j+1} و C_{j-1}) در زمان $j+1$ است، نمی‌توان به‌طور صریح برای C_i^{j+1} حل کرد، لذا از روش ضمنی برای حل در مدل عددی OTIS استفاده شده است. با این حال، می‌توانیم رابطه (۲-۱۴) را به‌گونه‌ای بازنویسی کنیم که همه

¹ Runkel and Broshears (1991)

کمیت‌های معلوم در سمت راست و همه کمیت‌های مجهول در سمت چپ ظاهر شوند. دو استثنا برای این بازنویسی وجود دارد: غلظت‌های املاح در ناحیه نگهداشت و غلظت رسوب بستر رودخانه در سطح زمانی بعدی $(C_{sed}^{j+1}, C_s^{j+1})$ مجهول هستند و در سمت راست باقی می‌مانند. این استثناها در بخش ۲-۵ مورد بحث قرار گرفته است. در حال حاضر، نتیجه بازنویسی مطابق زیر به دست خواهد آمد:

$$1 + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} + \alpha + \rho \hat{\lambda} K_d + \lambda \right) C_i^{j+1} - \frac{\Delta t}{2} L[C]^{j+1} = C_j^i + \frac{\Delta t}{2} G[C, C_s, C_{sed}]^j + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} C_L^{j+1} + \alpha C_s^{j+1} + \rho \hat{\lambda} C_{sed}^{j+1} \quad (۱۶-۲)$$

رابطه (۱۶-۲) با یکسری ساده کردن عبارات می‌تواند به فرم زیر ساده شود:

$$E_i C_{i-1}^{j+1} + F_i C_i^{j+1} + G_i C_{i+1}^{j+1} = R_i \quad (۱۷-۲)$$

عبارات تعریف شده در رابطه (۱۷-۲) مطابق روابط (۱۸-۲) تا (۲۱-۲) به شرح زیر تعریف خواهد شد:

$$E_i = - \frac{\Delta t}{2A_i^{j+1} \Delta x} \left(\frac{Q_i^{j+1}}{2} + \frac{(AD)_{i-1,i}^{j+1}}{\Delta x} \right) \quad (۱۸-۲)$$

$$F_i = 1 + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{(AD)_{i-1,i}^{j+1} + (AD)_{i,i+1}^{j+1}}{A_i^{j+1} \Delta x^2} + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} + \alpha + \rho \hat{\lambda} K_d + \lambda \right) \quad (۱۹-۲)$$

$$G_i = \frac{\Delta t}{2A_i^{j+1} \Delta x} \left(\frac{Q_i^{j+1}}{2} - \frac{(AD)_{i,i+1}^{j+1}}{\Delta x} \right) \quad (۲۰-۲)$$

$$R_i = C_i^j + \frac{\Delta t}{2} \left(G[C, C_s, C_{sed}]^j + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} C_L^{j+1} + \alpha C_s^{j+1} + \rho \hat{\lambda} C_{sed}^{j+1} \right) \quad (۲۱-۲)$$

روابط (۱۸) تا (۲۱) برای شرایط خاص که طول بخش‌ها (segment) مساوی بوده قابلیت استفاده دارد. ضمیمه (ج) مطالعات رانکل و بروشرز^۱ (۱۹۹۱) برای موارد کلی که طول بخش‌ها متغیر بوده توضیحات کافی را در بردارد.

^۱ Runkel and Broshears (1991)

پس از توسعه رابطه (۲-۱۷) برای تمام بخش‌های سیستم مدل‌سازی شده، به مجموعه‌ای از روابط جبری خطی خواهیم رسید. این روابط می‌بایست به صورت هم‌زمان حل شوند تا غلظت املاح ناحیه اصلی جریان (C^{j+1}) در هر یک از بخش‌های جریان به دست آید. مجموعه‌ای فرضی از روابط در یک سیستم دارای پنج بخش در زیر نشان داده شده است:

$$\begin{bmatrix} F_1 & G_1 \\ E_2 & F_2 & G_2 \\ & E_3 & F_3 & G_3 \\ & & E_4 & F_4 & G_4 \\ & & & E_5 & F_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^{j+1} \\ C_2^{j+1} \\ C_3^{j+1} \\ C_4^{j+1} \\ C_5^{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \\ R_5 \end{bmatrix} \quad (2-22)$$

مجموعه روابط مانند رابطه (۲-۲۲) را می‌توان با استفاده از الگوریتم توماس^۱ به طور مؤثری حل کرد. توضیحات تکمیلی در خصوص الگوریتم توماس و نحوه بهره‌گیری از این الگوریتم در روش‌های حل عددی توسط رانکل و چاپرا^۲ (۱۹۹۳) ارائه شده است.

۲-۴-۴- غلظت‌های املاح در ناحیه نگهداشت و رسوب بستر

در بخش‌های قبل در خصوص استفاده از روش ضمنی کرانک-نیکلسون برای گسسته سازی معادلات حاکم بر غلظت املاح در ناحیه اصلی جریان صحبت شد. اکنون می‌توان با همین روش گسسته سازی روابط حاکم بر نواحی نگهداشت موقت (هایپریک) و همچنین نواحی رسوب بستر رودخانه‌ها و آبراهه‌ها که در روابط (۲-۴) و (۲-۵) نشان داده شده بود، را نیز انجام داد. روابط (۲-۲۳) و (۲-۲۴) به ترتیب، نشان‌دهنده فرم گسسته سازی شده غلظت املاح در نواحی نگهداشت و بستر رسوبی توسط روش ضمنی کرانک-نیکلسون می‌باشند:

$$\frac{C_s^{j+1} - C_s^j}{\Delta t} = \frac{\left(\alpha \frac{A}{A_s} (C - C_s) + \lambda_s (\hat{C}_s - C_s) - \lambda_s C_s \right)^{j+1} + \left(\alpha \frac{A}{A_s} (C - C_s) + \lambda_s (\hat{C}_s - C_s) - \lambda_s C_s \right)^j}{2} \quad (2-23)$$

¹ Thomas Algorithm

² Runkel and Chapra (1993)

$$\frac{C_{sed}^{j+1} - C_{sed}^j}{\Delta t} = \frac{[\widehat{\lambda}(K_d C - C_{sed})]^{j+1} + [\widehat{\lambda}(K_d C - C_{sed})]^j}{2} \quad (24-2)$$

برخلاف رابطه انتقال املاح در ناحیه اصلی جریان، روابط (۲۳-۲) و (۲۴-۲) ممکن است به طور صریح، برای متغیرهای موردنظر (C_{sed}^{j+1} , C_S^{j+1}) قابل حل باشند که منجر به نتیجه زیر خواهند شد:

$$C_S^{j+1} = \frac{(2 - \gamma^j - \Delta t \widehat{\lambda}_s - \Delta t \lambda_s) C_S^j + \gamma^{j+1} C^{j+1} + 2 \Delta t \widehat{\lambda}_s \widehat{C}_s}{2 + \gamma^{j+1} + \Delta t \widehat{\lambda}_s + \Delta t \lambda_s} \quad (25-2)$$

$$C_{sed}^{j+1} = \frac{(2 - \Delta t \widehat{\lambda}) C_{sed}^j + \Delta t \widehat{\lambda} K_d (C^j + C^{j+1})}{2 + \Delta t \widehat{\lambda}} \quad (26-2)$$

که در این روابط مقدار γ مطابق رابطه (۲۷-۲) تعریف می‌شود:

$$\gamma = \frac{\alpha \Delta t A}{A_s} \quad (27-2)$$

این معادلات گسسته‌سازی شده به روش عددی صریح در بخش زیر استفاده خواهند شد.

۲-۴-۵- مجزا کردن روابط ناحیه اصلی جریان، ناحیه نگهداشت و ناحیه بستر رسوبی
 رانکل و چاپرا (۱۹۹۳، ۱۹۹۴)^۱ تکنیکی را برای جداسازی معادلات ناحیه اصلی جریان و ناحیه نگهداشت ارائه کردند. هدف از این بخش، گسترش این روش برای لحاظ شدن معادله حاکم بر رسوب در بستر رودخانه‌ها است. بررسی رابطه (۱۷-۲) نشان می‌دهد که غلظت ناحیه اصلی جریان به غلظت‌های هر دو منطقه نگهداشت و رسوب بستر رودخانه در سطح زمانی بعدی (C_{sed}^{j+1} , C_S^{j+1}) وابسته است. چون این غلظت‌ها مجهول هستند، رابطه (۱۷-۲) با روابط (۲۵-۲) و (۲۶-۲) جفت می‌شوند. این جفت‌سازی یک روش حل تکراری را پیشنهاد می‌کند که به موجب آن روابط (۱۷-۲)، (۲۵-۲) و (۲۶-۲) به ترتیب، حل می‌شوند تا زمانی که یک سطح مطلوبی از همگرایی ایجاد شود. این فرآیند تکراری از این جهت ناکارآمد است که روابط (۱۷-۲)، (۲۵-۲) و (۲۶-۲) باید بیش از یک بار در هر گام زمانی حل شوند، اما می‌توان این معادلات را با توجه به اشکال صریح روابط (۲۵-۲) و (۲۶-۲) جدا کرد. با بررسی رابطه (۲-۲)

¹ Runkel and Chapra (1993)

² Runkel and Chapra (1994)

(۲۵) می‌بینیم که غلظت نگهداشت تابعی از دو کمیت معلوم (C^j, C_s^j) و یک کمیت مجهول (C^{j+1}) است. هم‌چنین، به‌طور مشابه، غلظت رسوب بستر رودخانه تابعی از دو غلظت معلوم (C^j, C_{sed}^j) و یک غلظت مجهول (C^{j+1}) است. با جایگزینی روابط (۲۵-۲) و (۲۶-۲) به رابطه (۲۱-۲)، به عبارت جدیدی مطابق رابطه (۲۸-۲) برای عبارت R خواهیم رسید:

$$R'_i = C_i^j + \frac{\Delta t}{2} \left[G[C, C_s, C_{sed}]^j + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} C_L^{j+1} + \alpha \left(\frac{(2-\gamma^j - \Delta t \hat{\lambda}_s - \Delta t \lambda_s) C_s^j + \gamma^j C^j + \gamma^{j+1} C^{j+1} + 2\Delta t \hat{\lambda}_s \hat{C}_s}{2 + \gamma^{j+1} + \Delta t \hat{\lambda}_s + \Delta t \lambda_s} \right) + \rho \hat{\lambda} \left(\frac{(2-\Delta t \hat{\lambda}) C_{sed}^j + \Delta t \hat{\lambda} K_d (C^j + C^{j+1})}{2 + \Delta t \hat{\lambda}} \right) \right] \quad (28)$$

اگرچه این عبارت R هم هنوز دارای یک کمیت مجهول است، اما رابطه (۲۸-۲) بیان بسیار راحت‌تری در مقایسه با رابطه (۲۱-۲) دارد. تنها کمیت مجهول در این رابطه، عبارت (C^{j+1}) است، متغیری که قبلاً در سمت راست رابطه (۱۷-۲) ظاهر می‌شد که می‌توانیم عبارات شامل (C^{j+1}) را به سمت چپ رابطه (۱۷-۲) منتقل کنیم و عبارات جدیدی برای F و R ایجاد کنیم:

$$F'_i = 1 + \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{(AD)_{i-1,i}^{j+1} + (AD)_{i,i+1}^{j+1}}{A_i^{j+1} \Delta x^2} + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} + \alpha \left(1 - \frac{\gamma^{j+1}}{2 + \gamma^{j+1} + \Delta t \hat{\lambda}_s + \Delta t \lambda_s} \right) + \rho \hat{\lambda} K_d \left(1 - \frac{\Delta t \hat{\lambda}}{2 + \Delta t \hat{\lambda}} \right) + \lambda \right] \quad (29-2)$$

$$R''_i = C_i^j + \frac{\Delta t}{2} \left[G[C, C_s, C_{sed}]^j + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} C_L^{j+1} + \alpha \left(\frac{(2-\gamma^j - \Delta t \hat{\lambda}_s - \Delta t \lambda_s) C_s^j + \gamma^j C^j + \gamma^{j+1} C^{j+1} + 2\Delta t \hat{\lambda}_s \hat{C}_s}{2 + \gamma^{j+1} + \Delta t \hat{\lambda}_s + \Delta t \lambda_s} \right) + \rho \hat{\lambda} \left(\frac{(2-\Delta t \hat{\lambda}) C_{sed}^j + \Delta t \hat{\lambda} K_d C^j}{2 + \Delta t \hat{\lambda}} \right) \right] \quad (30-2)$$

از آنجایی که R اکنون فقط کمیت‌های معلوم را شامل می‌شود، رابطه (۱۷-۲) را می‌توان به‌طور مستقل، برای غلظت املاح ناحیه اصلی جریان (C^{j+1}) حل کرد. پس از حل رابطه (۱۷-۲)، معادلات نواحی نگهداشت و رسوب بستر جریان (روابط ۲۵-۲ و ۲۶-۲) به تابعی از غلظت ناحیه اصلی جریان معلوم (C^{j+1}) تبدیل شده، لذا عبارات حاکم بر حل کرانک-نیکولسون برای این روابط را در بخش‌های قبلی مجزا کرده بودیم.

۵-۲- حل عددی معادلات حالت پایدار زمانی

در این بخش نیز همانند معادلات حاکم بر حالت جریان متغیر زمانی، مشتقات مکانی در رابطه (۶-۲) را با استفاده از روش عددی تفاضلات محدود تقریب می‌زنیم. توضیح تکمیلی این تقریب‌ها مبتنی بر روش‌های تفاضلات محدود در پیوست (ب) مطالعات رانکل و بروشرز^۱ (۱۹۹۱) ارائه شده است. معادله جبری حاصل برای ناحیه اصلی جریان به صورت رابطه زیر به دست می‌آید:

$$0=L[C]+\frac{qLIN}{A_i}(C_l-C_i)+\alpha(C_S-C_i)+\rho\hat{\lambda}(C_{sed}-K_dC_i)-\lambda C_i \quad (31-2)$$

مشکل مهمی که پس از شکل‌گیری رابطه (۳۱-۲) ایجاد می‌شود، وابستگی غلظت ناحیه اصلی جریان در این رابطه به الف) غلظت ناحیه نگهداشت و ب) غلظت رسوب بستر رودخانه است که با جایگزینی روابط (۹-۲) و (۱۰-۲) در رابطه (۳۱-۲) می‌توان این مشکل را حل کرد که در نهایت به رابطه (۳۲-۲) تبدیل خواهد شد:

$$0=L[C]+\frac{qLIN}{A_i}(C_l-C_i)+\frac{\alpha A_s(\hat{\lambda}_s C_s-\lambda_s C_i-\hat{\lambda}_s C_i)}{\alpha A+\lambda_s A_s+\hat{\lambda}_s A_s}-\lambda C_i \quad (32-2)$$

از آنجایی که رابطه (۳۲-۲) شامل غلظت املاح در بخش‌های مجاور (C_{i+1} و C_{i-1}) می‌شود، نمی‌توان به‌طور صریح، برای بخش جاری (C_i) حل کرد. باین‌حال، می‌توانیم رابطه (۳۲-۲) را بازنویسی کرده تا کمیت‌های مجهول (C_{i+1} و C_i ، C_{i-1}) در سمت چپ رابطه قرار گیرند که نتیجتاً مطابق رابطه (۳۳-۲) خواهد شد:

$$E_i C_{i-1}+F_i C_i+G_i C_{i+1}=R_i \quad (33-2)$$

که عبارت‌های E ، F ، G و R در رابطه (۳۳-۲) به ترتیب مطابق روابط (۳۴-۲) تا (۳۷-۲) به شرح زیر خواهند بود:

$$E_i=\frac{-1}{A_i \Delta x}\left(\frac{Q_i}{2}+\frac{(AD)_{i-1,i}}{\Delta x}\right) \quad (34-2)$$

¹ Runkel and Broshears (1991)

$$F_i = \left(\frac{(AD)_{i-1,i} + (AD)_{i,i+1}}{A_i \Delta x^2} + \frac{q_{LIN}}{A_i} + \alpha A_s \left(\frac{\lambda_s + \hat{\lambda}_s}{\alpha A_i + \lambda_s A_s + \hat{\lambda}_s A_s} \right) + \lambda \right) \quad (۳۵-۲)$$

$$G_i = \frac{1}{A_i \Delta x} \left(\frac{Q_i}{2} - \frac{(AD)_{i,i+1}}{\Delta x} \right) \quad (۳۶-۲)$$

$$R_i = \frac{q_{LIN}}{A_i} C_1 + \frac{\alpha A_s \hat{\lambda}_s \hat{C}_s}{\alpha A_i + A_s \lambda_s + A_s \hat{\lambda}_s} \quad (۳۷-۲)$$

روابط (۳۴-۲) تا (۳۷-۲) برای شرایط خاص که طول بخش‌ها (segment) مساوی بوده قابلیت استفاده دارد. ضمیمه (د) مطالعات رانکل و بروشرز^۱ (۱۹۹۱) برای موارد کلی که طول بخش‌ها متغیر بوده دارای توضیحات تکمیلی می‌باشد. غلظت املاح ناحیه اصلی جریان با حل یک سیستم مشابه مجموعه روابط نشان داده شده در رابطه (۲۲-۲) تعیین خواهد شد.

۲-۶- شرایط مرزی

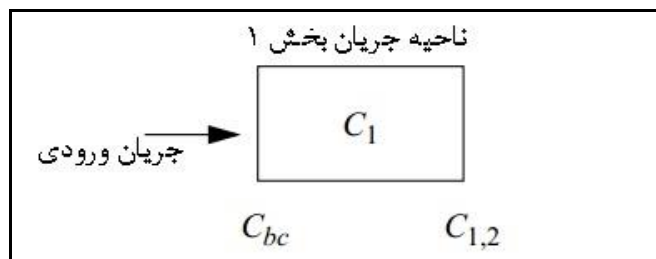
به‌طور کلی، برای حل معادلات دیفرانسیل از نوع مرتبه دوم^۲ همانند معادله انتقال املاح در مجاری باز (رابطه ۳-۲) می‌باید دو نوع شرط مرزی مشخص گردد. برای مسئله موردنظر شبیه‌سازی در مدل عددی OTIS که انتقال املاح در یک کانال جریان یک‌بعدی اعم از آبراهه یا رودخانه است، این نوع شرایط مرزی می‌باید در مرزهای بالادست و مرزهای پایین‌دست تعریف شود، لذا در این بخش به معرفی انواع شرایط مرزی بالادست و پایین‌دست در مدل OTIS پرداخته می‌شود.

۲-۶-۱- شرایط مرزی بالادست

مطابق آنچه در شکل ۲-۵ نشان داده شده است، شرایط مرزی بالادست برحسب غلظت ثابت در مرز بالادست (C_{bc}) تعریف می‌شود. بنابراین این نوع شرایط مرزی نشان‌دهنده غلظت املاحی است که وارد انتهای بالادست سیستم می‌شوند. برای حل معادلات متغیر زمانی که در بخش ۲-۲-۲ تشریح شده، شرایط مرزی بالادست ممکن است در طول زمان تغییر کند، لذا انواع مشخصات شرایط مرزی بالادست قابل تعریف در مدل عددی OTIS در بخش ۳-۵-۴ به‌طور مفصل، موردبحث قرار خواهند گرفت.

¹ Runkel and Broshears (1991)

² Second-Order Differential Equations



شکل ۲-۵- شریای مرزی بالادست (C_{bc}) در بخش اول سیستم مدل سازی شده

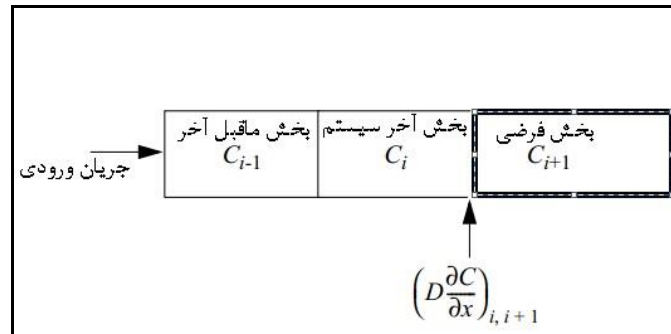
۲-۶-۲- شریای مرزی پایین دست

همان طور که در بخش ۲-۶-۱ بیان شد، شریای مرزی بالادست یک غلظت ثابت است، اما برخلاف آن، شریای مرزی پایین دست یک غلظت ثابت نیست. شریای مرزی پایین دست در واقع یک مقدار است که تابعی از ضریب پراکنده و تغییرات غلظت در انتهای بازه مدل سازی است. برای اجرای شریای مرزی پایین دست، یک غلظت پراکنده در بین بخش های i و $i+1$ تعریف می شود، اما توجه به این نکته حائز اهمیت است که زیر نویس i به آخرین بخش در سیستم مدل سازی و زیر نویس $i+1$ نیز به بخش فرضی مجاور این آخرین بخش اشاره خواهد داشت. شار پراکنده غلظت^۱ به صورت زیر تعریف می شود:

$$\left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_{i,i+1} = \text{DSBOUND} \quad (2-38)$$

که در آن DSBOUND یک مقدار ارائه شده از سوی کاربر برای شار پراکنده غلظت است که به عنوان شریای مرزی پایین دست مدل تعریف می شود. توجه داشته باشید که اگر مقدار DSBOUND برابر با عدد صفر در نظر گرفته شود، رابطه (۳۸) نشان دهنده یک شرط مرزی با شیب غلظتی صفر در پایین دست خواهد بود و در واقع، بدین معناست که غلظت در بخش آخر سیستم مدل سازی شده یا در واقع همان i برابر با غلظت بخش فرضی در نظر گرفته شده یا در واقع همان $i+1$ است. تعریف شریای مرزی پایین دست و همچنین بخش فرضی در نظر گرفته شده در سیستم مدل سازی شده در شکل ۲-۶ نشان داده شده است. مشخصات شریای مرزی پایین دست قابل تعریف در مدل عددی OTIS با عنوان DSBOUND در بخش ۳-۵-۴ به طور مفصل، مورد بحث قرار خواهد گرفت.

¹ Concentration Dispersive Flux



شکل ۲-۶- شرایط مرزی پایین دست برحسب تعریف یک مقدار ثابت برای شار پراکنده غلظت

۲-۷- تخمین پارامترها

هدف اغلب مطالعات انتقال املاح، تخمین پارامترهای مدل نگهداشت موقت (TSM) است. منظور از تخمین پارامترها، یعنی آن که با توجه به مجموعه‌ای از غلظت‌های برداشتی (مشاهداتی) در مقاطع مختلف یک رودخانه یا آبراهه بتوانیم مجموعه‌ای از مقادیر پارامترهای مدل نگهداشت موقت (TSM) را تعیین کرد (واسنجی^۱) که به درستی، سیستم مورد مطالعه را شبیه‌سازی نماید (صحت‌سنجی^۲)؛ برای مثال، از مطالعات رقیق‌سازی ماده ردیاب^۳ به منظور تعیین کمیت پارامترهای هیدرولوژیکی حمل و نقل فیزیکی و اختلاط املاح (α و A_s ، A ، D) استفاده می‌شود (به مطالعات بروشرز و همکاران^۴ (۱۹۹۳) مراجعه شود). تخمین پارامترها اغلب شامل یک روش آزمون و خطا^۵ است که در آن تخمین پارامترها به صورت دستی در طی یک سری شبیه‌سازی‌های مختلف تنظیم می‌شوند تا تطابق قابل قبولی بین غلظت‌های شبیه‌سازی شده و مشاهداتی به دست آید. یک جایگزین برای رویکرد آزمون و خطا، استفاده از تکنیک‌های تخمین پارامتر مانند روش حداقل مربعات غیرخطی^۶ (NLS) است که به طور خودکار، مجموعه‌ای از برآوردهای بهینه پارامترها را تعیین می‌کند.

¹ Calibration

² Verification

³ Tracer-dilution

⁴ Broshears et al. (1993)

⁵ Trial-and-Error Procedure

⁶ Nonlinear Least Squares (NLS)

هدف این بخش ارائه یک نمای کلی از نحوه اجرای NLS در مدل انتقال املاح OTIS است. برای اطلاعات بیشتر در این خصوص توصیه می‌شود به مطالعات: درپیر و اسمیت^۱ (۱۹۸۱)، واگنر و گورلیک^۲ (۱۹۸۶) و دونالدسون و تریون^۳ (۱۹۹۰) نیز مراجعه شود. همچنین، جزئیات بیشتر در مورد NLS در OTIS در بخش‌های ۲-۳ و ۳-۵ و نیز دو مثال کاربردی مدل در بخش‌های ۴-۵ و ۴-۶ ارائه شده‌اند. به‌طور کلی، غلظت املاح مشاهداتی ممکن است به‌صورت مجموع غلظت‌های شبیه‌سازی شده و یک خطای تصادفی بیان شود:

$$c_k = f(\zeta, \bar{\theta})_k + \varepsilon_k \quad , \quad K = 1, \quad (39-2)$$

که در این رابطه:

N - تعداد مشاهدات؛

NP - تعداد پارامترهای مدل؛

c_k - متغیر حالت وابسته، غلظت املاح ناحیه اصلی جریان $[M/L^3]$ ؛

$f(\zeta, \bar{\theta})_k$ - یک تابع غیرخطی که مشاهدات k ام را شبیه‌سازی می‌کند، حل روابط (۲-۳) الی (۲-۵) که غلظت کانال اصلی شبیه‌سازی شده (C_k) را ارائه می‌کند.

ζ - متغیر مستقل که برای مسائل متغیر زمانی برابر است با $t = \zeta$ ، درحالی‌که برای مسائل حالت پایدار زمانی برابر است با $x = \zeta$ ؛

$\bar{\theta}$ - یک بردار به طول NP حاوی تخمین پارامترها؛

ε_k - خطای تصادفی مرتبط با مشاهده K ام؛

و پارامترهای مدل در $\bar{\theta}$ شامل: $D, A, A_s, \alpha, \lambda, \lambda_s, \hat{\lambda}_s, \rho$ و K_d است.

حداقل مربعات غیرخطی (NLS) به‌عنوان یک مسئله بهینه‌سازی با تابع هدف^۴ رابطه (۲-۴۰) مشخص می‌شود:

$$RSS(\bar{\theta}) = \sum_{k=1}^N \{w_k [c_k - f(\zeta, \bar{\theta})_k]^2\} = \sum_{k=1}^N (w_k \varepsilon_k^2) \quad (40-2)$$

¹ Draper and Smith (1981)

² Wagner and Gorelick (1986)

³ Donaldson and Tryon (1990)

⁴ Objective Function

که در این رابطه:

$$RSS(\bar{\theta}) - \text{مجموع باقی مانده وزنی مربعها؛}$$

w_k - ضریب وزنی اختصاص داده شده به مشاهده k ؛

هدف حداقل مربعات غیرخطی (NLS) تعیین بردار تخمین پارامترها ($\bar{\theta}$) بوده که مجموع مربعات خطاها ($RSS(\bar{\theta})$) در رابطه (۲-۴۰) را به حداقل می‌رساند. همان‌طور که از سوی واگنر و گورلیک^۱ (۱۹۸۶) توضیح داده شد، مشکل کمینه‌سازی^۲ ممکن است آن باشد که به هر خطا اهمیت یکسانی داده می‌شود و در واقع، همه خطاها دارای یک وزن برابر هستند ($w_k = 1, k = 1, N$). که راه‌حل جایگزین می‌تواند تعیین ضریب وزنی مطابق رابطه (۴۱) برحسب مقدار غلظت املاح باشد (واگنر و گورلیک، ۱۹۸۶):

$$w_k = \frac{1}{f(\zeta, \bar{\theta})_k^2} \quad (۲-۴۱)$$

مدل عددی OTIS-P، مقدار مجموع مربعات خطاها ($RSS(\bar{\theta})$) را با بهره‌گیری از روش حداقل مربعات غیرخطی (NLS) که در مطالعه دنیس و همکاران^۳ (۱۹۸۱) نیز تشریح شده از طریق یک فرآیند تکراری به حداقل رسانده که در این روش تکراری، تخمین پارامترها مطابق با رابطه (۲-۴۲) به‌روزرسانی می‌شوند:

$$\bar{\theta}_{m+1} = \bar{\theta}_m - (J^T W J + S + Y)_m^{-1} J_m^T W_m \bar{\epsilon}_m^T \quad (۲-۴۲)$$

البته مشروط به برقراری رابطه (۲-۴۳):

$$\sqrt{\sum_{l=1}^{NP} \left[\frac{\theta_{m+1,l} - \theta_{m,l}}{SCALE_l} \right]^2} \leq d_m \quad (۲-۴۳)$$

که در این روابط:

S - یک ماتریس با ابعاد NP در NP که یک عبارت از ماتریس هسین^۴ را تقریب می‌زند؛

SCALE - اندازه معمولی یک پارامتر معین؛

^۱ Wagner and Gorelick (1986)

^۲ Minimization

^۳ Dennis et al. (1981)

^۴ یک ماتریس مربعی از مشتقات جزئی مرتبه دوم یک تابع چند متغیره تشکیل می‌شود (Hessian matrix).

- W – ماتریس قطری^۱ N در N از فاکتورهای وزنی w_k ، $K=1$ ، N ؛
- Y – یک ماتریس قطری NP در NP به گونه‌ای انتخاب شده که رابطه (۲-۴۳) برقرار باشد؛
- d – قطر منطقه اعتماد^۲ (دونالدسون و تریون، ۱۹۹۰)؛
- l – مقادیر مربوط به پارامتر l ام را نشان می‌دهد؛
- m – نشان دهنده تکرار m ام می‌باشد؛
- $\bar{\epsilon}$ – برداری به طول N از باقی‌مانده‌ها ϵ_k ، $K=1$ ، N ؛
- θ – تخمین پارامتر l ام در تکرار m؛
- J – یک ماتریس N در NP با عناصر $J_{k,l}$ که توسط رابطه (۲-۴۴) تعریف می‌شود:

$$J_{k,l} = \frac{\partial f(\zeta, \bar{\theta})_k}{\partial \theta_l} \quad (۲-۴۴)$$

روند تکراری تا زمانی که یکی از دو معیار همگرایی^۳ برقرار شود، ادامه خواهد داشت. همگرایی ممکن است بر اساس تغییر نسبی در پارامترها باشد:

$$\frac{\max \left[\frac{|\theta_{m+1,l} - \theta_{m,l}|}{SCALE_l}, l=1, NP \right]}{\max \left[\frac{|\theta_{m+1,l}| + |\theta_{m,l}|}{SCALE_l}, l=1, NP \right]} < STOPP \quad (۲-۴۵)$$

یا تغییر در مجموع باقی‌مانده مربع‌ها:

$$\frac{fcst [RSS(\bar{\theta})]}{RSS(\bar{\theta}_m)} < STOPSS \quad (۲-۴۶)$$

که در آن STOPP و STOPSS معیارهای همگرایی مشخص شده توسط کاربر در پوشه STARPAC مدل OTIS-P هستند و $fcst [RSS(\bar{\theta})]$ تغییر پیش‌بینی شده در مجموع باقی‌مانده مربع‌ها است. فرآیند^۴ تکرار برای تخمین پارامتر به‌طور خلاصه در شکل ۲-۷ نشان داده شده است. روند تکراری با برآورد تخمین پارامترهای اولیه ($\bar{\theta}_0$) و قطر اولیه منطقه اعتماد (d_0) آغاز می‌شود. سپس روابط (۲-۳) الی

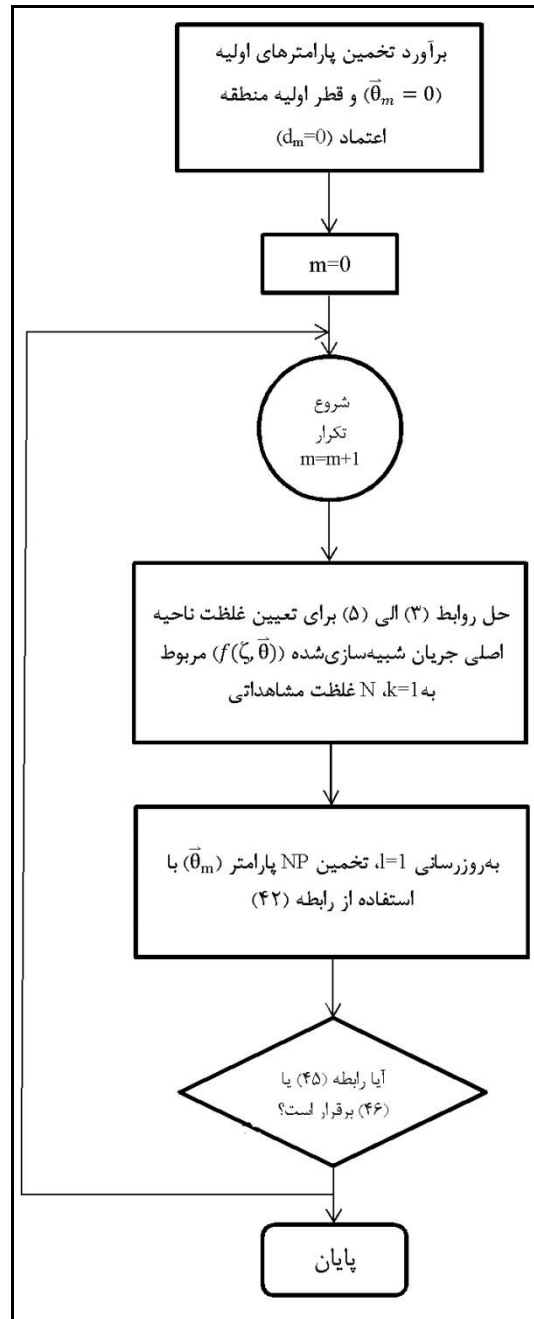
¹ Diagonal Matrix

² Diameter of the Trust Region

³ Convergence Criteria

⁴ FlowChart

(۵-۲) برای تعیین غلظت ناحیه اصلی جریان شبیه‌سازی شده $(f(\bar{\theta}_k, \bar{y}_k))$ مربوط به N غلظت مشاهداتی حل می‌شوند. تخمین NP پارامتر با استفاده از رابطه (۴۲) به‌روزرسانی شده و یک آزمون همگرایی انجام می‌گردد. اگر هر یک از روابط (۲-۴۵) یا (۲-۴۶) برقرار شود، راه‌حل همگرا شده است و تخمین پارامترهای نهایی توسط $\bar{\theta}_m$ ارائه خواهد شد و اگر هیچ‌یک از روابط برقرار نباشد، یک تکرار جدید شروع می‌گردد.



شکل ۲-۷- فرآیند تکرار برای تخمین پارامترها در OTIS-P

فصل سوم

راهنمای کاربر

۳- راهنمای کاربر

در این فصل، اطلاعات موردنیاز برای استفاده از مدل انتقال املاح OTIS تشریح خواهد شد. مدل انتقال املاح OTIS از دو مدل عملیاتی تشکیل شده است. اولین مدل که در این کتاب با عنوان OTIS نامیده می‌شود، نسخه به‌روز شده مدلی است که در ابتدا توسط رانکل و بروشرز^۱ (۱۹۹۱) مستند شده بود. معادلات حاکم بر مدل عددی OTIS در فصل دوم کتاب تشریح شدند. دومین مدل که در این کتاب با عنوان OTIS-P نامیده می‌شود، نسخه اصلاح‌شده OTIS است که با الگوریتم‌های حداقل مربعات غیرخطی (NLS) توصیف‌شده توسط دونالدسون و تریون^۲ (۱۹۹۰) همراه شده است. مدل عددی OTIS-P مجموعه‌ای بهینه از تخمین‌های پارامترها مربوط به داده‌های غلظت مشاهداتی را همان‌طور که در بخش ۲-۷ توضیح داده شده است، تعیین می‌کند. بخش‌های ۳-۱ الی ۳-۷ مشخصات ورودی و خروجی OTIS و OTIS P را توضیح می‌دهند.

۳-۱- محدوده کاربرد مدل OTIS

مدل حمل‌ونقل املاح OTIS در ابتدا برای استفاده در رودخانه‌های کوچک کوهستانی توسعه یافت، اما امکان بهره‌گیری از این مدل با فرض یک‌بعدی در نظر گرفتن حمل‌ونقل املاح برای هر جریان یا رودخانه‌ای وجود دارد. فرض اولیه تجزیه‌وتحلیل یک‌بعدی این است که جرم املاح به‌طور یکنواخت، در سطح مقطع جریان توزیع شده باشد. با در نظر گرفتن این فرض، غلظت املاح فقط در جهت طولی متفاوت خواهد بود و در عمق و یا عرض تغییر نمی‌کند. اگرچه این یکنواختی به‌ندرت در طبیعت رخ می‌دهد، اما برای بسیاری از نهرها و رودخانه‌ها یک فرض منطقی به شمار می‌رود. جزئیات بیشتر در مورد تجزیه‌وتحلیل یک‌بعدی جریان توسط فیشر و دیگران^۳ (۱۹۷۹) ارائه شده است.

¹ Runkel and Broshears (1991)

² Donaldson and Tryon (1990)

³ Fischer et al. (1979)

مدل OTIS به طور کلی، می‌تواند برای دو کاربرد دسته‌بندی شود: الف) برای تعیین کمیت فرآیندهای فیزیکی مؤثر بر املاح غیر واکنشی مانند ردیاب‌ها، ب) کاربردهای اضافی شامل تجزیه و تحلیل املاح واکنشی در معرض جذب و یا زوال مرتبه اول. یک نمای کلی از فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی موجود در مدل در بخش ۲ ارائه شده است.

۳-۲- ویژگی‌های مدل

چندین حالت مختلف برای شبیه‌سازی در مدل انتقال املاح وجود دارد. مروری کلی بر گزینه‌های مختلف شبیه‌سازی در بخش‌های زیر ارائه خواهد شد و جزئیات بیشتر در بخش ۳-۵ مورد بحث قرار خواهد گرفت.

۳-۲-۱- شرایط متغیر زمانی و پایدار زمانی

مدل OTIS ممکن است برای حل معادلات متغیر زمانی (حالت پویا) بخش ۲-۲-۲ یا معادلات حالت پایدار زمانی بخش ۲-۲-۳ استفاده شود. شرح کامل پارامترهای ورودی مربوط به هر کدام از این حالت‌ها در بخش ۳-۵-۴ ارائه شده است. حالت شبیه‌سازی پویا زمانی انتخاب خواهد شد که کاربر علاقه‌مند به تعیین ماهیت متغیر زمانی برای انتقال املاح باشد. در این حالت کاربر می‌بایست یک شرط مرزی از نوع متغیر زمانی، یک بازه زمانی یکپارچه‌سازی (متغیر ورودی TSTEP) و یک بازه زمانی چاپ نتایج (متغیر ورودی PSTEP) را مشخص کند. در حالت پویا گزینه TSTEP می‌بایست روی عددی غیر از صفر تنظیم شود.

حالت پایدار برای شرایطی انتخاب خواهد شد که پاسخ طولانی‌مدت سیستم به شرایط بارگذاری ثابت مورد توجه باشد. در این حالت برخلاف شرایط متغیر زمانی، با تنظیم بازه زمانی یکپارچه‌سازی (متغیر ورودی TSTEP) روی عدد صفر، گزینه حالت پایدار فراخوانی می‌گردد.

۳-۲-۲- مدل‌سازی برای املاح واکنشی یا غیر واکنشی

از قابلیت‌های مهم مدل OTIS شبیه‌سازی املاح واکنشی، غیر واکنشی یا هر دو حالت به صورت هم‌زمان است. املاح غیر واکنشی در معرض فرآیندهای فیزیکی جابه‌جایی، پراکندگی، جریان‌های جانبی و ذخیره موقت قرار دارند، در حالی که در شبیه‌سازی املاح واکنشی فرآیندهای اضافی نظیر جذب و زوال مرتبه اول نیز ممکن است برای مدل‌سازی در نظر گرفته شوند. املاح غیر واکنشی با تنظیم گزینه‌های IDECAY و ISORB روی عدد صفر مدل‌سازی می‌شوند. املاح واکنشی در معرض فرآیند جذب با

تنظیم ISORB روی عدد ۱ و مشخص کردن داده‌های مختلف جذب (LAMHAT, LAMHAT2, RHO, KD و CSBACK) مدل می‌شوند. زوال و یا تولید مرتبه اول نیز با تنظیم IDECAY روی عدد ۱ و مشخص کردن ضرایب نرخ مرتبه اول (LAMBDA و LAMBDA2) مدل‌سازی خواهند شد. در این شرایط، مقادیر مثبت در صورتی مشخص می‌شوند که املاح در معرض زوال مرتبه اول باشند، درحالی‌که مقادیر منفی برای تعیین نرخ تولید مرتبه اول استفاده خواهند شد. توضیحات بیش‌تر در مورد گزینه‌های مختلف و پارامترهای ورودی در بخش ۳-۵-۴ ارائه خواهد شد.

۳-۲-۳- رژیم‌های جریان^۱

علاوه بر توضیحات بخش ۳-۲-۲، یکی دیگر از قابلیت‌های مدل OTIS توانایی شبیه‌سازی حمل‌ونقل تحت رژیم‌های مختلف شرایط جریان است. این مدل توانایی شبیه‌سازی جریان‌های متغیر مکانی (یکنواخت^۲ یا غیریکنواخت^۳) و هم‌چنین، متغیر زمانی (پایدار^۴ یا ناپایدار^۵) را دارد. مشخصات انواع رژیم‌های هیدرولوژیکی حاکم بر حل مسئله در این مدل در جدول ۳-۱ به صورت خلاصه ارائه شده است. در یک رژیم جریان پایدار، پارامترهای مدل مانند جریان‌های جانبی و سطح مقطع جریان باگذشت زمان ثابت خواهند بود، لذا گزینه‌های اول و دوم این جدول که شامل رژیم جریان پایدار هستند، نسبتاً ساده می‌باشند، اما گزینه سوم در جدول ۳-۱، به شبیه‌سازی جریان‌های ناپایدار می‌پردازد که در این شرایط پارامترهای مدل باگذشت زمان متغیر خواهند بود. این حالت از رژیم جریان معمولاً زمانی انتخاب می‌شود که مدل املاح همراه با یک مدل مسیریابی جریان استفاده شود که جریان‌های جانبی متغیر با زمان، دبی جریان کانال متغیر با زمان و سطح مقطع جریان متغیر با زمان را ارائه می‌دهد، لذا تنها تعداد کمی از برنامه‌های کاربردی مدل جریان ناپایدار تا به امروز انجام شده است. قالب ورودی مورد استفاده برای تعیین رژیم جریان در بخش ۳-۵-۵ آورده شده است. توصیه می‌شود برای اطلاعات بیش‌تر در مورد رژیم‌های جریان مختلف به هندرسون^۶ (۱۹۶۶) مراجعه شود.

¹ Flow Regimes

² Uniform

³ Nonuniform

⁴ Steady

⁵ Unsteady

⁶ Henderson (1966)

جدول ۳-۱- مشخصات انواع رژیم‌های هیدرولوژیکی قابل تعریف در مدل OTIS

مشخصات کاربردی	رژیم جریان
گزینه جریان‌های جانبی (QLATIN و QLATOUT) روی عدد صفر تنظیم شده و گزینه تغییر در مقدار دبی جریان (QSTEP) نیز روی عدد صفر تنظیم خواهد شد.	یکنواخت- پایدار
گزینه جریان‌های جانبی (QLATIN و QLATOUT) روی مقادیر مدنظر تنظیم شده و گزینه تغییر در مقدار دبی جریان (QSTEP) نیز روی عدد صفر تنظیم خواهد شد.	غیریکنواخت- پایدار
پوشه جریان (Flow File) ورودی مدل OTIS برای مقادیر جریان، مقادیر جریان ورودی جانبی و مقادیر سطح مقطع جریان با استفاده از یک مدل روندیابی ^۱ مناسب (برای مثال: مدل DR3M توسط آلی و اسمیت ^۲ (۱۹۸۲)) تولید می‌شود. هم‌چنین گزینه تغییر در مقدار دبی جریان (QSTEP) نیز برابر با گام زمانی خروجی مدل روندیابی تنظیم خواهد شد.	غیریکنواخت- ناپایدار

۳-۲-۴- تخمین پارامترها با استفاده از الحاقیه OTIS-P

بسیاری از مطالعات مدل‌سازی املاح در مجاری باز شامل روش‌های سعی و خطای دستی هستند که در آن پارامترهای مدل در طی یک سری شبیه‌سازی تنظیم شده تا تطابق قابل‌قبولی بین مقادیر شبیه‌سازی شده و مشاهداتی به دست آید. یک رویکرد جایگزین استفاده از تکنیک‌های خودکار تخمین پارامترها مانند روش حداقل مربعات غیرخطی (NLS) شرح داده شده در بخش ۲-۷ است. مدل OTIS-P چارچوب ریاضی OTIS را با الگوریتم‌های NLS جفت می‌کند (دونالدسون و تریون^۳، ۱۹۹۰). در نتیجه OTIS-P یک وسیله خودکار برای تخمین پارامترهای مدل فراهم خواهد کرد. برای استفاده از روش تخمین پارامتر خودکار، کاربر می‌باید پوشه‌های ورودی اولیه OTIS و هم‌چنین دو پوشه اضافی موردنیاز برای الحاقیه OTIS-P را آماده کند. این پوشه‌های اضافی شامل: الف) پارامترهای غلظت مشاهداتی در بازه‌های مختلف پایین دست و ب) پارامترهای مختلف ورودی پوشه STARPAC (پوشه ورودی مخصوص OTIS-P) را تشکیل خواهند داد. کاربران می‌توانند تخمین پارامتر برای هر زیرمجموعه از ۱۰

¹ Routing Model

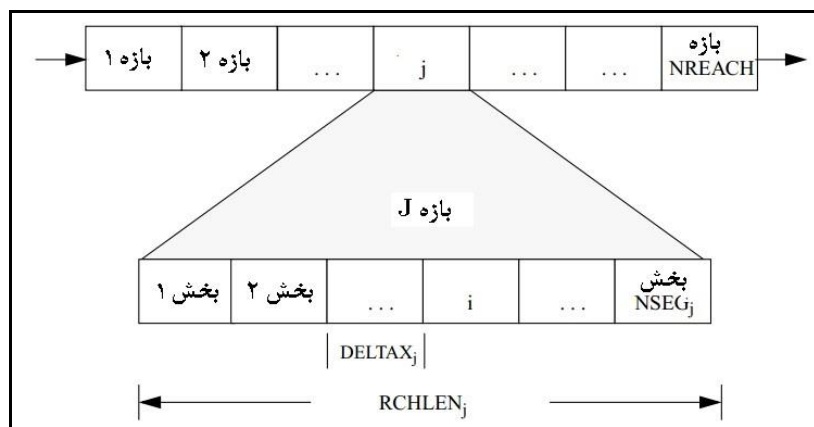
² Alley and Smith (1982)

³ Donaldson and Tryon (1990)

پارامتر قابل تخمین مدل (LAMBDA2, LAMBDA, ALPHA, AREA2, AREA, DISP, RHO, LAMHAT2, LAMHAT و KD) را درخواست نمایند.

۳-۳- سیستم مفهومی^۱ بازبینی شده

قبل از ارائه شرح مفصلی از ورودی‌های مدل، مفید است که برخی از متغیرهای برنامه را از نظر سیستم مفهومی تعریف کنیم. سیستم مفهومی شامل یک یا چند بازه^۲ بوده و هر بازه به تعدادی عنصر یا بخش^۳ محاسباتی تقسیم‌بندی می‌شود. شکل ۳-۱ یک سیستم مفهومی مدل‌سازی شده را نشان می‌دهد. برای مدل‌سازی انتقال املاح، بازه باید به‌عنوان یک فاصله پیوسته تعریف شود که در طول آن پارامترهای مدل ثابت خواهند ماند؛ به‌طور مثال، یک بازه دارای ضریب پراکندگی طولی، نرخ زوال و نرخ جریان جانبی ثابت خواهد بود. تعداد بازه‌های تعریف شده برای یک سیستم معین بستگی به تنوع ذاتی آن و همچنین، در دسترس بودن پارامترها دارد. یک جریان یکنواخت مکانی ممکن است با استفاده از یک بازه واحد مدل‌سازی شود، درحالی‌که یک جریان با تغییرات مشخص در ویژگی‌های کانال ممکن است با استفاده از چندین بازه شبیه‌سازی شود. تعداد بازه‌ها در سیستم مدل‌سازی شده از طریق پارامتر ورودی (NREACH) مشخص می‌شود.



شکل ۳-۱- سیستم مفهومی در مدل OTIS شامل بازه‌ها و بخش‌ها

¹ Conceptual System

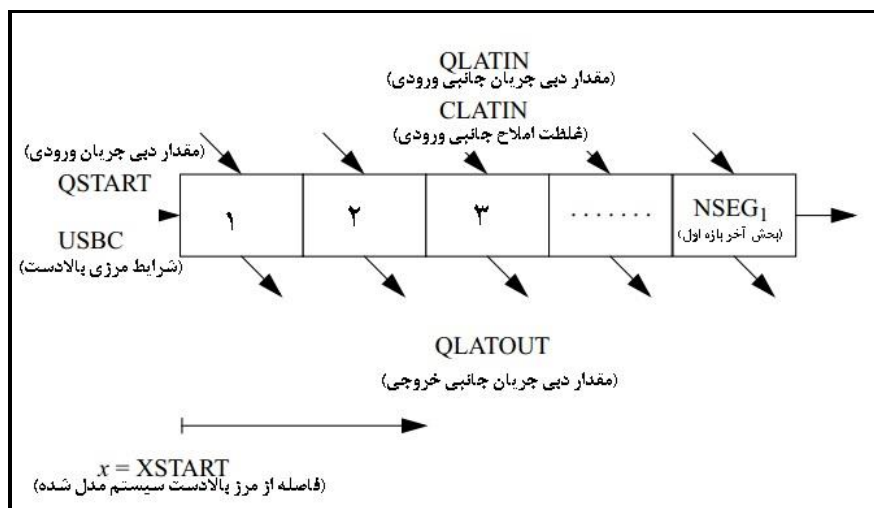
² Reach

³ Segment

همان‌طور که بیان شد، هر بازه به تعدادی عنصر یا بخش محاسباتی تقسیم می‌شود. هر بخش نشان‌دهنده یک حجم کنترل^۱ است که معادلات تعادل جرم بر آن اعمال می‌شود. برای هر بازه معین، تعدادی بخش در آن بازه (NSEG) با طول (DELTA) وجود دارد. توجه داشته باشید که DELTAX بر اساس طول بازه (RCHLEN) و تعداد بخش در آن بازه (NSEG) تعیین می‌شود:

$$DELTA = \frac{RCHLEN}{NSEG} \quad (1-3)$$

متغیرهای اضافی برنامه در شکل ۳-۲ نشان داده شده است. در این شکل اولین بازه در شبکه جریان و رابطه آن با برخی از متغیرهای ورودی موردنیاز تعریف شده است. از آنجاکه این بازه از مرز بالادست سیستم شروع می‌شود، ما یک دبی جریان ورودی (QSTART) و مقدار مرزی املاح در بالادست (USBC) را تعریف می‌کنیم. USBC شرایط مرزی بالادست است که در بخش‌های ۱-۲-۳ و ۳-۴-۵ موردبحث قرار خواهد گرفت (ورودی نوع ۱۷، جدول ۳-۱۱). متغیر (XSTART) نشان‌دهنده فاصله از شروع جریان آبراهه بوده در بالادست بازه اول اعمال است. لازم به ذکر است که این سه متغیر (QSTART، USBC، XSTART) فقط برای اولین بازه سیستم مدل‌سازی شده اعمال می‌شوند.



شکل ۳-۲- اولین بازه در سیستم مفهومی و متغیرهای ورودی موردنیاز

¹ Volume Control

متغیرهای باقی‌مانده برنامه (QLATIN، CLATIN و QLATOUT) نشان داده شده در شکل ۳-۲ معمولاً برای هر بازه در سیستم مدل‌سازی شده مشخص می‌شوند (یک استثنا در مورد جریان ناپایدار وجود دارد که برای این منظور به بخش ۳-۵-۵ مراجعه شود). دبی جریان جانبی (QLATIN)، مقدار جریان ورودی به کانال توسط جریان‌های سطحی، جریان‌های هایپریک^۱ و تخلیه آب زیرزمینی را نشان می‌دهد. این جریان اضافی می‌تواند دارای غلظت املاح باشد که قابلیت تعریف آن توسط متغیر (CLATIN) به مدل تعریف وجود دارد. متغیر نهایی (QLATOUT) نیز یک جریان خروجی جانبی است که نشان‌دهنده از دست دادن آب از کانال اصلی جریان است. هر دو متغیر QLATIN و QLATOUT بر اساس بعد $(L^3/L-T)$ تعریف می‌شوند.

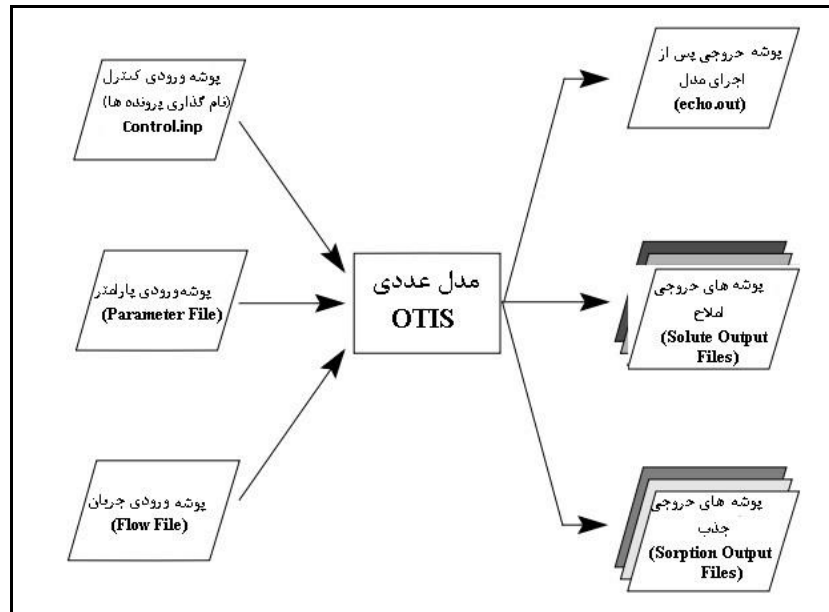
۳-۴- ساختار تعریف ورودی‌ها و خروجی‌های مدل

در این بخش، توضیح مختصری از پوشه‌های ورودی و خروجی مرتبط با OTIS و OTIS-P شرح داده خواهد شد. توضیحات دقیق‌تر در بخش‌های ۳-۵ تا ۳-۷ ارائه می‌شود.

۳-۴-۱- مدل عددی OTIS

شکل ۳-۳ ساختار پوشه‌های ورودی و خروجی مدل عددی OTIS را نشان می‌دهد. اولین پوشه ورودی تحت عنوان پوشه کنترل (Control File) برای تعیین نام پوشه‌های ورودی و خروجی استفاده می‌شود. نکته‌ای که می‌بایست در نظر داشت این است که برخلاف سایر پوشه‌های ورودی، نام این پوشه در داخل نرم‌افزار روی control.inp تنظیم شده است و نام آن به هیچ‌وجه، قابل تغییر نیست. دومین پوشه ورودی با عنوان پوشه پارامتر (Parameter File) برای تعیین گزینه‌های شبیه‌سازی، نوع شرایط مرزی و مشخص کردن پارامترهای مدل بوده که در طول اجرای برنامه ثابت می‌مانند. پوشه جریان (Flow File) آخرین ورودی نهایی مدل OTIS بوده که حاوی پارامترهایی از مدل مانند سرعت جریان و سطح مقطع کانال اصلی می‌باشد. نام پوشه‌های پارامتر و جریان توسط کاربر در پوشه کنترل (control.inp) قابل تعریف بوده و کاربر می‌تواند نام دلخواهی برای هر کدام از این پوشه‌ها تعیین کند.

¹ Hyporheic Flow



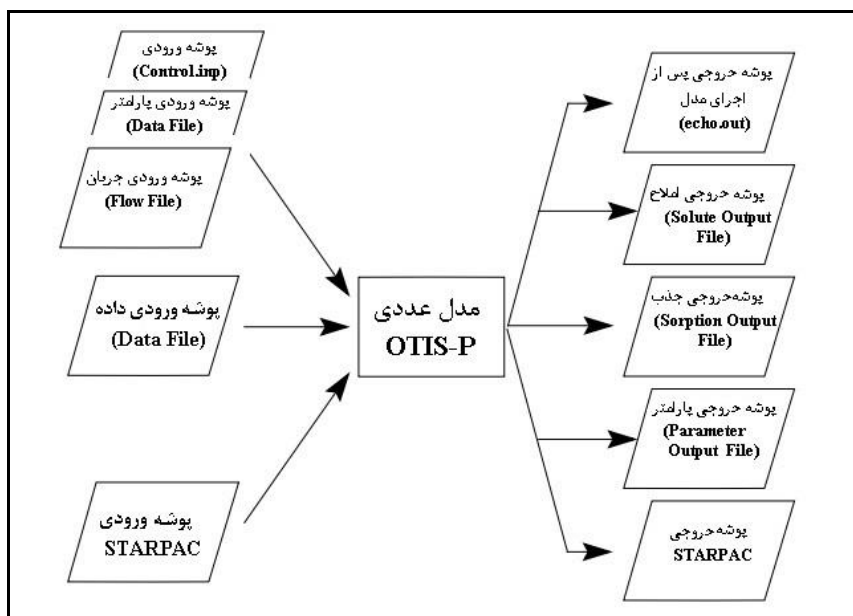
شکل ۳-۳- پوشه‌های ورودی و خروجی مدل عددی OTIS

همچنین، در شکل ۳-۳ پوشه‌های خروجی ایجادشده از طریق OTIS نشان داده شده است. پس از اتمام اجرای مدل، پوشه‌ای با عنوان echo.out تولیدشده که کلیاتی از گزینه‌های شبیه‌سازی واردشده توسط کاربر و پارامترهای ورودی مدل و سایر اطلاعات را نشان می‌دهد. هرگونه پیغام خطایی که احياناً کاربر در حین اجرای مدل با آن مواجه شده باشد نیز در انتهای این پوشه نشان داده خواهد شد. از سوی دیگر، ممکن است که تعداد املاح در OTIS بیش از یک مورد باشد و هدف شبیه‌سازی تمام این املاح باشد، لذا پس از اجرای مدل، برای هر یک از این املاح نیز یک پوشه خروجی املاح ایجاد خواهد شد. اگر در اجرای شبیه‌سازی موضوع جذب املاح نیز در حال مدل‌سازی باشد، یک پوشه خروجی برای جذب نیز برای هر یک از املاح ایجاد خواهد شد. نام هر یک از پوشه‌های خروجی محلول و جذب همان نامی خواهد بود که قبلاً توسط کاربر در پوشه control.inp مشخص شده بود.

۳-۴-۲- مدل عددی OTIS-P

شکل ۳-۴ ساختار پوشه‌های ورودی و خروجی مدل عددی OTIS-P را نشان می‌دهد. برای اجرای مدل OTIS-P پنج پوشه ورودی موردنیاز است. سه پوشه ورودی اول (کنترل، پارامتر و جریان) مطابق

توضیحات بخش ۳-۴-۱ همان مواردی است که برای مدل عددی OTIS است. چهارمین پوشه ورودی با عنوان پوشه داده‌ها (Data File) برای تعیین داده‌های غلظت مشاهداتی است که این داده‌ها در مراحل تخمین پارامترها استفاده خواهد شد. پوشه ورودی نهایی، پوشه ورودی تحت عنوان STARPAC برای تعیین این که کدام پارامترها باید توسط OTIS-P تخمین زده شود و همچنین تنظیم سایر گزینه‌های تخمین، استفاده می‌شود. نام پوشه داده‌ها و پوشه ورودی STARPAC توسط کاربر در control.inp مشخص خواهد شد. همچنین، در این شکل، پوشه‌های خروجی ایجاد شده توسط مدل عددی OTIS-P نیز نشان داده شده است. مانند مدل OTIS، مدل عددی OTIS-P نیز یک پوشه حاوی اطلاعات پس از اجرای نرم‌افزار تحت عنوان echo.out و یک پوشه خروجی املاح و همچنین، در صورت لزوم نیز یک پوشه خروجی جذب نیز ایجاد می‌کند. دو پوشه اضافی در این مدل عددی، پوشه خروجی پارامتر (Parameter Output File) و پوشه خروجی STARPAC هستند. پوشه خروجی پارامتر حاوی تخمین پارامترهای نهایی تعیین شده با استفاده از روش حداقل مربعات خطا است، در حالی که پوشه خروجی STARPAC حاوی تجزیه و تحلیل‌های آماری مربوط به داده‌های مشاهداتی و نتایج تخمینی توسط روش حداقل مربعات خطا است. نام پوشه‌های املاح، جذب، پارامتر و پوشه‌های خروجی STARPAC توسط کاربر در control.inp مشخص می‌شود.



شکل ۳-۴- پوشه‌های ورودی و خروجی مدل عددی OTIS-P

۳-۵- قالب ورودی داده‌ها

همان‌طور که در بخش ۳-۴ توضیح داده شد، چندین پوشه ورودی باید قبل از اجرای مدل آماده شده و در واقع، پارامترهای مربوط به انتقال-پراکندگی املاح در این پوشه‌ها تنظیم گردند. سه مورد از این پوشه‌های ورودی از طریق OTIS و OTIS-P (توضیح در بخش‌های ۳-۵-۳ و ۳-۵-۵) و دو مورد باقی‌مانده منحصراً توسط OTIS-P (توضیح در بخش‌های ۳-۵-۶ و ۳-۵-۷) استفاده می‌شوند. در بخش‌های بعدی، هر پوشه ورودی برحسب مجموعه‌ای از انواع ردیف^۱ توضیح داده خواهد شد. در هر نوع ردیف، یک یا چند موضوع برای تعیین پارامترهای ورودی مختلف استفاده می‌شوند. به‌طور کلی، انواع ردیف به خطوط موجود در پوشه‌های ورودی اشاره دارد و موضوعات نیز مربوط به ستون‌های^۲ خاصی در هر ردیف هستند. نمونه پوشه‌های ورودی در بخش ۴ ارائه خواهد شد.

۳-۵-۱- واحدها

در بخش ۲-۲ معادلات حاکم و پارامترهای مدل برحسب کمیت‌های اصلی: جرم [M]، طول [L] و زمان [T] توضیح داده شد. در مدل انتقال املاح OTIS واحدهای خاصی باید به پارامترهای ورودی مختلف اختصاص داده شوند که کاربر مدل ممکن است واحدهای مناسب را با توجه به موارد زیر انتخاب نماید:

واحدهای طول [L]: کاربران هر نوع واحد طول اعم از سیستم متریک یا انگلیسی را می‌توانند هنگام تعیین متغیرهای ورودی مدل نگهداشت موقت استفاده کنند، اما نکته حائز اهمیت این است که واحدهای طول باید برای همه پارامترهای مدل و متغیرهای به‌کاررفته در نرم‌افزار یکسان باشند. واحد طول انتخاب‌شده با نشانه L در توضیحات پوشه‌های ورودی در بخش‌های مختلف توضیح داده خواهد شد.

واحدهای غلظت [CU]: واحدهای غلظت به‌طور کلی، مستقل از واحدهای مورد استفاده برای پارامترهای مدل نگهداشت موقت و متغیرهای به‌کاررفته در نرم‌افزار هستند. واحدهای غلظت برای تعیین شرایط مرزی (USBC، DSBOUND)، غلظت جریان جانبی ورودی (CLATIN) و متغیرهای جذب (RHO، KD و CSBACK) استفاده خواهند شد و باید توجه داشت محدودیتی از حیث انتخاب نوع واحد غلظت وجود نداشته و فقط صرفاً می‌باید همه واحدهای غلظت به‌کاررفته در اجرای مدل یکسان باشند. واحد غلظت انتخاب‌شده با نشانه CU در توضیحات پوشه‌های ورودی در بخش‌های مختلف توضیح داده خواهد شد.

¹ Record

² Column

واحدهای زمان [T]: پارامترهایی از مدل نگهداشت موقت نظیر دبی جریان و ضرایب سرعت که نیاز به تعریف یک واحد زمانی مشخص دارند، برحسب ثانیه تعریف می‌شوند، اما باید توجه داشت که متغیرهای کنترل شبیه‌سازی نرم‌افزار مانند زمان شروع شبیه‌سازی (TSTART) باید برحسب ساعت تعریف شوند.

۳-۵-۲- شخصی‌سازی برنامه‌های اجرایی

کاربران نرم‌افزار ممکن است گاهی با نوشتن متن مبنی بر تاریخ، مکان و سایر مشخصات مربوط به پروژه در هر یک از پوشه‌های ورودی اقدام به شخصی‌سازی پوشه‌ها برای راحتی در اجراهای بعدی نمایند. خطوط دارای علامت هشتگ (#) که در ستون شماره ۱ آن قرار گرفته‌اند، برای مدل به‌عنوان یک نظر یا یک متن شخصی تلقی شده و تأثیری در اجرای نرم‌افزار نخواهند داشت. این ویژگی خاص در پوشه‌های ورودی مثال‌های کاربردی توضیح داده شده در بخش ۴، نشان داده خواهد شد.

۳-۵-۳- پوشه کنترل

پوشه کنترل (Control.inp) برای تعیین نام پوشه‌های ورودی و خروجی مختلف استفاده می‌شود. نمونه پوشه‌های کنترل در بخش ۴ آورده شده است.

۳-۵-۳-۱- پوشه کنترل OTIS

قالب پوشه Control.inp برای OTIS در جدول ۳-۲ نشان داده شده است. این پوشه کنترل از چهار ردیف تشکیل شده است. ردیف (۱) نام پوشه پارامتر مشخص می‌کند، ردیف (۲) نام پوشه جریان را مشخص کرده و ردیف (۳) نام پوشه‌های خروجی املاح را مشخص خواهد کرد. اگر جذب املاح نیز در مدل‌سازی ما در نظر گرفته شده باشد، ردیف (۴) نام پوشه‌های خروجی جذب را مشخص می‌کند، ولی اگر چنانچه جذب مدل نشده باشد، ردیف (۴) حذف خواهد شد. فهرست ردیف‌های پوشه کنترل در جدول (۲) ارائه شده است. البته باید در نظر داشت که پوشه کنترل ممکن است بیش از چهار ردیف داشته باشد، زیرا ممکن است برخی از انواع ردیف‌ها تکرار شوند؛ به‌عنوان مثال، اگر تعداد املاح مدل‌سازی شده بیش‌تر از یک باشد، در این صورت انواع ردیف ۳ و ۴ برای هر یک از املاح تکرار می‌شوند (پوشه‌های خروجی برای هر یک از املاح جداگانه ایجاد می‌شود).

جدول ۳-۲- پوشه کنترل OTIS

نوع ردیف	نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	توضیحات
۱	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه پارامتر
۲	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه جریان
*۳	تعریف پوشه یا پوشه‌ها	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه/پوشه‌های خروجی املاح
**۴	تعریف پوشه یا پوشه‌ها	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه/پوشه‌های خروجی جذب

* ردیف‌های (۳) و (۴) به تعداد املاح تکرار شوند. (NSOLUTE)

** ردیف (۴) در صورت عدم در نظر گرفتن مبحث جذب در مدل‌سازی حذف شود.

۳-۵-۲- پوشه کنترل OTIS-P

قالب پوشه control.inp برای OTIS-P در جدول ۳-۳ نشان داده شده است. این پوشه کنترل از هشت ردیف تشکیل شده است. انواع ردیف (۱) تا (۸) نام پوشه‌ها را به ترتیب، برای پوشه‌های ورودی پارامتر، جریان، داده، ورودی STARPAC، خروجی پارامتر، خروجی STARPAC، خروجی املاح و خروجی جذب مشخص می‌کنند. اگر جذب مدل نشده باشد، ردیف (۸) نیز حذف می‌شود.

جدول ۳-۳- پوشه کنترل OTIS-P

نوع ردیف	نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	توضیحات
۱	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه پارامتر
۲	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه جریان
۳	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه داده‌ها
۴	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه ورودی STARPAC
۵	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه خروجی پارامتر
۶	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه خروجی STARPAC

۷	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه خروجی املاح
*۸	تعریف پوشه	متن	۱ تا ۴۰	تعیین نام پوشه خروجی جذب

* ردیف (۸) در صورت در نظر نگرفتن مبحث جذب در مدل سازی حذف شود.

۳-۵-۴- پوشه پارامتر

پوشه پارامتر گزینه‌های چاپ، شرایط مرزی و پارامترهای مدل را مشخص می‌کند که در طول اجرای برنامه ثابت می‌مانند. پوشه پارامتر در جداول ۳-۴ تا ۳-۱۱ ارائه شده است. پوشه پارامتر با استفاده از ۱۷ نوع ردیف ایجاد خواهد شد که تمامی این موارد به ترتیب در زیر مورد بحث قرار خواهند گرفت.

۳-۵-۴-۱- ردیف (۱) - مدت زمان شبیه‌سازی

اولین ردیف در پوشه پارامتر برای تعیین یک عنوان برای شبیه‌سازی مورد استفاده قرار خواهد گرفت که این عنوان بعداً بخشی از موارد چاپ شده در پوشه echo.out خواهد بود. نکته حائز اهمیت در نام‌گذاری این است که تعداد حروف به کار برده در تعیین نام پروژه نباید از ۸۰ حرف تجاوز نماید.

۳-۵-۴-۲- ردیف (۲) و (۳) - پارامترهای چاپ نتایج

یکی از مهم‌ترین گام‌ها در ابتدای شبیه‌سازی انتقال املاح در مدل OTIS یا OTIS-P تنظیم صحیح گزینه چاپ (PRTOPT) بر مبنای نوع شبیه‌سازی است. گزینه چاپ که در ردیف (۲) تعیین می‌شود، در واقع، قالب پوشه‌های خروجی املاح را تعیین می‌کند. با تنظیم گزینه چاپ روی عدد ۱ صرفاً غلظت املاح فقط برای ناحیه اصلی جریان شبیه‌سازی خواهد شد، اما اگر چنانچه هدف کاربر شبیه‌سازی هم-زمان غلظت املاح هم در ناحیه اصلی جریان و هم در نواحی نگهداشت موقت باشد، باید گزینه چاپ را روی عدد ۲ تنظیم نماید.

بازه زمانی تحلیل‌های درخواستی برحسب ساعت (PSTEP) در ردیف (۳) تعیین خواهد شد و در واقع، در این ردیف، تعیین فاصله زمانی چاپ نتایج انجام خواهد شد؛ به عنوان مثال، اگر چاپ نتایج یا همان بازه شبیه‌سازی هر ۱۵ دقیقه مدنظر باشد، مقدار ۰/۲۵ ساعت برای مرحله چاپ وارد می‌شود. نکته قابل توجه این است که اگر زمان درخواستی قابل درون‌یابی نباشد، ممکن است مرحله چاپ واقعی با مرحله چاپ درخواستی کمی متفاوت باشد که در این صورت نرم‌افزار، مرحله چاپ را برابر نزدیک‌ترین مضرب گام زمانی درون‌یابی و تنظیم می‌کند.

۳-۵-۴-۳- ردیف (۴)، (۵) و (۶) - پارامترهای زمان

وارد کردن پارامترهای زمانی مناسب برای گام‌های بعدی در تهیه پوشه پارامتر ورودی می‌باشد. ردیف (۴) برای تنظیم متغیر ورودی TSTEP استفاده می‌شود. مطابق توضیحات بخش ۱-۲-۳، اگر TSTEP روی عدد صفر تنظیم شود، محاسبات راه‌حل حالت پایدار زمانی (بخش ۵-۲) انجام خواهد شد و مقادیر غیر از عدد صفر برای متغیر TSTEP، برای درون‌یابی در بازه زمانی (Δt) در روش حل عددی متغیر زمانی (بخش ۲-۴) استفاده می‌شود. برای یک حل دقیق می‌بایست چندین مدل شبیه‌سازی اجرا گردد تا بتوان به یک بازه زمانی (Δt) مناسب دست یافت.

پارامترهای TSTART و TFINAL به‌عنوان پارامترهای زمانی بعدی هستند که با استفاده از ردیف‌های ۵ و ۶ تنظیم خواهند شد. متغیر ورودی TSTART زمان شروع شبیه‌سازی را نشان می‌دهد و TFINAL نیز به همین ترتیب، زمان پایان شبیه‌سازی را مشخص خواهد کرد. نکته حائز اهمیت که در خصوص این دو پارامتر زمانی نیز باید توجه داشت، این است که هر دو پارامتر بر مبنای ساعت باید در برنامه تعریف شوند. مقادیر TSTEP، TSATRT و TFINAL در جدول ۳-۴ نشان داده شده است.

۳-۵-۴-۴- ردیف (۷) - فاصله از مرز بالادست

ردیف (۷) با عنوان XSTART در پوشه پارامتر معرفی شده که در واقع فاصله در مرز بالادست سیستم مدل شده را مشخص می‌کند. در طول اجرای مدل، XSTART برای تعیین فواصل در مکان‌های مختلف پایین‌دست استفاده می‌شود. از آنجایی که مرز بالادست در ابتدای ناحیه مدل‌سازی شده است، معمولاً XSTART روی صفر تنظیم می‌شود تا تمام فواصل پایین‌دست از ابتدای بالادست تعیین شوند.

۳-۵-۴-۵- ردیف (۸) - شرایط مرزی پایین‌دست

ردیف (۸) با عنوان DSBOUND در پوشه پارامتر معرفی شده که در واقع شرایط مرزی پایین‌دست را مشخص می‌کند. در بسیاری از برنامه‌های مدل‌سازی، شار نشان‌دهنده توسط شرایط مرزی پایین‌دست روی صفر تنظیم می‌شود. همان‌طور که در بخش ۲-۶ بحث شد، تنظیم DSBOUND روی عدد صفر نشان می‌دهد که شیب غلظت در مرز پایین‌دست برابر با صفر است. با توجه به این که این موضوع یک فرض است، لذا برای تحقق آن باید طول آخرین بازه شبیه‌سازی در سیستم مدل‌سازی شده به‌گونه‌ای مشخص شود که محل مرز پایین‌دست به‌اندازه کافی پایین‌تر از آخرین مکان رودخانه موردنظر ما باشد؛ به‌طور مثال اگر آخرین بازه پایین‌دست ما یک رودخانه در طول L1 باشد، لذا طول آخرین بازه

شبیه‌سازی تعریف شده در مدل توسط کاربر باید مقداری بیش‌تر از این مقدار L_1 باشد. جزئیات بیش‌تر در مورد تعیین شرایط مرزی پایین‌دست در بخش ۲-۶ و بخش ۴-۱ ارائه شده است.

۳-۵-۴-۶- ردیف (۹) - تعداد بازه‌ها

همان‌طور که در بخش ۳-۳ بحث شد، سیستم مدل‌سازی شده به تعدادی بازه تقسیم می‌شود. تعیین تعداد این بازه‌ها در شبیه‌سازی صورت گرفته توسط ردیف (۹) تحت عنوان NREACH برای مدل تعریف می‌شود. برای هر بازه، پارامترهای ثابت با استفاده از ردیف (۱۰) مشخص می‌شوند.

جدول ۳-۴- پوشه پارامتر- ردیف‌های (۱) تا (۹)

نوع ردیف	نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
۱	TITLE	متن	۱ تا ۸۰	-	مدت زمان شبیه‌سازی
۲	PRTOPT	عدد صحیح	۱ تا ۵	-	گزینه‌های شبیه‌سازی (جریان و / یا املاح)
۳	PSTEP	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	ساعت	بازه‌های زمانی شبیه‌سازی
۴	TSTEP	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	ساعت	درون‌یابی بازه زمانی
۵	TSTART	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	ساعت	زمان شروع شبیه‌سازی
۶	TFINAL	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	ساعت	زمان پایان شبیه‌سازی
۷	XSTART	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	L	فاصله از مرز بالادست
۸	DSBOUND	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	(L/sec)CU	شرایط مرزی پایین‌دست
۹	NREACH	عدد صحیح	۱ تا ۵	-	تعداد بازه‌ها

۳-۵-۴-۷- ردیف (۱۰) - پارامترهای انتقال آلودگی هر بازه

در ردیف (۱۰) پارامترهای خاص انتقال و پراکندگی املاح در مجاری باز برای هر بازه تعریف می‌شود که این پارامترها و توضیحات مربوط به تعریف آن‌ها در جدول ۳-۵ ارائه شده است. نکته حائز اهمیت در ردیف (۱۰) برخلاف ردیف‌های (۱) تا (۹) این است که این ردیف شامل تعریف بیش از یک متغیر ورودی خواهد بود. متغیر اول در ردیف (۱۰) تعداد بخش‌های تقسیم شده در محدوده هر بازه با عنوان NSEG و متغیر دوم نیز تعیین طول هر بازه تحت عنوان RCHLEN است. مطابق رابطه (۳-۱)، این دو پارامتر (NSEG و RCHLEN) تعیین کننده طول هر بخش (DELTA) می‌باشند.

ضریب پراکندگی طولی در هر بازه تحت عنوان DISP، سطح مقطع ناحیه نگهداشت موقت تحت عنوان AREA2 و ضریب تبادل ناحیه نگهداشت نیز تحت عنوان ALPHA، ردیف (۱۰) را تکمیل خواهند کرد. از آنجایی ردیف (۱۰) برای تعیین پارامترهای خاص هر بازه استفاده می‌شود، لذا برای هر تعداد NREACH می‌بایست یک تعریف جداگانه صورت گیرد حتی اگر پارامترها مشابه باشند.

اگر بخواهیم مدل نگهداشت موقت (TSM) را بدون در نظر گرفتن مبحث نگهداشت موقت بررسی کنیم و درواقع، تبدیل به معادله انتقال-پراکندگی کلاسیک (ADE) کنیم، می‌بایست مقدار ALPHA باید روی عدد صفر تنظیم شود، اما اگر AREA2 نیز برابر صفر باشد، مقدار کسر در رابطه (۲-۲) برابر بی‌نهایت خواهد شد، لذا مقدار AREA2 می‌بایست برابر عددی غیر از صفر تنظیم گردد. البته این مقدار بر نتایج شبیه‌سازی تأثیری ندارد اگر مقدار ALPHA برابر صفر تنظیم شده باشد.

جدول ۳-۵- پوشه پارامتر- ردیف (۱۰)*

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
NSEG	عدد صحیح	۱ تا ۵	-	تعداد بخش‌های تقسیم شده در یک بازه
RCHLEN	عدد اعشاری	۶ تا ۱۸	L	طول یک بازه
DISP	عدد اعشاری	۱۹ تا ۳۱	L ² /sec	ضریب پراکندگی طولی (D _x)
AREA2	عدد اعشاری	۳۲ تا ۴۴	L ²	مساحت مقطع عرضی ناحیه نگهداشت (A _s)
ALPHA	عدد اعشاری	۴۵ تا ۵۷	1/sec	ضریب تبادل ناحیه نگهداشت (α)

* ردیف (۱۰) یک‌بار برای هر بازه تکرار می‌شود (NREACH بار).

۳-۵-۴-۸- ردیف (۱۱) - تعداد املاح و گزینه‌های ژئوشیمی جریان

ردیف (۱۱) شامل تعریف سه متغیر ورودی است که در جدول ۳-۶ نشان داده شده است. متغیر اول در ردیف (۱۱) تعداد املاح شبیه‌سازی شده تحت عنوان NSOLUTE است. متغیرهای دوم و سوم تحت عناوین IDECAY و ISORB گزینه‌های مربوط به شبیه‌سازی شیمی جریان را مشخص خواهند کرد. اگر شبیه‌سازی رفتار املاح غیر واکنشی مانند ردیاب‌ها مدنظر باشد در این صورت بحث شیمی جریان بی‌اثر بوده، لذا با تنظیم IDECAY و ISORB روی عدد صفر این‌گونه مدل‌سازی‌ها انجام می‌شود. اما اگر چنانچه شبیه‌سازی رفتار املاح واکنشی مدنظر باشد، در این صورت دو بحث شیمیایی زوال مرتبه اول و یا جذب می‌بایست برای مدل تعریف شوند. املاح واکنشی در معرض زوال مرتبه اول با تنظیم IDECAY روی عدد ۱ و تعیین ضرایب مرتبط با زوال مرتبه اول در ردیف (۱۲) مدل‌سازی خواهند شد. در خصوص مدل‌سازی مبحث جذب نیز با تنظیم ISORB روی عدد ۱ و مشخص کردن ضرایب مرتبط با جذب در ردیف (۱۳) مدل‌سازی می‌شود.

جدول ۳-۶- پوشه پارامتر- ردیف (۱۱)

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	توضیحات
NSOLUTE	عدد صحیح	۱ تا ۵	تعداد املاح
IDECAY	صفر یا یک	۶ تا ۱۰	گزینه شبیه‌سازی زوال مرتبه اول
ISORB	صفر یا یک	۱۵ تا ۱۵	گزینه شبیه‌سازی جذب

۳-۵-۴-۹- ردیف (۱۲) - تعیین ضرایب زوال مرتبه اول (اختیاری)

نکته حائز اهمیت که پیش از شروع این بخش باید بیان داشت، این است که اگر در مرحله قبل ردیف (۱۱) گزینه IDECAY روی عدد صفر تنظیم شده باشد و در واقع، مبحث زوال مرتبه اول جز اهداف شبیه‌سازی نباشد، ردیف (۱۲) حذف خواهد شد.

ضرایب زوال مرتبه اول با استفاده از ردیف (۱۲) مشخص می‌شوند که در جدول ۳-۷ نشان داده شده است. اولین متغیر در ردیف (۱۲) مربوط به ضریب زوال مرتبه اول برای ناحیه اصلی جریان بوده که

تحت عنوان LAMBDA معرفی می‌شود. همچنین، ضریب زوال مرتبه اول برای نواحی نگهداشت نیز در متغیر دوم تحت عنوان LAMBDA2 مشخص می‌شود. تئوری حاکم بر این ضرایب را در مبحث انتقال و پراکندگی املاح در مجاری باز در روابط (۲-۳) و (۲-۴) نشان داده شده است. نکته مهم دیگر در خصوص ضرایب زوال مرتبه اول این است که ممکن است این ضرایب اولاً بین بازه‌های مختلف و ثانیاً بین املاح مختلف تعریف شده در مدل متفاوت باشند، لذا ردیف (۱۲) چندین بار در یک پوشه پارامتر می‌تواند تعریف شود؛ به‌طور مثال اگر N بازه برای مدل‌سازی تعداد S املاح در مدل تعریف شده باشد، این ردیف $N*S$ بار تکرار می‌شود تا ضرایب زوال مرتبه اول برای هر یک از املاح در هر یک بازه‌ها به‌صورت تفکیکی مشخص شوند. در این صورت N خط اول در این ردیف برای تعریف ضرایب محلول اول و N خط‌های بعدی برای تعریف ضرایب املاح بعدی خواهند بود.

جدول ۳-۷- پوشه پارامتر- ردیف (۱۲)*

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
LAMBDA	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	1/sec	ضریب زوال مرتبه اول ناحیه اصلی جریان
LAMBDA2	عدد اعشاری	۱۴ تا ۲۶	1/sec	ضریب زوال مرتبه اول نواحی نگهداشت

* برای هر محلول، ردیف (۱۲) یک‌بار برای هر بازه تکرار می‌شود (NREACH بار).

۳-۵-۴-۱۰- ردیف (۱۳) - تعیین ضرایب جذب (اختیاری)

نکته حائز اهمیت که پیش از شروع این بخش نیز باید بیان داشت، این است که اگر در مرحله ردیف (۱۱) گزینه IDECAY روی عدد صفر تنظیم شده باشد و در واقع، مبحث جذب جز اهداف شبیه‌سازی نباشد، ردیف (۱۳) حذف خواهد شد.

ردیف (۱۳) دارای پنج متغیر بوده که متغیرهای جذب را برای یک املاح معین در هر بازه مشخص می‌کنند که این ضرایب و توضیحات مربوط به آن در جدول ۳-۸ نشان داده شده است. متغیرهای یک و دو مربوط به ضریب جذب ناحیه اصلی جریان و ضریب جذب ناحیه نگهداشت تحت عناوین LAMHAT و LAMHAT2 می‌باشند. سایر متغیرهای این ردیف به ترتیب جرم رسوب قابل دسترس به حجم آب تحت عنوان RHO، ضریب پخش تحت عنوان KD و غلظت پایه املاح در ناحیه

نگهداشت تحت عنوان CSBACK می‌باشند. تئوری حاکم بر این ضرایب را در مبحث انتقال و پراکندگی املاح در مجاری باز در روابط (۳) و (۴) نشان داده شده است. همانند آنچه در بخش قبلی مربوط به ضرایب زوال مرتبه اول بیان شد، در خصوص ضرایب جذب نیز ممکن است این ضرایب اولاً بین بازه‌های مختلف و ثانیاً بین انواع املاح تعریف شده در مدل متفاوت باشند، لذا ردیف (۱۳) چندین بار در یک پوشه پارامتر می‌تواند تعریف شود؛ به‌طور مثال اگر P بازه برای مدل‌سازی تعداد R املاح در مدل تعریف شده باشد، این ردیف P×R بار تکرار می‌شود تا ضرایب جذب برای هر یک از املاح در هر یک از بازه‌ها به‌صورت تفکیکی مشخص شوند. در این صورت P خط اول در این ردیف برای تعریف ضرایب محلول اول و P خط‌های بعدی برای تعریف ضرایب املاح بعدی خواهند بود.

جدول ۳-۸- پوشه پارامتر- ردیف (۱۳)*

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
LAMHAT	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	1/sec	ضریب جذب ناحیه اصلی جریان
LAMHAT2	عدد اعشاری	۱۴ تا ۲۶	1/sec	ضریب جذب ناحیه نگهداشت
RHO	عدد اعشاری	۲۷ تا ۳۹	CU	جرم رسوب قابل دسترس به حجم آب
KD	عدد اعشاری	۴۰ تا ۵۲	1/CU	ضریب پخش
CSBACK	عدد اعشاری	۵۳ تا ۶۵	CU	غلظت پایه املاح در ناحیه نگهداشت

* برای هر محلول، ردیف (۱۳) یک‌بار برای هر بازه تکرار می‌شود (NREACH بار).

۳-۵-۴-۱۱- ردیف (۱۴) و (۱۵)- مکان‌های چاپ

درحالی‌که انواع ردیف‌های (۲) و (۳) در خصوص نوع خروجی و زمان چاپ نتایج بودند، انواع ردیف‌های (۱۴) و (۱۵) مکان‌هایی که نتایج در آنجا چاپ خواهند شد، را کنترل می‌کنند که این توضیحات مربوط به این ردیف‌ها در جدول ۳-۹ نشان داده شده است. درواقع، این ردیف‌ها به کاربر اجازه می‌دهند تا غلظت املاح را در تعدادی از مکان‌ها در طول جریان درخواست نماید.

اولین متغیر در ردیف (۱۴) مربوط به تعداد مکان‌های درخواست چاپ نتایج شبیه‌سازی بوده که تحت عنوان NPRINT معرفی می‌شود. همچنین، گزینه مربوط به درون‌یابی نیز در ستون دوم این ردیف تحت عنوان IOPT در پوشه پارامتر تعریف می‌شود. اعداد تعریف‌شده در ردیف (۱۵) مربوط به فاصله یک مکان چاپ معین هستند که تحت عنوان PRTLOC معرفی شده و NPRINT بار تکرار می‌شود. اگر گزینه درون‌یابی (IOPT) روی عدد ۱ تنظیم شود، غلظت در هر مکان چاپ با استفاده از درون‌یابی خطی مراکز دو بخش (Segment) نزدیک به محل چاپ تعیین می‌شود. از سوی دیگر، اگر IOPT روی عدد صفر تنظیم شود، غلظت در هر مکان چاپ برابر با غلظت نزدیک‌ترین بخش (Segment) بالادست تنظیم می‌شود. لازم به ذکر است در بسیاری از مطالعات کاربردی، مشخصات IOPT تأثیر ناچیزی بر نتایج شبیه‌سازی خواهند داشت.

انتخاب گزینه درون‌یابی (IOPT=1) ممکن است زمانی مناسب باشد که از بخش‌های با طول زیاد (DELTA) استفاده شود. نکته بسیار مهمی که می‌بایست در نظر داشت، این است که پارامترهای رودخانه‌ها در زمینه‌های مختلف اعم از هیدرولیکی و مربوط به انتقال املاح و ... در بازه‌های مختلف رودخانه معمولاً متفاوت می‌باشند، حال زمانی که مکان‌های چاپ نزدیک به نقطه‌های انتهایی بازه‌ها باشند و بازه پایین دست با پارامترهایی مشخص می‌شود که به‌طور قابل توجهی، با پارامترهای بازه فعلی متفاوت است، به‌هیچ‌وجه، درون‌یابی توصیه نمی‌شود.

جدول ۳-۹- پوشه پارامتر- ردیف (۱۴) و (۱۵)

نوع ردیف	نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
۱۴	NPRINT	عدد صحیح	۱ تا ۵	-	تعداد مکان‌های چاپ
۱۴	IOPT	عدد صحیح	۶ تا ۱۰	-	گزینه درون‌یابی
*۱۵	PRTLOC	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	L	مکان چاپ نتایج شبیه‌سازی

* ردیف (۱۵) باید برای هر مکان چاپ تکرار شود (NPRINT بار).

۳-۵-۴-۱۲- ردیف (۱۶) و (۱۷) - شرایط مرزی بالادست

انواع ردیف نهایی در پوشه پارامتر، شرایط مرزی بالادست در حالت متغیر زمانی (Time Variable) را مشخص می‌کند. اولین متغیر در ردیف (۱۶) مربوط به تعداد شرایط مرزی بوده که تحت عنوان

NBOUND معرفی می‌شود. همچنین، گزینه مربوط به تعیین نوع شرایط مرزی نیز در ستون دوم این ردیف تحت عنوان IBOUND تعریف شده که در جدول ۳-۱۰ توضیحات مربوط به این ردیف ارائه شده است.

جدول ۳-۱۰- پوشه پارامتر- ردیف (۱۶)

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
NBOUND	عدد صحیح	۱ تا ۵	-	تعداد شرایط مرزی
IBOUND	عدد صحیح	۶ تا ۱۰	-	گزینه شرایط مرزی

شرایط مرزی بالادست در تعداد NBOUND با زمان شروع و یک مقدار مرزی برای هر املاح مشخص می‌شود. اولین متغیر در ردیف (۱۷) مربوط به زمان اعمال شرط مرزی بوده که تحت عنوان USTIME معرفی می‌شود. همچنین، گزینه مربوط به تعیین مقادیر مرزی غلظت در هر یک از زمان‌ها نیز در ستون دوم این ردیف تحت عنوان USBC در انتهای پوشه پارامتر تعریف شده که در جدول ۳-۱۱ توضیحات مربوط به این ردیف ارائه شده است.

نکته حائز اهمیت در خصوص ردیف (۱۷) این است که اگر هدف مدل‌سازی بیش از یک املاح باشد، در این صورت مقادیر USBC به صورت افقی برای هر املاح حل شده تکرار می‌شوند. بدین صورت که ستون‌های ۱۴ تا ۲۶ حاوی مقادیر مرزی برای املاح یک، ستون‌های ۲۷ تا ۳۹ برای املاح دو و بدین ترتیب، برای سایر املاح ادامه داده خواهد شد. همچنین، در ردیف (۱۷) باید توجه داشت که این ردیف می‌بایست NBOUND بار برای هر تغییر در غلظت‌های مرزی تکرار شود؛ به طور مثال، اگر در پروژه‌ای تعداد داده‌های غلظت در زمان‌های مختلف ۱۰ برداشت بوده است، می‌بایست مقدار NBOUND در پوشه پارامتر برابر ۱۰ قرار داده شود و همچنین، می‌بایست در ۱۰ زمان برداشت داده‌ها (USTIME‌های مختلف)، تعداد ۱۰ غلظت مرزی برداشتی (USBC‌های برداشتی) را در سایر خطوط مربوط به ردیف (۱۷) وارد کرد و بدین ترتیب، این ردیف دارای ۱۰ خط در سه ستون خواهد بود. حال اگر در همین مثال، مدل‌سازی سه املاح مختلف به عنوان هدف باشد، باید همین ۱۰ خط را در چهار ستون تکمیل کرد که ستون اول مربوط به زمان برداشت داده‌ها (USTIME‌های مختلف) و سه ستون بعدی به ترتیب USBC مربوط به هر یک از این املاح می‌باشند.

جدول ۳-۱۱- پوشه پارامتر- ردیف (۱۷)*

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
USTIME	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	ساعت	زمان شروع شرایط مرزی
USBC	عدد اعشاری	۱۴ تا ۲۶**	CU; CU-L ³ /sec***	مقدار شرایط مرزی بالادست

* این ردیف برای هر شرط مرزی باید یکبار تکرار شود و درنهایت، باید NBOUND بار تعریف شوند.
 ** اگر بیش از یک املاح وجود داشته باشند، USBC به صورت افقی باید تکرار شود (مقدار املاح اول در ستون‌های ۱۴-۲۶، مقدار املاح دو در ستون‌های ۲۷-۳۹ و به همین ترتیب، باید ادامه داشته باشند).
 *** نوع واحدهای USBC به مقدار IBOUND در ردیف نوع (۱۶) بستگی دارد.

تفسیر USBC به نوع شرایط مرزی مشخص شده بالادست بستگی دارد. مطابق شکل ۳-۵، سه نوع شرایط مرزی مختلف ممکن است با استفاده از گزینه شرط مرزی (IBOUND) مشخص شوند. درواقع، با توجه به این که کدام یک از اعداد یک، دو و یا سه در گزینه IBOUND وارد شوند، شرایط مرزی در سه حالت متفاوت مطابق توضیحات زیر خواهند بود:

حالت الف) یک پروفیل غلظت پله‌ای^۱ در شرایط مرزی بالادست با انتخاب گزینه IBOUND برابر عدد ۱ ایجاد خواهد شد. درواقع، با انتخاب این گزینه، USBC مربوط به غلظت مرزی بالادست یا همان C_{bc} هست (به بخش ۲-۶-۱ مراجعه شود). با انتخاب گزینه پروفیل غلظت پله‌ای، مقدار C_{bc} ابتدا باید روی اولین مقدار مرزی ($USBC_j$) تنظیم شود و در ادامه روی مقادیر بعدی $USBC_{j+1}$ ، $USBC_{j+2}$ و ... در زمان‌های متناسب با هر کدام $USTIME_{j+1}$ ، $USTIME_{j+2}$ و ... به‌روزرسانی شوند.

حالت ب) یک پروفیل دبی جریان-غلظت پله‌ای^۳ در شرایط مرزی بالادست با انتخاب گزینه IBOUND برابر عدد ۲ ایجاد خواهد شد. درواقع، با انتخاب این گزینه، USBC با مقدار QC_{bc} مطابقت دارد. در این نوع شرایط مرزی، مقدار Q برابر دبی جریان حجمی در شرایط مرزی بالادست است ($Q=QSATERT$)، به شکل ۳-۲ و جدول ۳-۱۳ مراجعه شود). با انتخاب گزینه پروفیل دبی جریان-غلظت پله‌ای، مقدار اولین C_{bc} از تقسیم مقدار مرزی ($USBC_j$) بر Q به دست آمده و در ادامه

¹ Concentration Boundary Concentration

² Step Concentration Profile

³ Step Flux Profile

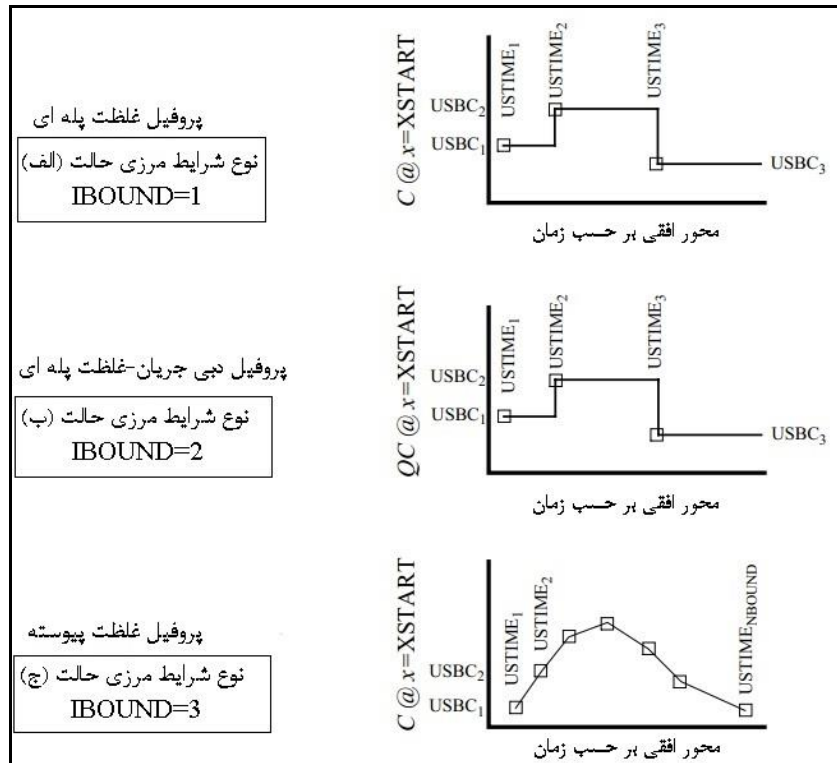
غلظت‌های مرزی بالادست باید در زمان‌های $USTIME_{j+1}$ ، $USTIME_{j+2}$ و ... مناسب به‌روزرسانی شوند (نمونه‌ای از مثال کاربردی با اعمال شرایط مرزی این حالت در بخش ۴-۴ توضیح داده شد). حالت ج) یک پروفیل غلظت پیوسته^۱ در شرایط مرزی بالادست با انتخاب گزینه IBOUND برابر عدد ۳ ایجاد خواهد شد. در واقع، با انتخاب این گزینه، مقادیر C_{bc} باید در هر گام زمانی مدل به‌روزرسانی شوند. مقادیر اختصاص داده‌شده به C_{bc} با درونیابی خطی^۲ با استفاده از مقادیر مشخص‌شده USBC تعیین می‌شوند. نکته بسیار مهم در این خصوص که بعضاً کاربران به آن توجهی ندارند، این است که به‌منظور اجازه دادن به مدل برای تکمیل روند درونیابی، زمان آخرین شرایط مرزی ($USTIME_{NBOUND}$) باید بزرگ‌تر یا مساوی با زمان پایان شبیه‌سازی TFINAL (ردیف ۶ پوشه پارامتر) باشد (نمونه‌ای از مثال کاربردی با اعمال شرایط مرزی این حالت در بخش ۴-۵ توضیح داده شد).

۳-۵-۵- پوشه جریان

پوشه جریان پارامترهایی از مدل را مشخص می‌کند که به‌طور بالقوه‌ای، می‌توانند در زمان متفاوت باشند. این پارامترها شامل: دبی جریان حجمی تحت عنوان Q یا QSTART، دبی جریان جانبی تحت عنوان QLATIN یا QLATOUT، مساحت مقطع عرضی ناحیه اصلی جریان تحت عنوان AREA و غلظت املاح ورودی جانبی تحت عنوان CLATIN هست. مجموعه این پارامترها به‌عنوان متغیرهای جریان شناخته می‌شوند.

¹ Continuous Concentration Profile

² Linear Interpolation



شکل ۳-۵- انواع حالات تعریف شرایط مرزی بالادست

قالب پوشه جریان که تحت عنوان FLOW FILE شناخته می‌شود، به ماهیت پارامترهای موجود در آن بستگی دارد. از این لحاظ که اگر همه متغیرهای جریان در زمان ثابت باشند، رژیم جریان از نوع پایدار بوده، درحالی‌که اگر هر یک از متغیرهای جریان در زمان تغییر کند، رژیم جریان از نوع ناپایدار لحاظ می‌شود. باید در نظر داشت که در شرایط جریان پایدار، متغیرهای جریان بر اساس بازه به بازه آبراهه یا رودخانه مدنظر مشخص می‌شوند، اما هنگامی که رژیم جریان ناپایدار است، متغیرهای جریان با استفاده از مکان‌های جریان^۱ مشخص خواهند شد. قالب پوشه‌های جریان پایدار و ناپایدار در زیر آورده شده است.

۳-۵-۱- پوشه جریان - رژیم جریان پایدار

مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۵، هنگامی که متغیرهای جریان باگذشت زمان ثابت باشند، درواقع، باید گزینه جریان پایدار برای مدل‌سازی فراخوانی شود. نحوه تعریف ردیف‌های مختلف برای تشکیل یک

¹ Flow Locations

سایر متغیرهای باقیمانده مربوط به جریان با استفاده از تعریف آنها در ستون‌های ردیف (۳) انجام خواهند شد. همان‌طور که در جدول ۳-۱۴ نیز نشان داده شده است، سه متغیر اول ردیف (۳) به ترتیب دبی جریان جانبی ورودی تحت عنوان QLATIN، دبی جریان جانبی خروجی تحت عنوان QLATOUT و مساحت مقطع عرضی ناحیه اصلی جریان تحت عنوان AREA را برای یک بازه خاص مشخص می‌کنند. متغیر چهارم این ردیف نیز برای نشان دادن غلظت املاح ورودی جانبی تحت عنوان CLATIN استفاده می‌شود. در برخی شبیه‌سازی‌ها تعداد املاح تعریفی در مدل بیش‌تر از یک مورد هست، لذا در این موارد سایر املاح ورودی جانبی باید به صورت افقی برای هر املاح مدل‌شده تکرار شوند. بدین منظور، از ستون ۴۰ تا ۵۲ ردیف (۳) برای محلول اول، از ستون ۵۳ تا ۶۵ برای محلول دوم، از ستون ۶۶ تا ۷۸ برای محلول سوم و بدین ترتیب، برای تعریف سایر املاح (در صورت وجود) استفاده خواهند شد. همچنین، باید در نظر داشت که این امکان وجود خواهد داشت که متغیرهای جریان اشاره شده در این ردیف (QLATIN، QLATOUT، AREA و CLATIN) از یک بازه تا بازه دیگر آبراهه یا رودخانه موردنظر متفاوت باشند، لذا در این شرایط، متغیرهای ردیف نوع (۳) مربوط به هر بازه باید در خطوط بعدی این ردیف نیز تکرار شوند.

جدول ۳-۱۴- پوشه جریان پایدار- ردیف (۳)*

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
QLATIN	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	$L^3/sec-L$	دبی جریان جانبی ورودی
QLATOUT	عدد اعشاری	۱۴ تا ۲۶	$L^3/sec-L$	دبی جریان جانبی خروجی
AREA	عدد اعشاری	۲۷ تا ۳۹	L^2	مساحت مقطع عرضی ناحیه جریان
CLATIN	عدد اعشاری	۴۰ تا ۵۲**	CU	غلظت املاح جانبی ورودی

* این ردیف برای هر شرط مرزی باید یک‌بار تکرار شود و در نهایت، باید NREACH بار تعریف شوند.

** اگر بیش از یک املاح وجود داشته باشد، CLATIN باید به صورت افقی تکرار شود (غلظت جریان ورودی جانبی برای املاح یک در ستون‌های ۴۰-۵۲، غلظت محلول دو در ستون‌های ۵۳-۶۵ قرار می‌گیرد و ...)

۳-۵-۲- پوشه جریان - رژیم جریان ناپایدار

مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۵، هنگامی که متغیرهای جریان باگذشت زمان متغیرند باید گزینه جریان ناپایدار برای مدل‌سازی فراخوانی شود. در رژیم جریان ناپایدار، با توجه به پارامترهای جریان متغیر با زمان، پیچیدگی‌های مدل افزایش خواهد یافت. در واقع، قالب پوشه جریان ناپایدار به‌طور قابل‌توجهی، با پوشه ارائه‌شده برای حالت پایدار متفاوت است. همچنین، پوشه جریان ناپایدار بسیار بزرگ‌تر از پوشه جریان پایدار خواهد بود، چراکه چندین نوع ردیف اضافی باید برای هر تغییر در متغیرهای جریان تکرار شوند.

قالب مورد استفاده در اینجا با مدل‌های روندیابی^۱ استاندارد همانند DR₃M (آلن و اسمیت^۲، ۱۹۸۲) و DAFLOW (جابسون^۳، ۱۹۸۹) سازگار است. نحوه تعریف انواع ردیف‌های (۲) تا (۸) برای تشکیل یک پوشه برای رژیم جریان از نوع ناپایدار برای تعیین پارامترهای متغیر با زمان در مکان‌های مختلف در امتداد کانال جریان در بخش‌های زیر نشان داده شده است. همچنین، لازم به ذکر است که این ردیف‌ها ممکن است با قالب مجدد خروجی از مدل‌های روندیابی انتخاب‌شده نیز ایجاد شوند.

۳-۵-۲-۱- ردیف (۱) - گزینه تغییرات در مقدار جریان

در یک رژیم جریان ناپایدار، زمانی که تغییرات در مقادیر جریان رخ می‌دهد، متغیرهای جریان از پوشه جریان خوانده می‌شوند. همان‌طور که در بخش ۳-۵-۱-۱- توضیح داده شد، QSTEP زمان‌هایی را که در آن متغیرهای جریان به‌روزرسانی می‌شوند را تعریف می‌کند. حال در رژیم‌های جریان از نوع ناپایدار برخلاف رژیم‌های جریان از نوع پایدار که تغییر در مقدار متغیرهای جریان برحسب زمان روی می‌دهد می‌بایست گزینه QSTEP را روی عددی غیر از صفر تنظیم کرد که توضیحات آن در جدول ۳-۱۵ نشان داده شده است؛ به‌عنوان مثال، اگر متغیرهای جریان هر ۱۵ دقیقه تغییر می‌کنند، گزینه QSTEP روی عدد ۰/۲۵ ساعت تنظیم می‌شود و متغیرها در زمان‌های مناسب خوانده می‌شوند.

¹ Routing Models

² Alley and Smith, 1982

³ Jobson, 1989

ج) آخرین مکان جریان باید در شرایط مرزی پایین دست یا پایین تر از آن قرار گیرد.

جدول ۳-۱۶- پوشه جریان ناپایدار- ردیف (۲)* و (۳)

ردیف	نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
۲	NFLOW	عدد صحیح	۱ تا ۵	-	تعداد مکان‌های جریان
۳*	FLOWLOC	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	L	مکان جریان

* ردیف (۳) به تعداد مکان‌های جریان (NFLOW بار) تکرار شود.

۳-۵-۵-۲-۳- ردیف‌های (۴) تا (۷)- جریان‌های جانبی، جریان‌ها و مساحت‌ها

در پوشه رژیم جریان ناپایدار، برخلاف پوشه رژیم جریان پایدار، جریان‌های جانبی و غلظت‌های جانبی (QLATIN و CLATIN) برای بازه‌های تعریف شده مطابقت نداشته، بلکه این پارامترها برای هر مکان جریان تعریفی توسط کاربر در مدل، مشخص می‌شوند. در واقع، این مقادیر مشخص شده برای همه بخش‌های (segments) بین مکان جریان فعلی و مکان جریان بلافاصله در بالادست (از مکان 1-j تا مکان j) استفاده می‌شوند.

با توجه به توضیحات بالا، باید توجه داشت که این موضوع در شرایطی نیز دارای استثنا خواهد بود و آن که اگر مکان‌های جریان در انتهای هر بازه تعریف شوند، در واقع این طرح با پوشه رژیم جریان پایدار مطابقت خواهد داشت که البته باید توجه داشت که بعضاً، برای راحتی محاسبات بهتر هم همین خواهد بود که مکان‌های جریان در شرایط رژیم ناپایدار در همان بازه‌های تعریفی در مدل قرار گیرند. همان‌طور که قبلاً نیز بیان شد، مقادیر دبی جریان و مساحت مقطع عرضی ناحیه جریان (Q و AREA) در مکان‌های جریان برای درون‌یابی مقادیر برای بخش‌های (segments) داخل شبکه مورد استفاده قرار می‌گیرند.

مقادیر متغیرهای جریان جانبی ورودی تحت عنوان QLATIN، دبی جریان تحت عنوان Q، سطح مقطع عرضی ناحیه جریان تحت عنوان AREA و غلظت جریان جانبی ورودی تحت عنوان CLATIN به ترتیب، برای هر مکان جریان با استفاده از انواع ردیف‌های (۴)، (۵)، (۶) و (۷) تنظیم خواهند شد. توضیحات مربوط به این چهار ردیف و ستون‌های مربوط به هر یک از این ردیف‌ها برای تعریف هر مکان جریان در جدول ۳-۱۷ توضیح داده شده است.

نکته حائز اهمیت در تعریف پوشه جریان ناپایدار این است که انواع ردیف‌های مربوط به متغیرهای Q, QLATIN, AREA و CLATIN باید به صورت افقی برای هر مکان جریان تکرار شوند. در واقع، اگر در یک مدل‌سازی تعداد NFLOW به طور مثال برابر ۶ عدد باشد، در این صورت ردیف‌های (۴) تا (۷) باید به تعداد ۶ مرتبه برای هر مکان جریان به صورت جداگانه تعریف شوند؛ به طور مثال در این حالت، مقادیر مربوط به مکان جریان اول باید در ستون‌های (۱) تا (۱۳)، مقادیر مربوط به مکان جریان دوم نیز باید در ستون‌های (۱۴) تا (۲۶)، مقادیر مربوط به مکان جریان چهارم نیز باید در ستون‌های (۴۰) تا (۵۲)، مقادیر مربوط به مکان جریان پنجم نیز باید در ستون‌های (۵۳) تا (۶۵) و مقادیر مربوط به مکان جریان ششم نیز باید در ستون‌های (۶۶) تا (۷۸) وارد شوند. نکته حائز اهمیت دیگری نیز که در ردیف (۷) وجود دارد نیز این است که این ردیف باید یک‌بار برای هر املاح استفاده شود یعنی در واقع این ردیف می‌بایست NSOLUTE بار تکرار شود.

اما مهم‌ترین نکته در خصوص تشکیل پوشه جریان ناپایدار این است که ردیف‌های (۴) تا (۷) باید برای هر تغییر در متغیرهای جریان که قبلاً در ردیف (۱) تحت عنوان QSTEP به مدل معرفی شده بود، تکرار گردند. همین امر سبب خواهد شد تا پوشه جریان برای رژیم ناپایدار دارای محتویات بسیار بیش‌تری نسبت به همین پوشه برای رژیم جریان پایدار باشد؛ به طور مثال، اگر متغیرهای جریان هر ۱۵ دقیقه تغییر کنند و در واقع QSTEP برابر ۰/۲۵ ساعت باشد، در این شرایط ردیف‌های (۴) تا (۷) می‌بایست چهار بار برای هر یک ساعت زمان شبیه‌سازی تکرار شوند و اگر مجموعاً هدف ۱۰ ساعت شبیه‌سازی باشد می‌بایست ۴۰ بار تکرار ردیف‌های (۴) تا (۷) را در پوشه رژیم جریان ناپایدار داشت. در نتیجه این تکرارها، پوشه جریان ناپایدار ممکن است حاوی تعداد زیادی خطوط باشد.

جدول ۳-۱۷- پوشه جریان ناپایدار- ردیف (۴) تا (۷)*

ردیف	نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
۴	QLATIN	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳***	L ³ /sec-L	دبی جریان جانبی ورودی از مکان جریان 1- تا z
۵	Q	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳***	L ³ /sec-L	دبی جریان در مکان جریان j
۶	AREA	عدد اعشاری	۱ تا	L ²	مساحت مقطع عرضی ناحیه

جریان در مکان جریان Z	***۱۳			
غلظت املاح جانبی ورودی	۱ تا	عدد اعشاری	CLATIN	**۷
از مکان جریان 1-Z تا Z	***۱۳	CU		

* انواع ردیف‌های (۴) تا (۷) برای هر تغییر در متغیرهای جریان می‌بایست تکرار شوند.

** ردیف نوع (۷) برای هر املاح باید تکرار شود (NSOLUTE بار).

*** Q, CLATIN, AREA و CLATIN باید به صورت افقی برای هر مکان جریان مشخص شده تکرار شوند (باید مقادیر مکان جریان اول با استفاده از ستون‌های ۱ تا ۱۳، برای مکان جریان دوم با استفاده از ستون‌های ۱۴ تا ۲۶ و به همین ترتیب برای غیره تنظیم شوند).

۳-۵-۶- پوشه داده‌ها (صرفاً مدل عددی OTIS-P)

۳-۵-۶-۱- ردیف (۱) - تعداد داده‌های مشاهداتی

مطابق توضیحات بخش ۳-۴-۲، نرم‌افزار OTIS-P برای تخمین پارامترهای ده‌گانه مدل نگهداشت موقت (TSM) به روش حداقل مربعات غیرخطی (NLS) قابلیت کاربرد دارد. قطعاً، این برآورد صورت گرفته از طریق OTIS-P نیاز به یک سری ورودی‌های بیش‌تر به جهت تخمین صحیح‌تر خواهد داشت. داده‌های غلظت مشاهداتی^۱ یکی از همین ورودی‌های موردنیاز بوده که صرفاً برای مدل عددی OTIS-P بوده که این ورودی‌ها در پوشه داده‌ها تحت عنوان DATA تعریف می‌شوند. پوشه داده‌ها از دو نوع ردیف تشکیل شده است. تعداد داده‌های غلظت مشاهداتی (برداشتی) مرتبط با هر بازه در ردیف (۱) تحت عنوان N مشخص می‌شود که توضیحات آن در جدول ۳-۱۸ ارائه شده است. در واقع، در این ردیف باید مشخص کرد که چه تعداد داده‌های مشاهداتی اضافه‌تر در زمان‌ها یا مکان‌های مختلف برداشت شده است. در خصوص این ردیف به دو نکته مهم باید توجه داشت: الف) این که بیان شد چه تعداد در زمان یا مکان بستگی به نوع حالت شبیه‌سازی (پایدار زمانی یا متغیر زمانی) داشته که در بخش بعدی توضیح داده خواهند شد، ب) در هر حال، برای هر یک از این حالات شبیه‌سازی باید تعداد داده‌های غلظت مشاهداتی برای هر بازه به صورت جداگانه مشخص شوند. اگر هم در بازه‌ای غلظتی برداشت نشده است می‌بایست با تعیین عدد صفر، عدم برداشت در آن بازه را مشخص کرد.

¹ Observed Concentration

جدول ۳-۱۸- پوشه داده‌ها- ردیف (۱)

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات
N	عدد صحیح	۱ تا ۵	-	تعداد داده‌های مشاهداتی در بازه j

۳-۵-۶-۲- ردیف (۲)- مقادیر غلظت‌های مشاهداتی

مقادیر تمامی غلظت‌های مشاهداتی در ردیف (۲) پوشه DATA تحت عنوان CONC مشخص شده که توضیحات آن در جدول‌های ۳-۱۹ و ۳-۲۰ ارائه شدند. همان‌طور که در بخش قبلی بیان شد، نکته حائز اهمیت در خصوص تعریف ردیف (۲) این است که OTIS-P ممکن است هم برای شبیه‌سازی حالت پایدار زمانی (Steady-State) یا هم برای شبیه‌سازی حالت متغیر زمانی (Time-Variable) به کار برده شود، بنابراین نوع تعریف ردیف (۲) به نوع حالت شبیه‌سازی مدنظر بستگی دارد. در شبیه‌سازی‌های حالت پایدار زمانی، فاصله هر داده مشاهداتی توسط متغیر اول ردیف (۲) تحت عنوان DIST مشخص شده که از ستون‌های ۱ تا نهایتاً ۱۵ می‌بایست تعریف شود که توضیحات آن در جدول ۳-۱۹ ارائه شده است.

جدول ۳-۱۹- پوشه داده‌ها- ردیف (۲)* برای حالت پایدار زمانی

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات**
DIST	عدد اعشاری	۱ تا ۱۵	L	فواصل مکانی مرتبط با داده‌های مشاهداتی
CONC	عدد اعشاری	۱۶ تا ۳۰	CU	غلظت داده‌های مشاهداتی

* برای هر بازه، ردیف (۲) می‌بایست برای هر مشاهده تکرار شود (N بار).

** انواع ردیف‌های (۱) و (۲) باید برای هر بازه تکرار شود (انواع ردیف‌های (۱) و (۲) می‌بایست ابتدا برای بازه اول مشخص شوند و سپس انواع ردیف‌های (۱) و (۲) برای بازه دوم و به همین ترتیب برای سایر بازه‌های رودخانه یا آبراهه (در صورت وجود) مشخص شوند).

از سوی دیگر، در شبیه‌سازی‌های حالت متغیر زمانی، زمان مرتبط با هر داده مشاهداتی توسط متغیر اول ردیف (۲) تحت عنوان TIME مشخص شده که این متغیر نیز همانند متغیر DATA، از ستون‌های ۱ تا

نهایتاً ۱۵ می‌بایست تعریف شود که توضیحات آن در جدول ۳-۱۹ ارائه شده است. نکته دیگری که در خصوص تعریف ردیف (۲) می‌بایست توجه داشت این است که متغیر دوم این ردیف همان مقادیر غلظت‌های مشاهداتی تحت عنوان CONC بوده که از ستون‌های ۱۶ تا ۳۰ می‌بایست تعریف شود. همچنین لازم به ذکر است که این متغیر هم شامل حالت پایدار زمانی مرتبط با فواصل مکانی و هم شامل حالت متغیر زمانی مرتبط با فواصل زمانی می‌باشد.

جدول ۳-۲۰- پوشه داده‌ها- ردیف (۲)* برای حالت متغیر زمانی

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	واحد	توضیحات**
TIME	عدد اعشاری	۱ تا ۱۵	ساعت	فواصل زمانی مرتبط با داده‌های مشاهداتی
CONC	عدد اعشاری	۱۶ تا ۳۰	CU	غلظت داده‌های مشاهداتی

* برای هر بازه، ردیف (۲) می‌بایست برای هر مشاهده تکرار شود (N بار).

** انواع ردیف‌های (۱) و (۲) باید برای هر بازه تکرار شود (انواع ردیف‌های (۱) و (۲) می‌بایست ابتدا برای بازه اول مشخص شوند و سپس انواع ردیف‌های (۱) و (۲) برای بازه دوم و به همین ترتیب برای سایر بازه‌های رودخانه یا آبراهه (در صورت وجود) مشخص شوند).

برای جمع‌بندی نهایی در مورد پوشه داده‌ها می‌توان بیان داشت که: الف) انواع ردیف‌های (۱) و (۲) چندین باره تکرار می‌شوند. ب) برای اولین بازه، ردیف (۱) برای تعیین تعداد داده‌های مشاهداتی تحت عنوان N و ردیف (۲) سپس N بار برای تعیین داده‌های مشاهداتی برای این بازه استفاده می‌شوند. درواقع، هر بازه مجموعاً شامل N+1 خط خواهد بود. ج) این مجموعه از ردیف‌های N+1 خطی برای سایر بازه‌های باقی‌مانده تکرار می‌شوند. د) نکته بسیار مهمی که در خصوص شبیه‌سازی‌های حالت متغیر زمانی باید توجه داشت این است که فاصله مربوط به هر مشاهده با محل چاپ مربوطه به آن باید داده شود (بخش ۳-۵-۴)؛ به‌عنوان مثال، فاصله مربوط به هر مشاهده در بازه (Reach) اول با محل چاپ (Print Location) اول داده می‌شود. نمونه پوشه‌های داده در بخش‌های ۴-۵ و ۴-۶ ارائه شده است.

۳-۵-۷- پوشه ورودی STARPAC (صرفاً مدل عددی OTIS-P)

۳-۵-۷-۱- ردیف‌های (۱) تا (۷) - تنظیمات محاسباتی برای تخمین پارامترها

پوشه ورودی STARPAC چندین پارامتر مختلف را مشخص می‌کند که الگوریتم STARPAC NLS مورد استفاده در OTIS-P را کنترل می‌کند. بسیاری از پارامترهای STARPAC ارائه شده در زیر با جزئیات بیش‌تر در راهنمای کاربر STARPAC (توسط دونالدسون و تریون^۱، ۱۹۹۰) سندی که بخشی از صفحه اصلی مدل عددی OTIS به آدرس وب‌گاه سازمان زمین‌شناسی آمریکا (USGS): <https://water.usgs.gov/software/OTIS/doc/> است، مورد بحث قرار گرفت. مقادیر متغیرهای

معمولی در بخش ۴-۵ ارائه شده است، جایی که نمونه پوشه ورودی STARPAC ارائه شده است. انواع ردیف‌های (۱) تا (۷) برای تعریف در پوشه ورودی STARPAC در جدول ۳-۲۱ ارائه شده است. گزینه تجدیدنظر وزنی^۲ تحت عنوان IWEIGHT در ردیف (۱) تعریف شده که فاکتورهای وزنی توصیف‌شده در بخش ۲-۷ را تعیین خواهد کرد. اگر IWEIGHT روی عدد صفر تنظیم شود، هر ضریب وزنی روی عدد ۱ تنظیم می‌شود و در واقع به هر خطا یک اهمیت یکسانی داده خواهد شد (کم‌ترین مربعات خطی غیروزنی^۳). از سوی دیگر، اگر گزینه IWEIGHT روی عدد ۱ تنظیم شود، فاکتورهای وزنی مربوط به هر مشاهده بر اساس رابطه (۲-۴۱) ارائه شده در بخش ۲-۷ اختصاص داده خواهد شد. با مراجعه به مثال‌های کاربردی ارائه شده توسط USGS به نظر می‌رسد که تنظیم عدد صفر برای این گزینه مناسب‌ترین حالت باشد، چراکه منجر به ایجاد شرایط یکسان برای هر خطا خواهد شد.

گزینه واریانس-کوواریانس^۴ تحت عنوان IVAPRX در ردیف (۲) تعریف می‌شود. همان‌طور که در مطالب مرتبط با STARPAC توسط دونالدسون و تریون (۱۹۹۰) توضیح داده شده است، سه تقریب از ماتریس واریانس-کوواریانس موجود است. تقریب پیش‌فرض، بر اساس فرض باقیمانده‌های به‌اندازه کافی کوچک، با تنظیم IVAPRX روی عدد ۱ انتخاب می‌شود. مقادیر دیگر برای IVAPRX توسط دونالدسون و تریون (۱۹۹۰) مشخص شده‌اند که برای این ردیف به نظر می‌رسد که تنظیم این گزینه روی عدد ۱ مناسب‌ترین حالت باشد.

حداکثر تعداد تکرارها تحت عنوان MIT در ردیف (۳) تعریف شده که عدد ۱۰۰ برای این گزینه مناسب‌ترین حالت به نظر می‌رسد. همچنین ساختار پوشه خروجی STARPAC تحت عنوان NPRT که یک عدد صحیح پنج‌رقمی بوده نیز در ردیف (۴) تعریف می‌شود. هر رقم این عدد NPRT مربوط به

¹ Donaldson and Tryon, 1990

² Weight Revision Option

³ Unweighted Nonlinear Least Squares

⁴ Variance-Covariance Option

یکی از بخش‌های پنج‌گانه پوشه خروجی STARPAC خواهد بود. تنظیم هر یک از این اعداد روی عدد صفر منجر به حذف آن بخش در خروجی پوشه STARPAC، روی عدد ۱ خلاصه‌ای از آن بخش و روی عدد ۲ باعث ارائه نتیجه کامل خواهد شد؛ به‌طور مثال، عدد ۲۲۲۲۲ منجر به تولید کامل در تمام بخش‌ها یا عدد ۲۱۰۰۲ یعنی بخش اول کامل، دوم خلاصه، سوم و چهارم حذف و بخش آخر نیز کامل باشد. برای این ردیف نیز به نظر می‌رسد که تنظیم این گزینه روی عدد ۲۲۲۲۲ مناسب‌ترین حالت باشد.

جدول ۳-۲۱- پوشه ورودی STARPAC- ردیف‌های (۱) تا (۷)*

ردیف	نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	توضیحات
۱	IWEIGHT	عدد صحیح	۱ تا ۵	گزینه تجدیدنظر وزن
۲	IVAPRX	عدد صحیح	۱ تا ۵	گزینه واریانس-کوواریانس
۳	MIT	عدد صحیح	۱ تا ۵	حداکثر تعداد تکرار
۴	NPRT	عدد صحیح	۱ تا ۵	گزینه ساختار پوشه خروجی STARPAC
۵	DELTA	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	حداکثر تغییر مقیاس مجاز پارامترها در اولین تکرار
۶	STOPP	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	مقدار توقف برای همگرایی پارامترها
۷	STOPSS	عدد اعشاری	۱ تا ۱۳	مقدار توقف برای همگرایی مجموع باقیمانده مربعات

ردیف (۵) مشخص‌کننده حداکثر تغییر مقیاس مجاز در پارامترها در طی اولین تکرار تحت عنوان DELTA هست. مطابق توضیحات بخش ۲-۷ و همچنین شکل ۲-۷، DELTA به‌عنوان قطر اولیه منطقه اعتماد^۱ (d_0) استفاده می‌شود. اگرچه مقدار پیش‌فرض برای DELTA برابر ۱۰۰ هست، اما قطعاً در نظر گرفتن مقادیر کوچک‌تر از این عدد می‌تواند تضمین‌کننده بهتری برای ترک نکردن تخمین‌های پارامتر در طی اولین تکرار در منطقه موردنظر باشد. برای این ردیف نیز به نظر می‌رسد که تنظیم این گزینه روی عدد ۱ مناسب‌ترین حالت باشد.

انواع ردیف‌های (۶) و (۷) مشخص‌کننده معیارهای همگرایی برای توقف الگوریتم جست‌وجوی یافتن جواب بهینه تحت عناوین STOPP و STOPSS می‌باشند. مطابق توضیحات روابط (۴۵) و (۴۶)، قابلیت

¹ Initial Diameter of the Trust Region

استفاده از گزینه‌های STOPP و STOPSS برای تعیین زمان همگرایی روند تخمین پارامتر تکراری روی جواب بهینه هست. راه‌حل تکراری زمانی به همگرایی می‌رسد که مقادیر پارامترها نسبت به مقدار عددی گزینه STOPP تغییری نکند یا زمانی که مجموع باقی‌مانده مربعات نسبت به STOPSS تغییری نداشته باشد. لازم به ذکر است که STOPP و STOPSS مستقل از هرگونه مقیاس می‌باشند. حال به‌طور مثال، اگر گزینه STOPP برابر با عدد 10^{-4} باشد، در این صورت اگر چهار رقم اول هر پارامتر در دو تکرار متوالی یکسان باشند، رابطه (۲-۴۵) در نظر گرفته خواهد شد. به‌طور مشابه‌ای، اگر STOPSS برابر با 10^{-4} باشد، در این صورت اگر چهار رقم اول مجموع باقیمانده مربعات در دو تکرار متوالی یکسان باشند، رابطه (۲-۴۶) در نظر گرفته خواهد شد. ذکر این نکته در اینجا حائز اهمیت بوده که برای تعریف عدد 10^{-4} در پوشه STARPAC باید به‌صورت ID-4 نوشتار شود. در پوشه خروجی echo.out نیز تمامی این موارد تعیینی در پوشه STARPAC که توسط کاربر تعیین شده، نشان داده می‌شود و کاربر می‌تواند مقادیر ورودی توسط خودش را مجدد بررسی نماید و به فرض مثال همین گزینه برابر $1E-4$ نوشته خواهد شد که در واقع، نشان‌دهنده همان عدد 10^{-4} وارد شده توسط کاربر هست.

۳-۵-۷-۲- ردیف‌های (۸) - تخمین پارامترها

سایر پارامترهای باقی‌مانده پوشه STARPAC در ردیف (۸) تعریف می‌شوند که مشخصات آن در جدول ۳-۲۲ ارائه شده است. متغیر اول ردیف (۸) که در ستون ۱ تا ۵ قرار خواهد داشت و تحت عنوان IFIXED معرفی شده، مشخص می‌کند که آیا پارامترهای ده‌گانه مدل نگهداشت موقت (TSM) در طول مدل‌سازی ثابت خواهند بود یا می‌بایست تخمین زده شوند؟ برای ثابت نگه‌داشتن پارامترهای ده‌گانه مدل نگهداشت موقت (TSM) در طی مدل‌سازی باید گزینه IFIXED برابر عدد ۱ در نظر گرفته شود که در این حالت، این دست از پارامترها در طول مدل‌سازی توسط الگوریتم NLS تخمین زده نخواهند شد و مقادیر اولیه تعیین شده توسط کاربر در طی مراحل تخمین ثابت باقی خواهند ماند، اما از سوی دیگر، اگر هدف تخمین پارامترهای ده‌گانه مدل نگهداشت موقت (TSM) باشد، در این صورت باید گزینه IFIXED برابر عدد صفر در نظر گرفته شود که در این حالت، پارامترهای تخمینی توسط الگوریتم NLS برای به‌دقت آوردن یک مقدار بهینه ارزیابی خواهند شد. در طی مراحل روش تخمین پارامترها، پارامترهای اولیه مشخص شده توسط کاربر برای همه پارامترها به صورت تخمین اولیه استفاده خواهند شد (شکل ۲-۷).

متغیر دوم ردیف (۸) برای نرمال‌سازی هر یک از پارامترها مانند رابطه (۲-۴۳) تحت عنوان SCALE استفاده می‌شود. هنگامی که SCALE روی عدد صفر تنظیم شود، مقادیر پیش‌فرض به‌صورت خودکار

توسط الگوریتم NLS تعیین شده و قبل از هر تکرار به روزرسانی می‌شوند، لذا مقدار توصیه شده برای متغیر SCALE قرار دادن عدد 0.0D0 در پوشه ورودی STARPAC هست.

جدول ۳-۲۲- پوشه ورودی STARPAC- ردیف (۸)*

نوع ورودی	قالب تعریف ورودی	ستون	توضیحات
IFIXED	عدد صحیح	۱ تا ۵	گزینه درخواست تخمین یا ثابت بودن پارامتر در طی مراحل تخمین
SCALE	عدد اعشاری	۶ تا ۱۸	گزینه نرمال سازی هریک از پارامترها

* ردیف ۸ می‌بایست ۱۰ مرتبه تکرار شود. در واقع، یک بار برای هر یک از پارامترهای مدل که ممکن است تخمین زده شوند، باید اعمال گردد. ردیف (۸) برای پارامترهای مدل به ترتیب مقابل صورت خواهد پذیرفت: (۱) DISP، (۲) AREA، (۳) AREA2، (۴) ALPHA، (۵) LAMBDA، (۶) LAMBDA2، (۷) RHO، (۸) KD، (۹) LAMHAT، (۱۰) LAMHAT2؛ (اولین اقدام در ردیف (۸) برای DISP، دومی برای AREA و به همین ترتیب، برای سایر پارامترها باید انجام پذیرد).

از آنجایی که IFIXED و SCALE مختص هر یک از پارامترهای ده گانه مدل نگهداشت موقت (TSM) هستند، بنابراین ردیف (۸) باید یک بار برای هر پارامتر مدل تکرار شود. مطابق توضیحات بخش ۳-۲-۴، مدل نگهداشت موقت (TSM) دارای ۱۰ پارامتر هست که ممکن کاربر تقاضای تخمین و ارزیابی هر کدام از این پارامترهای ده گانه را به صورت جداگانه داشته باشد. بدین منظور باید مقدار IFIXED در مقابل هر کدام از پارامترها برابر عدد صفر لحاظ شود تا OTIS-P اقدام به تخمین پارامترهای مدنظر کاربر داشته باشد. پارامترهای لیست ده گانه مدل در پوشه ورودی STARPAC به ترتیب، عبارت‌اند از: (۱) ضریب پراکندگی طولی تحت عنوان DISP، (۲) مساحت مقطع عرضی ناحیه جریان تحت عنوان AREA، (۳) مساحت مقطع عرضی ناحیه نگهداشت (هایپریک) تحت عنوان AREA2، (۴) ضریب تبادل ناحیه نگهداشت (هایپریک) تحت عنوان ALPHA، (۵) ضریب زوال مرتبه اول ناحیه جریان تحت عنوان LAMBDA، (۶) ضریب زوال مرتبه اول ناحیه نگهداشت تحت عنوان LAMBDA2، (۷) جرم رسوب قابل دسترس به حجم آب تحت عنوان RHO، (۸) ضریب پخش تحت عنوان KD، (۹) ضریب جذب ناحیه اصلی جریان LAMHAT و (۱۰) ضریب جذب ناحیه نگهداشت (هایپریک) LAMHAT2 می‌باشند.

فصل چہارم

مسائل

کاربردی

۴- برنامه‌های کاربردی مدل

در این بخش، چندین کاربرد برای مدل انتقال املاح OTIS و الحاقیه OTIS-P ارائه خواهد شد. هر یک از برنامه‌ها برای معرفی یک یا چند ویژگی منحصر به فرد مدل طراحی شده است. توصیه می‌شود تا تمام برنامه‌های ارائه شده را برای به دست آوردن یک نمای کلی از قابلیت‌های مدل به صورت کامل بررسی کنید. کاربردهای اضافی مدل توسط بروشرز و همکاران^۱ (۱۹۹۳)، والت و همکاران^۲ (۱۹۹۶) و مورایس و همکاران^۳ (۱۹۹۷) ارائه شده است. هر برنامه دارای چهار بخش اساسی است: (الف) شرح ویژگی‌های مدل که در برنامه نشان داده شده است، (ب) بیان مختصر موضوع شبیه‌سازی، (ج) نمونه پوشه‌های ورودی و (د) نتایج شبیه‌سازی پوشه‌های ورودی. نمونه توضیحات تکمیلی برای شناخت پوشه‌های ورودی در بخش ۳-۵ بحث شده بود. پوشه‌های ورودی در این مثال‌های کاربردی، حاشیه‌نویسی شده‌اند تا نحوه استفاده از انواع ردیف در پوشه‌های مختلف نشان داده شود. همچنین، به علت محدودیت در فضای نوشتار کتاب، همه پوشه‌های ورودی برای هر برنامه نمایش داده نمی‌شوند. مجموعه کاملی از پوشه‌های ورودی برای بخشی از نرم‌افزار است که نحوه دسترسی به آن‌ها در بخش ۵-۲ نشان داده خواهد شد.

۴-۱- مثال کاربردی اول - انتقال املاح غیر واکنشی (OTIS)

در این برنامه، قالب پوشه‌های ورودی مورد استفاده در OTIS نشان داده خواهد شد. این برنامه شامل یک شبیه‌سازی متغیر زمانی از یک ردیاب غیر واکنشی است که شاید رایج‌ترین استفاده از املاح OTIS باشد. بنکالا و والترز^۴ (۱۹۸۳) در یک آزمایش میدانی از کلرید^۵ برای یک ردیاب غیر واکنشی استفاده کردند.

¹ Broshears et al. (1993)

² Vallet et al. (1996)

³ Norrice et al. (1997)

⁴ Bancala and Walters (1983)

⁵ Chloride

این آزمایش در یک آبراهه کوچک دارای فرم بستر خیزاب-چالاب^۱ در کالیفرنیا^۲ شمالی^۳ تحت عنوان یواس کریک^۳ انجام گردید. در طی انجام آزمایش، کلرید با سرعت ثابت به مدت ۳ ساعت تزریق شده و غلظت‌ها در پنج مکان مختلف پایین دست (۳۸، ۱۰۵، ۲۸۱، ۴۳۳ و ۶۱۹ متر) بررسی شدند. شبیه‌سازی‌ها با داده‌های تجربی برای تعیین کمیت ویژگی‌های هیدرودینامیکی آبراهه مدنظر ترکیب شدند (بنکالا و والترز، ۱۹۸۳). پوشه‌های ورودی، واحدهای تعیین شده توسط کاربر برای غلظت (CU) و طول (L) به ترتیب، میلی‌گرم بر لیتر و متر می‌باشد. پوشه کنترل که در آن نام پوشه پارامترها، پوشه جریان و همچنین پوشه‌های خروجی املاح مشخص شده در شکل ۴-۱ ارائه گردیده است. پارامترهای مدل ثابت با زمان از پوشه params.inp (ردیف ۱) خوانده می‌شوند و همچنین مشخصات مربوط به معرفی مقادیر مربوط به جریان آبراهه نیز از پوشه q.inp (ردیف ۲) خوانده شده و در نهایت، خروجی مدل که در واقع، شبیه‌سازی غلظت‌های کلرید در زمان مختلف بوده نیز با پوشه cl.out معرفی خواهد شد (ردیف ۳).

```
#####
#
#                               OTIS control file
#
#
# line                               name of the:
# ----                               -
# 1                                 parameter file
# 2                                 flow file
# 3 to 2+NSOLUTE                   solute output files
# 3+NSOLUTE to 2+(NSOLUTE*2)      sorption output files (ISORB=1 only)
#
#####
۱ params.inp
۲ q.inp
۳ cl.out
```

شکل ۴-۱- پوشه کنترل برای مثال کاربردی اول

شکل ۴-۲ پوشه پارامتر برای شبیه‌سازی کلرید در این مثال کاربردی را نشان می‌دهد. برای این شبیه‌سازی، درخواست چاپ غلظت‌های کانال اصلی و ناحیه نگهداشت (بستر رسوبی) در هر ۰/۱ ساعت داده شد (ردیف‌های نوع ۲ و ۳). مرحله زمانی درون‌یابی در این مثال ۰/۰۵ ساعت تنظیم شده و در نظر است تا شبیه‌سازی در ساعت ۸/۲۵ شروع شده و در ساعت ۲۴/۰۰ به پایان برسد (ردیف‌های نوع ۴، ۵ و ۶). مرز بالادست در نظر گرفته شده برای شروع شبیه‌سازی شبکه مدنظر در ۰/۰ متر در نظر گرفته شده و مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۴ در خصوص شرایط مرزی پایین‌دست نیز در حالت بدون جریان فرض

¹ Pool-Riffle

² Northern California

³ Uvas Creek

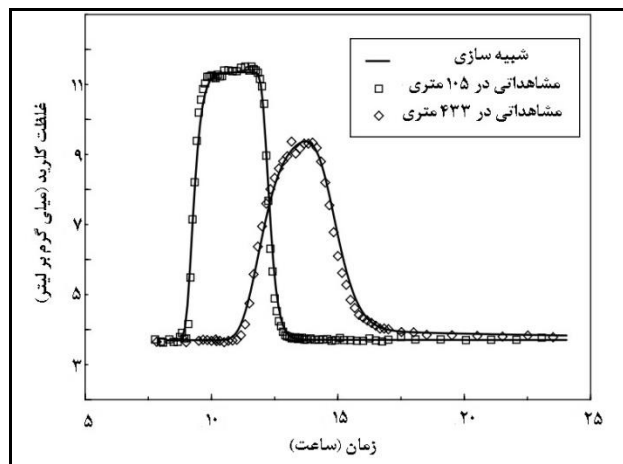
گردیده و روی ۰/۰ تنظیم گردید (ردیف‌های نوع ۷ و ۸). این آبراهه به پنج بازه تقسیم شد (ردیف نوع ۹). ردیف نوع ۱۰ به‌طور مکرر، برای تعیین طول و همچنین تعیین پارامترهای انتقال آلودگی هر بازه (ضریب پراکندگی طولی، مساحت ناحیه نگهداشت و ضریب تبادل ناحیه نگهداشت) استفاده می‌شود. طول بازه‌های یک تا چهار به‌گونه‌ای مشخص شده که به محل‌های نمونه‌برداری بازه بعدی ختم گردد و آخرین بازه نیز ۵۰ متر اضافی به سمت پایین‌دست در نظر گرفته می‌شود تا هرگونه خطای ایجادشده توسط شرایط مرزی پایین‌دست را کاهش دهد (مراجعه به بخش ۲-۶-۲ و همچنین ۳-۵-۴).

در این مثال کاربردی، تعداد یک املاح مدل‌سازی شده بنابراین مقدار $NSOLUTE=1$ در ردیف نوع ۱۱ در نظر گرفته شده و با توجه به ماهیت غیر واکنشی ماده ردیاب، هیچ نوع واکنش شیمیایی (زوال و جذب) نیز در آن وجود نخواهد داشت، لذا $ISORB=IDECAY=0$ در همان ردیف نوع ۱۱ اعمال گردیده و در واقع، ردیف‌های نوع ۱۲ و ۱۳ عملاً بی‌اثر خواهند شد. در این مثال کاربردی، درخواست چاپ نتایج شبیه‌سازی در پنج نقطه ($NPRINT=5$) با تعریف در ردیف نوع ۱۴ داده شده و همچنین، مکان‌های موردنظر برای چاپ نتایج نیز متناظر با مکان‌های نمونه‌گیری (۳۸، ۱۰۵، ۲۸۱، ۴۳۳ و ۶۱۹ متر) در ردیف نوع ۱۵ تعریف می‌شوند. با توجه به طولانی نبودن فواصل بازه‌های اندازه‌گیری، درون‌یابی نیز درخواست نشده، لذا در ردیف نوع ۱۴ مقدار $IOPT$ برابر مقدار صفر در نظر گرفته شد.

مانند بسیاری از نمونه‌های مطالعات شبیه‌سازی‌های آزمایش‌های ماده ردیاب، غلظت مرزی بالادست برحسب پروفیل غلظت پله‌ای بوده که شامل سه دوره زمانی (ساعت ۸/۲۵، ساعت ۸/۴ و ساعت ۱۱/۴) است. بنابراین، مقدار $NBOUND=3$ در ردیف نوع ۱۶ تعریف شده که نشان‌دهنده سه دوره زمانی داده‌های برداشتی در مرز بالادست بوده و از سوی دیگر، مقدار $IBOUND$ برابر ۱ در همین ردیف برای معرفی نوع پروفیل غلظت پله‌ای برداشتی در شرایط مرزی بالادست تعریف می‌گردد. در واقع، شرط مرزی اول (ساعت ۸/۲۵) و شرط مرزی سوم (ساعت ۱۱/۴) غلظت پایه کلرید در جریان این آبراهه مربوط به دوره‌های قبل و بعد از تزریق را مشخص کرده و شرط مرزی دوم نیز به مدت حدوداً ۳ ساعت برای نشان دادن دوره تزریق اعمال می‌شود (ردیف نوع ۱۷).

پوشه ورودی جریان برای این آبراهه در شکل ۳-۴ نشان داده شده است. در این مثال کاربردی با توجه به مشخصات جریان آبراهه یواس کریک، شرایط رژیم جریان پایدار می‌بایست انتخاب گردد، بنابراین در ردیف نوع ۱ مقدار تغییرات در جریان برحسب زمان $QSTEP=0$ در نظر گرفته شد. مقدار دبی حجمی جریان در شرایط مرزی بالادست ۰/۰۱۲۵ مترمکعب در ثانیه در این آبراهه اندازه‌گیری شده است، لذا مقدار $QSTART$ برابر ۰/۰۱۲۵ در ردیف نوع ۲ مشخص گردید.

مقدار سطح مقطع کانال اصلی از هر بازه به بازه دیگر متفاوت بوده، لذا مقدار AREA در ردیف نوع ۳ برای بازه اول برابر ۳۰/ مترمربع، بازه دوم ۴۲/ مترمربع، بازه سوم ۰/۳۶ مترمربع، بازه چهارم ۰/۴۱ مترمربع و بازه آخر نیز ۰/۵۲ مترمربع وارد گردید. غلظت کلرید ورودی به هر یک از بازه‌ها یکسان بوده، لذا مقدار CLATIN برابر ۳/۷ در ردیف نوع ۳ تعریف شد. در این مثال کاربردی، نتایج شبیه‌سازی از پوشه خروجی املاح (cl.out) در شکل ۴-۴ نشان داده شد. در این شکل، غلظت کلرید شبیه‌سازی شده در مکان‌های شبیه‌سازی بازه‌های دوم و چهارم (۱۰۵ و ۴۳۳ متر) با غلظت‌های اندازه‌گیری شده ماده ردیاب در این نقاط مقایسه شده است.



شکل ۴-۴- غلظت‌های شبیه‌سازی شده و مشاهداتی در ۱۰۵ و ۴۳۳ متری

۴-۲- مثال کاربردی دوم- انتقال همراه با جذب (OTIS)

در مثال کاربردی اول، ماده ردیاب کلرید به‌عنوان یک املاح غیر واکنشی بوده که با هیچ‌یک از عناصر جریان در آبراهه مدنظر دارای جذب شیمیایی نشده است، درحالی‌که بسیاری از آلاینده‌های موجود در جریان‌های مجاری باز دارای قابلیت جذب توسط پوشش‌های گیاهی یا بستر رسوبی آبراهه‌ها یا سایر عناصر موجود می‌باشند، لذا در شبیه‌سازی انتقال چنین املاحی در مجاری باز می‌بایست به وجود این واکنش‌های شیمیایی نیز دقت کرد. هدف از این مثال کاربردی نشان دادن استفاده از OTIS برای املاح واکنشی است. بانکالا^۱ (۱۹۸۳) در مطالعه‌ای به تزریق سه‌ساعته استرانسیوم^۲ هم‌زمان با تزریق کلرید

¹ Bencala (1983)

² Stronium

(مطابق شرح در مثال کاربردی اول) پرداخت (مراجعه به بخش ۴-۱). از آنجاکه استرانسیوم به رسوبات بستر رودخانه جذب شده است، لذا نمی‌توان آن را برای یک املاح غیر واکنشی مدل کرد. در این مثال کاربردی، الگوریتم‌های جذب در OTIS برای مدل‌سازی سرنوشت و انتقال استرانسیوم در آبراهه یواس کریک استفاده می‌شوند.

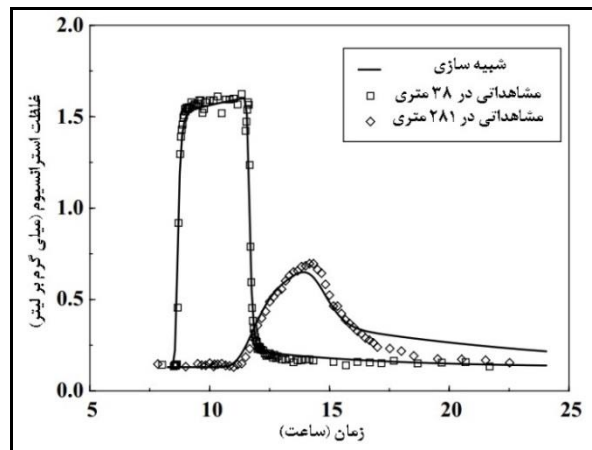
پوشه‌های ورودی نمونه برای شبیه‌سازی استرانسیوم در آبراهه مدنظر، بسیار شبیه به پوشه‌های برنامه کاربردی اول هستند. پوشه کنترل شامل یک خط اضافی برای تعیین نام پوشه خروجی جذب (ردیف نوع ۴) است و فرمت پوشه جریان مشابه با برنامه اول است.

شکل ۴-۵ فهرستی جزئی از پوشه پارامتر برای شبیه‌سازی استرانسیوم است. در این شکل، ردیف‌های نوع ۱-۱۰ نشان داده نشده است، زیرا آن‌ها با موارد موجود در شکل ۴-۲ کاملاً یکسان هستند. در ردیف نوع ۱۱، همانند مثال کاربردی اول، در تعیین تعداد املاح NSOLUTE روی ۱ تنظیم می‌شود، زیرا که فقط استرانسیوم به صورت ماده ردیاب در شبیه‌سازی بوده، اما در همین ردیف، برخلاف مثال کاربردی اول، با توجه به واکنشی بودن املاح باید گزینه‌های مربوط به رفتارهای شیمیایی املاح نیز استفاده گردد. جذب با تنظیم ISORB روی ۱ و استفاده مکرر از نوع ردیف ۱۳ برای مشخص کردن پارامترهای جذب خاص برای هر یک از بازه‌های آبراهه مدل‌سازی می‌شود. ردیف نوع ۱۳ با انواع ردیف‌های ۱۴ تا ۱۷ به روشی مشابه آنچه در شکل ۴-۲ نشان داده شد، انجام می‌شود.

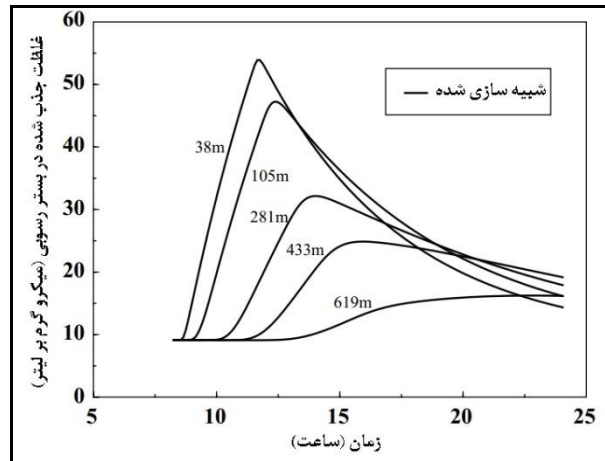
```
#####
#
# Number of Solutes and flags for decay and sorption
#
# NSOLUTE (col.1-5) IDECAY(col.6-10) ISORB(col.11-15)
#
# | |
#####
11 1 0 1
#####
#
# Sorption Parameters (ISORB=1, only)
#
# for I = 1, NREACH
#
#LAMHAT      LAMHAT2      RHO      KD      CSBACK
#
#####
13 5.6e-5      1.0      4.0e+4      70.0e-6      0.13
13 5.6e-5      1.0      2.0e+4      70.0e-6      0.13
13 5.6e-5      1.0      2.0e+4      70.0e-6      0.13
13 5.6e-5      1.0      2.0e+4      70.0e-6      0.13
13 5.6e-5      1.0      4.0e+4      70.0e-6      0.13
#####
```

شکل ۴-۵- بخشی از پوشه پارامتر برای برنامه کاربردی دوم

نتایج شبیه‌سازی از پوشه‌های خروجی املاح و جذب در شکل‌های ۴-۶ و ۴-۷ نشان داده شده است. غلظت‌های شبیه‌سازی شده و مشاهده شده استرانسیوم در کانال اصلی برای بازه‌های اول و سوم این آبراهه (۳۸ و ۲۸۱ متر) در شکل ۴-۶ ترسیم شده است. همچنین غلظت املاح در بستر رسوبی (C_{sed}) نیز در هر پنج بازه آبراهه در شکل ۴-۷ رسم شده است.

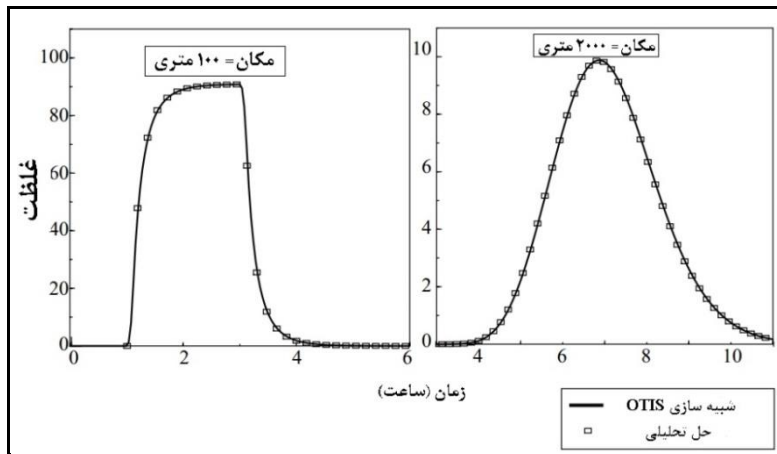


شکل ۴-۶- غلظت‌های شبیه‌سازی شده و مشاهداتی در ۳۸ و ۲۸۱ متری



شکل ۴-۷- غلظت‌های شبیه‌سازی شده استرانسیوم در بستر رسوبی در هر پنج بازه

است. زوال مرتبه اول را می‌توان در ۲۰۰۰ متری پایین دست مشاهده کرد، جایی که غلظت اوج با مقدار ۱۰ واحد بسیار کمتر از غلظت در مرز بالادست با مقدار ۱۰۰ واحد است.



شکل ۴-۹- مقایسه نتایج شبیه‌سازی OTIS و روش حل تحلیلی

۴-۴- مثال کاربردی چهارم- انتقال املاح غیر واکنشی در جریان‌های غیردائمی (OTIS)

مثال‌های کاربردی قبلی بر نحوه استفاده از OTIS در جریان‌های دائمی تأکید داشت، اما در بسیاری از کارهای عملی و انواع جریان‌های ایجاد شده در مجاری باز، تغییرات زمانی نقش مؤثری در تغییرات خصوصیات جریان داشته و در واقع، مشخصات جریان مستقل از زمان نبوده بنابراین نمی‌توان در شبیه‌سازی انتقال و پراکندگی املاح در چنین شرایطی، عامل زمان را حذف یا نادیده گرفت لذا می‌بایست برای شبیه‌سازی انتقال و پراکندگی املاح در جریان‌های دائمی نیز شرایط حاکم را در نظر گرفت. در این مثال کاربردی سعی شد تا استفاده از OTIS را برای شبیه‌سازی انتقال املاح تحت یک رژیم جریان غیردائمی نشان داده شود. مکنایت و اندروز^۱ (۱۹۹۳) یک آزمایش انتقال املاح انجام شده روی آبراهه هوی کریک^۲ که یک آبراهه مذاب یخچالی در دره‌های خشک مک‌موردای^۳ قطب جنوب^۴ بوده را بررسی

^۱ McKnight and Andrews (1993)

^۲ Huey Creek

^۳ McMurdo Dry Valleys

^۴ Antarctica

کردند. در ژانویه ۱۹۹۲، یک ردیاب لیتیوم^۱ در یک دوره زمانی ۳/۷۵ ساعته به این جریان آب تزریق شد. نمونه‌ها در چندین مکان مختلف پایین دست جمع‌آوری شدند و کنترل جریان آب به‌طور مداوم، صورت پذیرفت. دبی جریان آب در طی انجام آزمایش کمتر از ۱ فوت مکعب در ثانیه تا تقریباً ۴ فوت مکعب در ثانیه متغیر بوده است.

تجزیه و تحلیل آزمایش‌های ماده ردیاب در این آبراهه مستلزم در نظر گرفتن تغییرات بزرگ شکل گرفته در جریان خواهد بود که توضیحات تئوری آن پیش‌تر اشاره شد. تغییرات جریان برای تعریف در OTIS با تهیه یک پوشه جریان ناپایدار مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۵ در نظر گرفته خواهد شد. پوشه جریان ناپایدار برای این آبراهه با بهره‌گیری از روش روندیابی موج سینماتیکی^۲ از طریق بسته نرم‌افزاری تحت عنوان MMS^۳ (سیستم مدل‌سازی پودمانی) که از سوی لیوزلی و همکاران^۴ (۱۹۹۶) توسعه داده شد، تهیه گردید. داده‌های ورودی مورد استفاده توسط این نرم‌افزار شامل یک هیدروگراف ورودی، تخمین زبری کانال، شیب و عرض کانال بوده و پوشه جریان ناپایدار تولیدی مطابق ساختار مورد نیاز تعریفی در OTIS قالب‌بندی شد (رانکل و همکاران^۵، ۱۹۹۵).

در شکل ۴-۱۰ بخشی از پوشه جریان ناپایدار برای هوی کریک ارائه شده است. در ردیف نوع ۱ (QSTEP) فاصله زمانی بین تغییرات جریان برحسب ساعت مشخص خواهد شد. از آنجایی که در جریان‌های دائمی، تغییرات در مشخصات جریان برحسب زمان روی نخواهد داد، لذا در پوشه جریان مثال‌های کاربردی اول تا سوم مقدار QSTEP برابر صفر تنظیم گردیده بود، اما در این مثال با توجه به ماهیت جریان‌های غیردائمی و تغییرات رخ داده در مقدار جریان برحسب زمان، مقدار QSTEP بزرگ‌تر از صفر تنظیم خواهد شد. شش مکان اندازه‌گیری جریان با استفاده از انواع ردیف‌های ۲ و ۳ تعریف شده‌اند. همان‌طور که در مبحث جریان‌های غیردائمی بخش ۳-۵-۵ اشاره شد، مکان‌های جریان باید به ترتیب صعودی از بالادست به سمت پایین دست تنظیم گردد، به طوری که اولین مکان در انتهای بالادست شبکه جریان قرار گیرد. پس از تعیین مکان‌های جریان، از انواع ردیف‌های ۴ تا ۷ برای تنظیم دبی جریان جانبی ورودی، دبی حجمی جریان، سطح مقطع عرضی ناحیه اصلی جریان و غلظت جریان جانبی ورودی برای هر یک از شش مکان تعریف شده استفاده خواهد شد. انواع ردیف‌های ۴-۷ برای هر ساعت QSTEP از زمان شبیه‌سازی می‌بایست تکرار گردد.

¹ Lithium

² Kinematic-Wave Routing

³ Modular Modeling System

⁴ Leavesley et al. (1996)

⁵ Runkel et al. (1996)

```
#####
#
#                               OTIS unsteady flow file
#
#                               1/7/1992 Huey Creek, Antartica
#                               Conservative Transport of Lithium
#
#
#####
#
#                               1.66666667e-2   QSTEP [hour]
#####
#                               Flow Locations
#####
#                               6                               NFLOW
#                               (FLOWLOC for I = 1, NFLOW)
#
#                               0.00
#                               9.00
#                               213.00
#                               457.00
#                               610.00
#                               762.00
#####
#                               Flow Data from DR3M/MMS
#####
#
#                               starting time, 11.30
#
#
#                               0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
#                               0.061573  0.061472  0.059380  0.056964  0.055279  0.053600
#                               0.109640  0.109532  0.098029  0.089586  0.095372  0.092534
#                               0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
```

شکل ۴-۱۰- پوشه جریان ناپایدار برای برنامه کاربردی چهارم

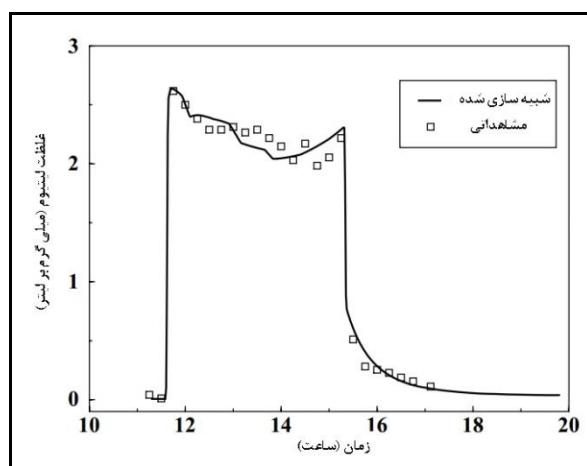
```
# time = 11.3 + QSTEP
#
#                               0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
#                               0.062194  0.062093  0.060010  0.057605  0.055927  0.054242
#                               0.110300  0.110193  0.098650  0.090189  0.096041  0.093197
#                               0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
#
# time = 11.3 + 2 QSTEP
#
#                               0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
#                               0.062814  0.062714  0.060639  0.058246  0.056576  0.054891
#                               0.110958  0.110852  0.099269  0.090788  0.096707  0.093863
#                               0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
#
# time = 11.3 + 3 QSTEP
#
#                               0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
#                               0.063435  0.063335  0.061269  0.058887  0.057225  0.055545
#                               0.111613  0.111508  0.099885  0.091385  0.097370  0.094531
#                               0.00      0.00      0.00      0.00      0.00      0.00
#
#                               ادامه دارد.....
#
```

ادامه شکل ۴-۱۰- پوشه جریان ناپایدار برای برنامه کاربردی چهارم

ذکر دو نکته در تهیه پوشه پارامتر در شبیه‌سازی لیتیوم در این آبراهه قابل توجه بوده که کاربران باید در شبیه‌سازی‌های دارای این شرایط رعایت کنند: ابتدا، مرحله زمانی یکپارچه‌سازی (TSTEP) به گونه‌ای انتخاب می‌گردد که به‌طور مساوی، به گام زمانی روندیابی تقسیم شود؛ یعنی درواقع مقدار $\frac{QSTEP}{TSTEP}$ یک مقدار صحیح حاصل گردد. دوم، در این مثال کاربردی، درحالی‌که غلظت مرزی بالادست با تغییرات

جریان تغییر می‌کند، اما مقدار شار تزریق در طی بازه زمانی ۳/۷۵ ساعت ثابت است، لذا مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۴، مشخص کردن یک شار تزریق ثابت اجازه می‌دهد تا با IBOUND برابر ۲ مشخصات شرایط مرزی بالادست را ساده‌سازی کرده و با مشخص کردن مقدار غلظت و دبی جریان در سه دوره زمانی قبل تزریق، شروع تزریق و پس از تزریق، مقادیر USBC در هر یک از این سه دوره USTIME معین گردند.

نتایج شبیه‌سازی برای آزمایش آبراهه هوی کریک در شکل ۴-۱۱ نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود، غلظت لیتیوم در طول دوره تزریق (۱۲ تا ۱۵ ساعت) به دلیل تغییرات در جریان متفاوت خواهد بود. از سوی دیگر، توجه نکردن به این تغییرپذیری جریان و در نظر گرفتن شرایط جریان دائمی سبب ایجاد یک پروفایل شبیه‌سازی مسطح در طول دوره تزریق خواهد شد.



شکل ۴-۱۱- غلظت‌های مشاهده‌ای و شبیه‌سازی شده لیتیوم در مکان اندازه‌گیری چهارم (۴۵۷ متری از بالادست)

۴-۵- مثال کاربردی پنجم- شرایط مرزی پیوسته^۱ و تخمین پارامترها (OTIS-P)

این مثال کاربردی دارای دو هدف: الف) نشان دادن چگونگی استفاده از الحاقیه OTIS-P برای تخمین پارامترهای مدل با استفاده از حداقل مربعات غیرخطی، ب) ارائه یک مثال دارای گزینه شرایط مرزی پیوسته است.

¹ Continuous Boundary Condition

لائین و ریسلی^۱ (۱۹۹۷) در مطالعاتی از رنگ رودامین^۲ برای ماده ردیاب در نهرها و رودخانه‌ها در اورگان^۳ استفاده نمودند. در ژوئیه ۱۹۹۲، رودامین به رودخانه کلاکاماس^۴ اضافه و نمونه‌های آب در سه مکان به ترتیب، در ۱۱ مایل (تعریف شده به عنوان بازه اول)، ۹/۵ مایل (تعریف شده به عنوان بازه دوم) و ۸ مایل (تعریف شده به عنوان بازه سوم) از پایین دست جمع‌آوری شدند. این داده‌ها برای تخمین پارامترهای انتقال و پراکندگی در انتهای دو بازه اول و دوم استفاده شدند.

پوشه کنترل برای مطالعه رودامین در رودخانه کلاکاماس که شامل ورودی‌ها و خروجی‌های OTIS-P بوده در شکل ۴-۱۲ نشان داده شد؛ مانند پوشه کنترل OTIS، این پوشه در OTIS-P نیز دارای نام پوشه‌های ورودی و خروجی مختلف مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۳ است.

```
#####
#
#               OTIS-P control file
#
#   line          name of the:
#   ----          -
#   1             parameter file
#   2             flow file
#   3             data file
#   4             STARPAC input file
#   5             parameter output file
#   6             STARPAC output file
#   7             solute output file
#   8             sorption output file (ISORB=1 only)
#
#####
#
#   params.inp
#   q.inp
#   data.inp
#   star.inp
#   params.out
#   star.out
#   solute.out
#
#####
```

شکل ۴-۱۲- پوشه کنترل برای مثال کاربردی پنجم

پوشه‌های داده‌ها و جریان (دائمی) برای این مثال کاربردی به علت شباهت با مثال‌های کاربردی اول و چهارم (بخش‌های ۴-۱ و ۴-۴) داشته است، لذا برای بررسی بیشتر به شکل‌های ارائه شده در آن بخش‌ها مراجعه شود. در این مثال کاربردی از گزینه شرایط مرزی پیوسته ($IBOUND=3$)، توضیحات بخش ۳-۵-۴ استفاده شد. از داده‌های برداشتی در بازه اول (۱۱ مایلی از پایین دست رودخانه) برای تعریف شرایط مرزی بالادست بهره گرفته شدند. این کار با تنظیم $NBOUND$ برابر با تعداد داده‌های

¹ Laenen and Risley (1997)

² Rhodamine

³ Oregon.

⁴ Clackamas River

مشاهداتی در بازه مدنظر و تنظیم IBOUND برابر با عدد ۳ و همچنین استفاده از داده‌های غلظت برداشتی در زمان‌های مختلف برای تعیین USTIME و USBC (ردیف‌های ۱۶ و ۱۷ پوشه پارامترها) انجام خواهد شد. داده‌های مشاهده‌شده به‌عنوان شرایط مرزی با نتایج شبیه‌سازی در انتهای این مثال کاربردی ارائه شده است (شکل ۴-۱۵).

دو پوشه ورودی اضافی برای OTIS-P موردنیاز است. در شکل ۴-۱۳ فهرستی جزئی از پوشه داده^۱ برای شبیه‌سازی رودخانه کلاکاماس ارائه شده است. پوشه داده در واقع، حاوی داده‌های غلظت-زمان مشاهداتی بوده که در بازه‌های پایین‌دست رودخانه برداشت شده‌اند. این پوشه برای تخمین پارامترهای مدل موردنیاز بوده و در حقیقت یکی از پوشه‌های اصلی و اضافی برای اجرای OTIS-P است. برای تعیین N (ردیف ۱)، تعداد نقاط داده مشاهداتی برای هر بازه و ردیف نوع ۲ سپس N بار برای مشخص کردن داده‌های غلظت و زمان در بازه دوم (۹/۵ مایل از پایین‌دست رودخانه) بوده و سپس انواع ردیف-های ۱ و ۲ با استفاده از داده‌های رودخانه در بازه سوم (۸ مایل از پایین‌دست رودخانه) تکرار می‌شوند.

¹ Data File

OTIS-P data file	
line	for J = 1, NREACH
1	N - Number of observations for reach J.
2-N+1	TIME (time-variable) or DIST (steady-state) associated with each observation (col. 1-15).
Clackamas River Rhodamine - July 1992	
Data from Laenen and Risley (1997)	
Site 1, 2414 m (River Mile 9.5)	
27	
	11.00 0.00
	11.25 0.23
	11.33 1.10
	11.42 4.41
	11.50 8.19
	11.58 11.00
	11.67 12.35
	11.70 12.88
	11.75 12.49
	11.83 12.06
	11.92 11.38
	12.00 9.56
	12.08 8.38
	12.17 7.45
	12.25 6.59
	12.33 5.70
	12.42 5.11
	12.50 4.32
	12.58 3.72
	12.67 3.23
	12.75 2.88
	12.83 2.50
	12.92 2.15
	13.00 1.86
	13.25 1.20
	13.50 0.89
	14.50 0.00
	Site 2, 4828 m (River Mile 8.0)
18	
	12.75 0.00
	13.03 0.37
	13.47 4.07
	Continued.....

شکل ۴-۱۳- پوشه داده برای مثال کاربردی پنجم

یک پوشه ورودی نهایی، پوشه ورودی STARPAC که در شکل ۴-۱۴ نشان داده شده است. همان-طور که در بخش ۳-۵-۷ نیز بیان شد، این پوشه صرفاً مختص مدل OTIS-P بوده و در اجرای مدل OTIS نیازی به بارگذاری و تعریف این پوشه ورودی نیست. انواع ردیف ۱ تا ۷ برای تعیین چندین گزینه در پوشه STARPAC استفاده می‌شوند. مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۷، قابلیت تخمین ۱۰ پارامتر در OTIS-P وجود دارد، لذا در این مرحله، برای نمایش پارامترهایی از مدل که ثابت بوده یا درخواست تخمین آن از مدل وجود خواهد داشت در ردیف نوع ۸ تعیین می‌شوند. در این مثال کاربردی، پارامترهایی

که درخواست تخمین آن‌ها را از مدل داریم (IFIXED=0) شامل ضریب پراکندگی طولی (D)، سطح مقطع کانال اصلی و منطقه ذخیره‌سازی (A و A_s) و ضریب تبادل ناحیه نگهداشت (α) بوده و سایر پارامترهای باقی‌مانده مدل (IFIXED=1) که در واقع در مقادیر ورودی مشخص شده توسط کاربر به صورت ثابت تعریف می‌شوند.

```
#####
#
#                               STARPAC Parameter Input File
#                               Rob Runkel 3/11/95
#
#####
#
# Record Types 1-4, Integer values in Columns 1-5
#-----
# IWEIGHT  Weight Revision Option
# IVAPRX   Variance/Covariance Option
# MIT      Maximum Number of Iterations
# NPRT     STARPAC Print Option
#-----
#
# Record Types 5-7, Double precision values in Columns 1-13
#-----
# DELTA    Maximum Scaled Change, First Iteration
# STOPP    Stopping Value for Parameter Convergence
# STOPSS   Stopping Value for Sum of Square Convergence
#-----
#
# For each of the ten model parameters, enter IFIXED (Integer, Col. 1-5)
# and SCALE (Floating Point, Col 6-18).
#
# IFXD SCALE
#-----
# IFIXED and SCALE for:
#-----
0 0.0D0 | Dispersion Coefficient, DISP
0 0.0D0 | Main Channel Cross-Sectional Area, AREA
0 0.0D0 | Storage Zone Cross-Sectional Area, AREA2
0 0.0D0 | Storage Zone Exchange Coefficient, ALPHA
1 0.0D0 | Main Channel First-Order Decay Coefficient, LAMBDA
1 0.0D0 | Storage Zone First-Order Decay Coefficient, LAMBDA2
1 0.0D0 | Mass of Accessible Sediment/Volume Water, RHO
1 0.0D0 | Distribution Coefficient, KD
1 0.0D0 | Main Channel Sorption Rate Coefficient, LAMHAT
1 0.0D0 | Storage Zone Sorption Rate Coefficient, LAMHAT2
```

شکل ۴-۱۴- پوشه STARPAC برای مثال کاربردی پنجم

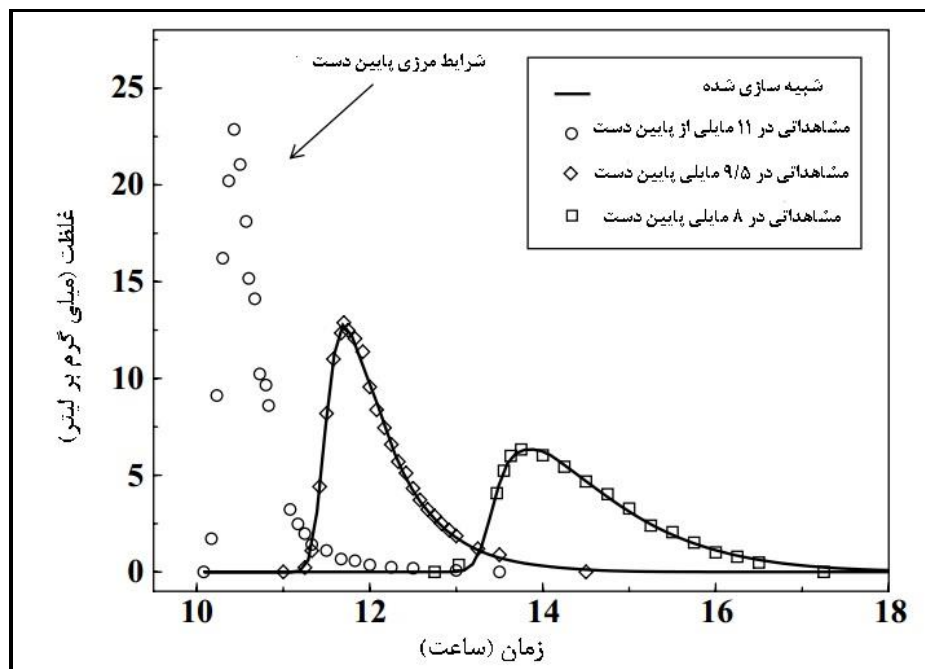
مطابق توضیحات بخش ۳-۶-۲، OTIS-P باید چندین بار اجرا شود تا مجموعه‌ای بهینه از مقادیر پارامترهای موردتقاضا برای تخمین و ارزیابی برای هر بازه رودخانه یا آبراهه تعیین شود. در این مثال کاربردی، سه اجرای OTIS-P برای به دست آوردن مجموعه پارامترهای نهایی انجام شد. در جدول ۴-۱ فرآیند اجرای مدل برای بازه سوم به صورت خلاصه ارائه گردیده است. جایی که مقادیر پارامتر برای

بازه ۲ نشان داده شد. برای اولین اجرا، تخمین پارامترهای اولیه برای D ، A ، A_s و α توسط کاربر مدل مشخص شده که این تخمین‌های اولیه مستقیماً از پارامترهای تخمینی در پوشه جریان گرفته می‌شوند. در پایان اجرای اول، تخمین پارامترها برای هر بازه از رودخانه با استفاده از پوشه خروجی (STARPAC.OUT) انجام شده و به‌عنوان تخمین پارامترهای اولیه برای شروع اجرای دوم استفاده می‌شوند. این روند برای اجرای سوم و آخر تکرار خواهد شد و اگر تکرارهای دیگری در طول اجرای مدل نیاز باشد نیز این روند ادامه خواهد داشت. همان‌طور که در جدول ۴-۱ نشان داده شده است، تخمین پارامترها و مجموع مربعات باقیمانده (RSS) از اجرای دوم و سوم تقریباً یکسان هستند. این مقادیر برای RSS و همگرایی پارامترها نشان می‌دهند که اجرای چهارم OTIS-P موردنیاز نیست. پارامترهای نهایی برای بازه سوم و نسبت‌های مرتبط (تخمین پارامتر تقسیم‌بر انحراف استاندارد آن) در جدول ارائه شده است. نسبت پایین برای پارامتر D نشان می‌دهد که تخمین این پارامتر تا حد زیادی غیرقطعی است.

جدول ۴-۱- تخمین پارامترها برای بازه دوم

شماره اجرا	D		A		A _s		α		RSS
	مقدار	نسبت	مقدار	نسبت	مقدار	نسبت	مقدار	نسبت	نسبت
تخمین اولیه	۰/۲۰	-	۵۰/۰	-	۲۵/۰	-	۵*۱۰ ^{-۵}	-	-
اجرای (۱)	۱/۷۴	SC	۵۰/۲	SC	۱۳/۱	SC	۹/۵۹*۱۰ ^{-۵}	SC	۱/۶۵۸
اجرای (۲)	۰/۴۰	۰/۴۴	۴۸/۲	۱۱۰/۰	۱۴/۴	۲۰/۰	۱/۶۷*۱۰ ^{-۴}	۱۱/۶	۰/۳۴۱۵
اجرای (۳)	۰/۴۱	۰/۴۴	۴۸/۱	۱۱۱/۰	۱۴/۴	۲۰/۰	۱/۶۷*۱۰ ^{-۴}	۱۱/۶	۰/۳۴۱۲

فرآیند تخمین پارامتر که در بالا توضیح داده شد، در نهایت، موجب مجموعه‌ای از پارامترها برای بازه‌های اول و دوم می‌شود که سبب مطابقت قابل‌قبولی بین غلظت‌های رودامین مشاهداتی و شبیه‌سازی شده گردیدند. این مطابقت بین داده‌های مشاهداتی و شبیه‌سازی شده در شکل ۴-۱۵ برای نتایج شبیه‌سازی‌ها در بازه‌های ۹/۵ مایلی (۲۴۱۴ متر) و ۸/۰ مایلی (۴۸۲۸ متر) رودخانه نشان داده شده است.



شکل ۴-۱۵- نتایج شبیه‌سازی مثال کاربردی پنجم

۴-۶- مثال کاربردی ششم - شبیه‌سازی حالت پایدار و تخمین پارامترها

همان‌طور که در بخش ۳-۲-۱ اشاره شد، مدل انتقال املاح OTIS ممکن است برای تعیین غلظت املاح در حالت پایدار^۱ ناشی از یک سناریوی بارگذاری ثابت^۲ مورد استفاده قرار گیرد. در این مثال کاربردی، از OTIS-P در حالت پایدار برای مدل‌سازی پروفیل غلظت مکانی^۳ آهن محلول در یک آبراهه کوچک درجه یک^۴ (سنت کوین گولچ^۵) که در کوه‌های راکی کلرادو^۶ واقع شده و هم‌چنین تحت تأثیر زهکشی معدن اسیدی نیز قرار دارد، استفاده خواهد شد.

کیمبال و همکاران^۷ (۱۹۹۱) به تشریح یک مطالعه میدانی انجام شده در آگوست ۱۹۸۶ پرداختند. آن‌ها در این مطالعه، نمونه‌های آب در مکان‌های متعدد درون جریان را جمع‌آوری کردند و برای تعیین غلظت

^۱ Steady-State

^۲ Constant Loading

^۳ Spatial Concentration Profile

^۴ First-Order Stream

^۵ St. Kevin Gulch

^۶ Colorado Rocky Mountains

^۷ Kimball et al. (1991)

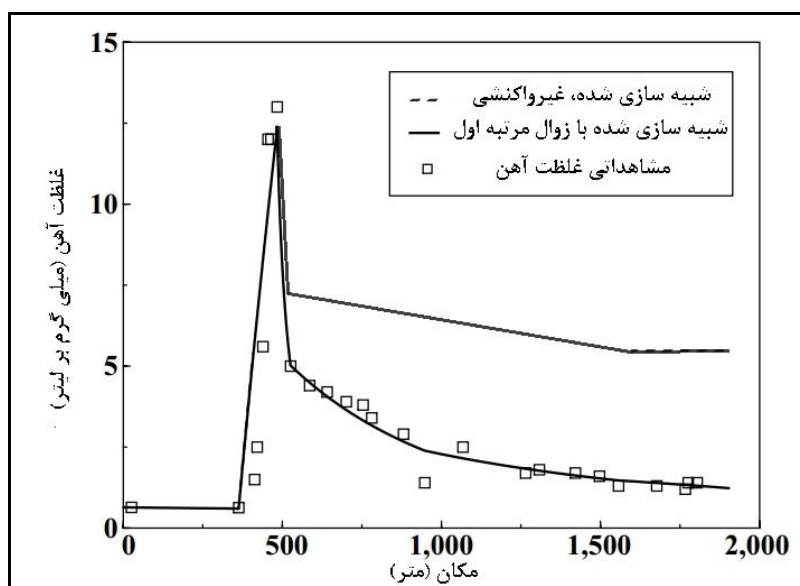
فلزات محلول مورد تجزیه و تحلیل قرار دادند. همچنین، یکسری نمونه‌های اضافی از مجموعه‌ای از چشمه‌های ورودی به محدوده مورد مطالعه در رودخانه نیز جمع‌آوری شدند. شکل ۴-۱۶ پروفیل مکانی تغییرات غلظت آهن محلول را نشان می‌دهد. با توجه به این شکل، دو ویژگی از پروفیل غلظت مکانی مورد توجه است: اول، افزایش زیادی در آهن محلول در حدود ۴۰۰ متر رخ می‌دهد و ویژگی دوم کاهش ناگهانی غلظت آهن محلول در حدود ۵۲۵ متر است که هدف از این مثال کاربردی نیز تعیین کمیت پارامترهای مؤثر در رخداد این تغییرات است.

در این گونه مطالعات، شناخت سیستم هیدرولوژی اولین گام در تجزیه و تحلیل است. بروشیرز و همکاران^۱ (۱۹۹۳) افزودن یک ماده ردیاب واکنش ناپذیر در یک مطالعه میدانی را برای شناخت دستگاه‌های رودخانه‌ای در پدیده جابجایی املاح تشریح کردند. داده‌های حاصل از افزودن ردیاب برای تعیین مقدار جریان و همچنین تعیین پارامترهای فیزیکی آبراهه استفاده خواهد شد، سپس این اطلاعات با غلظت‌های ورودی جانبی مشاهده شده ترکیب می‌شود تا با این فرض که آهن محلول غیر واکنشی است، یک پروفیل مکانی ایجاد کند. نتایج حاصل از این شبیه‌سازی OTIS حالت پایدار غیر واکنشی در شکل ۴-۱۶ به صورت خطچین نشان داده شده است. مطابقت نزدیک بین غلظت آهن مشاهده شده و شبیه‌سازی شده در قسمت‌های بالایی آبراهه (۵۰۰-۰ متر) نشان می‌دهد که افزایش اولیه آهن به دلیل عوامل کاملاً هیدرولوژیکی، یعنی بارگیری آهن از چشمه‌های غنی از آهن که از زباله معدنی در مجاورت سرچشمه می‌گیرد. غلظت آهن شبیه‌سازی شده در پایین دست پس از ۵۰۰ متر به دلیل افزودن آب از یک شاخه نسبتاً رقیق کاهش می‌یابد، اما با کاهش داده‌های مشاهداتی مطابقت ندارد. این اختلاف نشان می‌دهد که واکنش‌های شیمیایی و یا بیولوژیکی بر غلظت آهن محلول در بعد از ۵۰۰ متر تأثیرگذار خواهد بود.

یک روش ساده برای تعیین کمیت واکنش‌های شیمیایی یا بیولوژیکی، تعیین نرخ زوال مرتبه اولی است که در آن آهن در سیستم از بین می‌رود که این روش با تثبیت پارامترهای فیزیکی و تخمین اولیه نرخ زوال مرتبه اول برای هر بازه با استفاده در OTIS-P انجام می‌پذیرد. پوشه‌های ورودی و روش‌های تخمین پارامترها معمولاً همان مواردی هستند که در مثال کاربردی پنجم ارائه شده‌اند. داده‌های مشاهداتی از چشمه‌ها برای تعریف غلظت‌های ورودی جانبی در پوشه جریان استفاده شده و همچنین، در پوشه پارامتر، گام زمانی روی ۰/۰ تنظیم خواهد شد تا گزینه حالت پایدار فراخوانی شود و تخمین‌های اولیه برای نرخ زوال مرتبه اول کانال اصلی مشخص شده است. بخشی از پوشه داده‌ها در شکل ۴-۱۷ نشان داده شده است که در آن داده‌های غلظت مشاهداتی برحسب فاصله برای هر بازه مشخص شده

¹ Broshears et al. (1993)

است. همانند مثال کاربردی پنجم، در این مثال کاربردی نیز سه اجرای OTIS-P برای تخمین پارامترهای نهایی مورد نیاز بوده است. مقادیر نرخ زوال مرتبه اول در کانال اصلی از 5.8×10^{-4} تا 8×10^{-6} در هر ثانیه متغیر بوده که منجر به پروفیل شبیه‌سازی شده (خط سیاه) در شکل ۴-۱۶ شد.



شکل ۴-۱۶- پروفیل مکانی غلظت آهن محلول در آبراهه سنت کوین گلچ

```

#####
#
#                               OTIS-P data file
#
#
#   line      for J = 1, NREACH
#   ----
#   1         N - Number of observations for reach J.
#   2-N+1     TIME (time-variable) or DIST (steady-state) associated
#             with each observation (col. 1-15) and CONC (col. 16-30)
#
#   1986 St. Kevin Steady-State Iron.  Data from Kimball et al.(1991)
#
#####
#
#   Reach 1 0-26m
#
#   1
#   0
#
#   Reach 2 26-363m
#
#   1
#   2
#   26.0          0.64
#   363.0         0.63
#
#

```

شکل ۴-۱۷- فهرست بخشی از پوشه داده برای برنامه مثال کاربردی ششم

```

#   Reach 3 363-484m
#
#   1
#   7
#   363.0          0.63
#   413.0          1.5
#   421.0          2.5
#   439.0          5.6
#   455.0         12.0
#   464.0         12.0
#   484.0         13.0
#
#   Reach 4 484-526m
#
#   1
#   2
#   484.0          13.0
#   526.0           5.0
#
#   continued.....(data for Reaches 5-7)
#
#

```

ادامه شکل ۴-۱۷- فهرست بخشی از پوشه داده برای برنامه مثال کاربردی ششم

فصل پنجم

خطاهای

نرم افزار

۵-۱- راهنمای نرم افزار

در برنامه‌نویسی به زبان فرترن^۱ باید ابعاد هر بردار یا آرایه قبل از اجرای برنامه به صورت ثابت تعریف شوند. به عبارتی دیگر، هر بردار یا آرایه تعریف شده در مدل دارای یک مقدار حداکثر اندازه بوده که تعیین آن نیاز به اطلاع و شناخت از پارامترها دارد. در واقع، انتخاب اندازه مناسب برای هر پارامتر یک کار مهم است، چراکه مقادیر بسیار کوچک کاربرد برنامه را محدود کرده و از طرفی، مقادیر بسیار زیاد نیز حافظه برنامه را تلف خواهد کرد. از آنجایی که OTIS نیز تحت فرترن^۲-۷۷ کد نویسی و توسعه داده شده، لذا در انتخاب اندازه تعریفی پارامترهای مدل محدودیت‌هایی وجود خواهد داشت. مقادیر پیش فرض برای حداکثر ابعاد در جدول‌های ۵-۱ و ۵-۲ ارائه شده است. به طور کلی، هر یک از ابعاد مربوط به یک متغیر ورودی ارائه شده توسط کاربر است که نام هر یک از ورودی‌ها به صورت پرانتزی در ستون سوم جدول نشان داده شده است.

گاهی این اندازه‌های حداکثر برای برخی کاربران در شبیه‌سازی برخی پروژه‌های خاص ایجاد محدودیت می‌کند. برای رفع این مشکل، حداکثر ابعاد برای کل مدل با استفاده از دو فایل شامل: fmodules.inc و fmodules2.inc تعریف شده است. افزایش یا کاهش در حداکثر ابعاد با ویرایش فایل‌های گفته شده و اجرای دوباره مدل (مطابق توضیحات بخش ۵-۴) صورت خواهد پذیرفت.

با توجه به حداکثرهای تعریف شده در جدول‌های ۵-۱ و ۵-۲ به نظر می‌رسد که در اغلب مسائل شبیه‌سازی با OTIS، متغیرهای ورودی از حداکثر مقادیر مجازشان تجاوز نکنند؛ برای مثال، تعداد مکان‌های چاپ (مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۴، ردیف نوع ۱۴)، ممکن است از حداکثر مقدار ارائه شده توسط MAXPRINT تجاوز نکند، اما هنگامی که یک مقدار ورودی از حداکثر داده شده خود بیش تر شود،

¹ Fortran

² Fortran-77

اجرای برنامه خاتمه یافته و یک پیام خطا صادر می‌شود. در این مرحله کاربر می‌بایست تعداد حداکثر تعریفی در مدل OTIS را کاهش داده و دوباره به شبیه‌سازی بپردازد تا خطا برطرف شود. حال اگر چنانچه در این شبیه‌سازی امکان کاهش حداکثر پارامتر ورودی نباشد نیز می‌بایست مقدار حداکثر مناسب را با ویرایش fmodules.inc یا fmodules2.inc و اجرای دوباره برنامه، افزایش داد.

جدول ۱-۵- حداکثر ابعاد پیش فرض برای متغیرها (فایل fmodules.inc)

ابعاد	مقادیر پیش فرض	توضیحات
MAXREACH	۳۰	تعداد بازه‌های آبراهه (NREACH)
MAXPRINT	۳۰	تعداد مکان‌های شبیه‌سازی (NPRINT)
MAXBOUND	۲۰۰	تعداد تعریفی در شرایط مرزی بالادست (NBOUND)
MAXSEG	۵۰۰۰	تعداد بخش‌های هر بازه ($\sum NSEG_j$, $j=1$ to NREACH)
MAXSOLUTE*	۱، ۳	تعداد املاح مدل‌سازی شده (NSOLUTE)
MAXFLOWLOC	۳۰	تعداد مکان‌های تغییر جریان در جریان-های غیردائمی (NFLOW)

* حداکثر این گزینه برای OTIS برابر ۳ و برای OTIS-P برابر ۱ است.

جدول ۲-۵- حداکثر ابعاد پیش فرض برای متغیرها (فایل fmodules2.inc) صرفاً برای OTIS-P

ابعاد	مقادیر پیش فرض	توضیحات
MAXOBS	۲۰۰	تعداد داده‌های مشاهداتی برای هر بازه (N)
MAXPAR	۱۰	تعداد پارامترهای مدل

۲-۵- بررسی خطاها

ورودی‌های مدل از راه یک سری زیر برنامه‌ها با چندین آزمایش اعتبارسنجی شده و در صورت شناسایی خطاهایی در هنگام ورود داده‌ها، یک پیام خطا در فایل خروجی echo.out نوشته می‌شود و در همان

لحظه نیز اجرای برنامه خاتمه می یابد. به منظور شناخت صحیح پیامهای خطا داده شده در فایل echo.out، توضیحات این پیامها برای مدل های OTIS و OTIS-P در جدول ۳-۵ و صرفاً برای مدل OTIS-P در جدول ۴-۵ ارائه شده است.

جدول ۳-۵- پیامهای خطا در مدل های OTIS و OTIS-P

مفهوم خطا	خطای ایجادشده در OTIS و OTIS-P
تعداد بازهها (NREACH) نباید از حداکثر تعداد (MAXREACH) تجاوز کند.	The number of reaches, NREACH, must not exceed the maximum, MAXREACH.
تعداد بخشها (IMAX) نباید از حداکثر مجاز (MAXSEG) تجاوز کند.	The number of segments, IMAX, must not exceed the maximum, MAXSEG.
تعداد مکانهای چاپ نتایج شبیه سازی (NPRINT) نباید از حداکثر مجاز (MAXPRINT) تجاوز کند.	The number of print locations, NPRINT, must not exceed the maximum, MAXPRINT.
تعداد املاح تعریفی در مدل (NSOLUTE) نباید از حداکثر مجاز (MAXSOLUTE) تجاوز کند.	The number of solutes, NSOLUTE, must not exceed the maximum, MAXSOLUTE.
تعداد دادههای مشاهداتی در شرایط مرزی بالادست (NBOUND) نباید از حداکثر مجاز (MAXBOUND) تجاوز کند.	The number of upstream boundary conditions, NBOUND, must not exceed the maximum, MAXBOUND.
تعداد مکانهای تغییر جریان در جریانهای غیردائمی (NFLOW) نباید از حداکثر مجاز (MAXFLOWLOC) تجاوز کند.	The number of flow locations, NFLOW, must not exceed the maximum, MAXFLOWLOC.
مساحت ناحیه نگهداشت A_s (AREA2) باید از صفر بیش تر باشد.	The storage zone cross-sectional area, AREA2, must be greater than zero.
یک مکان مشخص برای شبیه سازی ($PRTLOC_i$) باید در شبکه مدل سازی تعریف شود.	A given print location, $PRTLOC_i$, must lie within the modeled network.
مکانهای جریان در جریانهای غیردائمی (FLOWLOC) باید از بالادست به پایین دست تعریف شوند.	The flow locations, FLOWLOC, must be entered in ascending (downstream) order.

اولین مکان جریان در جریان‌های غیردائمی ($FLOWLOC_1$) باید در شرایط مرزی بالادست و آخرین مکان جریان در جریان‌های غیردائمی باید در شرایط مرزی پایین‌دست تعریف شوند.	The first flow location, $FLOWLOC_1$, must be placed at the upstream boundary. The last flow location must be at or below the downstream boundary.
برای شرایط مرزی غلظت پیوسته ($IBOUND=3$)، زمان آخرین شرط مرزی ($USTIME_{NBOUND}$) باید بزرگ‌تر یا برابر با زمان پایان شبیه‌سازی ($TFINAL$) باشد.	For a continuous concentration boundary condition ($IBOUND$ equal to 3), the time of the last boundary condition ($USTIME_{NBOUND}$) must be greater than or equal to the simulation end time, $TFINAL$.
گزینه‌های چاپ ($PRTOPT$) می‌بایست برابر ۱ که درخواست شبیه‌سازی غلظت املاح فقط در کانال اصلی است یا برابر ۲ که هم کانال اصلی و هم ناحیه ذخیره موقت است، تنظیم شود.	The print option, $PRTOPT$, must equal 1 or 2.
گزینه درون‌یابی ($IOPT$) باید برابر صفر یا یک تنظیم شود.	The interpolation option, $IOPT$, must equal 0 or 1.
گزینه شرایط مرزی ($IBOUND$) باید برابر ۱، ۲ یا ۳ تنظیم شود.	The boundary condition option, $IBOUND$, must equal 1, 2, or 3.
گزینه زوال ($IDECAY$) باید برابر صفر یا یک تنظیم شود.	The decay option, $IDECAY$, must equal 0 or 1.
گزینه جذب ($ISORB$) باید برابر صفر یا یک تنظیم شود.	The sorption option, $ISORB$, must equal 0 or 1.

جدول ۵-۴- پیام‌های خطا صرفاً در مدل OTIS-P

مفهوم خطا	خطای ایجاد شده در OTIS-P
تعداد داده‌های مشاهداتی برای یک بازه (N) نباید	The number of observations for a reach, N , must not exceed the maximum,

از ۲۰۰ مورد تجاوز کند.	MAXOBS.
<p>زمان اولین داده مشاهداتی ($TIME_1$) باید بیش تر از مجموع زمان شروع شبیه سازی ($TSTART$) و گام زمانی درون یابی ($TSTEP$) باشد.</p>	<p>The time of the first observation must be greater than the simulation start time plus the integration time step ($TIME_1 > TSTART + TSTEP$).</p>
$TIME1 > TSTART + TSTEP$	
<p>داده های مشاهداتی باید به ترتیب صعودی و از کم ترین به بیش ترین زمان وارد گردند.</p>	<p>Observations must be entered in order of ascending time ($TIME_{j+1} > TIME_j, j=1,N$).</p>
<p>فاصله زمانی بین مشاهدات متوالی باید از گام زمانی درون یابی ($TSTEP$) بیش تر باشد.</p>	<p>The time between successive observations must be greater than the time step ($TIME_{j+1} - TIME_j > TSTEP, j=1,N$).</p>
<p>فاصله مشخص شده بین داده های مشاهداتی ($DIST$) باید طوری باشد که مجموعاً در داخل شبکه مدل سازی شده قرار گیرد.</p>	<p>The distance specified, $DIST$, must lie within the modeled network.</p>
<p>گزینه اصلاح وزنی ($IWEIGHT$) باید برابر صفر یا یک تنظیم شود.</p>	<p>The weight revision option, $IWEIGHT$, must equal 0 or 1.</p>

منابع

- Alley, W.M. and Smith, P.E. 1982. Distributed routing rainfall-runoff model, Version II, Computer program documentation, User's manual: U.S. Geological Survey Open-File Report 82-344, 205 p.
- Bencala, K. 1983. Simulation of Solute Transport in a Mountain Pool-and-Riffle Stream With a Kinetic Mass Transfer Model for Sorption. *WATER RESOURCES RESEARCH*, 19(3): 732-738.
- Bencala, K. E., and Walters, R. A. 1983. Simulation of solute transport in a mountain pool-and riffle stream: a transient storage model. *Water Resource Research*, 19(3).pp 112–124.
- Broshears, R.E., Bencala, K.E., Kimball, B.A. and McKnight, D.M. 1993. Tracer-dilution experiments and solute-transport simulations for a mountain stream, Saint Kevin Gulch, Colorado: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 92-4081, 18 p.
- Chapra, S.C. and Canale, R.P. 1988. *Numerical methods for engineers* (2d ed.): New York, McGraw-Hill, 812 p.
- Dennis, J.E., Jr., Gay, D.M. and Welsh, R.E. 1981. An adaptive nonlinear least-squares algorithm: *Association for Computing Machinery, Transactions on Mathematical Software*, v. 7, no. 3, p. 348-368.
- Donaldson, J.R. and Tryon, P.V. 1990. User's guide to STARPAC—The standards, time series, and regression package: National Institute of Standards and Technology Internal Report NBSIR 86-3448.
- Draper, N.R. and Smith, H. 1981. *Applied regression analysis* (2d ed.): New York, John Wiley and Sons, 709 p.
- Fischer, H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger, J., and Brooks, N.H. 1979. *Mixing in inland and coastal waters*: San Diego, Academic Press, 483 p.
- Harrison, D. 1989. *Xgraph Version 11.3.2*: University of California, Berkeley.
- Harvey, J.W., Wagner, B.J., and Bencala, K.E. 1996. Evaluating the reliability of the stream tracer approach to characterize stream-subsurface exchange: *Water Resources Research*, v. 32, no. 8, p. 2441-2451.
- Henderson, F.M. 1966. *Open channel flow*: New York, Macmillan, 522 p.
- Jackman, A.P., Walters, R.A. and Kennedy, V.C. 1984. Transport and concentration controls for chloride, strontium, potassium and lead in Uvas Creek, a small cobble-bed stream in Santa Clara County,

- Jobson, H.E. 1989. User's manual for an open-channel streamflow model based on the diffusion analogy: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 89-4133, 73 p.
- Kimball, B.A., Broshears, R.E., Bencala, K.E. and McKnight, D.M. 1991. Comparison of rates of hydrologic and chemical processes in a stream affected by acid mine drainage, in U.S. Geological Survey Toxic Substances Hydrology Program—Proceedings of the technical meeting, Monterey, California, March 11-15, 1991, Mallard, G.E., and Aronson, D.A., eds.: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 91-4034, p. 407-412.
- Laenen, Antonius and Risley, J.C. 1997. Precipitation-runoff and streamflow-routing model for the Willamette River Basin, Oregon: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 95-4284, 252 p.
- Leavesley, G.H., Restrepo, P.J., Markstrom, S.L., Dixon, M. and Stannard, L.G. 1996. Modular Modeling System (MMS)—User's manual: U.S. Geological Survey Open-File Report 96-151.
- McKnight, D.M. and Andrews, E.D. 1993. Hydrologic and geochemical processes at the stream-lake interface in a permanently ice-covered lake in the McMurdo Dry Valleys, Antarctica: *Verhandlungen der Internationalen Vereinigung fuer Limnologie*, v. 25, p. 957-959.
- Morrice, J.A., Valett, H.M., Dahm, C.N. and Campana, M.E. 1997. Alluvial characteristics, groundwater-surface water exchange and hydrological retention in headwater streams: *Hydrological Processes*, v. 11, p. 253-267.
- Nordin, C.F. and Troutman, B.M. 1980. Longitudinal dispersion in rivers—The persistence of skewness in observed data: *Water Resources Research*, v. 16, no. 1, p. 123-128.
- Runkel, R.L. 1996. Solution of the advection-dispersion equation—Continuous load of finite duration: *Journal of Environmental Engineering, American Society of Civil Engineers*, v. 122, no. 9, p. 830-832.
- Runkel, R.L. and Bencala, K.E. 1995. Transport of reacting solutes in rivers and streams, in *Environmental Hydrology*, Singh, V.P., ed.: Dordrecht, The Netherlands, Kluwer, p. 137-163.
- Runkel, R.L. and Broshears, R.E. 1991. One-dimensional transport with inflow and storage (OTIS)—A solute transport model for small streams: Boulder, Colo., University of Colorado, CADSWES Technical Report 91-01, 85 p.

- Runkel, R.L. and Chapra, S.C. 1993. An efficient numerical solution of the transient storage equations for solute transport in small streams: *Water Resources Research*, v. 29, no. 1, p. 211-215.
- Runkel, R.L. and Chapra, S.C. 1994. Reply to Comment on “An efficient numerical solution of the transient storage equations for solute transport in small streams” by W.R. Dawes and David Short: *Water Resources Research*, v. 30, no. 10, p. 2863-2865.
- Runkel, R.L., McKnight, D.M. and Andrews, E.D. 1995. Transient storage in an Antarctic stream, 1995 Fall Meeting of the American Geophysical Union, San Francisco, Calif., December 11-15, 1995: *EOS*, v. 76, no. 46, p. 226.
- Rutherford, J.C. 1994. *River mixing*: Chichester, England, John Wiley and Sons, 347 p.
- Thackston, E.L. and Krenkel, P.A. 1967. Longitudinal mixing in natural streams: *Journal of the Sanitary Engineering Division, American Society of Civil Engineers*, v. 93, no. SA5, p. 67-90.
- Thackston, E.L. and Schnelle, K.B. 1970. Predicting effects of dead zones on stream mixing: *Journal of the Sanitary Engineering Division, American Society of Civil Engineers*, v. 96, no. SA2, p. 319-331.
- Valentine, E.M. and Wood, I.R. 1977. Longitudinal dispersion with dead zones: *Journal of the Hydraulics Division, ASCE*, v. 103, no. HY9, p. 975-990.
- Valett, H.M., Morrice, J.A., Dahm, C.N. and Campana, M.E. 1996. Parent lithology, surface-groundwater exchange, and nitrate retention in headwater streams: *Limnology and Oceanography*, v. 41, no. 2, p. 333-345.
- Wagner, B.J. and Gorelick, S.M. 1986. A statistical methodology for estimating transport parameters— Theory and applications to one-dimensional advective-dispersive systems: *Water Resources Research*, v. 22, no. 8, p. 1303-1315.

فصل ششم

پیوست‌ها

۶-۱- مقدمه

در این فصل از کتاب برای درک بهتر خوانندگان به تشریح پدیده انتقال و پراکندگی املاح در مجاری باز پرداخته خواهد شد. از سوی دیگر، به منظور رفع برخی ابهامات در خصوص چگونگی تعریف پارامترها به مدل عددی و همچنین تفسیر خروجی‌های مدل نیز به ارائه چند مثال کاربردی مبتنی بر مطالعات آزمایشگاهی پرداخته می‌شود. لازم به ذکر است که این فصل از کتاب خارج از مباحث ترجمه‌شده راهنمای OTIS بوده و صرفاً برای توضیحات تکمیلی تر جهت استفاده دانشجویان، محققان و سایر خوانندگان این کتاب ارائه گردیده است.

۶-۲- آلودگی در مجاری باز

رودخانه‌ها یکی از منابع اصلی تامین نیاز آبی بشر بوده و شناخت کیفیت آب آن‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است. پساب‌های کشاورزی و صنعتی، شیرابه ناشی از دفع زباله‌ها، فاضلاب‌های شهری و سایر آلودگی‌ها با ورود به رودخانه‌ها و آبراهه‌های طبیعی، کیفیت آب آن‌ها را دچار تهدید می‌کنند، لذا شناخت انواع آلودگی‌ها و همچنین، پیش‌بینی و مدل‌سازی کمی و کیفی نحوه جابجایی آن‌ها یکی از مهمترین مسائل در مهندسی زیست محیطی رودخانه‌ها می‌باشد. تحقیق و پژوهش در این خصوص به علت افزایش روزافزون جمعیت و صنعتی شدن دنیا از یک سو و همچنین بحران‌های ناشی از کم‌آبی از سوی دیگر، دارای اهمیت بیشتری نیز شده است. هنگامی که آلاینده‌ای همراه با مواد مذکور به داخل آب رها شود، به علت حرکت مولکولی و تلاطم و نیز غیریکنواختی سرعت در سطح مقطع جریان، در آب پخش و همراه با جریان آب جابجا می‌شود. مکانیسم پخش و حرکت آلاینده‌ها در آب، بخش مهمی از دانش محیط زیست است.

۶-۳- فرآیند حرکت آلاینده‌ها

باید دانست که انتقال آلاینده در آب، منحصرأً توسط جریان آب و سوار بر آن صورت نمی‌گیرد، بلکه بسته به غلظت آلاینده، این آلاینده در درون توده آب جاری به جنبش درآمده و به علت فرآیندهای پخشیدگی^۱ و پراکندگی^۲ در آب نیز جابه‌جا و پخش می‌شود (محمودیان‌شوشتری، ۱۳۸۷).

۶-۳-۱- پخشیدگی

اگر یک ماده مخلوط پذیر (املاح) در درون آب به طور یکنواخت توزیع نشده باشد، یک شیب غلظت از این ماده برقرار می‌شود و ماده مخلوط شده از نقطه یا نقاطی که غلظت آن بیشتر است به محلی که غلظت آن کمتر است انتقال می‌یابد. این انتقال را که در اثر شیب غلظت و حرکت مولکول‌ها و برخورد آن‌ها با یکدیگر و تغییر مسیر پیش می‌آید، پخشیدگی می‌نامند. می‌توان فرآیند پخشیدگی را به دو نوع پخشیدگی مولکولی^۳ و پخشیدگی متلاطم^۴ تقسیم کرد.

۶-۳-۱-۱- پخشیدگی مولکولی

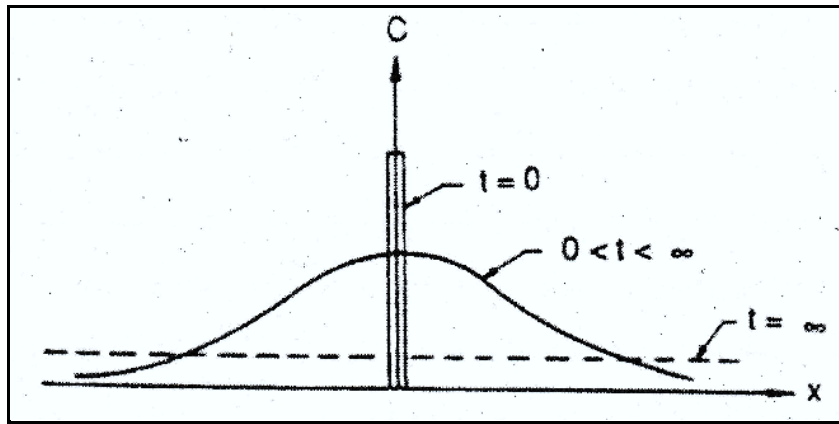
فرض کنید قسمتی از یک کانال دارای آب ساکن است، یک ماده ردیاب به طور آنی، در لحظه $t=0$ تزریق گردد. بلافاصله، پس از تزریق ردیاب یک شیب غلظت در طرفین چپ و راست مقطع تزریق به وجود می‌آید. بر اثر این شیب و فعالیت دائمی مولکول‌های مایع، ماده ردیاب به آهستگی به دو طرف مقطع تزریق حرکت کرده و منتشر شده که این فرآیند را پخشیدگی مولکولی می‌نامند. حرکت ماده ردیاب و همچنین تغییرات غلظت به علت پخشیدگی در شکل ۶-۱ نشان داده شده است (محمودیان‌شوشتری، ۱۳۸۷).

¹ Diffusion

² Dispersion

³ Molecular Diffusion

⁴ Turbulent Diffusion

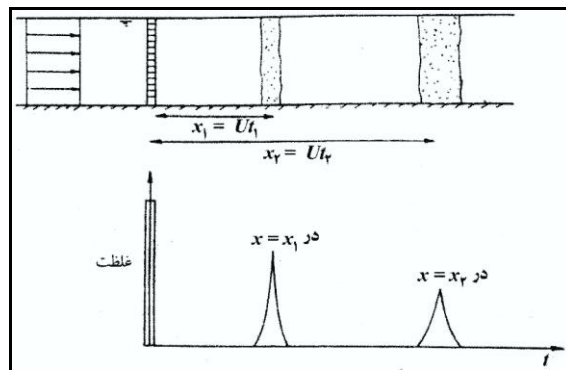


شکل ۶-۱- پخش مولکولی در آب ساکن (محمودیان شوشتری، ۱۳۸۷)

۶-۱-۳-۲- پخشیدگی متلاطم

فرض کنید که قسمتی از یک کانال دارای یک جریان یکنواخت (بدون داشتن شیب سرعت) و متلاطم، یک ماده ردیاب به طور آبی، در لحظه $t=0$ تزریق گردد. ماده ردیاب بلافاصله پس از تزریق، تحت تاثیر یک حرکت با سرعت یکنواخت و فرآیند پخشیدگی قرار می‌گیرد. شدت تلاطم، توانایی سیال را در انتشار ماده ردیاب خیلی بیش‌تر می‌کند. علت اختلاط ماده ردیاب در این شرایط، بخشی به فعالیت مولکولی و بخشی به حرکت درهم و برهم گرداب‌های متلاطم مربوط می‌شود. این بدان معنی است که انتشار ابر آلودگی^۱ نتیجه تاثیر دو فرآیند پخشیدگی مولکولی و پخشیدگی متلاطم است. به علت اینکه معمولاً بزرگی پخشیدگی متلاطم چندین مرتبه بزرگتر از پخشیدگی مولکولی است، در تحلیل جریان‌های متلاطم غالباً، از پخشیدگی مولکولی صرف‌نظر می‌شود. حرکت ماده ردیاب و همچنین، تغییرات غلظت به علت پخشیدگی به ترتیب در شکل ۶-۲ نشان داده شده است.

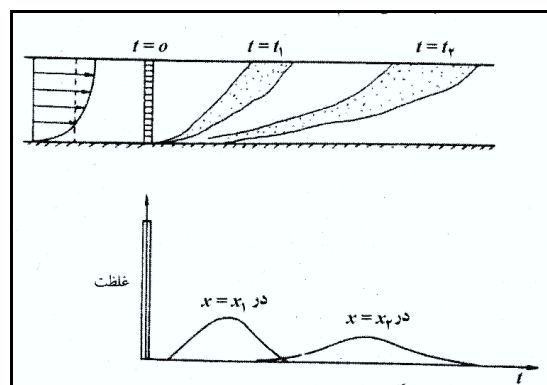
^۱ Contaminants Cloud



شکل ۶-۲- پخشیدگی متلاطم در جریان بدون شیب سرعت (محمودیان شوشتری، ۱۳۸۷)

۳-۱-۳-۶- پراکندگی (طولی)

فرض کنید که قسمتی از یک کانال که دارای یک جریان متلاطم با شیب سرعت، یک ماده ردیاب به طور آبی، در لحظه $t=0$ تزریق شده است. ماده ردیاب بلافاصله پس از تزریق، تحت تأثیر سرعت‌های مختلف در امتداد عمق (سرعت از کف تا سطح آب در امتداد عمق تغییر می‌کند) قرار می‌گیرد و همچنین، به علت پخشیدگی متلاطم در امتداد عمق، اختلاط جانبی صورت می‌گیرد. نتیجه ترکیب این دو فرآیند (پخشیدگی متلاطم و جریان با گرادیان سرعت) یک انتشار بزرگ‌تر در جهت طول صورت گرفته که در شکل ۳-۶ نشان داده شده است. در این شکل به علت پخشیدگی متلاطم، سرانجام ابر ردیاب تمام عمق را اشغال کرده و بعد از آن فقط یک کشیدگی و انتشار ماده در جهت طولی دیده می‌شود که به پراکندگی طولی^۱ شناخته می‌شود.



¹ Longitudinal Dispersion

شکل ۶-۳- پخشیدگی متلاطم در جریان با شیب سرعت (محمودیان شوشتری، ۱۳۸۷)

پراکندگی طولی، انتقال جرم همراه با غیریکنواختی توزیع سرعت در امتداد عمق است. در حقیقت فرآیند پراکندگی از یکنواخت نبودن سرعت ناشی می‌شود. تیلور^۱ (۱۹۵۳) نشان داده است که در یک جریان متلاطم، پخشیدگی متلاطم فقط حدود یک درصد و یا کمتر از پراکندگی کل را تشکیل می‌دهد. پیش‌تر نیز بیان شد که در جریان‌های متلاطم مشارکت پخشیدگی مولکولی در مقایسه با پخشیدگی متلاطم معنی‌دار نیست و لذا از آن‌ها صرف‌نظر می‌شود. اگرچه پراکندگی طولی از نظر مکانیسم عمل با پخشیدگی متفاوت است، ولی نتیجه‌ای مشابه هم دارند و آن توزیع غلظت ماده ردیاب در محیط می‌باشد. به علت تشابه تأثیر (و نه تشابه عمل و مکانیسم) پخشیدگی و پراکندگی یک ماده قابل حل، می‌توان این دو فرآیند را جمع‌پذیر تلقی کرد (تیلور، ۱۹۵۳).

۶-۴- معادله حاکم بر فرآیند پخشیدگی

بر اساس قانون اول فیک^۲، یک ماده محلول در آب ساکن به دلیل پخشیدگی مولکولی در جهت محور x حرکت می‌کند که بر اساس این قانون می‌توان نوشت:

$$q_{sx} = -D_x \frac{\partial c}{\partial x} \quad (۱-۶)$$

که در این رابطه: q_{sx} جرم عبوری محلول از واحد سطح در واحد زمان در جهت x ، D_x ضریب پخشیدگی مولکولی^۳ در جهت x ، c غلظت جرمی محلول و $\frac{\partial c}{\partial x}$ گرادیان غلظت جرمی محلول در جهت x می‌باشد. علامت منفی در رابطه فوق که به قانون اول فیک معروف است بیانگر آن است که جهت حرکت در جهت کاهش غلظت است.

رابطه پیوستگی یک بعدی در جهت x برای انتقال ماده به علت پخشیدگی مولکولی و یا پخشیدگی متلاطم از رابطه (۶-۲) به دست می‌آید.

$$\frac{\partial q_{sx}}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial t} = 0 \quad (۲-۶)$$

^۱ Taylor (1953)

^۲ Fick's Law

^۳ Molecular Diffusion Coefficient

که با قرارگیری رابطه (۲-۶) در رابطه (۱-۶)، معادله پخشیدگی که به قانون دوم فیک مرسوم است به دست می‌آید که در رابطه (۳-۶) ارائه شده است.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = Dx \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (۳-۶)$$

۶-۵- معادله پخشیدگی - جابجایی^۱:

با فرض حرکت یک جریان یک بعدی در یک کانال و تزریق آنی یک محلول آلودگی به درون جریان، ماده محلول همراه با سرعت جریان به سمت پایین دست حرکت می‌کند و پخش می‌شود. در جریان فوق، جرم کل عبوری محلول از واحد سطح در واحد زمان (q_{sx}) در جهت x ، جمع دو جرم جابجایی (cu) و جرم پخشیدگی ($-Dx \cdot \frac{\partial c}{\partial x}$) است و مطابق رابطه (۴-۶) می‌باشد:

$$q_{sx} = cu - Dx \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \quad (۴-۶)$$

با قرار دادن رابطه (۴-۶) در رابطه پیوستگی (رابطه ۲-۶)، رابطه (۵-۶) به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial c}{\partial x} = Dx \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (۵-۶)$$

رابطه (۵-۶) معادله پخشیدگی - جابجایی یک بعدی در جهت محور x است. در سمت چپ رابطه (۵-۶) یک جمله اضافی در مقایسه با رابطه (۳-۶) قرار دارد که به علت جابجایی آلودگی در جهت x است. معادله پخشیدگی - جابجایی برای جریان سه بعدی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial c}{\partial x} + v \cdot \frac{\partial c}{\partial y} + w \cdot \frac{\partial c}{\partial z} = Dx \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + Dy \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + Dz \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (۶-۶)$$

که در این رابطه: C غلظت متوسط ماده آلاینده (ماده ردیاب) در مقطع عرضی، t مدت زمان سپری شده بعد از تزریق آلودگی، x ، y ، z به ترتیب، جهت‌های طولی، عرضی و عمقی، u ، v ، w به ترتیب، مولفه‌های سرعت متوسط در جهت‌های x ، y ، z و D_x ، D_y ، D_z به ترتیب ضرایب پراکندگی در جهت‌های x ، y و z می‌باشند. معادله فوق شامل دو ترم بسیار مهم می‌باشد: ۱- ترم‌های جابجایی (advection): بعد از ترم

¹ Advection-Diffusion Equation

اول سمت چپ معادله فوق که تغییرات زمانی غلظت در یک نقطه را نشان می‌دهد سه ترم دیگر شامل جابجایی آلودگی در جهت‌های مختلف می‌باشند که ترم‌های انتقال نیز نامیده می‌شوند. ۲- ترم‌های پخشیدگی (diffusion): تمامی عبارات سمت راست رابطه (۶-۶) که انتشار جرم به دلیل وجود گرادبان سرعت در جهت‌های مختلف را نشان می‌دهند ترم‌های انتشار یا پراکندگی می‌باشند (چانسون^۱، ۲۰۰۴). با ورود آلودگی به رودخانه، ماده آلاینده تحت تأثیر جابجایی و پراکندگی قرار می‌گیرد که فرآیندهای جابجایی و پراکندگی ابر آلودگی را در جهت‌های عرضی، عمقی و راستای طولی جریان توسعه می‌دهند. با فاصله گرفتن از محل تزریق آلودگی، اختلاط در مقطع عرضی و عمقی کامل شده و تغییرات عمده و مهم غلظت در جهت طولی خواهد بود که در نتیجه رابطه (۶-۶) که یک معادله سه بعدی است، در عمل تبدیل به رابطه (۵-۶) که یک معادله یک بعدی است، تبدیل می‌شود. معادله حاکم بر پدیده انتقال و انتشار آلودگی در رودخانه‌ها، معادله پخشیدگی-جابجایی می‌باشد، اما همانگونه که پیشتر اشاره شد، به علت تشابه تأثیر (و نه تشابه عمل و مکانیسم) پخشیدگی و پراکندگی یک ماده قابل حل، می‌توان این دو فرآیند را جمع‌پذیر تلقی کرد، لذا اصطلاحاً به معادله انتقال و انتشار آلودگی در رودخانه‌ها و آب‌های سطحی، معادله جابجایی-پراکندگی^۲ (ADE) گفته می‌شود که از نوع معادلات دیفرانسیل جزئی سهموی بوده و از ترکیب معادله‌ی پیوستگی و قانون فیک به دست می‌آید. این معادله کاربردهای فراوانی در شبیه‌سازی پدیده‌های مهندسی آب دارد که از جمله می‌توان به شبیه‌سازی انتقال رسوب و انتشار آلودگی در رودخانه‌ها اشاره کرد.

۶-۵-۱- حل تحلیلی معادله جابجایی-پراکندگی (ADE)

برای حل تحلیلی معادله جابجایی-پراکندگی با توجه به مقدار غلظت اولیه آلاینده ورودی و همچنین نوع نحوه ورود آلودگی به سیستم (آنی، در یک بازه زمانی مشخص یا مداوم)، روش‌های متفاوتی وجود دارد. حل تحلیلی معادله جابجایی-پراکندگی در حالت یک بعدی (رابطه ۵-۶) با ضریب پراکندگی طولی (D_x) و سرعت جریان ثابت U و تزریق آلودگی M_0 در داخل یک کانال به سطح مقطع A صورت رابطه (۶-۷) می‌باشد (چانسون، ۲۰۰۴):

$$C(x, t) = \frac{M_0}{2A\sqrt{\pi D_x t}} \exp\left(-\frac{(x-Ut)^2}{4D_x t}\right) \quad (7-6)$$

¹ Chanson (2004)

² Advection-Dispersion Equation

۶-۶- ناحیه هایپریک^۱

رودخانه‌ها سیستم‌های پیچیده‌ای هستند که انواع فرآیندهای شیمیایی، بیولوژیکی و فیزیکی در آن‌ها اتفاق می‌افتد. هنگامی که جریان در مسیر رودخانه حرکت می‌کند، تبادل گرمی بین جریان رودخانه و بستر آن (محیط متخلخل) ایجاد می‌شود. ناحیه هایپریک، یک ناحیه اشباع بینابینی زیر بستر رودخانه و جداره‌های آن است که شامل بخشی از جریان رودخانه می‌باشد که به داخل بستر رودخانه نفوذ کرده است (بوآنو و همکاران^۲، ۲۰۱۴). اختلاط جریان‌های هایپریک به وسیله سلول‌های چرخشی‌ای رخ می‌دهد که جریان رودخانه را به سمت آبرفت هدایت می‌کنند (جریان‌های رو به پایین^۳)، مدتی در آنجا باقی می‌گذارند و دوباره به داخل رودخانه بازمی‌گردانند (جریان‌های رو به بالا^۴)، که مجموعه این عمل را تبادلات هایپریک^۵ می‌نامند (تونینا و بافنینگتن^۶، ۲۰۰۹). مدت زمانی که طول می‌کشد تا جریان رودخانه از بین رسوبات زیر بستر رودخانه عبور کند و دوباره به سطح باز گردد، زمان ماند^۷ تعریف می‌شود. تبادلات هایپریک، مواد محلول و معلق مانند مواد مغذی، آلاینده‌ها، کربن آلی و اکسیژن را به داخل ناحیه هایپریک حمل می‌کند و دوباره، به سطح جریان باز می‌گرداند (بافنینگتن و تونینا^۸، ۲۰۰۹). شکل ۴-۶ نمونه‌ای از تبادلات هایپریک در اثر تزریق ماده رنگی در ناحیه بستر رسوبی در یک مدل آزمایشگاهی را نشان می‌دهد.

¹ Hyporheic Zone

² Boano et al., (2014)

³ Downwelling

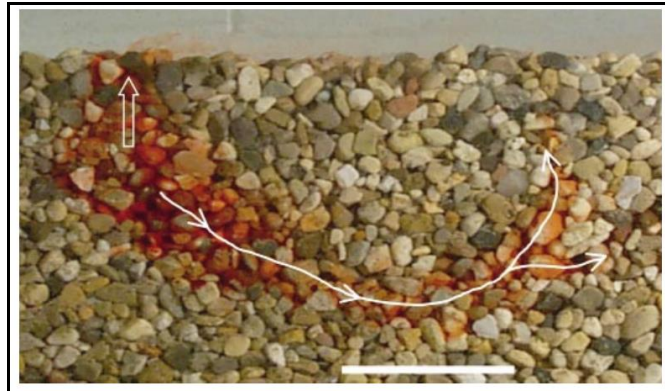
⁴ Upwelling

⁵ Hyporheic Exchange

⁶ Tonina and Buffington (2009)

⁷ Residence Time

⁸ Buffington and Tonina (2009)



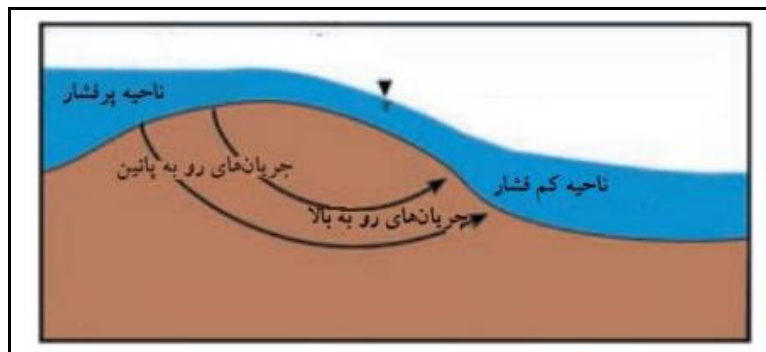
شکل ۶-۴- نمونه‌ای از تبدلات هایپریک در اثر تزریق ماده رنگی در ناحیه اصلی جریان به صورت آزمایشگاهی (پکمن و همکاران، ۱، ۲۰۰۴)

۶-۷- فرم بستر

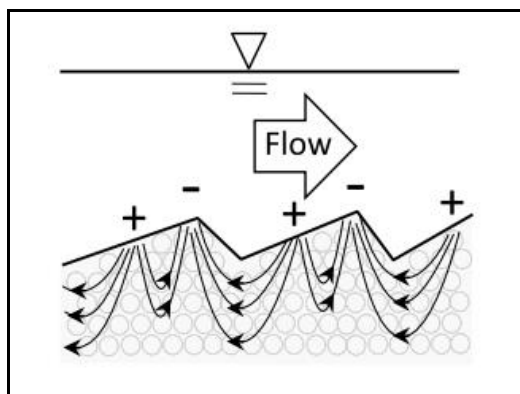
ناهمواری‌های بستر به شکل‌های مختلف، در بستر رودخانه در اثر حرکت جریان به وجود می‌آید و تأثیر مستقیمی روی زبری بستر و در نتیجه مقاومت جریان دارد (شفاعی‌بجستان، ۱۳۹۰). تبادل آب بین جریان‌های سطحی و ناحیه هایپریک به دلیل ایجاد اختلاف فشار می‌باشد که فرم‌های بستر یکی از عوامل موثر در ایجاد این اختلاف فشار می‌باشد. جریان هایپریک به دلیل گرادیان‌های فشار هیدرودینامیکی در امتداد فرم بستر ایجاد می‌شود، به طوری که در مناطق پرفشار، جریان به داخل فرم بستر هدایت شده و در مناطق کم‌فشار دوباره به داخل جریان برمی‌گردد (بیدولف^۲، ۲۰۱۵). شکل‌های ۶-۵ و ۶-۶ به ترتیب، نشان‌دهنده شکل‌گیری جریان‌های هایپریک در شرایط حضور فرم‌های بستر خیزاب-چالاب و تلماسه می‌باشند.

¹ Packman et al. (2004)

² Biddulph (2015)



شکل ۶-۵- نمای شماتیک تبدلات هایپریک در حضور فرم بستر خیزاب-چالاب (موحدی و همکاران، ۱۳۹۸)



شکل ۶-۶- نمای شماتیک تبدلات هایپریک در حضور فرم بستر تلماسه (گرنٹ و همکاران^۱، ۲۰۱۸)

۶-۸- مدل نگهداشت موقت (TSM)

وقتی که یک مقداری از ماده آلاینده در آبراهه طبیعی حرکت می‌کند، بخشی از جرم ماده حل شده وارد نواحی نگهداشت^۲ شده و در نتیجه، غلظت ماده حل شده در کانال اصلی رقیق می‌شود. بعد از این که ماده حل شده به طور کامل از آبراهه عبور کرد، نواحی نگهداشت موقت نقش منبعی از ماده حل شده در آبراهه را ایفا نموده و در نتیجه جرمی از ماده آلاینده که در این نواحی به طور موقتی، ذخیره شده بود، به کانال اصلی برمی‌گردد و موجب ایجاد یک دنباله پیش‌رونده در پروفیل غلظت مشاهداتی می‌گردد، لذا برای

^۱ Grant et al., (2018)

^۲ Dead Zone

شبه‌سازی دقیق فرایند انتقال ماده حل شده در چنین محیط‌هایی باید یکسری اصلاحات در نظر گرفت و از این روابط که تحت عنوان مدل نگهداشت موقت^۱ (مدل ذخیره موقت یا به اختصار TSM) نام برده می‌شود، برای چنین محیط‌هایی استفاده نمود (بانکالا^۲، ۱۹۸۳؛ بانکالا و والترز^۳، ۱۹۸۳).

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{Q}{A} \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(AD \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{q_L}{A} (C_L - C) + \alpha (C_s - C) \quad (7-6)$$

$$\frac{dC_s}{dt} = -\alpha \frac{A}{A_s} (C_s - C) \quad (8-6)$$

$$\beta = \frac{A_s}{A} \quad (9-6)$$

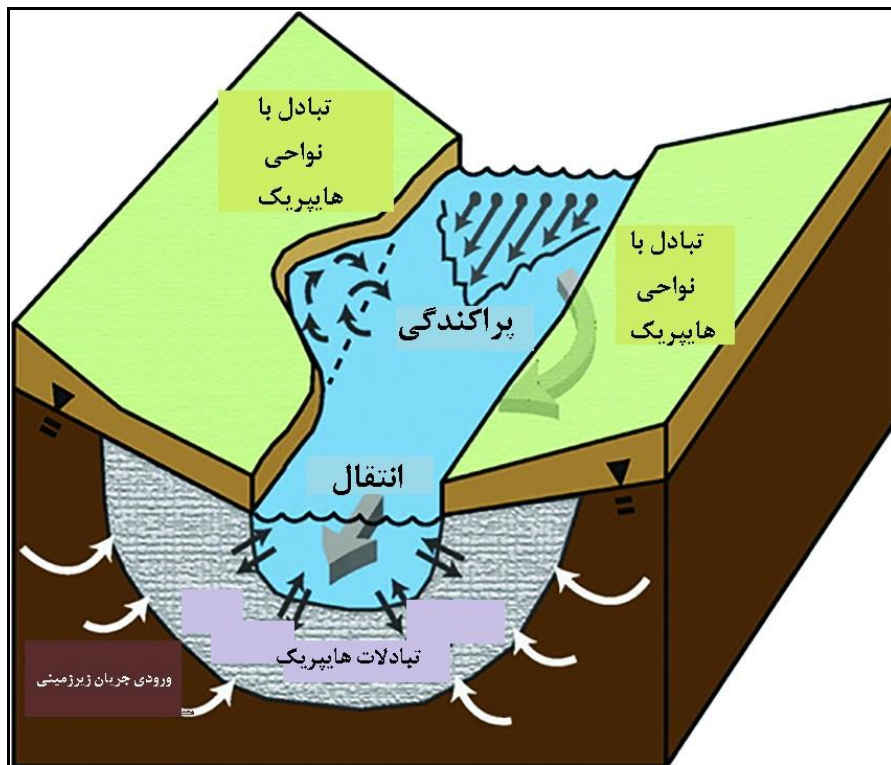
که در روابط فوق: A مساحت مقطع عرضی کانال اصلی $[L^2]$ ، A_s مساحت مقطع عرضی ناحیه‌ی نگهداشت $[L^2]$ ، C غلظت ماده‌ی حل شده در کانال اصلی C_L غلظت ماده‌ی حل شده در جریان ورودی جانبی $[M/L^3]$ ، C_s غلظت ماده‌ی حل شده در ناحیه‌ی نگهداشت $[M/L^3]$ ، D ضریب پراکندگی $[L^2/T]$ ، Q دبی جریان $[M/L^3]$ ، q_L دبی در واحد عرض جریان ورودی جانبی $[L^2/T]$ ، β نسبت مساحت ناحیه ذخیره به ناحیه اصلی جریان، t زمان $[T]$ ، X فاصله از محل تزریق آلودگی $[L]$ و α ضریب تبادل ناحیه‌ی نگهداشت $[1/T]$ می‌باشد.

شکل‌های ۶-۷ و ۶-۸ به‌منظور درک بهتر پدیده‌های انتقال-پراکندگی املاح همراه با تبادلات هایپرریک در یک آبراهه یا رودخانه ارائه شده‌اند. شکل ۶-۷ نحوه انتقال و همچنین، پراکندگی املاح در یک آبراهه یا رودخانه همراه با تبادلات هایپرریک جانبی و زیرزمینی را به‌صورت شماتیک نشان می‌دهد. شکل ۶-۸ نیز نحوه شکل‌گیری یک ناحیه هایپرریک و ورود املاح از جریان‌های زیرزمینی و جریان آبراهه به آن و همچنین تبادل به جریان آبراهه را نشان می‌دهد.

¹ Transient Storage Model (TSM)

² Bencala (1983)

³ Bencala and Walters (1983)



شکل ۶-۷- تصویرسازی شماتیک انتقال املاح در یک آبراهه همراه با ذخیره موقت در نواحی هایپرریک



شکل ۶-۸- شکل‌گیری نواحی هایپرریک در مسیر جریان یک آبراهه

۶-۹- جمع‌بندی

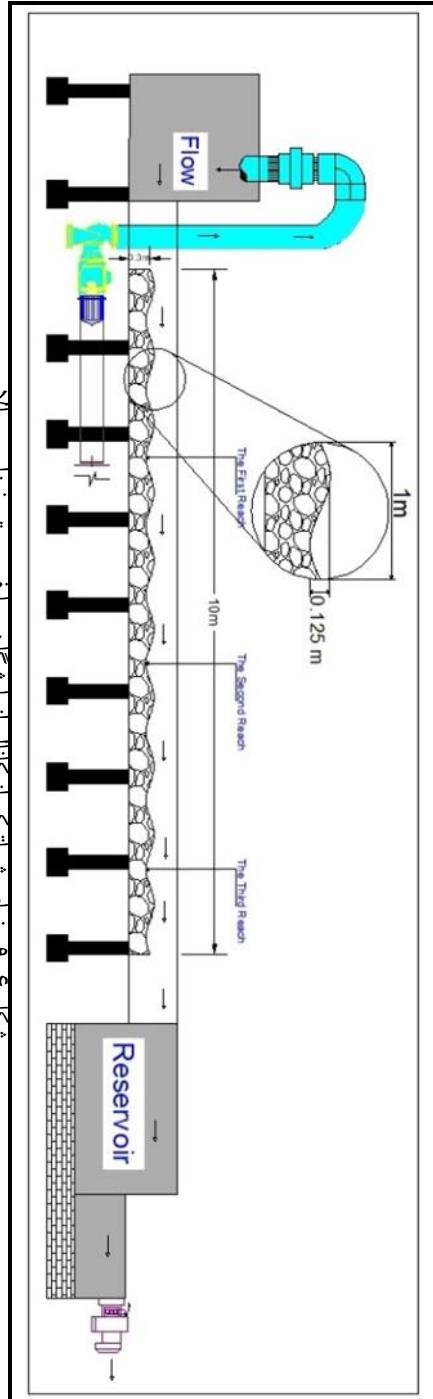
با توجه به موارد توضیح داده شده در فوق، فرآیند انتقال و پراکندگی آلودگی در مجاری روباز و نحوه کمی‌سازی آن، از مسائل مهم در روندیابی آلودگی‌ها می‌باشد. همچنین، تعیین ضرایب مربوط به انتشار آلودگی در حالت‌های خاص از ورود آلودگی و شرایط هیدرولیکی جریان با توجه به نوع فیزیوگرافی رودخانه از موارد بسیار مهم است. مواردی را در نظر بگیریم که وقتی یک آلودگی اعم از پساب‌های صنعتی کارخانه‌ها حوالی رودخانه، تخلیه فاضلاب‌های شهری، تخلیه شیرابه‌های ناشی از دفن زباله، فاضلاب‌های بیمارستانی، پساب‌های کشاورزی و سایر انواع آلودگی وارد جریان یک رودخانه شوند. الف) این که چه زمان این آلودگی به نقطه‌ای خاص در پایین‌دست می‌رسد؟ ب) پس از گذشت زمانی مشخص در چه نقطه‌ای از پایین‌دست قرار دارد؟ ج) بیشینه غلظت آلودگی در پایین‌دست در چه زمان و مکانی ایجاد می‌گردد؟ د) حداکثر زمان ماندگاری آلودگی در این رودخانه چه میزان است؟ برای پاسخ‌گویی به این سوالات باید علاوه بر مشخص شدن نحوه ورود آلودگی و مدت زمان تزریق به رودخانه، ضرایب پراکندگی آلودگی در رودخانه مدنظر نیز مشخص گردد.

۶-۱۰- مثال کاربردی

شبیه‌سازی نتایج آزمایش‌های انتقال املاح یا ماده ردیاب نیز یکی از کاربردهای مدل عددی OTIS بوده که می‌تواند مورد استفاده بسیاری از پژوهشگران این حوزه قرار گیرد. وجود فرم‌های بستر از جمله خیزاب-چالاب سبب خواهند شد تا تبدلات هاپیریک بیش‌تری بین ناحیه اصلی جریان و بستر رسوبی شکل گیرد و همین موضوع باعث خواهد شد تا شبیه‌سازی انتقال و پراکندگی املاح در آبراهه‌ها یا رودخانه‌ها با دشواری بیش‌تری همراه باشد، لذا در این بخش از کتاب به منظور درک بهتر خوانندگان از نحوه تعریف پوشه‌های ورودی، شبیه‌سازی انتقال و پراکندگی املاح غیرواکنشی با استفاده از یک‌سری آزمایش‌های جابه‌جایی املاح در بسترهای رسوبی با فرم بستر خیزاب-چالاب توسط مدل عددی OTIS-P انجام پذیرفت.

آزمایش‌های این پژوهش در کانال آزمایشگاهی با طول ۱۲ متر، عرض ۰/۵ متر و ارتفاع ۰/۷ متر با شیب طولی ۰/۰۰۶ با کف و دیواره‌هایی از جنس پلکسی‌گلس شفاف و دارای شاسی و کف فلزی واقع در آزمایشگاه هیدرولیک دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری انجام پذیرفت. برای بررسی دقیق‌تر نحوه انتقال و جابجایی آلودگی، طول کانال آزمایشگاهی به سه بازه مساوی تقسیم‌بندی و محاسبات برای هر یک از بازه‌ها به صورت جداگانه انجام پذیرفت. بازه اول به فاصله سه متری از ابتدای بستر رسوبی، بازه دوم به فاصله شش متری از ابتدای بستر رسوبی و بازه سوم به فاصله نه متری از ابتدای

بستر رسوبی در نظر گرفته شدند. از کلرید سدیم (NaCl) به عنوان ماده ردیاب استفاده شد. غیرواکنشی بودن این ماده با جریان اصلی و همچنین وجود تجهیزاتی به منظور اندازه‌گیری تغییرات غلظت، دلیل انتخاب این ماده به عنوان ردیاب بوده است. غلظت اولیه آلودگی از حل کردن ۲۴۰ گرم کلرید سدیم ۹۹ درصد در ۴ لیتر آب تهیه شد که این محلول به صورت آنی (لحظه‌ای) در نقطه‌ای به فاصله ۱ متر از بالادست شروع بستر رسوبی در جریان اصلی تزریق شده و برای ردیابی این ماده از حسگرهای اندازه‌گیری هدایت الکتریکی در پایین‌دست استفاده شد. بدین منظور دو حسگر اندازه‌گیری هدایت الکتریکی در انتهای هر بازه نصب شد. همچنین در جریان همراه با فرم بستر، حسگرها در گودترین نقاط بستر (خیزاب) قرار داده شدند. حسگرهای نصب شده در خط مرکزی جریان ۱ قابلیت اندازه‌گیری و ثبت هدایت الکتریکی جریان در هر ۲ ثانیه را به وسیله یک دستگاه ثبت داده متصل به رایانه دارند. میانگین هدایت الکتریکی ثبت شده در یک مقطع عرضی به عنوان هدایت آن مقطع در نظر گرفته شد. پیش از شروع آزمایش‌ها، یک رابطه واسنجی شده بین غلظت ماده ردیاب و هدایت الکتریکی برای هر یک از حسگرها استخراج شد و غلظت جریان با استفاده از این رابطه در هر ۲ ثانیه برای هر یک از آزمایش‌ها محاسبه گردید شکل ۶-۹ نمای شماتیک از کانال آزمایشگاهی مورد استفاده در این پژوهش را نشان می‌دهد.



شکل ۶-۹- نمای شماتیک از کانال آزمایشگاهی با فرم بستر خیراب- چالاب

۶-۱۰-۱- پوشه‌های ورودی‌ها

۶-۱۰-۱-۱- تعریف پوشه کنترل

همان‌طور که در بخش ۳-۴-۱ بیان شد، اولین پوشه ورودی تحت عنوان پوشه کنترل (Control File) برای تعیین نام پوشه‌های ورودی و خروجی استفاده می‌شود. نکته‌ای که می‌بایست در نظر داشت این است که برخلاف سایر پوشه‌های ورودی، نام این پوشه در داخل نرم‌افزار روی control.inp تنظیم شده است و نام آن به هیچ‌وجه قابل تغییر نیست، لذا این پوشه در این مثال با همین نام ذخیره گردید. در واقع، در این مثال، ۴ پوشه ورودی تحت عناوین q.inp، params.inp، data.inp و star.inp و همچنین، ۳ پوشه خروجی تحت عناوین params.out، star.out و solute.out نیز برای شبیه‌سازی عددی این مسأله تعریف شده‌اند. شکل ۶-۱۰ پوشه کنترل ساخته شده برای حل این مسأله را نشان می‌دهد.

```
#####
#
#           OTIS-P control file
#   SARI UNIVERSITY BY M.MIRNASERI (2020)
#
# line      name of the:
# ----      -
# 1         parameter file
# 2         flow file
# 3         data file
# 4         STARPAC input file
# 5         parameter output file
# 6         STARPAC output file
# 7         solute output file
# 8         sorption output file (ISORB=1 only)
#
#####
params.inp
q.inp
data.inp
star.inp
params.out
star.out
solute.out
```

شکل ۶-۱۰- پوشه کنترل تعریف شده

۶-۱۰-۲- تعریف پوشه پارامتر

دومین پوشه ورودی تحت عنوان پوشه پارامتر (Parameter File) برای تعیین گزینه‌های شبیه‌سازی، نوع شرایط مرزی و مشخص کردن پارامترهای مدل بوده که در طول اجرای برنامه ثابت می‌مانند. توضیحات کامل ردیف‌های ۱۷ گانه این پوشه در شکل ۶-۱۱ برای شبیه‌سازی مسئله مدنظر ارائه شده است.

```
#####
#
#
#           OTIS parameter file
#
#           SARI UNIVERSITY BY M.MIRNASERI (2020)
#
#
#####
#
M.MIRNASEI (2020) SANRU
1          |   PRTOPT
0.000556  |   PSTEP [hour]
0.000278  |   TSTEP [hour]
12.000000 |   TSTART [hour]
12.063333 |   TFINAL [hour]
0.0000000 |   XSTART [L]
0.0000000 |   DSBOUND [(L/sec) CU]
2          |   NREACH
#####
#
# Physical Parameters
#
#           for I = 1, NREACH
#
#NSEG RCHLEN  DISP   AREA2   ALPHA
# |         |         |         |
#####
30  3.0  0.08  0.042   0.002
30  3.0  0.10  0.042   0.002
#####
#
# Number of Solutes and flags for decay and sorption
#
# NSOLUTE (c.1-5) IDECAY (c.6-10) ISORB (c.11-15)
#
# | | |
#####
1  0  0
#####
# Print Information
#####
1  0          NPRINT (col.1-5) IOPT (col.6-10)
6          (PRTLOC for I = 1, NPRINT)
#####
```

```

#
# Boundary Conditions
#
#####
115 3      NBOUND (col.1-5) IBOUND (col.6-10)
#####
#      for I = 1,NBOUND
#
#USTIME  USBC (for i=1, NSOLUTE)
#      |      |      |
#####
12.000000      0.00
12.000556      0.00
12.001111      0.00
12.001667      0.00
12.002222      0.00
12.002778      0.00
12.003333      0.00
12.003889      0.00
12.004444      0.00
12.005000      0.00
12.005556      0.00
12.006111      0.00
12.006667      0.00
12.007222      0.37
12.007778      0.37
12.008333      4.52
12.008889      4.52
12.009444      4.52
12.010000      4.52
12.010556      8.75
12.011111      8.75
12.011667      17.44
12.012222      17.44
12.012778      21.91
.
.
.

```

شکل ۶-۱۱- پوشه پارامتر تعریف شده

عنوان پروژه در ورودی ردیف اول این پوشه تحت عنوان SANRU (M.MIRNASEI (2020) تعریف شده است. تعریف عنوان پروژه اختیاری بوده و برای تفکیک پروژه‌های کاربر در مراجعات بعدی کاربردی به نظر می‌رسد. از آنجایی که این پروژه با هدف شبیه‌سازی انتقال و پراکندگی ماده ردیاب (NaCl) در

ناحیه اصلی جریان بوده، لذا عدد ۱ برای ردیف PRTOPT وارد گردید. لازم به ذکر است با وارد کردن عدد ۲ برای ردیف PRTOPT می‌توان شبیه‌سازی ناحیه بستر رسوبی را نیز انجام داد. از آنجایی که برداشت‌های آزمایشگاهی ماده ردیاب این آزمایش برای هر بازه زمانی ۲ ثانیه بوده، لذا برای ردیف PSTEP مقدار عددی ۰/۰۰۰۵۵۶ ساعت برابر ۲ ثانیه در نظر گرفته شد. برای تعریف TSTEP هم بهترین راه میانگین زمانی مقادیر PSTEP می‌باشد، لذا مقدار ۰/۰۰۰۲۷۸ برای تعریف ردیف TSTEP در این مسأله تعیین گردید. زمان شروع شبیه‌سازی (TSTART) در این مسأله ساعت ۱۲ در نظر گرفته شد. البته لازم به ذکر است که انتخاب زمان شروع در اختیار کاربر بوده و می‌توان هر زمانی را برای شروع شبیه‌سازی پروژه در نظر گرفت، اما برای زمان پایان شبیه‌سازی (TFINAL) مناسب‌تر است بر مبنای داده‌های برداشتی تعیین نماییم. به فرض مثال در این پروژه زمان پایان شبیه‌سازی (TFINAL) با توجه به برداشت تعداد ۱۱۵ داده آزمایشگاهی غلظت ماده ردیاب در بالادست برای بازه زمانی هر ۲ ثانیه و با توجه به زمان شروع شبیه‌سازی (ساعت ۱۲) برابر ۱۲/۰۶۳۳۳ ساعت در نظر گرفته شد. در این مسأله، انتهای بازه اول، یعنی فاصله ۳ متری از ابتدای شروع بستر رسوبی را شرایط مرزی بالادست در نظر گرفتیم، لذا مقدار XSTART که همان فاصله سیستم مدل شده از مرز بالادست است، باید برابر صفر در نظر گرفته شود. همان‌طور که در بخش ۲-۶-۲ توضیح داده شد، برای تعیین مقدار DSBOUND یا همان شرایط مرزی پایین دست با در نظر گرفتن این فرض که غلظت املاح در بازه سوم دارای یک شیب غلظتی صفر بوده و تغییراتی بعد از این بازه رخ نمی‌دهد، برابر صفر در نظر گرفتیم. تعداد بازه‌هایی که باید توسط مدل عددی شبیه‌سازی گردد، نیز توسط ردیف NREACH تعریف می‌شود. لذا با توجه به این مسأله و این که هدف شبیه‌سازی بازه‌های دوم و سوم می‌باشد، مقدار عددی NREACH برابر ۲ تعریف گردید.

در این مسأله با توجه به این که طول هر بازه برابر ۳ متر بوده، لذا RCHLEN یا همان مقدار طول بازه برابر ۳ در نظر گرفته شدند. از طرف دیگر، مقدار NSEG را برابر ۳۰ در نظر گرفتیم؛ یعنی هر بازه به ۳۰ بخش ۰/۱ متری برای انجام محاسبات عددی مدل در نظر گرفتیم. در خصوص تعیین مقدار NSEG می‌بایست بیان داشت که تعیین این مقدار به کاربر بستگی دارد و باید خاطر نشان کرد که مقادیر بسیار زیاد این متغیر، یعنی این که بازه به بخش‌های بسیار کوچکی تقسیم‌بندی گردد که هم حجم محاسبات زیاد خواهد شد و هم گاهی، موجب ناپایداری در حل مسأله می‌گردد. البته در این شبیه‌سازی می‌توانستیم از مقادیر بالاتری برای NSEG نیز استفاده نماییم. حال باید متغیرهای DISP (ضریب پراکندگی طولی)، AREA2 (مساحت ناحیه نگهداشت) و ALPHA (ضریب تبادل ناحیه نگهداشت) را برای بازه مدنظر تعریف کنیم. تعریف این سه متغیر برای فرض اولیه بوده که مدل از این اعداد به صورت

مقادیر اولیه سعی و خطا در یافتن جواب بهینه آن‌ها استفاده خواهد کرد، لذا می‌توان مقادیر دیگری غیر از مقادیر تعریف شده را برای مدل در نظر گرفت. البته باید در نظر داشت که محدوده این متغیرها باید با واقعیت همخوانی داشته باشند، لذا اطلاعات اولیه از مبحث آلودگی و انتقال املاح و ضرایب حاکم بر معادلات آن ضروری به نظر می‌رسد. همچنین، می‌بایست توجه داشت که این ردیف (ردیف ۱۰) باید برای هر کدام از ۲ بازه مدل به صورت جداگانه تعریف شوند. البته مقادیر بازه‌ها می‌توانند متفاوت باشند، اما با توجه به این که در این مسأله بازه‌های مدنظر تفاوتی ندارند، لذا مقادیر یکسان ورودی‌های ردیف (۱۰) برای هر بازه را در نظر گرفتیم.

با توجه به این که در این مسأله یک نوع محلول NaCl به عنوان املاح مورد شبیه‌سازی می‌باشد، لذا مقدار NSOLUTE برابر ۱ در نظر گرفته شد و همچنین، مقادیر ضرایب جذب (ISORB) و زوال (IDECAY) با توجه به غیرواکنشی بودن کلریدسدیم نیز برابر صفر قرار داده شدند که در واقع با این نوع تعریف، مدل‌سازی جذب و زوال مدنظر نخواهد بود. با توجه به غیرواکنشی بودن املاح، ردیف‌های (۱۲) و (۱۳) نیز نیاز به تعریف در پوشه پارامتر نخواهند داشت، لذا در ورودی‌های شکل ۶-۱۱ نیز تعریف نشده‌اند.

با توجه به این که هدف ما در این مثال، شبیه‌سازی انتقال املاح در انتهای بازه سوم می‌باشد، لذا باید مقدار NPRINT یا همان تعداد مکان‌های مورد درخواست برای شبیه‌سازی توسط مدل را برابر ۱ قرار دهیم. از سوی دیگر، همان‌طور که در بخش ۳-۵-۴-۱۱ بیان شد، برای شبیه‌سازی‌هایی که طول بازه کوچک است، بهتر است که گزینه درون‌یابی برابر صفر در نظر گرفته شود، لذا گزینه درون‌یابی یا IOPT در همین ردیف را برابر صفر در نظر گرفتیم. مدل در این حالت با فاصله ۰/۱ متری از انتهای بازه سوم که همان مکان موردنظر ما برای شبیه‌سازی است، اقدام به تولید منحنی‌های رخنه خواهد کرد. از آنجایی که شبیه‌سازی انتقال املاح در ۶ متری پایین‌دست (انتهای بازه سوم) از شروع شرایط مرزی بالادست مدنظر می‌باشد، لذا مقدار PRTLOC یا همان مکان‌های چاپ نتایج شبیه‌سازی را می‌بایست برابر ۶ متر برای مدل تعریف کرد.

در آزمایش‌های انجام شده تعداد ۱۱۵ غلظت ماده ردیاب (NaCl) با فواصل زمانی ۲ ثانیه در انتهای بازه اول (شرایط مرزی بالادست) اندازه‌گیری شدند، لذا مقدار NBOUND در ورودی‌های پوشه پارامتر برابر ۱۱۵ تعریف شد. از سوی دیگر، مقدار IBOUND نیز با توجه به این که مقادیر برداشتی در شرایط مرزی بالادست از نوع غلظت-زمان بوده برابر با ۳ تعریف گردید. پس از تعریف مقادیر NBOUND و IBOUND در ردیف (۱۶) می‌بایست مقادیر شرایط مرزی بالادست را در مدل وارد کرد تا پوشه پارامتر کامل گردد. در ردیف (۱۷) از ساعت ۱۲ (زمان شروع شبیه‌سازی) با فواصل زمانی هر ۲ ثانیه

(۰/۰۰۰۵۵۶) می‌بایست مقادیر غلظت مشاهداتی را شرایط مرزی بالادست برای مدل تعریف نمود. لازم به ذکر است که در این ردیف می‌بایست تمامی ۱۱۵ مورد که در NBOUND وارد کرده بودیم، را برای مدل تعریف کنیم. لازم به ذکر است که مقادیر غلظت-زمان در انتهای شکل ۶-۱۱ به علت زیاد بودن داده‌ها ارائه نشده و شکل به صورت خلاصه شده می‌باشد.

۶-۱۰-۱-۳- تعریف پوشه جریان

پوشه جریان (Flow File) سومین پوشه‌ای است که باید برای شبیه‌سازی این مسأله تعریف گردد. این پوشه حاوی پارامترهایی از مدل مانند دبی جریان و سطح مقطع ناحیه اصلی جریان می‌باشد. نام پوشه‌های پارامتر و جریان از سوی کاربر در پوشه کنترل (control.inp) قابل تعریف بوده و کاربر می‌تواند نام دلخواهی برای هرکدام از این پوشه‌ها تعیین نماید که ما در این شبیه‌سازی، پوشه پارامتر را params.inp و پوشه جریان را q.inp نام‌گذاری کردیم. همچنین، می‌بایست توجه داشت که پسوند .inp برای پوشه‌هایی بوده که کاربر برای ورودی به مدل تعریف می‌کند و پوشه‌های با پسوند .out نیز برای پوشه‌هایی که مدل عددی OTIS-P یا OTIS-P تولید می‌کند. توضیحات کامل ردیف‌های ۳ گانه این پوشه در شکل ۶-۱۲ برای شبیه‌سازی مسئله مدنظر ارائه شده است.

```
#####
#
#          OTIS steady flow file
#
#  SARI UNIVERSITY BY M.MIRNASERI (2020)
#
#####
0.00      QSTEP [hour]
0.01      QSTART [L^3/second]
#####
#      for I = 1, NREACH
#
#QLATIN   QLATOUT   AREA   (CLATIN J=1,NSOLUTE)
#      |           |           |
#####
0.00     0.00     0.05525   0.00
0.00     0.00     0.05525   0.00
```

شکل ۶-۱۲- پوشه جریان تعریف شده

از آنجایی که مسأله مدنظر ما دارای یک رژیم جریان از نوع پایدار بوده و مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۵، پوشه جریان شامل دو پارامتر اصلی الف) دبی جریان حجمی (QSTART) و ب) مساحت مقطع عرضی ناحیه اصلی جریان (AREA) می‌باشد. برای تعریف پایدار بودن رژیم جریان برای مدل باید در ردیف اول پوشه جریان مقدار عددی QSTEP که همان میزان تغییرات در دبی جریان است، برابر صفر تنظیم گردد. دبی جریان در کانال آزمایشگاهی با استفاده از یک دبی‌سنج اولتراسونیک^۱ برابر ۱۰ لیتر بر ثانیه اندازه‌گیری شده بود، لذا در پوشه جریان برای ردیف (۲) مقدار QSTART برابر ۰/۰۱ مترمکعب بر ثانیه وارد گردید. همچنین، در این پوشه برای ردیف (۳) باید مقدار AREA یا همان مساحت مقطع عرضی ناحیه اصلی جریان در مدل وارد گردد. عمق جریان در کانال آزمایشگاهی به وسیله یک عمق-سنج اولتراسونیک^۲ برابر حدوداً ۱۱/۰۵ سانتی‌متر اندازه‌گیری شده بود، لذا با توجه به عرض کانال آزمایشگاهی که برابر ۰/۵ متر بوده است، مقدار AREA در ردیف (۲) برابر ۰/۵۵۲۵ مترمربع وارد گردید.

همچنین، با توجه به این که در این مسأله دارای جریان‌های جانبی ورودی یا خروجی نمی‌باشیم، لذا نیازی به تعریف پارامترهایی نظیر QLATIN دبی حجمی جریان جانبی ورودی، QLATOUT دبی حجمی جریان جانبی خروجی یا CLATIN غلظت املاح ورودی جانبی در ردیف (۳) نخواهد بود، اما اگر چنانچه در مسأله‌ای دارای این نوع جریان‌های جانبی بوده‌ایم، الزام به تعریف آن‌ها در هر یک از بازه‌ها به صورت جداگانه وجود خواهد داشت. از سوی دیگر، اگر چنانچه هدف، شبیه‌سازی رژیم جریان از نوع ناپایدار باشد، می‌بایست مطابق توضیحات بخش‌های ۳-۵-۵-۲-۳ و ۴-۴ اقدام به ساخت یک پوشه جریان از نوع ناپایدار نمود.

۶-۱۰-۱-۴- تعریف پوشه داده‌ها

چهارمین پوشه ورودی تحت عنوان پوشه داده‌ها (DATA File) بوده که همان‌طور که در بخش ۳-۵-۵-۱ بیان شد، این پوشه صرفاً برای مدل عددی OTIS-P بوده و در واقع، اطلاعات بیش‌تری برای مدل عددی به‌منظور تخمین پارامترهای مدل نگهداشت موقت (TSM) تعیین می‌کنیم. برای شبیه‌سازی این مسأله، پوشه data.inp برای پوشه ورودی داده‌ها می‌باشد. به‌طور کلی، برای ساخت پوشه داده‌ها دو حالت وجود دارد: الف) اگر نوع شبیه‌سازی مدنظر از نوع پایدار زمانی باشد (مراجعه شود به بخش ۲-۲-۳): در هر بازه تعریف‌شده برای مدل، غلظت املاح باید در فواصل مکانی مشخص در طول هر بازه

¹ Ultrasonic Flow Meter

² Ultrasonic Depth Gauge

تعریف گردد. ذکر این نکته لازم است که همه بازه‌های تعریف‌شده در پوشه پارامتر باید در این پوشه تعریف شوند و مقادیر غلظت مشاهداتی ثبت شوند. حال اگر چنانچه در بازه‌ای غلظت املاح ثبت نشده باشد، بازه مدنظر باید تعریف گردد، اما تعداد داده‌های مشاهداتی باید برابر صفر لحاظ گردد که همین امر برای مدل مشخص می‌کند که برداشت غلظت املاح در طول این بازه صورت نگرفته است. از سوی دیگر، باید توجه داشت که افزایش تعداد غلظت- مکان‌های مشاهداتی در هر بازه موجب افزایش دقت مدل OTIS-P برای رسیدن به جواب بهینه خواهد شد. (ب) اگر نوع شبیه‌سازی مدنظر از نوع متغیر زمانی باشد (مراجعه شود به بخش ۲-۴): در هر بازه تعریف‌شده برای مدل، غلظت املاح باید در فواصل زمانی اندازه‌گیری و در مدل تعریف شوند. ذکر این نکته لازم است که در این حالت هم مطابق حالت الف، همه بازه‌های تعریف‌شده در پوشه پارامتر باید در این پوشه نیز تعریف شوند و مقادیر غلظت مشاهداتی ثبت شوند. حال اگر چنانچه در بازه‌ای غلظت املاح ثبت نشده باشد، بازه مدنظر باید تعریف گردد، اما تعداد داده‌های مشاهداتی باید برابر صفر لحاظ گردد که همین امر برای مدل مشخص می‌کند که برداشت غلظت املاح در زمان‌های مختلف برای این بازه صورت نگرفته است. از سوی دیگر، باید توجه داشت که افزایش تعداد غلظت-زمان‌های مشاهداتی در هر بازه موجب افزایش دقت مدل برای رسیدن به جواب بهینه خواهد شد.

مسئله مدنظر ما در این شبیه‌سازی از نوع متغیر زمانی بوده، لذا حالت (ب) برای تعریف پوشه داده‌ها استفاده گردید. شکل ۶-۱۳ نحوه ساخت این پوشه به‌منظور تعریف بازه اول، تعداد داده‌های مشاهداتی و تغییرات غلظت-زمان داده‌های مشاهداتی را نشان می‌دهد. بازه اول مسئله در فاصله ۳ متری از شروع شرایط مرزی بالادست بوده و برداشت‌های آزمایشگاهی نیز در انتهای این بازه در فواصل زمانی هر ۲ ثانیه صورت گرفت، بنابراین برای تعریف پوشه داده‌ها، فاصله بازه اول برابر ۳ متر تعریف گردید که تحت عنوان Site 1 مشخص شده است. همچنین، فاصله بازه دوم برابر ۶ متر تعریف گردید که این بازه نیز تحت عنوان Site 2 مشخص شده است.

تعریف ۲ ردیف برای ساخت پوشه داده‌ها الزامی می‌باشد: الف) ردیف اول، تعداد داده‌های مشاهداتی: که با توجه به برداشت‌های آزمایشگاهی در این مسئله برای بازه اول تعداد ۱۱۵ داده و برای بازه دوم نیز همین تعداد داده برداشت گردید که عدد ۱۱۵ در ردیف اول هر بازه برای مدل تعریف شد. (ب) ردیف دوم: غلظت-زمان برداشت‌های آزمایشگاهی بوده که هر ۱۱۵ مورد به‌صورت جداگانه در هر بازه برای مدل تعریف شدند.

لازم به ذکر است که پوشه داده‌های ارائه شده در شکل ۶-۱۳ ادامه داشته و باید پس از تعریف ۱۱۵ داده غلظت-زمان مشاهداتی برای بازه اول به تعریف بازه دوم مطابق بازه اول اقدام شود. به‌طور کلی، برای

۶-۱۰-۱-۵- تعریف پوشه ورودی STARPAC

مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۷، پوشه ورودی STARPAC صرفاً برای زمانی که کاربرد دارد که هدف استفاده از مدل عددی OTIS-P باشد. این پوشه را تحت عنوان star.inp در پوشه ورودی کنترل برای این مسأله تعریف کردیم. همان‌طور که بیان شد، این پوشه دارای ۸ ردیف ورودی مختلف بوده که ردیف ۸ام این پوشه بدین‌منظور بوده که کاربران بتوانند تخمین پارامتر برای هر زیرمجموعه از پارامترهای ۱۰ گانه قابل تخمین (DISP, AREA, AREA2, ALPHA, LAMBDA, LAMBDA2, LAMHAT, LAMHAT2, RHO و KD) را درخواست نمایند. از آن‌جایی که موضوع شبیه‌سازی در این مسأله برای یک نوع محلول غیرواکنشی بوده، لذا پارامترهای شش‌گانه مبتنی بر جذب و زوال (LAMBDA, LAMBDA2, LAMHAT, LAMHAT2, RHO و KD) مدنظر برای تخمین نخواهند بود و در پوشه‌های ورودی نیز، مقادیر اولیه‌ای برای تخمین این موارد در نظر نگرفته بودیم. بنابراین مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۷-۲، مقدار متغیر اول ردیف ۸ام (IFIXED) را برای پارامترهای چهارگانه DISP, AREA, AREA2, ALPHA برابر صفر در نظر می‌گیریم و در واقع، بدین روش از مدل عددی درخواست تخمین این چهار پارامتر را خواهیم داشت. از سوی دیگر، مقدار عددی متغیر IFIXED در ردیف ۸ام را برای سایر پارامترهای شش‌گانه مبتنی بر جذب و زوال (LAMBDA, LAMBDA2, LAMHAT, LAMHAT2, RHO و KD) برابر ۱ در نظر می‌گیریم تا بدین روش نیز نبود درخواست تخمین این شش پارامتر را از مدل عددی نشان دهیم. هم‌چنین، برای تعریف متغیر دوم این ردیف (SCALE) نیز مطابق توضیحات بخش ۳-۵-۷-۲ پیشنهاد می‌شود تا مقدار آن روی عدد صفر تنظیم گردد تا بدین‌صورت مقادیر پیش‌فرض تخمین‌ها به‌صورت خودکار توسط الگوریتم NLS تعیین شوند و قبل از هر تکرار نیز به‌روزرسانی شوند. شکل ۶-۱۴ نحوه ساخت ردیف ۸ام این پوشه برای شبیه‌سازی مسأله مدنظر ما را نشان می‌دهد.

```
# For each of the ten model parameters, enter IFIXED (Integer, Col. 1-5)
# and SCALE (Floating Point, Col 6-18).
#
# IFXD SCALE
# | | IFIXED and SCALE for:
#-----
0 0.0D0 | Dispersion Coefficient, DISP
0 0.0D0 | Main Channel Cross-Sectional Area, AREA
0 0.0D0 | Storage Zone Cross-Sectional Area, AREA2
0 0.0D0 | Storage Zone Exchange Coefficient, ALPHA
1 0.0D0 | Main Channel First-Order Decay Coefficient, LAMBDA
1 0.0D0 | Storage Zone First-Order Decay Coefficient, LAMBDA2
```


1.D-5

#

For each of the ten model parameters, enter IFIXED (Integer, Col. 1-5)

and SCALE (Floating Point, Col 6-18).

#

شکل ۶-۱۵- تعریف ردیف‌های ۱ الی ۷ پوشه STARPAC (ویژه OTIS-P)

۶-۱۰-۱-۶- اجرای مدل عددی

اجرای مدل عددی OTIS-P بدین صورت بوده که می‌بایست همه پوشه‌های ورودی مورد نیاز مدل را مطابق شکل ۳-۴ تهیه کرد و سپس نرم‌افزار OTIS-P را در مسیر این پوشه‌ها در رایانه قرار داد. شکل ۶-۱۶ پوشه‌های مورد نیاز برای حل این مسأله به همراه نرم‌افزار OTIS-P را نشان می‌دهد.

Name	Date modified	Type	Size
CONTROL.INP	2/1/2025 7:38 PM	INP File	1 KB
DATA.INP	1/20/2025 10:43 AM	INP File	6 KB
OTIS-P.EXE	2/13/1998 11:38 AM	Application	368 KB
params.inp	1/19/2025 1:03 AM	INP File	5 KB
q.inp	2/1/2025 7:45 PM	INP File	1 KB
star.inp	2/1/2025 7:37 PM	INP File	2 KB

شکل ۶-۱۶- پوشه‌های ورودی به همراه نرم‌افزار OTIS-P

در ادامه، کلیک کردن نرم‌افزار OTIS-P منجر به اجرای مدل عددی شده و پوشه‌های خروجی نیز مطابق شکل ۳-۴ پس از گذشت مدت زمانی تولید خواهند شد. در خصوص پوشه‌های خروجی باید به چند نکته توجه داشت: الف) تعریف صحیح پوشه‌های ورودی برای شرط اصلی یک اجرای موفق و تولید پوشه‌های خروجی می‌باشد. ب) هریک از پوشه‌های خروجی نشان‌داده در شکل ۳-۴ در صورتی که به‌عنوان فرآیند تخمین و مدل‌سازی توسط کاربر خواسته شده باشد، ایجاد خواهند شد، به طور مثال، پوشه‌های مربوط به جذب برای این مسأله با توجه به غیرواکنشی بودن محلول در فرآیند شبیه‌سازی تولید نخواهند شد. ج) در صورتی که صرفاً پوشه echo.out تولید شده باشد یا سایر پوشه‌های تولیدشده حاوی محتویات نباشند، باید به انتهای پوشه echo.out به‌منظور رفع خطاهای ایجاد شده در تعریف ورودی‌ها مراجعه نمایید (فصل پنجم). د) هنگام اجرای نرم‌افزار یک صفحه سیاه مطابق شکل ۶-۱۷ روی صفحه رایانه ایجاد شده که نشان‌دهنده شروع حل توسط مدل عددی OTIS یا OTIS-P می‌باشد.

مدت زمان اجرای نرم‌افزار و تولید پوشه‌های خروجی، بستگی به میزان ورودی‌های تعریفی در مدل و حجم پروژه شبیه‌سازی داشته و معمولاً، از چند ثانیه تا چند دقیقه ممکن است زمان صرف گردد.



شکل ۶-۱۷- ایجاد صفحه سیاه پس از اجرای نرم‌افزار OTIS یا OTIS-P

شکل ۶-۱۸ پوشه‌های خروجی تولیدشده پس از اجرای نرم‌افزار OTIS-P را نشان می‌دهد. مقایسه شکل‌های ۶-۱۶ و ۶-۱۸ نشان می‌دهد که پوشه‌های echo.out, params.out, solute.out و star.out پس از اجرای مدل عددی OTIS-P در مسیر اجرای نرم‌افزار در رایانه تولید شده‌اند.

Name	Date modified	Type	Size
CONTROL.INP	2/1/2025 7:38 PM	INP File	1 KB
DATA.INP	1/20/2025 10:43 AM	INP File	6 KB
echo.out	2/1/2025 7:46 PM	OUT File	21 KB
OTIS-P.EXE	2/13/1998 11:38 AM	Application	368 KB
params.inp	1/19/2025 1:03 AM	INP File	5 KB
params.out	2/1/2025 7:46 PM	OUT File	6 KB
q.inp	2/1/2025 7:45 PM	INP File	1 KB
solute.out	2/1/2025 7:46 PM	OUT File	4 KB
star.inp	2/1/2025 7:37 PM	INP File	2 KB
star.out	2/1/2025 7:46 PM	OUT File	44 KB

شکل ۶-۱۸- پوشه‌های ورودی به همراه پوشه‌های خروجی تولیدشده پس از اجرای نرم‌افزار OTIS-P

لازم به توضیح است که مراحل اجرای مدل عددی OTIS و شبیه‌سازی‌های انجام‌شده با این نرم‌افزار نیز عیناً، مطابق توضیحات ارائه‌شده در خصوص روند اجرای مدل عددی OTIS-P می‌باشد. می‌بایست توجه داشت که پوشه‌های ورودی و همچنین، پوشه‌های خروجی تولیدشده در شبیه‌سازی با مدل عددی OTIS مطابق شکل ۳-۳ خواهد بود.

لازم به ذکر است که کاربران در هنگام اجرای هر یک از نرم‌افزارهای OTIS یا OTIS-P در ویندوزهای نسخه ۱۰ به بالا ممکن است با خطای ارائه‌شده در شکل ۶-۱۹ مواجه شوند. کاربران در این شرایط می‌توانند با انتخاب گزینه Run anyway یا همان اجرای نرم‌افزار از هر روشی، نرم‌افزارهای OTIS یا OTIS-P را اجرا نمایند.

همچنین، کاربران باید توجه داشته باشند که در برخی از نسخه‌های ویندوز (خصوصاً نسخه‌های ۱۰ و بالاتر) ممکن است که نرم‌افزار یا پوشه‌های مرتبط که یک فایل مخرب محسوب می‌شود، از راه آنتی‌ویروس‌های فعال شناسایی گردند. البته لازم به ذکر است که در هنگام فعال بودن آنتی‌ویروس‌ها هم موردی مبنی بر تخریب یا حذف پوشه‌ها یا نبود اجرای نرم‌افزارها مشاهده نشده است، اما به جهت اطمینان بیشتر توصیه می‌شود تا نسبت به خاموشی موقت آنتی‌ویروس‌های فعال در هنگام اجرای این نرم‌افزارها اقدام گردد.



شکل ۶-۱۹- پیام خطا هنگام اجرای نرم‌افزار در ویندوزهای نسخه ۱۰ به بالا

۶-۱۰-۲- پوشه‌های خروجی

۶-۱۰-۲-۱- پوشه echo.out

همان‌طور که در بخش قبلی نیز تشریح شد، اجرای نرم‌افزار OTIS یا OTIS-P موجب تولید یک‌سری پوشه‌های خروجی با پسوند *.out خواهد شد که این پوشه‌های خروجی برای این مثال کاربردی در شکل ۶-۱۷ نمایش داده شده است. پوشه echo.out اولین و مهم‌ترین پوشه‌ای است که بعد از اجرای نرم‌افزار باید به‌طور دقیق و کامل، توسط کاربران بررسی گردد. همان‌طور که در بخش ۳-۴-۱ نیز بیان شد، در واقع، این پوشه بیان‌گر کلیاتی از گزینه‌های شبیه‌سازی وارد شده توسط کاربر، پارامترهای ورودی مدل و سایر اطلاعات خواهد بود. از سوی دیگر، اهمیت این پوشه از این جهت نیز خواهد بود که هرگونه پیغام خطایی که احیاناً کاربر در حین اجرای مدل با آن مواجه شده باشد، نیز در انتهای این پوشه نمایش داده خواهد شد.

پوشه‌های ورودی و خروجی که پیش‌تر در پوشه کنترل توسط کاربر نام‌گذاری شده بودند، در ابتدای پوشه echo.out تحت عنوان I/O Files نمایش داده خواهد شد. بدین ترتیب، کاربر می‌تواند صحت نام‌گذاری پوشه‌های تعیین‌شده را کنترل نماید. خلاصه‌ای از متغیرهای ورودی توسط کاربر در پوشه‌هایی

نظیر پارامتر و جریان در ادامه پوشه echo.out تحت عنوان Input Data ارائه می‌گردد. گاهی، نبود رعایت فواصل بین متغیرهای تعریفی در یک ردیف موجب خواهد شد تا مدل اعداد ورودی توسط کاربر را به اشتباه دریافت نماید و همین امر سبب نبود شبیه‌سازی یا شبیه‌سازی اشتباه خواهد شد، لذا توصیه می‌گردد که همه متغیرهای ورودی که پیش‌تر تعیین شده بود، در این پوشه کنترل شوند تا این اطمینان حاصل شود که از یک سو متغیرها به‌درستی، برای مدل تعریف شده باشند و از سوی دیگر، مدل نیز به درستی متغیرهای تعریفی توسط کاربر را قرائت کرده است. اطلاعات تعیینی توسط کاربر در خصوص بازه‌های جریان (Reach Information)، بخش‌های تعریف‌شده (Number of Spatial Segments)، ضرایب تعیینی برای ناحیه نگهداشت (Storage Parameters)، املاح (Number of Solutes)، مکان‌های چاپ نتایج شبیه‌سازی (Printing Information)، نوع و مقدار جریان (Flow and Area)، گزینه جذب اگر در شبیه‌سازی مدنظر باشند (Sorption Option)، گزینه زوال اگر در شبیه‌سازی مدنظر باشند (Decay Option)، تعداد غلظت‌های شرایط مرزی بالادست (Boundary Condition Option) و شرایط مرزی بالادست (Upstream Boundary Conditions)، نوع شرایط مرزی تعیینی (Upstream Boundary Conditions) و شرایط مرزی بالادست (Upstream Boundary Conditions)، از جمله مواردی هستند که به‌صورت خلاصه در ادامه پوشه echo.out از طریق مدل به‌منظور کنترل و بررسی ورودی‌ها ارائه می‌گردد.

یک خلاصه کوتاه از مقادیری که قبلاً در پوشه star.inp توسط کاربر تعیین شده بود، تحت عنوان STARPAC Input Parameters در ادامه پوشه echo.out ارائه خواهد شد. همچنین، درخواست تخمین یا نبود تخمین هریک از پارامترهای ده‌گانه مدل نگهداشت موقت (TSM) نیز در ادامه محتویات این پوشه تحت عنوان Model Parameters ارائه خواهد شد. هریک از پارامترهایی که قبلاً درخواست تخمین آن داده شده باشد، تحت عنوان Estimated و هریک از پارامترهایی که قبلاً درخواست تخمین آن داده نشده باشد، تحت عنوان Fixed در این لیست خلاصه‌نویسی شده‌اند. در انتهای محتویات این پوشه نیز خلاصه‌ای از مقادیر زمان و غلظت داده‌های مشاهداتی تحت عنوان Observed Concentration Data برای هریک از بازه‌ها به‌صورت جداگانه مطابق آن‌چه در پوشه داده‌ها توسط کاربر تعریف شده بود، ارائه می‌گردد. مجدداً توصیه می‌گردد که کاربران پس از اجرای هریک از نرم‌افزارهای OTIS یا OTIS-P نسبت به بررسی مقادیر در پوشه echo.out به‌منظور کنترل صحت ورودی‌ها به‌عنوان اولین قدم در بررسی نتایج اقدام نمایند.

۶-۱۰-۲- پوشه star.out

همان‌طور که در بخش ۳-۴-۲ نیز تشریح شد، پوشه starpac.out از موارد تولیدی پس از اجرای نرم‌افزار OTIS-P خواهد بود. در ابتدای این پوشه تحت عنوان SUMMARY OF INITIAL

CONDITIONS نمایش داده خواهد شد. ادامه محتویات این پوشه در واقع، بیان‌گر تجزیه و تحلیل‌های آماری مربوط به داده‌های مشاهداتی و نتایج تخمینی توسط روش حداقل مربعات غیرخطی با مشتقات تقریبی عددی می‌باشد. در این پوشه، مقادیر مجموع باقی‌مانده مربع‌ها تحت عنوان RESIDUAL SUM OF SQUARES و همچنین، انحراف استاندارد باقی‌مانده تحت عنوان RESIDUAL STANDARD DEVIATION که برای هر بازه به صورت جداگانه و در انتهای محتویات مربوط به آن بازه ارائه شده دارای بیش‌ترین اهمیت برای کاربر خواهد بود.

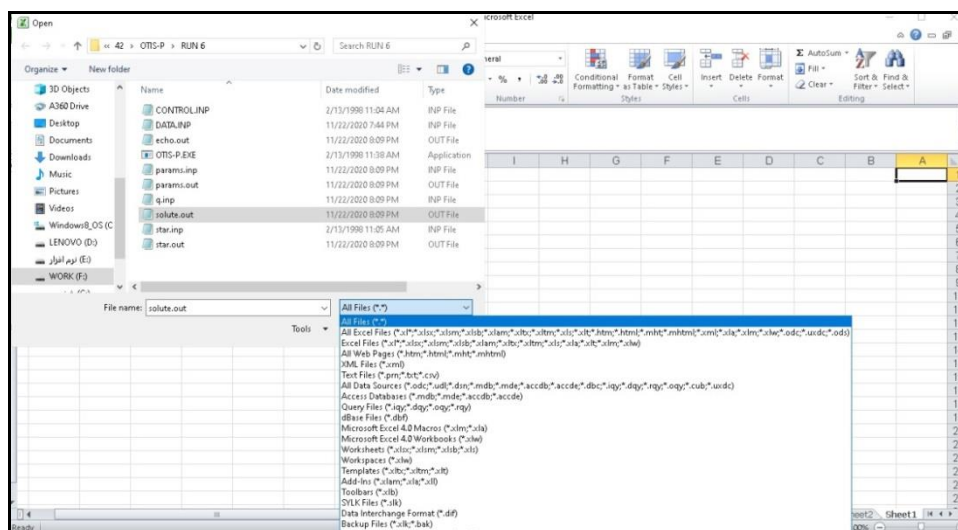
در خصوص اجرای نرم‌افزار OTIS-P و همچنین استفاده از پوشه starpac.out که در این مثال با نام star.out نام‌گذاری نمودیم، دو نکته را می‌بایست مدنظر قرار داد: الف) اجرای نرم‌افزار OTIS-P تا دستیابی به کم‌ترین مقدار RSS یا همان RESIDUAL SUM OF SQUARES ادامه دهید. ب) در صورتی که تغییری در مقدار RSS دو اجرای متوالی مشاهده نشد، اجرای نرم‌افزار را پایان دهید و آن را برای نتیجه نهایی استفاده نمایید (مراجعه به بخش ۴-۵ مربوط به مثال کاربردی پنجم). لازم به ذکر است که در این مسأله نیز اجرای نرم‌افزار OTIS-P را تا رسیدن به کم‌ترین مقدار RSS در اجرای ششم ادامه دادیم.

۶-۱۰-۲- پوشه‌های solute.out و params.out

دو پوشه خروجی پارامتر و املاح که در این مسأله تحت عنوان‌های params.out و solute.out نام‌گذاری شده‌اند، نشان‌دهنده نتایج نهایی شبیه‌سازی و در واقع مهم‌ترین پوشه‌های اجرای نرم‌افزار OTIS-P می‌باشند.

پوشه خروجی پارامتر که در این مسأله params.out نام‌گذاری کرده‌ایم، حاوی تخمین‌های نهایی هریک از پارامترهای ده‌گانه مدل نگهداشت موقت خواهد بود که پیش‌تر کاربر در پوشه starpac.in درخواست نموده است. همان‌طور که پیش‌تر نیز تشریح شد، این مسأله با هدف تخمین چهار پارامتر DISP، AREA2، AREA، ALPHA بوده، لذا پوشه خروجی پارامتر نیز حاوی تخمین‌های مرتبط با این چهار پارامتر بوده است. لازم به تذکر است که این پوشه برای هر بازه دارای مقادیر نهایی تخمین پارامترها به صورت جداگانه تحت عنوان Estimated Parameters, Reach # 1 یا Estimated Parameters, Reach # 2 می‌باشد. تخمین اولیه هر یک از پارامترها در واقع، بر مبنای همان مقدار اولیه‌ای بوده که کاربر در پوشه‌های پارامتر و جریان برای مقادیر ورودی برای مدل تعریف نمود، لذا تعریف مقادیر نسبتاً معقول برای هریک از این پارامترهای ده‌گانه در تخمین درست‌تر و سریع‌تر و همچنین دستیابی به یک شبیه‌سازی صحیح لازم به نظر می‌رسد که این موضوع نیاز به تجربه و شناخت کافی از موضوع انتقال و پراکندگی املاح در مجاری باز خواهد داشت. نمونه‌ای از تخمین

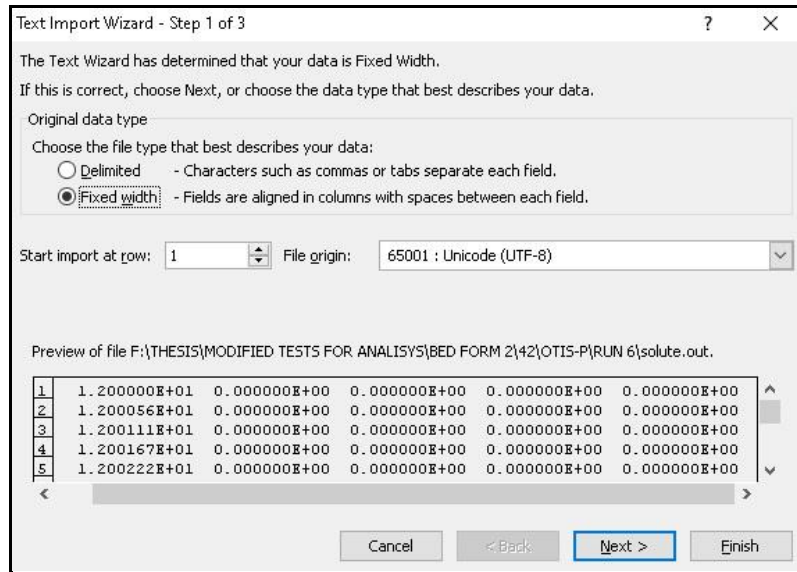
این پوشه در واقع، حاوی میزان غلظت املاح مختلف (در صورت وجود املاح متفاوت) در زمان‌های مختلف برای مکان‌های تعیین شده توسط کاربر خواهد بود. مبنای زمان شروع و پایان شبیه‌سازی بر پایه اعداد تعریف شده TSTART و TFINAL توسط کاربر در پوشه پارامتر و فواصل زمانی شبیه‌سازی نیز بر مبنای PSTEP تعریف شده در همان پوشه پارامتر می‌باشد. از سوی دیگر، تعداد مکان یا مکان‌های ارائه نتایج شبیه‌سازی نیز مطابق اعداد تعریف شده برای ردیف NPRINT در پوشه پارامتر و فاصله این مکان یا مکان‌ها نیز بر مبنای عدد یا اعداد تعریف شده برای PRTLLOC در همان پوشه پارامتر می‌باشد. نکته حائز اهمیت که کاربران برای استفاده بهتر از نتایج شبیه‌سازی املاح در پوشه solute.out در نظر داشته باشند، این است که محتویات این پوشه قابلیت فراخوانی در محیط نرم‌افزار EXCEL را دارند. کاربران توجه داشته باشند که به منظور آن که پوشه‌های ورودی یا خروجی در محیط نرم‌افزار EXCEL برای فراخوانی نشان داده شوند، باید گزینه All files را مطابق شکل ۶-۲۱ انتخاب نمایند.



شکل ۶-۲۱- نحوه فراخوانی پوشه solute.out در نرم‌افزار EXCEL

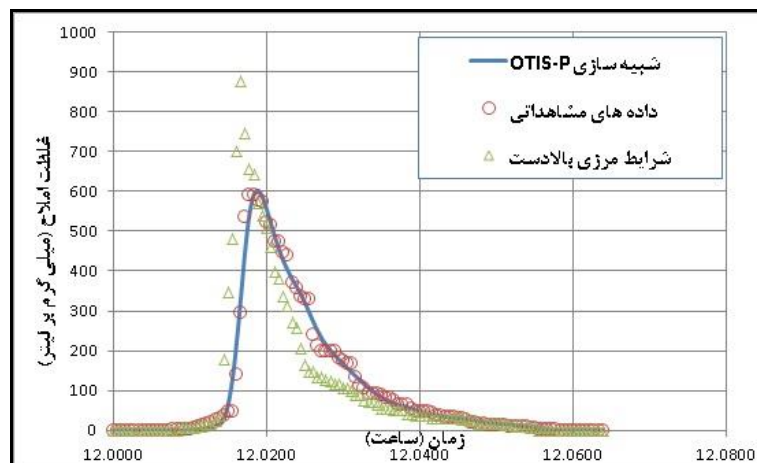
با توجه به این که محتویات پوشه‌های ورودی و خروجی نرم‌افزارهای OTIS یا OTIS-P به صورت پیش فرض در محیط نرم‌افزار Notepad تعریف و اجرا می‌شوند، لذا به منظور فراخوانی درست محتویات در محیط نرم‌افزار EXCEL می‌بایست تنظیمات نشان داده در شکل ۶-۲۲ را هنگام بازکردن پوشه solute.out انتخاب کرد. در واقع، انتخاب گزینه Fields are aligned in columns with spaces

between each field سبب خواهد شد تا زمان و غلظت املاح هر کدام در ستون‌های مجزا در نرم‌افزار EXCEL تعریف شوند.



شکل ۶-۲۲- تنظیمات نرم‌افزار EXCEL پس از فراخوانی پوشه solute.out

نتیجه نهایی شبیه‌سازی انتقال املاح در انتهای ناحیه جریان بازه سوم برای این مسأله در شکل ۶-۲۳ ارائه شده است. لازم به ذکر است همان‌گونه که در بخش ۳-۵-۴-۲ نیز تشریح شد، با تعریف عدد ۲ مربوط به گزینه PRTOPT می‌توان نتایج شبیه‌سازی مربوط به ناحیه بستر رسوبی را نیز در اختیار داشت که البته هدف شبیه‌سازی این مسأله نبوده است.



شکل ۶-۲۳- نتایج نهایی شبیه‌سازی توسط مدل عددی OTIS-P

۱۱-۶- منابع

- شفاعی بچستان، م. ۱۳۹۰. مبانی نظری و عملی هیدرولیک انتقال رسوب. انتشارات دانشگاه شهید چمران اهواز، ۵۴۹ ص.
- محمدی، م. ع. ۱۳۸۶. هیدرولیک جریان در کانال‌ها و رودخانه‌ها. انتشارات دانشگاه ارومیه، ۶۵۶ ص.
- محمودیان شوشتری، م. ۱۳۸۹. اصول جریان در مجاری روباز، جلد دوم. انتشارات دانشگاه شهید چمران اهواز، ۵۰۰ ص.
- موحدی، ن.، دهقانی، ا. ا.، ترات، ن. و مفتاح‌هلقی، م. (۱۳۹۸). بررسی آزمایشگاهی و عددی تبادلات هایپرریک در حضور فرم بستر خیزاب و چالاب. نشریه اکوهیدرولوژی، ۶ (۱): ۲۰۴-۱۹۱.
- Bencala, K. E., and Walters, R. A. 1983. Simulation of solute transport in a mountain pool-and riffle stream: a transient storage model. *Water Resource Research*, 19(3), 112-124.
- Bencala, K.E. and Walters, R.A. 1983. Simulation of solute transport in a mountain pool-and-riffle stream—A transient storage model: *Water Resources Research*, v. 19, no. 3, p. 718-724.
- Biddulph M. 2015. Hyporheic Zone: In Situ Sampling, *Geomorphological Techniques*. Chapter 3, Section 11.1.
- Boano F, Harvey JW, Marion A, Packman AI, Revelli R, Ridolfi L, Wörman A. 2014. Hyporheic flow and transport processes: Mechanisms, models, and biogeochemical implications. *Reviews of Geophysics*, 52(4), 603-679.

- Buffington JM, and Tonina D. 2009. Hyporheic exchange in mountain rivers II: Effects of Channel Morphology on Mechanics, Scales, and Rates of Exchange. *Geography Compass*, 3(3), 1038-1062.
- Chanson, H. (2004). *Environmental hydraulics of open channel flows*. Elsevier Butterworth-Heinemann Linacre House, Jordan Hill, Oxford.
- Grant, S. B., Stewardson, M. J., & Marusic, I. (2012). Effective diffusivity and mass flux across the sediment-water interface in streams. *Water Resources Research*, 48(5), 1-16.
- Taylor, G. I. 1953. Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proc. R. Soc. London Ser. A*, 219, 186–203.
- Tonina D, Buffington JM. 2009. Hyporheic exchange in mountain rivers I: Mechanics and environmental effects. *Geography Compass*, 3(3), 1063-1086.

فهرست نمایه‌ها

ا

استرانسیوم.....	۸۵، ۸۴
اعتبارسنجی.....	۱۰۳
املاح غیر واکنشی.....	۱۲، ۴۰، ۴۱، ۵۶، ۸۳، ۸۴
املاح واکنشی.....	۱۰، ۴۰، ۴۱، ۵۶، ۸۳
انتشار.....	۶، ۱۲، ۱۱۶، ۱۱۹، ۱۲۰، ۱۲۵
انتقال املاح.....	۱۰، ۱۱، ۱۲، ۱۷، ۱۹، ۲۴، ۲۸، ۳۱، ۳۳، ۳۴، ۴۰، ۴۱، ۴۴، ۴۹، ۵۲، ۵۹، ۷۸، ۸۷، ۹۶، ۱۲۴، ۱۲۵، ۱۳۲، ۱۴۷
انتقال جرم مرتبه اول.....	۱۶
اولتراسونیک.....	۱۳۴

آ

آبراهه.....	۱۲، ۱۳، ۱۵، ۱۶، ۱۸، ۱۹، ۲۱، ۳۱، ۳۳، ۴۵، ۶۳، ۶۵، ۷۱، ۷۲، ۷۸، ۷۹، ۸۰، ۸۳، ۸۴، ۸۵، ۸۷، ۸۸، ۹۰، ۹۴
آبراهه یواس کریک.....	۸۰، ۹۶، ۹۷، ۹۸، ۱۰۳، ۱۲۲، ۱۲۳، ۱۲۴
آزمون وخطا.....	۱۰، ۱۳، ۳۳
آلودگی.....	۲۲، ۵۵، ۷۹، ۱۱۴، ۱۱۶، ۱۱۸، ۱۱۹، ۱۲۰، ۱۲۳، ۱۲۵، ۱۲۶، ۱۳۲

پ

پایدار زمانی.....	۱۳، ۲۱، ۲۲، ۴۱، ۷۰، ۱۳۴
پخشیدگی.....	۱۱۴، ۱۱۵، ۱۱۶، ۱۱۷، ۱۱۸، ۱۱۹
پراکندگی.....	۲، ۱۵، ۱۶، ۱۸، ۲۳، ۴۱، ۴۸، ۵۵، ۵۷، ۵۸، ۸۶، ۸۷، ۹۱، ۱۱۴، ۱۱۶، ۱۱۷، ۱۱۹، ۱۲۰، ۱۲۳، ۱۲۵، ۱۳۱، ۱۴۵، ۱۴۶
پروفیل غلظت پله‌ای.....	۱۳، ۶۱، ۶۲، ۸۰
پروفیل غلظت پیوسته.....	۱۳، ۶۲

ت

تفاضلات محدود.....	۱۰، ۲۳، ۳۰
تقریب تفاضل مرکزی.....	۲۵
تلماسه.....	۱۲۱، ۱۲۲

ج

جابجایی.....	۱۵، ۱۶، ۹۷، ۱۱۴، ۱۱۸، ۱۱۹، ۱۲۰، ۱۲۶
--------------	-------------------------------------

جذب ۱۰، ۱۲، ۱۸، ۱۹، ۲۰، ۴۰، ۴۱، ۴۷، ۴۹، ۵۰، ۵۱، ۵۶، ۵۸، ۷۶، ۸۰، ۸۳، ۸۴، ۸۵، ۱۰۵، ۱۳۲، ۱۳۷، ۱۳۹، ۱۴۳

جذب جنبشی..... ۱۲
 جریان جانبی خروجی..... ۱۶، ۱۸، ۶۵، ۱۳۴
 جریان جانبی ورودی..... ۱۶، ۱۸، ۱۹، ۴۹، ۶۵، ۶۸، ۶۹، ۸۸، ۱۳۴
 جریان دائمی..... ۹۰
 جریان‌های جانبی..... ۱۰، ۱۲، ۴۱، ۴۲، ۶۸، ۱۳۴
 جریان‌های دائمی..... ۸۷، ۸۸
 جریان‌های غیردائمی..... ۸۷، ۸۸، ۱۰۳، ۱۰۴

ح

حالت پایدار زمانی..... ۱۳، ۲۱، ۳۰، ۳۴، ۴۱، ۵۲، ۷۱
 حداقل مربعات خطا..... ۴۷
 حداقل مربعات غیرخطی..... ۳۴، ۳۵، ۴۰، ۴۳، ۷۰، ۹۱، ۱۴۴
 حل تحلیلی..... ۸۷، ۱۲۰

خ

خیزاب-چالاب..... ۷۸، ۱۲۱، ۱۲۲، ۱۲۵

د

دبی جریان حجمی..... ۱۸، ۱۹، ۶۲، ۶۴، ۶۵، ۱۳۴
 دبی حجمی جریان..... ۸۰، ۸۸، ۱۳۴
 درون‌یابی..... ۱۳، ۵۲، ۵۳، ۵۴، ۵۹، ۶۰، ۶۲، ۶۷، ۶۸، ۷۹، ۸۰، ۱۰۵، ۱۰۶، ۱۳۲

ر

ردیاب..... ۱۰، ۱۳، ۳۳، ۷۸، ۸۰، ۸۳، ۸۴، ۸۸، ۹۱، ۹۷، ۱۱۵، ۱۱۶، ۱۱۷، ۱۱۹، ۱۲۵، ۱۲۶، ۱۳۱، ۱۳۲
 رژیم جریان پایدار..... ۴۲، ۶۴، ۶۸، ۶۹، ۸۰
 رسوب بستر..... ۲۰، ۲۱، ۲۶، ۲۷، ۲۸، ۳۰
 رگرسیون غیرخطی..... ۱۰، ۱۳
 رودخانه ع..... ۱۲، ۱۳، ۱۵، ۱۸، ۱۹، ۲۰، ۲۱، ۲۶، ۲۸، ۳۰، ۳۱، ۳۳، ۵۳، ۵۹، ۶۳، ۶۵، ۷۱، ۷۲، ۸۴، ۹۱، ۹۲، ۹۴، ۹۶، ۹۷، ۱۱۹، ۱۲۰، ۱۲۱، ۱۲۳، ۱۲۵

ز

زوال مرتبه اول..... ۱۰، ۱۲، ۱۳، ۱۸، ۱۹، ۲۰، ۴۰، ۴۱، ۵۶، ۵۷، ۵۸، ۷۶، ۸۶، ۸۷، ۹۷
 زهکشی..... ۹۶

ژ

ژئوشیمی ۵۶

س

سازمان زمین‌شناسی آمریکا ۱۲

سیستم مدل‌سازی پودمانی ۸۸

ش

شار ورودی پله‌ای ۱۳

شرایط مرزی ... ۱۳، ۲۱، ۳۱، ۳۲، ۳۳، ۴۵، ۴۶، ۴۹، ۵۲، ۵۳، ۵۴، ۶۰، ۶۱، ۶۲، ۶۳، ۶۴، ۶۵، ۶۷، ۷۹، ۸۰، ۹۰، ۹۱، ۹۲، ۱۰۳، ۱۰۴، ۱۰۵، ۱۲۸، ۱۳۱، ۱۳۲، ۱۳۵، ۱۴۳

شرایط مرزی پایین‌دست ۳۲، ۳۳، ۵۳، ۷۹، ۱۰۴، ۱۳۱

شیب غلظتی صفر ۳۲، ۱۳۱

ص

صریح ۲۴، ۲۶، ۲۸، ۲۹، ۳۰

ض

ضریب پخش ۲۰، ۵۸، ۵۹، ۷۶

ضریب پراکندگی ۱۹، ۳۲، ۴۴، ۵۵، ۷۶، ۷۹، ۹۴، ۱۲۰، ۱۳۲

ضریب تبادل ناحیه نگهداشت ۱۹، ۵۵، ۵۶، ۷۶، ۷۹، ۹۴، ۱۳۲

ضریب زوال مرتبه اول ۵۷، ۷۶

ضمنی ۲۴، ۲۶، ۲۷

غ

غلظت املاح در بستر رسوبی ۸۵

غلظت-زمان ۹۲، ۱۳۳، ۱۳۵، ۱۳۶

غیریکنواخت ۴۲

ف

فرتن ۱۰۲

فرم بستر ۷۸، ۱۲۱، ۱۲۲، ۱۲۵، ۱۲۶، ۱۲۷، ۱۴۸

ق

قانون اول فیک ۱۱۸

ک

کرانک-نیکولسون ۱۰، ۲۳، ۲۴، ۲۵، ۳۰

گ

- گرادیان غلظت جرمی ۱۱۸
 گسسته سازی ۲۸، ۲۷

م

- ماتریس هسین ۳۶
 متغیر زمانی ۱۹، ۲۱، ۲۳، ۳۰، ۳۲، ۳۴، ۴۱، ۴۲، ۵۳، ۶۰، ۷۰، ۷۱، ۷۲، ۷۸، ۱۳۵
 محیط متخلخل ۱۶، ۱۲۰
 مدل آزمایشگاهی ۱۲۱
 مدل نگهداشت موقت ۱۷، ۳۳، ۷۵، ۷۶، ۱۲۳
 مساحت ناحیه نگهداشت ۱۰۴، ۱۳۲
 معادلات دیفرانسیل ۱۷، ۱۹، ۲۱، ۲۴، ۳۱، ۱۲۰
 معادله انتقال - پراکندگی ۱۰، ۵۵
 مناطق متخلخل ۱۵

ن

- نگهداشت موقت ۱۰، ۱۵، ۱۶، ۱۷، ۱۸، ۲۷، ۳۳، ۴۹، ۵۲، ۵۵، ۷۰، ۷۵، ۷۶، ۱۲۲، ۱۳۴، ۱۴۳، ۱۴۴

ه

- هایبریک ۲۷، ۴۵، ۷۶، ۱۲۰، ۱۲۱، ۱۲۲، ۱۲۳، ۱۲۴، ۱۲۵، ۱۴۸
 هیدرودینامیک ۱۳
 هیدروگراف ورودی ۸۸
 هیدرولوژی ۹۷

ی

- یکنواخت ۴۰، ۴۲، ۴۴، ۸۶، ۱۱۵، ۱۱۶، ۱۱۷

فهرست واژگان

ا

Contaminants Cloud _____ ابر آلودگی
 Stronium _____ استرانسیوم
 Thomas Algorithm _____ الگوریتم توماس
 Nonconservative Solute _____ املاح واکنشی
 Advection _____ انتقال
 Solute Transport _____ انتقال املاح

آ

Stream _____ آبراهه
 First-Order Stream _____ آبراهه درجه یک
 River Huey Creek _____ آبراهه هوی کریک

ب

Constant Loading _____ بارگذاری ثابت
 Reach _____ بازه
 Segment _____ بخش
 Streambed _____ بستر آبراهه

پ

Hydrologic Parameters _____ پارامترهای هیدرولوژیک
 Uniform _____ پایدار (یکنواخت)
 Diffusion _____ پخشیدگی
 Turbulent Diffusion _____ پخشیدگی متلاطم
 Molecular Diffusion _____ پخشیدگی مولکولی
 Dispersion _____ پراکندگی
 Longitudinal Dispersion _____ پراکندگی طولی
 Spatial Concentration Profile _____ پروفیل غلظت مکانی
 Data File _____ پوشه داده

ت

Objective Function _____ تابع هدف

Hyporheic Exchange _____ تبادلات هایپریک
 Chemical transformation _____ تبدیل شیمیایی
 Finite Differences _____ تفاضلات محدود

ج

Transport _____ جابجایی
 Sorption, Sorption _____ جذب
 Mass of Accessible Sediment/Volume water _____ جرم رسوب قابل دسترس به حجم آب
 Lateral Inflow _____ جریان جانبی ورودی
 Lateral Inflow _____ جریان‌های جانبی
 Upwelling _____ جریان‌های رو به بالا
 Downwelling _____ جریان‌های رو به پایین
 Hyporheic Flow _____ جریان‌های هایپریک

ح

Steady-State _____ حالت پایدار
 Volume Control _____ حجم کنترل
 Nonlinear Least Squares _____ حداقل مربعات غیرخطی
 Numerical Solution _____ حل عددی

خ

Pool-Riffle _____ خیزاب-چالاب

د

Ultrasonic Flow Meter _____ دبی‌سنج اولتراسونیک
 Interpolation _____ درون‌یابی
 Linear Interpolation _____ درون‌یابی خطی

ر

Runge Kutta _____ رانگ کوتا
 Tracer _____ ردیاب
 Record _____ ردیف
 Flow Regimes _____ رژیم‌های جریان
 Streambed Sediment _____ رسوب بستر
 Nonlinear Regression _____ رگرسیون غیرخطی
 Rhodamine _____ رودامین

Clackamas River	رودخانه کلاکاماس
River Uvas Creek	رودخانه یواس کریک
Euler's Method	روش اویلر
Trial-and-Error Procedure	روش آزمون وخط
Explicitly Solve	روش صریح
Method Implicit	روش ضمنی
Tracer-Dilution	روندیابی غلظت
Kinematic-Wave Routing	روندیابی موج سینماتیکی
ز	
Residence Time	زمان ماند
First-Order Decay	زوال مرتبه اول
س	
Column	ستون
ش	
Boundary Conditions	شرایط مرزی
Upstream Boundary	شرایط مرزی بالادست
Downstream Boundry	شرایط مرزی پایین دست
Continuous Boundary Condition	شرایط مرزی پیوسته
ص	
Verification	صحت سنجی
ض	
Distribution Coefficient	ضریب پخش
Molecular Diffusion Coefficient	ضریب پخشیدگی مولکولی
ع	
Ultrasonic Depth Gauge	عمق سنج اولتراسونیک
غ	
Solute Concentrations	غلظت املاح
Sorbate Concentration on the Streambed Sediment	غلظت املاح جذب شده توسط رسوب بستر رودخانه
Background Storage Zone Solute Concentration	غلظت پایه املاح در ناحیه نگهداشت
Observed Concentration	غلظت مشاهداتی
Conservative	غیر واکنشی

Unsteady _____ غیریکنواخت

ف

FlowChart _____ فرآیند

Mass First-Order Mass Transfer Process _____ فرآیند انتقال جرم مرتبه اول

Fortran _____ فرترن

Bed-Form _____ فرم بستر

ق

Fick's Law _____ قانون فیک

ک

Northern California _____ کالیفرنیا شمالی

Finite-Difference ,Crank-Nicolson _____ کرانک-نیکلسون

Chloride _____ کلرید

Unweighted Nonlinear Least Squares _____ کم‌ترین مربعات خطی غیروزنی

Minimization _____ کمینه‌سازی

گ

Small Eddies _____ گرداب‌های کوچک

Weight Revision Option _____ گزینه تجدیدنظر وزنی

ل

Lithium _____ لیتیوم

م

Diagonal Matrix _____ ماتریس قطری

Hessian Matrix _____ ماتریس هسین

Time-Variable _____ متغیر زمانی

Porous Media _____ محیط متخلخل

Flow-Routing Model _____ مدل مسیریابی جریان

Transient Storage Model _____ مدل نگهداشت موقت

Squared Differences _____ مربع تفاضلات

Steady-State Equations _____ معادلات پایدار زمانی

Advection-Dispersion Equation _____ معادله انتقال-پراکندگی

Advection-Diffusion Equation _____ معادله پخشیدگی-جابجایی

Convergence Criteria _____ معیار هم‌گرایی

Field-Scale _____ مقیاس میدانی

Flow Locations _____ مکان‌های جریان

Porous Areas _____ مناطق متخلخل

ن

Main Channel _____ ناحیه اصلی جریان

Storage Zone _____ ناحیه نگهداشت موقت

Hyporheic Zone _____ ناحیه هایپریک

Transient Storage _____ نگهداشت موقت

Dead Zone _____ نواحی نگهداشت

و

Calibration _____ واسنجی

Chemical Reactions _____ واکنش‌های شیمیایی

ه

Hyporheic _____ هایپریک

Hydrodynamics _____ هیدرودینامیک

ی

Steady _____ یکنواخت



Sari Agricultural Sciences and
Natural Resources University

ONE-DIMENSIONAL TRANSPORT WITH INFLOW AND STORAGE (OTIS)

A SOLUTE TRANSPORT MODEL FOR STREAMS AND RIVERS

Author:

Rob L. Runkel

Ph. D. Research Hydrologist, U.S. Geological Survey

Translated by:

Dr. Mohammad Mirnaseri

Faculty Member, Water Engineering Department,

Sari Agricultural Sciences and Natural Resources University

