

## تعیین حساسیت نرم افزار ModFlow نسبت به شاخص پخش (Kd)

محمد نیکخواه منفرد<sup>۱</sup>  
m.nickhah@gmail.com  
محمد رضا صبور<sup>۲</sup>

یکی از عوامل مهمی که بتازگی در مباحث ژئوتکنیک زیست محیطی بدان توجه زیادی شده است، شاخص ضریب پخش (*Distribution Coefficient-Kd*) است. دامنه‌ی این شاخص به اندازه‌ی است که می‌تواند مقادیر «صفر» تا «هزار» و حتی بیشتر را به خود اختصاص دهد. این دامنه‌ی گسترده در بحث مدل سازی و استفاده از مدل‌های رایانه‌ای جهت شبیه‌سازی حرکت و پراکنش آلاینده‌ها در خاک، نقشی مهم خواهد داشت. نرم‌افزار MODFLOW یکی از نرم‌افزارهای بسیار مناسب در زمینه‌ی شبیه‌سازی حرکت و جابه‌جایی آلاینده‌ها در خاک و آب‌های زیرزمینی است که با توجه به خواص خاک و آلاینده و پارامترهای خاک و منطقه، مدلی از پراکنش آلاینده‌ها در خاک به دست می‌دهد. با توجه به نیاز این نرم‌افزار به شاخص پخش، توانایی نرم‌افزار برای محاسبه‌ی این شاخص به روش‌های مختلف و گسترده‌ی وسیع ضریب پخش، بسیار مهم است که بدانیم حساسیت نرم‌افزار نسبت به این ضریب چه مقدار است و روش‌های مختلف محاسبه‌ی مقدار این شاخص - که سه روش آن در MODFLOW قابل استفاده است - در نتایج مدل سازی چقدر می‌توانند اثر بگذارند و این نتایج را با خطا مواجه سازند. این پژوهش برای خاک منطقه‌ی شهر ری و با آلاینده‌ی MTBE در آزمایشگاه محیط زیست دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی اجرا و آزمایش‌های مربوطه (آزمایش‌های خاک، آزمایش جذب، آزمایش GC)، همگی طبق استاندارد ASTM انجام شده است و در نهایت مشخص شد که حساسیت نرم‌افزار MODFLOW نسبت به مقدار و روش محاسبه‌ی شاخص Kd ناچیز می‌باشد و این مدل در شرایطی که مقدار Kd دقیقاً مشخص نیست، بسیار مناسب است.

واژه‌های کلیدی: مدل سازی و شبیه‌سازی، ژئوتکنیک زیست محیطی، ضریب پخش، ModFlow، آب‌های زیرزمینی

۱- کارشناس ارشد عمران- محیط زیست

۲- دکترای ژئوتکنیک زیست محیطی، عضو هیأت علمی دانشکده‌ی عمران دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی

## مقدمه

امروزه یکی از نگرانی‌های جدی اندیشمندان، عدم هم‌خوانی نیازهای انسان کنونی، با منابع موجود زمین است؛ از جمله‌ی این منابع و یکی از مهم‌ترین لوازم حفظ یکپارچگی محیط زیست، منابع آب‌های شیرین است. یکی دیگر از منابع بسیار مهم، خاک می‌باشد که افزون بر این که به عنوان بستر اصلی رشد گیاهان و از عناصر مهم محیط زیست دارای اهمیتی بالاست، یکی از محیط‌های اصلی جابه‌جایی آب نیز بشمار می‌رود. آلوده شدن خاک می‌تواند باعث ورود آلاینده‌ها به چرخه‌ی غذایی موجودات زنده و در نهایت ایجاد معضل برای انسان‌ها شود. در کنار این، آلاینده‌های خطرناک با عبور از محیط متخلخل خاک به منابع آب‌های سطحی و زیرزمینی راه یافته، آن‌ها را آلوده می‌کنند و آگاهی از نحوه‌ی پراکنش این آلاینده‌ها در محیط و مدل سازی آن، می‌تواند نقشی اساسی در پیش‌بینی شرایط محیط زیست و در صورت نیاز، پاکسازی آن ایفا کند.

## ضرورت و فرضیات تحقیق

از جمله فعالیت‌های صنعتی مهم - که از نظر تولید آلاینده‌های گوناگون زیست‌محیطی در صدر سایر فعالیت‌ها قرار دارد - می‌توان به فعالیت‌های صنایع نفت و گاز و پتروشیمی اشاره کرد. فرآورده‌ها، محصولات فرعی، مواد زاید و پساب‌هایی تولیدی در واحدهای این صنایع از مهم‌ترین منابع آلاینده‌ی محیط زیست و بویژه منابع آب به شمار می‌رود؛ ایران نیز به عنوان یک کشور نفت‌خیز، همواره با مشکلات زیست‌محیطی ناشی از فعالیت‌های این صنعت دست‌وپنجه نرم کرده است.

برای نمونه منطقه‌ی پالایشگاه تهران (شهر ری) و جایگاه‌ها و انبارهای اطراف آن و نیز شرکت‌هایی چون شرکت لوله‌های نفت، شرکت نفت بهران، کارخانه‌ی سولفور سدیم و... از قدیمی‌ترین و معروفترین مناطق صنعت نفت به شمار می‌رود که به خاطر مرکزیت، نزدیکی به پایتخت و فاصله‌ی کم با زمین‌های مسکونی و کشاورزی (باقرشهر و اسماعیل‌آباد) و معضلات زیست‌محیطی متعدد ناشی از آن، همواره مورد توجه بوده است؛ تا آن جا که طی مطالعاتی که در سال ۱۳۸۳ توسط

شرکت ژاپنی «ایده میتسو» انجام گرفت، از نفوذ یک میلیون و ۴۴۰ هزار متر مکعب مواد نفتی دارای MTBE به عمق متوسط ۱/۵ تا ۷ متر بر روی سفره‌ی آب‌های زیرزمینی تنها در محدوده‌ی پالایشگاه تهران طی سال‌های گذشته پرده برداشته شد (۱).

در این شرایط، آگاهی از میزان نفوذ و نشت آلاینده‌ها به داخل خاک و امکان پیش‌بینی حرکت و جابه‌جایی آلاینده‌ها به طریق علمی از اهمیتی به سزا برخوردار خواهد بود و یکی از روش‌های دستیابی به این پیش‌بینی، مدل سازی است. تنظیم و واسنجی<sup>۱</sup> و حساسیت‌سنجی یک مدل و بهینه‌سازی آن برای منطقه‌ی مورد نظر در مواجهه با نفوذ آلاینده‌های مختلف، کاربردی بسیار مهم در تخمین میزان آلودگی در محیط‌های سطحی و زیرسطحی و منابع آب و نیز تعیین جهت و عمق پراکنش آلاینده‌ها خواهد داشت.

با توجه به این مهم، خاک پالایشگاه تهران (به خاطر مشکلات زیست‌محیطی متعدد منطقه) و آلاینده‌ی MTBE (به خاطر فراوانی و خطراتی که برای محیط و سلامت افراد دارد) جهت انجام یک مورد پژوهی انتخاب و به وسیله‌ی آن، نرم‌افزار MODFLOW برای ضریب پخش<sup>۲</sup> تحلیل حساسیت شد.

انتخاب شاخص ضریب پخش (Kd) بر این مبنا صورت گرفت که دامنه‌ی مقادیر این ضریب، بسیار وسیع است (۲) و تا کنون روش‌های مختلفی برای به دست آوردن و تخمین این ضریب، پیشنهاد شده که در هر یک مقداری متفاوت حاصل می‌شود (۳) و از آن جا که از سویی مقدار این ضریب با فرآیندهای تأخیر<sup>۳</sup> از جمله جذب<sup>۴</sup>، رابطه‌ای تنگاتنگ دارد و از دیگر سو، نرم‌افزارهای مدل سازی، نیازمند این ضریب به عنوان مقدار ورودی هستند، تخمین دقیق و نزدیک به واقعیت Kd، از ملزومات یک مدل سازی دقیق و کارآ می‌باشد.

- 1-Calibration
- 2-Distribution Coefficient
- 3-Retardation
- 4-Sorption

۲-۳- محاسبه‌ی ضریب پخش با مدل‌های ایزوترم جذب با توجه به اعداد به‌دست‌آمده، می‌توان مقدار ثابت جذب خطی (Kd) را یافت. برای محاسبه‌ی این ضریب، راه‌های مختلفی پیشنهاد شده است که با توجه به شرایط آزمایش جذب در این پژوهش، بهترین روش برای محاسبه‌ی آن، به کارگیری مدل‌های ایزوترم جذب است.

نظر به اهمیت ضریب جذب در جابه‌جایی آلاینده‌ها و خودپالایی خاک، تا کنون پژوهش‌های بسیاری جهت دستیابی به روش‌های مناسب تعیین ضریب جذب، صورت گرفته است. یکی از روش‌هایی که امروزه در جهان بسیار مورد توجه قرار گرفته، روش «ایزوترم جذب»<sup>۲</sup> است. در این روش شاخص‌های مؤثر بر یک فرآیند جذب ثابت نگه داشته می‌شود و تنها اثر غلظت آلاینده بر جذب را بررسی می‌کنند (۳).

اگر غلظت آلاینده‌ای که با خاک در تماس است، به طور یکنواخت بیشتر شود، کل سطح خاک از آلاینده اشباع می‌گردد و دیگر با افزایش غلظت آلاینده، جذب نخواهیم داشت و رابطه‌ی بین جذب سطحی و غلظت آلاینده، خطی نخواهد ماند.

مدل‌های ایزوترم برای توضیح این شرایط تعریف شده‌اند. وقتی که میزان آلاینده‌ی موجود، برای ایجاد جذب خطی کافی است، مدل‌های ایزوترم قابل استفاده‌اند. ۴ مدل ایزوترم جذب به‌کاررفته در این تحقیق، برای محاسبه‌ی ضریب پخش، عبارت‌اند از مدل خطی<sup>۳</sup>، مدل لانگ‌مایر<sup>۴</sup> و مدل فرندلیخ<sup>۵</sup> (۳)

### ۲-۳-۱- مدل خطی

ساده‌ترین و متداول‌ترین راه تعیین ضریب Kd، استفاده از نمودار خطی است. طبق تعریف، Kd عبارت است از نسبت ماده‌ی جذب‌شده در واحد وزن جاذب به غلظت اولیه‌ی آن در محلول. بنابراین اگر در یک دستگاه مختصات، محور افقی نشان‌دهنده‌ی مقدار غلظت اولیه‌ی محلول و محور عمودی

نرم‌افزار MODFLOW نیز از جمله مدل‌های بسیار کارآمد در شبیه‌سازی شرایط آب‌های زیرزمینی و خاک است. این نرم‌افزار قادر به شبیه‌سازی بر مبنای روش‌های مختلف ریاضی است و نیز می‌تواند ضریب پخش را به سه روش گوناگون، محاسبه کرده، از نتایج آن در مدل‌سازی بهره‌برد و به همین دلیل، بین نرم‌افزارهای موجود، این مدل برای موردپژوهشی انتخاب شد.

### ۳- روش انجام کار

#### ۳-۱- آزمایش‌های خاک

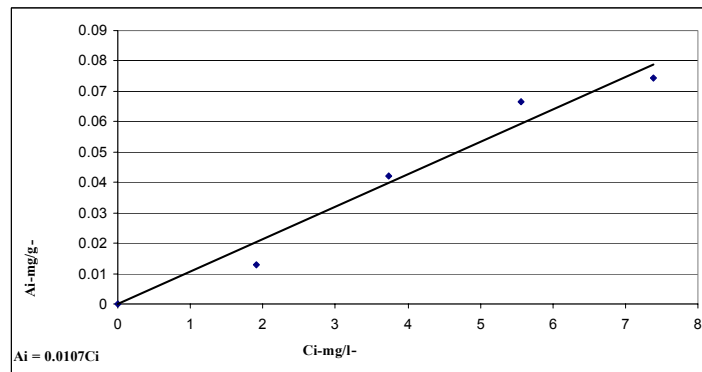
پس از تهیه‌ی مقادیری از خاک منطقه‌ی شهر ری، مطابق استاندارد ASTM آزمایش‌های مقدماتی خاک بر روی آن انجام شد که طبق این آزمایش‌ها، نوع این خاک از جنس رس با درصد ماسه‌ی ۱.۳۳٪ تعیین گشت. چگالی خاک مورد نظر نیز برابر  $\frac{gr}{cm^3}$  ۲.۸۸ به دست آمد؛ سپس برای تعیین ضریب جذب، برای چهار نمونه‌ی مختلف، بر اساس استاندارد ASTM D4646-03، آزمایش جذب انجام شد. بدین منظور، ۴ نمونه خاک با درصد وزنی مختلف به مدت ۲۴ ساعت در معرض تماس با محلول MTBE و آب، با غلظت‌های گوناگون قرار گرفت و پس از آن فاز محلول از فاز جامد جدا شده، به وسیله‌ی آزمایش GC<sup>۱</sup>، مقدار غلظت MTBE در آن مشخص گردید. از آن جا که به دلیل کوتاه بودن مدت آزمایش، امکان زوال رادیواکتیو و یا تجزیه‌ی مولکولی توسط میکروارگانیسم‌ها وجود نداشته است و نیز به خاطر رعایت شرایط آزمایشگاهی، میزان تبخیر، تقریباً صفر بوده است، می‌توان گفت که تفاوت غلظت اولیه و غلظت محلول پس از ۲۴ ساعت، ناشی از جذب MTBE توسط خاک می‌باشد و بدین ترتیب، ضریب جذب را محاسبه کرد.

مقادیر اولیه و نتایج آزمایش جذب در «جدول ۱» دیده می‌شود.

نشان دهنده‌ی ماده‌ی جذب‌شده در واحد وزن جاذب باشد، شیب خط رسم‌شده، معرف  $K_d$  خواهد بود (۳).

جدول ۱- نتایج آزمایش جذب خطی برای تعیین غلظت MTBE جذب‌شده توسط خاک پالایشگاه تهران

درصد جرمی جذب MTBE توسط خاک (%)	غلظت MTBE در واحد جرم خاک (mg/g)	جرم MTBE جذب‌شده (mg)	تفاضل غلظت اولیه و ثانویه (mg/l) MTBE	غلظت MTBE در آب طبق نتیجه‌ی آزمایش GC (mg/l)	جرم MTBE در نمونه (mg)	غلظت تصحیح‌شده‌ی MTBE در آب (mg/l)	غلظت اولیه‌ی MTBE در آب (mg/l)	حجم فاز مایع محلول (ml)	حجم خاک جاذب (ml)	جرم خاک جاذب (gr)	شماره‌ی نمونه
۲۱.۳	۰.۰۱۳۰	۰.۱۰۳	۰.۴۱۸	۱.۵	۰.۴۷۴	۱.۹۱۸	۵.۴۰۹	۲۴۷.۲۲۲	۲.۷۷۸	۸	
۵۵.۰۸۶	۰.۰۴۲۲	۰.۵۰۷	۲.۰۶۰ ۵	۱.۶۸	۰.۹۲۰	۳.۷۴۱	۷.۲۱۲	۲۴۵.۸۳۳	۴.۱۶۷	۱۲	
۷۸.۲۴۹	۰.۰۶۷	۱.۰۶۴	۴.۳۵۳	۱.۲۱	۱.۳۶۰	۵.۵۶۳	۹.۰۱۵	۲۴۴.۴۴۴	۵.۵۵۶	۱۶	
۸۲.۸۰۴	۰.۰۷۴۳	۱.۴۸۶	۶.۱۱۶	۱.۲۷	۱.۷۹۵	۷.۳۸۶	۱۰.۸۱۸	۲۴۳.۰۵۵۶	۶.۹۴۴	۲۰	
۵۹.۴۸۳	میانگین										



شکل ۱- نمودار تعیین ضریب جذب به روش ایزوترم خطی

$$A_i = \frac{K_L \cdot A_m \cdot C_i}{1 + K_L \cdot C_i} \quad (\text{رابطه‌ی ۲})$$

که در آن:

$A_i$ : مقدار آلاینده‌ی جذب‌شده در واحد جرم جامد

$K_L$ : ثابت جذب لانگ‌مایر مربوط به انرژی جذب

$A_m$ : بیشترین ظرفیت جذب جامد

$C_i$ : غلظت آلاینده در محلول

اگر  $K_L$  را با  $\frac{1}{B}$  جایگزین کنیم، پس از ساده‌سازی رابطه

با رسم نمودار در «شکل ۲» به خطی با (رابطه‌ی ۱) می‌رسیم

که طبق آن،  $K_d$  برابر  $\frac{lit}{gr} 0.107$  به دست خواهد آمد.

$$A_i = 0.0107 C_i \quad (\text{رابطه‌ی ۱})$$

۳-۲-۲- مدل لانگ‌مایر

مدل لانگ‌مایر برای توصیف جذب مولکول‌های گاز بر

سطوح جامد همگن پیشنهاد شد.

این مدل این گونه نشان داده می‌شود:

خواهیم داشت:

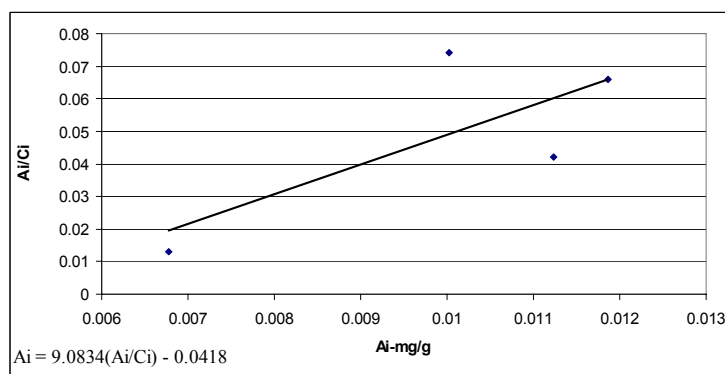
$$A_i = -B\left(\frac{A_i}{C_i}\right) + A_m \quad (\text{رابطه ی ۳})$$

اگر  $A_i$  را بر محور عمودی و  $\frac{A_i}{C_i}$  را بر محور افقی یک

دستگاه مختصات نشان دهیم، شیب  $-B$  و عرض از مبدأ  $A_m$  به دست خواهد آمد.

با توجه به نتایج حاصل از آزمایش جذب و با رسم نمودار، مقادیر  $A_m$  و  $-B$ ، به ترتیب برابر  $۹/۰۸۳۴$  و  $-۰/۰۴۱۸$  حاصل می شود.

با به کارگیری شاخص های به دست آمده در مدل و در نظر گرفتن (رابطه ی ۲)، نرم افزار می تواند با محاسبه ی مشتق های جزئی در هر نقطه،  $K_d$  را محاسبه کرده، از آن در مدل سازی بهره ببرد.



نمودار ۲- نمودار تعیین شاخص های روش روش لانگ مایر

### ۳-۲-۲- مدل فرندلیخ

مدل ایزوترم فرندلیخ بدین صورت تعریف شده است

$$A_i = K_F \cdot C_i^N \quad (\text{رابطه ی ۴})$$

که در آن:

$A_i$ : مقدار آلایندگی جذب شده در واحد جرم جامد

$C_i$ : غلظت آلایندگی در محلول

$K_F$ : ثابت جذب فرندلیخ

$N$ : ثابت

با لگاریتم گرفتن از رابطه ی مدل فرندلیخ به رابطه ی خطی ذیل

می رسیم:

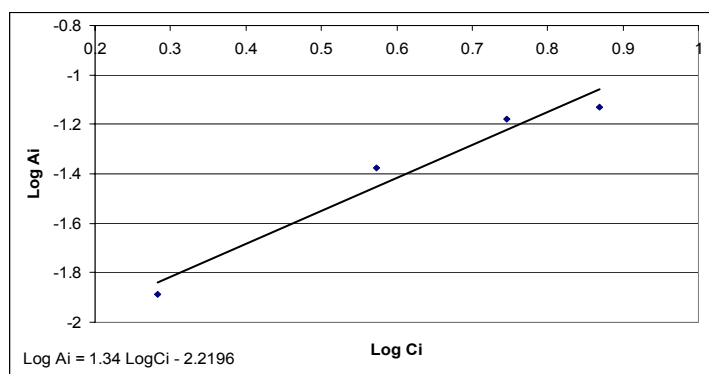
$$\text{Log}A_i = \text{Log}K_F + N \cdot \text{Log}C_i \quad (\text{رابطه ی ۵})$$

اگر  $\text{Log}A_i$  را در محور عمودی و  $\text{Log}C_i$  را بر

محور افقی یک دستگاه مختصات ترسیم کنیم و خطی از نقاط به دست آمده برآزش دهیم، شیب  $N$  و عرض از مبدأ  $\text{Log}K_F$  به دست خواهد آمد. اگر در (رابطه ی ۴)، داشته باشیم  $N = 1$ ، آن گاه طبق تعریف ضریب جذب،  $K_F$  برابر با  $K_d$  خواهد بود.

در شرایط مشابه، معمولاً مدل فرندلیخ بر مدل لانگ مایر برتری دارد و استفاده از آن توصیه می شود (۳).

با توجه به نتایج حاصل از آزمایش جذب و با رسم نمودار، مقادیر  $K_F$  و  $N$ ، به ترتیب برابر  $۰/۰۰۶$  و  $۱/۳۴$  حاصل می شود.



نمودار ۳- نمودار تعیین شاخص‌های روش فرندلیخ

برای این که بتوان متغیرهای دیگر آزمایش را تا حدی توان حذف کرد و تنها به بررسی جذب پرداخت، ارتفاع مفید ستون‌های طرح‌شده،  $300\text{ mm}$  و قطر مفید داخل آن،  $40\text{ mm}$  در نظر گرفته شد تا بتوان جریان عبوری آلاینده در خاک را یک‌بعدی فرض کرد (۴). درپوش این ستون‌ها نیز به طور سرپیچ‌دار ساخته شد تا از نفوذ هوا یا خروج فاز مایع و گاز آلاینده به بهترین نحو، جلوگیری شود و سرپیچ‌ها هم به کاغذ فیلتر مجهز شد. از آن جا که ممکن است مقاومت شیمیایی پلکسی‌گلاس در برابر MTBE کم باشد، داخل ستون‌های خاک با ورق آلومینیومی<sup>۳</sup> پوشانده شد تا از هرگونه تماس، جلوگیری شود.

با به کارگیری شاخص‌های به‌دست‌آمده در مدل و در نظر گرفتن (رابطه‌ی ۴)، نرم‌افزار می‌تواند با محاسبه‌ی مشتق‌های جزئی در هر نقطه، Kd را محاسبه کرده، از آن در مدل سازی بهره ببرد.

### ۳-۳- آزمایش انتشار روی ستون خاک

برای بررسی حساسیت نرم‌افزار MODFLOW نسبت به تغییرات و روش محاسبه‌ی شاخص ضریب پخش، این مدل توسط مقایسه‌ی نتایج مدل سازی عبور آلاینده از یک ستون خاک با مقادیر تجربی آن واریسی<sup>۱</sup> می‌شود. بدین منظور، با توجه به نیازها و الزامات این پروژه، ستون‌هایی طراحی و از جنس پلکسی‌گلاس<sup>۲</sup>، ساخته شد.



شکل ۴- ستون‌های آزمایش پراکنش آلاینده در خاک

خاک منطقه‌ی شهر ری در ارتفاع‌های مختلف، با رطوبت ۸۰٪ پس از ۲۰ روز، از انتهای ستون خاک، نمونه‌هایی رطوبت بهینه در لوله‌ها کوبیده شد و تحت عبور MTBE با تراز  $1/3 m$  قرار گرفت. برای تعیین غلظت MTBE به آزمایشگاه کروماتوگرافی گازی فرستاده شد و نتایج ذیل حاصل گشت:

جدول ۲- نتایج آزمایش GC برای ستون‌های خاک

شماره‌ی ستون	ارتفاع خاک در ستون (cm)	غلظت ورودی MTBE در محلول (mg/l)	غلظت MTBE در محلول خروجی (mg/l)
۱	۱۵	۶	۰.۹۶
۲	۱۰	۶	۱.۲۳

شد که لایه‌ی بالایی مدل دارای تراز ثابت  $1/3 m$  می‌باشد. عمق لایه‌ی میانی نیز به اندازه‌ی عمق خاک کوبیده‌شده در ستون تعیین شد.

از آن جا که جریان در ستون خاک یک‌بعدی فرض شده است، ضریب هدایت هیدرولیکی در راستای طولی و عرضی صفر فرض شد تا حرکت محلول، تنها در عمق شبیه‌سازی شود؛ هم‌چنین یک گمانه‌ی مشاهده نیز در میان مدل جایگذاری شد تا مقادیر مشاهده‌شده با مقادیر محاسبه‌شده توسط نرم‌افزار، مقایسه شود.

پس از طرح مدل، نرم‌افزار برای دو ستون با مقادیر خاک متفاوت و با در نظر گرفتن هر سه روش تخمین ضریب جذب مورد پشتیبانی MODFLOW، (جذب خطی، لانگ‌مایر و فرندلیخ)، اجرا شد.

برای هر روش، نمودار تغییرات غلظت انتهای لایه‌ی دوم (انتهای ستون خاک) بر حسب زمان (روز)

که این نتایج برای مقایسه با نتایج مدل سازی و تعیین دقت مدل به کار خواهد رفت.

### ۳-۴- مدل کردن ستون خاک با MODFLOW

با توجه به «آزمایش انتشار روی ستون خاک»، در این تحقیق سعی شد شرایطی مشابه توسط نرم‌افزار MODFLOW شبیه‌سازی شود. بدین منظور در نرم‌افزار، یک سلول مکعبی شکل به طول و عرض  $0/1 m$  در  $0/1 m$  در سه لایه طراحی و شبکه‌بندی شد. کاربرد شبکه‌ها<sup>۱</sup> در اجرای روش تفاضل محدود است و ابعاد آن

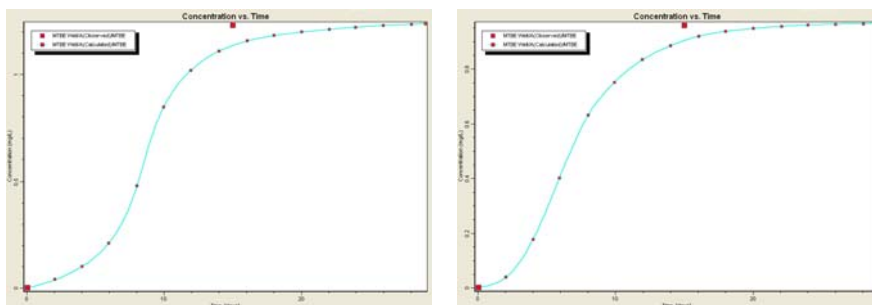
مطابق حساسیت نرم‌افزار نسبت به  $\frac{\Delta T}{\Delta X}$ ، برای یک

دوره‌ی ۳۰ روزه،  $25 mm$  در نظر گرفته شد. برای شبیه‌سازی تراز محلول ثابت بالای ستون خاک، فرض

آمده است و پس از آن جدولی ارایه شده که مقادیر نمودار را با مقادیر واقعی برگرفته از آزمایش GC بر روی نمونه‌ی استخراج‌شده از انتهای ستون خاک پس از ۱۵

روز، مقایسه می‌کند.

۳-۴-۱- روش ایزوترم خطی



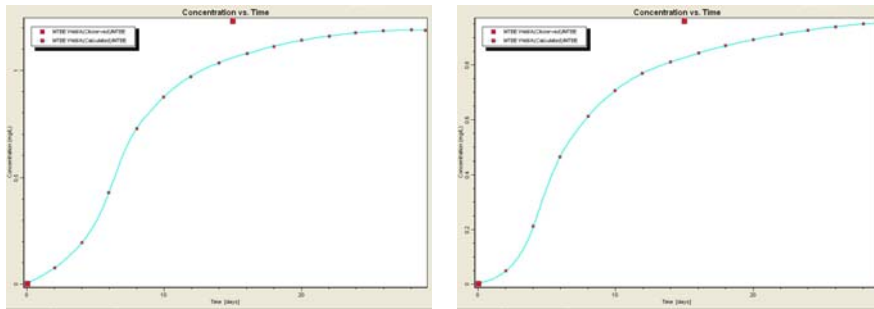
شکل ۵ و ۶- نمودار تغییرات غلظت MTBE به روش ایزوترم خطی بر حسب زمان در انتهای نمونه‌های ۱ و ۲

جدول ۳- مقایسه‌ی غلظت MTBE مشاهده‌شده با غلظت محاسبه‌شده به روش ایزوترم خطی

Well Name	Observation Time (day)	Observed MTBE Conc. (mg/l)	Calculated MTBE Conc. (mg/l)
نمونه‌ی ۱	A	۰	۰.۰۰
	A	۲	-
	A	۴	-
	A	۶	-
	A	۸	-
	A	۱۰	-
	A	۱۲	-
	A	۱۴	-
	A	۱۵	۰.۹۶
	درصد اختلاف		
نمونه‌ی ۲	A	۰	۰.۰۰
	A	۲	-
	A	۴	-
	A	۶	-
	A	۸	-
	A	۱۰	-
	A	۱۲	-
	A	۱۴	-
	A	۱۵	۱.۲۳
	درصد اختلاف		



۲-۴-۳- روش لانگ‌مایر



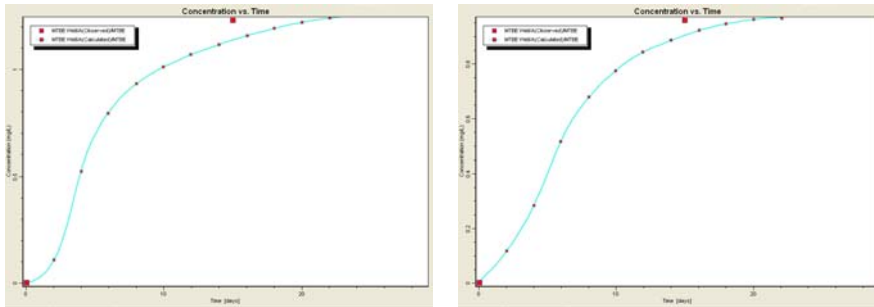
شکل ۷ و ۸- نمودار تغییرات غلظت MTBE به روش لانگ‌مایر بر حسب زمان در انتهای نمونه‌های ۱ و ۲

MTBE

-

Well Name	Observation Time (day)	Observed MTBE Conc. (mg/l)	Calculated MTBE Conc. (mg/l)
A		.	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		.	.
			% .
A		.	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		.	.
			% .

۳-۴-۲- روش فرندلیخ



MTBE -

MTBE -

Well Name	Observation Time (day)	Observed MTBE Conc. (mg/l)	Calculated MTBE Conc. (mg/l)
A		.	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		.	.
			% .
A		.	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		-	.
A		.	.
			% .

## ۴- نتیجه گیری

همان گونه که در نمودارهای خروجی نرم افزار MODFLOW دیده می شود، از آن جا که مدتی طول می کشد تا MTBE با سازوکارهای مختلف پخش انتهای نمونه ی خاک برسد، در چند روز نخست، غلظت آلاینده در انتهای نمونه باید صفر باشد که این امر در نمودار خروجی مدل دیده می شود که با واقعیت مطابقت است؛ همچنین با گذشت چند روز، میزان جذب و عبور آلاینده

به تعادل می رسد که در این زمان، نمودار به مقداری ثابت میل می کند؛ از آن جا که سطح خاک مورد نظر پس مدتی از آلاینده اشباع می شود، دیگر قدرت جذب نخواهد داشت و محلول آلاینده و آب، با غلظتی ثابت از آن می گذرند که این مسأله در نمودار، به صورت دوباره صعودی شدن (پس از این که نمودار به عددی ثابت میل کرد) دیده خواهد شد.

-

درصد اختلاف	غلظت مدل سازی (mg/l)	غلظت آزمایشگاهی (mg/l)	شماره ی نمونه	روش تخمین Kd
۵.۲۱٪	۰.۹۱	۰.۹۶	۱	ایزوترم خطی
۸.۹۴٪	۱.۱۲	۱.۲۳	۲	
۱۳.۵۴	۰.۸۳	۰.۹۶	۱	لانگ مایر
۱۳.۸۲	۱.۰۶	۱.۲۳	۲	
۵.۲۱٪	۰.۹۱	۰.۹۶	۱	فرنلایخ
۸.۹۴٪	۱.۱۲	۱.۲۳	۲	

بخش خطی نمودار، بیانگر مدت زمانی است که طول می کشد عبور آلاینده و جذب آن به تعادل برسد و آلاینده با نرخی ثابت جذب خاک شود. خلاصه ی نتایج آزمایش و نتایج به دست آمده از مدل سازی، در (جدول ۶) دیده می شود.

همان گونه که مشاهده می شود، نتایج مدل سازی به دست آمده به روش ایزوترم خطی و روش فرنلایخ، با دقت بالایی به هم نزدیک اند و تفاوت مقادیر آزمایشگاهی و مدل سازی نیز چشمگیر نیست؛ نتایج مدل سازی به روش لانگ مایر نیز -گرچه با مقادیر دو روش دیگر متفاوت است- اختلاف چشمگیری با نتایج آزمایشگاهی ندارد.

بنابراین، با توجه به نتایج حاصله، می توان استفاده از هر سه روش را توصیه کرد که با در نظر گرفتن درصد خطای کمتر روش ایزوترم خطی، سهولت به کار گیری و شهودی بودن و قابل درک بودن آن، به

کار گیری این روش بیش از دو روش دیگر قابل توصیه است و با استفاده از این روش و مقایسه ی نتایج مدل و آزمایش، به مدلی واسنجی شده دست می یابیم که برای شبیه سازی حرکت آب های زیرزمینی آلوده در خاک مناسب است.

بدین ترتیب با توجه به اختلاف ناچیز مقادیر حاصل از روش های مختلف با هم و نیز با مقادیر واقعی آزمایشگاهی، حساسیت MODFLOW نسبت به روش های محاسبه ی Kd، در محدوده ای قابل قبول است و تغییر Kd و روش های مختلف محاسبه ی آن، اثر چندانی بر نتایج حاصل از به کار گیری این مدل نخواهد داشت.

پس با توجه به آن چه گفته شد، با توجه به حساسیت کم این نرم افزار به ضریب پخش و روش محاسبه ی آن، در شرایطی که مقدار Kd دقیقاً مشخص نیست می توان بدون نگرانی از خطای حاصل از تقریب و

تخمین این شاخص، از MODFLOW جهت مدل سازی بهره برد.

کارشناسی ارشد؛ دانشکده‌ی محیط زیست دانشگاه تهران

3. EPA; Office of Radiation and Indoor Air; August 1999; "UNDERSTANDING VARIATION IN PARTITION COEFFICIENT, Kd, VALUES"; EPA 402-R-99-004A
4. C. W. Fetter; 1998; "Contaminant Hydrogeology"; 2nd Edition; Prentice Hall; ISBN: 0-13-512157-5

#### منابع

1. <http://www.hamshahrionline.ir/News/?id=41720>
۲. ابوالفضل‌زاده، عماد و گیتی‌پور، سعید؛ ۱۳۸۶؛ «بررسی میزان جذب و نشت MTBE در خاک های رسی معمولی و اصلاح‌شده»؛ پایان‌نامه‌ی