Computerized Modeling In Ground - Water Investigations

Hatami Varzaneh, M., Msc., Faculty of Environment, Univ. of Tehran
Kabodanian Ardestani, M., Assist. Prof., Faculty of Environment, Univ. of Tehran

Abstract

Modeling ground - water systems involves both water quantity (flow) and water quality considerations. Ground - water models incorporate mathematical representations of some or all of the following processes: movement of water and other fluids through saturated or unsaturated porous media or fractured rock; transport of water - soluble constituents; transformation of contaminants by chemical, biological, and physical processes; and heat transport and associated effects of temperature variations on ground - water flow and pollutant transport and fate.

In the present article, general aspects of use of computerized models are discussed as follwos: giving help to government decision - making, site assessment and remediation. In addition, hydrogeologic model parameters consisting of ground - water flow and contaminant transport parameters are surveyed. Also, a brief discussion about classification of models and the publications that are available in the field of ground - water modeling, are presented.

By studying the present article, one can become familiar with the hydrogeological data and other informations necessary for ground - water modeling.

آشنایی با مدل‌سازی کامپیوتری در تحقیقات آب‌های زیرزمینی

محمد حاتمی ورزنه * مجتبی کبودانیان اردستانی **

چکیده

مقوله مدل‌سازی سیستم‌های آب زیرزمینی شامل کمّیت آب (میزان جریان) و ملاحظات کیفی آب می‌باشد. مدل‌های آب زیرزمینی در برگیرنده تمام توصیف‌های ریاضی فرایندهایی نظیر حرکت آب و دیگر سیالات از میان محیط متخلخل اشباع و غیر اشباع با سنگ‌های شکسته شده، حمل اجزای قابل حل در آب، دگرگونی آلاینده‌ها در اثر فرایندهای شیمیایی، بیولوژیکی و فیزیکی و انتقال حرارت و اثرات مرتبط با تغییرات درجهٔ حرارت بر روی جریان آب زیرزمینی و بالاخره حمل آلاینده‌ها می‌باشند.

در این مقاله موارد کلی استفاده از مدل‌های کامپیوتری مورد بحث قرار گرفته است. این موارد عبارت‌اند از: کمک به تصمیم‌گیری‌های دولتی و ارزیابی و اصلاح محدودهٔ مورد مطالعه به علاوه پارامترهای هیدروژئولوژیکی مدل که شامل پارامترهای جریان آب زیرزمینی و انتقال آلودگی می‌باشند. همچنین بحث کوتاهی در زمینهٔ تقسیم‌بندی مدل‌ها و تألیفاتی که تاکنون در زمینهٔ مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی صورت گرفته است، در این مقاله ارائه گردیده است.

با مطالعه این مقاله می‌توان با زمینه‌های لازم اطلاعات هیدروژئولوژیکی و سایر اطلاعات برای مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی آشنا شد.

مقدمه

مدل‌ها، در وسیع‌ترین معنی، توضیحات ساده‌ای از سیستم‌های فیزیکی موجود می‌باشند. هر تحقیق در زمینهٔ آب‌های زیرزمینی که بیشتر در ارتباط با جمع‌آوری ساده و جدول‌بندی داده‌ها باشد مربوط به مدل‌سازی است. یک مدل مقدماتی یا فرضیه، سیستم آب‌های زیرزمینی راکه به وسیله داده‌های جمع‌آوری شده آزمایش گردیده تشریح می‌کند. اگر داده‌ها با فرضیه تناسب داشته باشد، مدل مورد پذیرش واقع می‌گردد. در غیر این صورت، مدل بایستی بازنگری شود. مدل‌ها در زمینه‌های زیر کارایی دارند:

۱) چگونگی راهبری فرایند در یک سیستم.

۲) ارائه نمایش‌های فیزیکی ساده‌ای از سیستم. (به عنوان نمونه مدل‌های فیزیکی آبخوان به صورت " مخزن شنی " و

* کارشناس ارشد عمران، دانشکده محیط زیست، دانشگاه تهران

** استادیار دانشکده محیط زیست، دانشگاه تهران

یکسری تجربیات آزمایشگاهی جهت سنجش ایزوترم‌های جذب سطحی).

۳) نمایش‌های ریاضی از سیستم‌های فیزیکی.

این مقاله بر روی مدل‌هایی تمرکز دارد که می‌توانند به شکل ریاضی بیان شوند و برای استفاده در برنامه‌های کامپیوتری سازگار گردند. انجمن مصالح و آزمایش‌های مواد آمریکا[1] مدل و برنامه کامپیوتری را به صورت زیر تعریف می‌کند [۱]:

" یک مدل مجموعه‌ای از مفاهیم در قالب یک معادلهٔ ریاضی است که فهم یک پدیده طبیعی را به تصویر می‌کشد ".

مدل بر اثر پذیرش داده‌های ورودی و دستورالعمل برای تحویل خروجی یک برنامه کامپیوتری نمایش می‌دهد که مجموعه‌ای از تکنیک‌های عددی، دفترداری و زبان‌های کنترلی است.

مدل‌سازی با کامپیوتر یک بحث تخصصی است که نیازمند تجربه و آموزش قابل ملاحظه‌ای می‌باشد. بدون اغراق می‌توان گفت که طی چند دهه گذشته صدها برنامه کامپیوتری برای شبیه‌سازی جنبه‌های مختلف سیستم‌های آب زیرزمینی ارائه شده است. این مقاله یک ایده اولیه از مدل‌سازی و تجزیه و تحلیل داده‌ها با کامپیوتر را فراهم می‌سازد که شامل: استفاد از آنها، تعریف پارامترهای اولیه هیدروژئولوژیکی و طبقه‌بندی انواع مدل‌ها و سوابق مطالعاتی آن‌ها می‌باشد.

موارد استفاده از مدل‌های کامپیوتری

بزرگترین مزیت کامپیوترها این است که مقادیر زیادی از داده‌ها را می‌توانند به سرعت پردازش نمایند و تغییر و تبدیل‌های تجربی می‌توانند به سهولت اعمال شوند، به طوری که می‌توان برای مسئله مورد نظر، بسیاری از موقعیت‌های ممکن را با جزییات بیشتر مورد مطالعه قرار داد. این خطر وجود دارد که بدون انتخاب مناسب و جمع‌آوری کامل داده‌ها، و ورودی‌ها و بدون روش‌های کنترل کیفیت، سودمندی کامپیوتر به سرعت تحلیل رود.

معمولاً مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی برای تأمین آب و مسائل کیفی آب به‌کار برده می‌شود. مدل‌ها همچنین در مطالعات نشست زمین ناشی از پمپاژ آب‌های زیرزمینی مورد استفاده قرار می‌گیرند. مدل‌های آب زیرزمینی همچنین می‌توانند نقش مهمی در مدیریت منابع محیطی از قبیل سیستم‌های اکولوژیکی در رودخانه‌ها، دهانهٔ رودخانه‌ها و تالاب‌ها بازی کنند. اگرچه معمولاً مدل‌ها برای مشخص کردن موارد خاص در مدیریت آب به‌کار می‌روند، اما به عنوان ابزارهای تحقیقاتی برای شناخت کلی و بهتر سیستم‌های آب‌های زیرزمینی و فرایندهای آن مورد استفاده قرار می‌گیرند.

غالباً مدل‌های جریان آب زیرزمینی در برنامه‌ریزی، طراحی و مدیریت حوزه تأثیر چاه‌ها استفاده می‌گردند. ضمناً مدل‌های آب زیرزمینی در مطالعات برنامه‌ریزی جامع در مورد گزینه‌های تأمین آب و استراتژی‌های مدیریت مورد نیاز به‌کار می‌روند. مدل‌ها ممکن است به منظور تجزیه و تحلیل قابلیت دسترسی آب یا آبدهی منابع آب در موارد مختلف به‌کار روند، افت مورد انتظار از احداث چاه، طرح‌های پمپاژ متناوب و اثرات ناشی از شرایط تغذیه طبیعی و مصنوعی (ساخت انسان) اثرات نفوذ آب شور یا ضرورت‌های دیگر برای تأمین آب ممکن است از مسائل مهم در به‌کارگیری مدل‌ها باشند. اثرات متقابل جریان آبخوان و مدیریت مربوط به آب‌های سطحی و آب‌های زیرزمینی می‌تواند نقش مهمی در موارد خاص مطالعاتی داشته باشد.

عامل مهم توسعه و کاربرد مدل‌های کامپیوتری، فعالیت‌های قانونی است که به منظور حفاظت کیفیت آبهای‌زیرزمینی صورت گرفته است. مدل‌های حمل و انتشار آلاینده‌ها برای ارزیابی اثرات آلودگی ناشی از مواردی چون: ریختن تصادفی، تراوش تانک‌های ذخیره، تزریق فاضلاب به زیرزمین، دفن بهداشتی، فعالیت‌های کشاورزی، بهره‌برداری و استخراج معادن و سایر منابع مختلف استفاده می‌شوند. مدل‌های آب زیرزمینی برای ارزیابی طرح‌هایی جهت مدیریت مواد زاید مورد استفاده قرار می‌گیرند. به علاوه در ارزیابی طرح‌های اصلاحی برای بهبود سیستم‌های آب زیرزمینی آلوده نیز استفاده می‌شوند. مدل‌های آب زیرزمینی همچنین می‌توانند رهنمودهایی را برای طراحی سیستم‌های پایش آلودگی که مورد نیاز برای مقررات ایالتی، دولتی و محلی

1- ASTM

می‌باشند ارائه نمایند.

مدل‌های آب زیرزمینی ممکن است از نظر کاربرد به عنوان مدل‌های پیش‌بینی تشریحی[1]، مدل‌های مدیریت تجویزی (بهینه‌سازی منبع[2]) و مدل‌های شناسایی پارامتر (پردازشی)[3] تلقی گردند [۲۰].

بیشتر مدل‌های آب زیرزمینی از نوع مدل‌های پیش‌بینی هستند که داده‌های ورودی راکه مشخصهٔ سیستم آب‌های زیرزمینی طبیعی و توسعه یافته توسط انسان است، به‌کار می‌برند تا شرایط کیفی و یا هیدرولیکی آب راکه تحت مدیریت خاصی مورد انتظار است پیش‌بینی نمایند. به عبارت دیگر مدل‌های پیش‌بینی، فرایندهای فیزیکی و شیمیایی را در زیرزمین شبیه‌سازی می‌کنند تا تخمین بزنند که یک آلودگی تا چه فاصله‌ای و با چه سرعتی و در چه جهتی ممکن است انتشار یابد. رایج‌ترین مدل‌های آب زیرزمینی تشریحی، آنهایی هستند که جریان را با در نظرگرفتن انتقال مواد محلول در محیط متخلخل پیوسته و یا بدون در نظرگرفتن انتقال آنها، شبیه‌سازی می‌نمایند. سایر مدل‌های پیچیده، جریان را در محیط شکسته شده، چند فازی، یا فرایندهای شیمیایی پیچیده(مدل‌های ژئوشیمیایی) شبیه‌سازی می‌نمایند.

از طرف دیگر، مدل‌های مدیریت تجویزی، به سمت تعیین برنامه‌ریزی‌های مدیریت بهینه، برای برخورداری از اهداف اختصاصی جهت‌یابی شده‌اند. این مدل‌ها، درگیر پیوند نمودن یک الگوریتم بهینه برای یک مدل جریان و یا یک مدل حمل مواد محلول می‌باشند. مدل‌های بهینه‌سازی منبع، ترکیب توابع محدود (به عنوان مثال، کل پمپاژ مجاز) و روال بهینه‌سازی برای توابع هدف (به عنوان مثال، بهینه‌سازی عملیات توسعه چاه برای هزینه حداقل یا برداشت حداقل با توجه به افزایش پمپاژ) با برنامه‌های پیش‌بینی می‌باشد. فرایند برنامه‌ریزی چند منظوره جنگل‌کاری ایالات متحده برای مدیریت جنگل‌های ملی با استفادهٔ وسیع از برنامه‌های بهینه‌سازی منبع انجام شده است [۶]. قابلیت چنین برنامه‌هایی برای مدیریت آب‌های زیرزمینی محدود است و فضای فعالی برای تحقیق و توسعه نمی‌باشد [۲۱].

مدل‌های شناسایی پارامتر یا واسنجی[4] برای اندازه‌گیری پارامترهایی که مشخصهٔ سیستم آب زیرزمینی می‌باشند تعیین شده‌اند. به عبارت دیگر، مدل‌های پردازشی ابتدا داده‌ها را برای تفسیر راحت‌تر یا برای تسهیل در ورود داده‌ها به برنامه‌های پیش‌بینی و بهینه‌سازی منبع شکل‌بندی می‌کنند. یک برنامه اختصاصی کامپیوتر ممکن است یکی یا بیشتر از این نوع برنامه‌ها را تطبیق نماید. برای مثال، برنامه‌هایی که سبب تسهیل در ورودی داده‌ها (پیش پردازنده‌ها) و خروجی داده‌ها (پس پردازنده‌ها) می‌شوند به عنوان خصوصیت عمومی اضافی برنامه های پیش‌بینی به حساب می آیند.

تصمیم‌گیری دولتی

کامپیوترها می‌توانند به تصمیم‌گیری‌های دولتی مربوط به ارزیابی آب‌های زیرزمینی در زمینه‌های زیر کمک نمایند:

فرموله کردن سیاست‌گزاری‌ها، قانون‌گزاری و فعالیت منظم.

مطالعات انجام گرفته در سال ۱۹۷۶ توسط مؤسسه تحقیقاتی هول کمب[5] در مورد مدل‌سازی زیست‌محیطی و تصمیم‌گیری در ایالات متحده، نقطه نظرات خوبی جهت فرموله کردن سیاست‌گزاری‌ها تأمین می‌کند ولی اکثر موارد مطالعاتی مربوط به آب‌های سطحی و منابع می‌باشد نه در مورد آب‌های زیرزمینی [۱۳]. اداره ارزیابی فن‌آوری در سال ۱۹۸۲ به طور تخصصی‌تر استفاده از مدل‌های منابع آب را جهت فرموله کردن سیاست‌گزاری‌ها نشان داده است. [۱۹].

جریان آب زیرزمینی و شاید مدل‌سازی حمل مواد محلول، جهت گرفتن مجوز برای تزریق مواد زاید خطرناک به داخل چاه‌های نوع اول[6] مورد نیاز می‌باشد. تهدید کیفیت آب‌های زیرزمینی که ممکن است ناشی از تصمیمات ابتدایی در مورد دفن بهداشتی زباله و تلنبار سطحی مواد زاید صنعتی باشد، تأکیدی است بر لزوم شبیه‌سازی آب‌های زیرزمینی به

1- Descriptive prediction models

2- More Prescriptive management models (Resource Optimizing)

3- Parameter identification models (manipulative)

4- Calibration

5- Holcomb

6- Class 1 Well

منظور رسیدن به اطمینان از عدم وجود مواد خطرناک. سازمان حفاظت محیط زیست ایالات متحده بازنگری خوبی در استفاده از مدل‌ها برای اداره کردن برنامه‌های حفاظت آب‌های زیرزمینی فراهم کرده است [۸].

ارزیابی و اصلاح جایگاه

استفاده از مدل‌سازی و برنامه‌های کامپیوتری می‌تواند در سه مرحله از جایگاه اختصاصی تحقیقات آب‌های زیرزمینی ارزشمند باشد: ۱) مشخصات جایگاه، ۲) ارزیابی نمایش و ۳) ارزیابی راه حل‌ها (چاره‌سازی‌ها).

مشخصات جایگاه

به طور نسبی مدل‌های ساده (از قبیل روش‌های تحلیلی) می‌توانند در مرحله اول جهت مشخص نمودن اهمیت کلی مسأله آلودگی احتمالی مفید باشند. مدل‌های انتقال مواد محلول که برای پراکندگی و بدون ضریب تأخیر به حساب می‌آیند می‌توانند در تعیین نوع جایگاه مفید باشند. آنها می‌توانند در تعیین اندازه منطقهٔ مورد مطالعه و در مکان‌یابی چاه‌های پایش کمک کنند. اگر مدل‌سازی کامپیوتری با مهارت بسیار خوبی طراحی شود، برنامه‌های اختصاصی که به کار می‌روند تا اندازه مشخصی، تلاش‌های مشخصه‌سازی جایگاه را به کمک پارامترهای موردنیاز آبخوان که بایستی به مدل داده شوند هدایت می‌کنند. مشخصات جایگاه، به ویژه جایی که نمونه‌های کیفیت آب برای امکان آلودگی‌های آلی آزمایش می‌شوند، می‌تواند مقادیر زیادی داده به دست آورد. کامپیوترها در گردآوری و پردازش این داده‌ها فوق‌العاده ارزشمند هستند.

ارزیابی نمایش[1]

رشد استفاده از ارزیابی نمایش در سرتاسر برنامه‌های سازمان حفاظت محیط زیست وجود دارد [۸]. در مورد آلودگی آب‌های زیرزمینی، نتایج ارزیابی نمایش اغلب تعیین خواهد کرد که آیا چاره‌سازی مورد نیاز هست یا نه.

چاره‌سازی[2]

مدل‌های پیش‌بینی می‌توانند به ویژه در تخمین اثرات احتمالی روش‌های متناوب برای چاره‌سازی آلودگی آب‌های زیرزمینی ارزشمند باشند [۶]. در جدول ۱ خلاصه‌ای از انواع مدل‌های مورد نیاز برای ویژگی‌های مختلف طرح چاره‌سازی ارائه شده است.

پارامترهای هیدروژئولوژیکی مدل

تمام مدل‌سازی‌ها، درگیر ساده نمودن فرضیات مربوط به پارامترهای سیستم فیزیکی شبیه‌سازی شده هستند. به علاوه، این پارامترها در نوع و پیچیدگی معادلاتی که در بیان مدل به صورت ریاضی استفاده می‌شوند مؤثر خواهند بود. هنگام توسعه یا انتخاب برنامه کامپیوتری برای شبیه‌سازی جریان آب زیرزمینی شش پارامتر عمده سیستم‌های آب زیرزمینی بایستی در نظرگرفته شوند و شش پارامتر اضافی نیز برای انتقال آلودگی در نظرگرفته می‌شوند.

پارامترهای جریان آب زیرزمینی

نوع آبخوان

مدل‌سازی آبخوان‌های بسته (محصور) با ضخامت یکنواخت، به علت قدرت انتقال ثابت مواد باقیمانده، از آبخوان‌های باز راحت‌تر می‌باشد. ضخامت آبخوان‌های باز (آزاد) با نوسانات سطح ایستابی تغییر می‌کند و بدین گونه محاسبات پیچیده می‌گردد. به طور مشابه، شبیه‌سازی آبخوان‌های بسته که دارای ضخامت متغیر می‌باشند پیچیده است چون سرعت‌ها عموماً در موارد کاهش ضخامت آبخوان افزایش و در موارد افزایش ضخامت آبخوان، کاهش می‌یابد.

مشخصات محیط متخلخل[3]

جریان در محیط‌های متخلخل برای مدل بسیار راحت‌تر از سنگ‌های شکسته شده یا تخلخل محلول است. این به علت آن است که اولاً معادلات حاکم بر جریان لایه‌ای از معادلات جریان متلاطم که ممکن است در سنگهای شکسته شده اتفاق افتد، ساده‌تر است و ثانیاً تخلخل مؤثر و هدایت

1- Exposure Assessment
2- Remediation
3- Matrix Characteristics

جدول ۱ - مدل‌سازی سیستم طراحی متناسب و فعالیت اصلاح کننده [۶، ۲۲]

خصوصیات طرح	اثرات بر آب زیرزمینی	نوع مدل مورد نیاز	مشکلات متداول مدل‌سازی
تسطیح و دوباره‌کاری پوشش گیاهی	کاهش نفوذ کاهش متوالی آب حاصل از نشت	مدل منطقه غیراشباع، دارای لایه‌های عمودی	پارامترهای مربوط به مشخصات نشت‌از خاکهای‌دوباره مصرف شده
پمپاژ آب زیرزمینی (و تزریق مجدد اختیاری آب تصفیه شده)	تغییرات‌درارتفاع، جهت‌جریان و حرکت آلاینده حذف کنترل شده توده آلودگی	مدل منطقه اشباع، ناحیه دوبعدی، متقارن یا سه‌بعدی، چاه‌یاسری چاه‌ها که به یک گره خاصی اختصاص داده می‌شود	نمایش‌نفوذجزیی
تزریق فاضلاب	تغییرات در ارتفاع و جهت جریان تولید توده آلودگی	مدل منطقه اشباع، ناحیه دوبعدی، متقارن یا سه‌بعدی، جریان وابسته به چگالی، اثرات تفاوت درجه حرارت	نمایش اثرات وابسته به چگالی
ترانشه‌های حائل	تغییرات‌درارتفاع، جهت‌جریان و حرکت آلاینده‌ها حذف توده آلودگی	مدل منطقه‌اشباع، ناحیه‌دوبعدی،یا برش عرضی، یا سه‌بعدی، ترانشه‌ها بوسیله خط گره‌ها با ارتفاع‌های تعیین شده نمایش داده می‌شود	نمایش‌نفوذجزیی،کوچک کردن دراجزادرنزدیکی ترانشه‌ها
مرز غیرقابل نفوذ (سیستم‌زهکشی‌اختیاری برای جلوگیری از بالاآمدن آب)	محتوی آب‌آلوده شده تعیین خط سیرآب زیرزمینی‌آلوده نشده در اطراف منطقه تغییر در ارتفاع‌و جهت جریان	مدل منطقه‌اشباع، ناحیه دوبعدی‌با برش‌عرضی، یاسه بعدی،امکان برش عرضی‌دوبعدی‌منطقه‌غیراشباع‌برای خطوط	نمایش نفوذجزیی، جریان و انتقال در اطراف انتهای مرزها هدایت‌الکتریکی یا مواد مرز تغییرات زیاد در هدایت الکتریکی بین عناصر همجوار، تفاوت در اندازه شبکه مورد نیاز
زهکش‌های زیرسطحی	حذف زه‌آبها، تغییرات در ارتفاع، جهت جریان و حرکت آلاینده‌ها	مدل منطقه‌اشباع‌یاترکیبی از منطقه غیراشباع، برش عرضی دو بعدی یا سه بعدی	کیفیت وضوح در نزدیک زهکش
استخراج معدن	حذف آلاینده‌ها بعد از تحرک واداری	مدل‌منطقه‌اشباع‌یاترکیبی‌از منطقه غیراشباع‌واشباع، برش عرضی دوبعدی‌یاسه‌بعدی‌خطوط‌منابع‌تغذیه (تزریق) و تخلیه (دفع)	پارامترهای‌مربوط‌به تحرک(ضریب جذب،ضریب‌تأخیر)
حفاری	حذف مواد زایدجامد و خاک آلوده تغییرات در مشخصات هیدرولیکی‌و شرایط مرزی،تغییرات‌درارتفاع و درجهت جریان	مدل‌منطقه‌غیراشباع،اشباع‌یاترکیبی‌از منطقه‌غیراشباع-اشباع؛برای‌بعضی مدل‌های غیراشباع حداقل یک‌بعدی عمودی،برای‌انواع دیگرحداقل‌مدل برش عرضی دوبعدی	پارامترهای مواد زمین پرکن

هیدرولیکی برای محیط متخلخل به مراتب آسان‌تر تخمین زده می‌شوند.

همگنی و همسان‌گردی [1]

آبخوان‌های همگن و همسان‌گرد، برای مدل‌سازی راحت‌ترین حالت هستند زیرا خواص اینها در هر سمت تغییر نمی‌کند. اگر خواص هیدرولیکی و غلظت‌ها به طور عمودی و در یکی از دو بعد افقی یکنواخت باشند، شبیه‌سازی یک بعدی امکان‌پذیر است. تغییرات خواص به صورت افقی با مشخصات عمودی یکنواخت می‌توانند به طور دو بعدی مدل شوند. به علت این که اکثر آبخوان‌ها تغییرات را در تمام جهات نشان می‌دهند و نتیجتاً نیازمند شبیه‌سازی سه بعدی می‌باشند، در نتیجه در ارتباط با خصوصیات محیط، اطلاعات اضافی لازم است. یکنواختی فضایی یا تغییرپذیری پارامترهای آبخوان از قبیل: تغذیه مجدد، هدایت هیدرولیکی، تخلخل مؤثر، ضریب آبگذری و ضریب ذخیره، تعداد ابعادی راکه به صورت مدل در خواهد آمد تعیین می‌نماید.

فازها

جریان آب‌های زیرزمینی و آب‌های زیرزمینی آلوده شده، هنگامی که ترکیبات حل شوندهٔ یک تودهٔ آلودگی در آن تفاوت‌های زیادی با آبخوان غیرآلوده از نظر چگالی یا لزجت ویسکوزیته ایجاد نکند، برای شبیه‌سازی نسبتاً آسان می‌باشند. فازهای متعدد، از قبیل آب و هوا در منطقه میانی و هیدروکربن‌های غیر محلول در آب [2] در آب‌زیرزمینی، برای شبیه‌سازی بسیار مشکل هستند.

تعداد آبخوان‌ها

شبیه‌سازی آبخوان واحد آسانتر از آبخوان‌های متعدد می‌باشد.

شرایط جریان

شبیه‌سازی جریان ثابت که بزرگی و جهت سرعت جریان نسبت به زمان در هر نقطه از حوزهٔ جریان ثابت است، نسبت به جریان ناپایدار بسیار راحت‌تر صورت می‌گیرد. جریان ناپایدار، یا غیر ثابت، هنگامی که تغییرات جریان در منطقه غیر اشباع در واکنش به تغییرات نزولات جوی و در منطقه اشباع نوسان سطح آب صورت می‌گیرد، اتفاق می‌افتد.

پارامترهای انتقال آلودگی

نوع منبع

به منظور شبیه‌سازی، منابع آلاینده می‌توانند به صورت نقطه، خط، مساحت و یا حجم، مشخصه‌بندی شوند. یک منبع نقطه‌ای مانند یک لوله تخلیه یا چاه تزریق، در یک نقطه واحد وارد آب زیرزمینی می‌شود، و می‌تواند به صورت یک، دو و یا سه بعدی شبیه‌سازی شود. یک نمونه منبع خطی، آلودگی‌های نشت یافته از کف یک ترانشه خواهد بود. یک منبع مسطح آب زیرزمینی به وسیله یک سطح افقی یا عمودی وارد آب زیرزمینی می‌گردد. منبع آلودگی واقعی ممکن است در خارج آبخوان به صورت سه بُعدی باشد، اما ورود آلودگی به داخل آبخوان می‌تواند به صورت یک سطح برای اهداف مدل‌سازی فرض شود. نشت از یک لاگون مواد زاید یا یک کشتزار کشاورزی، نمونه‌هایی از منابع سطحی آلودگی هستند. یک منبع حجمی، در داخل آبخوان سه بعد را اشغال می‌کند. هیدروکربن‌های دارای وزن مخصوص بیشتر از آب [3] که در کف آبخوان فرو رفته‌اند یک منبع حجمی از آلودگی خواهند بود. منابع خطی و سطحی می‌توانند به وسیله مدل‌های دو بعدی و یا سه بُعدی شبیه‌سازی شوند، در صورتی که یک منبع حجمی یک مدل سه بعدی نیاز خواهد داشت. شکل ۱ نوع توده آلودگی ناشی از دفن بهداشتی را در موارد زیر توضیح می‌دهد: ۱) منبع سطحی در بالای آبخوان، ۲) منبع سطحی در داخل آبخوان و عمود بر جهت جریان، ۳) منبع خطی عمودی در آبخوان، ۴) منبع نقطه‌ای در بالای آبخوان.

نوع انتشار منبع

انتشار یک مرحله‌ای آلودگی برای مدل آسانتر از انتشار پیوسته است. انتشار پیوسته ممکن است ثابت و متغیر باشد.

پراکندگی [4]

مدل‌سازی دقیق آلاینده نیازمند ترکیب انتقال به وسیله

1- Homogeneity and isotropy
2- Nonaqueous - Phase Liquids (NAPLs)
3- Dense Nonaqueous - Phase Liquids (DNAPLs)
4- Dispersion

پراکندگی است. متأسفانه قواعد معمول معادلهٔ همرفت - پراکندگی [1] اغلب به طور دقیق پراکندگی در مقیاس صحرایی را پیش‌بینی نمی‌کنند [۹].

جذب سطحی

برای شبیه‌سازی جذب سطحی، آسانترین روش توزیع واحد یا ضریب تجزیه [2] می‌باشد. جذب سطحی غیر خطی و موقتی و تغییرات مکانی در جذب سطحی، برای مدل بسیار مشکل می‌باشند.

تجزیه کیفیت

شبیه‌سازی تجزیه کیفیت [3] همانند جذب سطحی، هنگامی که از یک ضریب تجزیه درجه اول ساده استفاده می‌کند، آسان‌تر می‌باشد. ضرایب تجزیه درجه دوم که از تغییرات در پارامترهای متغیر از قبیل pH، غلظت ماده اولیه و جمعیت میکروبی نتیجه می‌شود، برای مدل بسیار مشکل می‌باشند. شبیه‌سازی تقلیل رادیواکتیو پیچیده است اما شبیه‌سازی دقیق زنجیره‌های تجزیه به علت آن که خوب شناخته شده‌اند آسانتر می‌باشد.

اثرات چگالی و لزجت

اگر درجه حرارت یا شوری توده آلوده کننده خیلی متفاوت از آنچه که یک آبخوان دست نخورده دارد باشد، شبیه‌سازی بایستی شامل اثرات تغییرات چگالی و لزجت باشد.

تقسیم‌بندی مدل‌ها

مدل‌های جریان آب‌های زیرزمینی ممکن است به روش‌های متفاوتی تقسیم‌بندی شوند. مدل‌ها ممکن است بر اساس ابعاد فضایی به صورت یک، دو یا سه بعدی و یا شبه سه‌بُعدی تقسیم‌بندی شوند. مدل‌ها ممکن است هم به صورت پایدار و هم ناپایدار [4] (تغییر زمان) یا به طور اختیاری برای هر یک از دو وضعیت در نظر گرفته شوند. مدل‌ها ممکن است به جریان سیال محدود شوند یا برای انتقال مواد محلول و یا انتقال حرارت در نظر گرفته شوند. فرایندهای تغییرات فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی شامل مدل‌های متفاوتی می‌باشند. مدل‌ها ممکن است جریان اشباع یا غیراشباع و یا هر دو را در نظر بگیرند. اساساً تمام مدل‌های آب زیرزمینی با محیط متخلخل سروکار دارند و تعدادی از آنها خصوصیات اضافه‌تری جهت مدل‌سازی جریان از میان سنگهای شکسته شده را دارند [۲۰].

منابع در زمینهٔ مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی

هیدرولوژی و هیدرولیک آب‌های زیرزمینی و هیدروژئولوژی آلاینده‌ها در کتاب‌های فریز و چری در سال ۱۹۷۹، دُمنیکو و استوارت در سال ۱۹۹۰ و فتر در سال ۱۹۹۳ آورده شده است [۷، ۱۰، ۱۱]. جزییات اصول و عملکرد مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی به وسیله بیر وورویت در سال ۱۹۸۷ وبیر و بچ مت در سال ۱۹۹۰ و اندرسون و وُسنردر سال ۱۹۹۲ طرح‌ریزی شده است [۳، ۴ و ۵]. اندرسون و همکاران در سال ۱۹۹۳ بازنگری مختصری از مدل‌های آب‌های زیرزمینی تهیه کردند و به طور وسیعی چندین کاربرد برجسته از بسته‌های نرم‌افزاری را تعمیم دادند [۲]. والتون در سال ۱۹۹۲ راهنمایی برای کاربرد یک نوع از برنامه‌های کمکی میکروکامپیوتر در مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی تهیه کرد [۲۶]. کمیته مشاوره تحقیقات ملی بر ارزیابی مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی در سال ۱۹۹۰ آخرین مدل‌های مدرن و پیشرفته [5] آب‌های زیرزمینی به وسیله وضع قوانین مختلف زیست محیطی از دور نمای توانایی‌ها، برای پشتیبانی مالی و فعالیتهای قانونی تعهد شده را ارزیابی نموده است [۱۸]. یه در سال ۱۹۹۲ روش‌های بهینه‌سازی راکه در برنامه‌ریزی و مدیریت آب‌های زیرزمینی به ویژه در توجه به مسأله معکوس واسنجی پارامترها کاربرد دارند، بازنگری نمود [۲۷]. جواندل و همکاران در سال ۱۹۸۴ مدل‌های انتقال آلاینده را مرور نمودند [۱۶]. ایستوک در سال ۱۹۸۹ روش عناصر محدود را به عنوان کاربرد در مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی طرح‌ریزی کرد [۱۴]. شرکت سهامی گراتی

1- Convective - dispersion equation
2- Partition Coefficient
3- Degradation
4- Steady state or transient
5- State - of - the - art

و میلر در سال ۱۹۹۱کتابی در مورد شناسایی انواع مختلف مراجع در مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی تهیه نمود [۱۲]. وان‌درهد و همکاران در سال ۱۹۸۸ مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی را بازنگری نموده و تقریباً به ۲۵۰ مورد از مدل‌های تولید شده که از منابع مختلف قابل تهیه هستند اشاره کردند [۲۳]. وان درهد و الناواوی در سال ۱۹۹۳ نوشته جامعی از مدل‌های آب زیرزمینی تهیه کرده‌اند [۲۵]. این نوشته محتوی نتایج ارزیابی توانایی‌های تعداد زیادی از نرم‌افزارهای آب زیرزمینی می‌باشد که برای شبیه‌سازی جریان، انتقال و فرایندهای نهایی در منطقه اشباع و غیراشباع و برای آنالیز مسائل مربوط به مدیریت آب‌های زیرزمینی طراحی شده‌اند. این نوشته دارای شرح مختصری از روش‌های تحقیقاتی و جداول محتوی اطلاعات جزیی در باره بیش از ۵۰۰ برنامه مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی می‌باشد.

جهت مدیریت اطلاعات در خصوص انواع نرم‌افزارها، مرکز بین‌المللی مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی[1] نسخه جدیدی از بانک اطلاعاتی نرم‌افزارهای مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی تحت نام مارس[2] (سیستم تفسیر و اصلاح مدل) را توسط وان درهد در سال ۱۹۹۴ توسعه داده است. این بانک اطلاعاتی جهت تطبیق و تصفیه اطلاعات مربوط به نرم‌افزارها برای شبیه‌سازی آب‌های‌زیرزمینی، آنالیزهای زمین آماری، آماده‌سازی ورودی‌های مدل، بازپردازش نتایج شبیه‌سازی و انواع مختلف سیستم‌های مشاوره‌ای طراحی شده است. تا سپتامبر ۱۹۹۴، این بانک اطلاعاتی دارای شرح و توصیف بیش از ۸۰۰نرم‌افزار بوده است. خلاصه‌ای از شرح اصطلاحات استفاده شده در نسخه ۴/۱ بانک اطلاعاتی مارس در جدول ۲ ارائه شده است [۲۴].

در نسخه ۴/۱بانک اطلاعاتی مارس تعداد ۳۷ دسته اصلی از نرم‌افزارهای طبقه‌بندی شده وجود دارد. گستره این دسته‌ها شامل جریان و انتقال (از قبیل جریان اشباع، جریان غیراشباع، انتقال مواد محلول، انتقال حرارت، انتقال ویروس)، آنالیز آزمایش‌ها (از قبیل آزمایش آبخوان، آنالیزهای آزمایش مواد ردیاب)، شناسایی پارامترها (از قبیل مدل معکوس، محیط متخلخل دوتایی[3]) و نهایتاً روش‌های یکپارچه‌سازی پارامترها[4] (از قبیل: بیلان آب[5]، بیلان حرارت، موازنه وزنی شیمیایی[6]) می‌باشد. لیست کامل این طبقه‌بندی‌ها در جدول ۳ با ذکر نام طبقه‌بندی و شرح مختصری از نوع نرم‌افزار که تحت نامشان ذخیره شده‌اند ارائه گردیده است [۲۴].

مدل‌سازی فرایندهای جریان سیال و انتقال مواد محلول

مدل‌سازی آب‌های زیرزمینی شامل فرایندهای وابسته به هم از قبیل جریان سیال، انتقال مواد محلول و انتقال حرارت می‌باشند. مدل‌های آب زیرزمینی حرکت آب و دیگر سیالات را در سیستم‌های متخلخل یا سنگ‌های شکسته شده شبیه‌سازی می‌نمایند. علاوه بر آب، سیالات مهم دیگر از قبیل هوا یا هیدروکربن‌ها در بسیاری از کاربردهای مدل‌سازی به کار می‌روند. آلاینده‌های پیچیده مایع ممکن است مرکب از ترکیبات شیمیایی محلول و نامحلول با تفاوت در جرم حجمی و لزجت باشند. هجوم آب شور یکی دیگر از پدیده‌های جریان ناشی از جرم حجمی می‌باشد. دو فرایند مهم در مدل‌های جریان عبارتنداز: جریان در واکنش با پتانسیل شیب هیدرولیکی[7] وکاهش یا افزایش آب از منابع تغذیه و تخلیه[8]، که شامل تغذیه یا جریان‌های خروجی طبیعی، چاه‌های پمپاژ یا تزریق و افزایش یاکاهش آنها در منابع ذخیره می‌باشد. مدل‌های جریان برای شرایط اشباع، غیراشباع و قابل تغییر برای اشباع و غیر اشباع توسعه داده شده‌اند. مدل‌های اشباع قابل تغییر، تحت هر دو شرایط از یک سری معادلات واحد استفاده می‌کنند. دیگر مدل‌های جفت شده برای منطقه اشباع - غیر اشباع دارای فرمولهای جداگانه‌ای برای شبیه‌سازی جریان در دو منطقه می‌باشند.

فرمول‌های ریاضی برای جریان آب‌های زیرزمینی بر

1- IGWMC
2- Model Annotation and Retrieval System (MARS)
3- Dual porosity medium
4- Lumped parameter approaches
5- Water budget
6- Chemical mass balance
7- Hydraulic potential gradients
8- Sinks and sources

جدول ۲- خلاصه‌ای از شرح اصطلاحات استفاده شده در نسخه ۴/۱ بانک اطلاعاتی MARS

اطلاعات کلی	جزییات
شماره مشخصه نرم‌افزار IGWMC (شماره راهنمای IGWMC)	توانایی‌های ابعادی مسأله
نام نرم‌افزار، نسخه اخیر و تاریخ نشر	هیدروژئولوژیک و یا ساختمان لایه‌بندی خاک
نویسنده نرم‌افزار	نشانی‌های جریان، انتقال مواد محلول، انتقال حرارت و فرایندهای تغییر شکل محیط
نوع و طبقه‌بندی مدل	
موضوع و هدف توسعه مدل	مشخصات سیستم جریان
خلاصه مقاله (شرح کوتاهی از مشخصات نرم‌افزارهای اصلی)	نوع مواد خاک و سنگ
نیازمندی‌های نرم‌افزاری و سخت‌افزاری	موارد فرایندهای هیدروژئوشیمیایی
ارزیابی IGWMC از آزمایش مستندات و برنامه‌ها	پشتیبانی شرایط مرزی
توانایی‌های پردازش ورودی برنامه	مشخصات شبکه عددی
توانایی‌های پردازش خروجی برنامه	تکنیک‌های حل ریاضی (فرموله کردن، راه حل‌ها، روش‌های معکوس‌سازی، بهینه‌سازی)
اصطلاحات قابل دسترسی به برنامه	
قابلیت دسترسی به مدل مورد نظر	نیازمندی‌های ورودی
نام و آدرس توزیع کننده برنامه	توانایی‌های خروجی
نام و آدرس سازمان نگهداری کننده برنامه	مراجع مربوط به متون
نام و آدرس سازمان توسعه دهنده برنامه	

جدول ۳- دسته‌های اصلی نرم‌افزار به صورت طبقه‌بندی شده در نسخه ۴/۱ بانک اطلاعاتی MARS

طبقه‌بندی	اصطلاح	شرح
۱	جریان اشباع	جریان آب زیرزمینی در منطقه اشباع؛ شامل خط مسیر، خط جریان و مدل‌های منطقه هجومی بر اساس معادلات جریان
۲	جریان غیر اشباع	جریان آب در منطقه غیراشباع؛ فاز واحد یا توأم با جریان هوا
۳	جریان و انتقال بخار	حرکت بخار در خاک‌ها و فعل و انفعال شیمیایی بین فاز بخار و فاز جامد و یا مایع
۴	انتقال مواد محلول	حرکت و تغییرات بیوشیمیایی مواد شیمیایی محلول در آب و فعل و انفعال شیمیایی آنها با محیط خاک و سنگ
۵	انتقال حرارت	انتقال حرارت در سنگ و خاک اشباع (تا یک اندازه)
۶	تغییر شکل محیط	تغییر شکل خاک یا سنگ آبخوان ناشی از دفع یا تزریق آب یا تغییر در زیر بار قرار دادن
۷	ژئوشیمیایی	واکنش‌های شیمیایی در فاز سیال و بین فاز سیال و فاز جامد
۸	بهینه سازی	مدل‌های جریان و انتقال شامل بهینه‌سازی ریاضی برای بهترین حالت مدیریت
۹	هیدرولیک آب‌های سطحی و زیرزمینی	فعل و انفعال بین آب زیرزمینی و آب سطحی در اصطلاحات مبادله جرم سیال توضیح داده شده؛ هیدرولیک آب زیرزمینی و آب سطحی هر دو توضیح داده شده‌اند.

ادامهٔ جدول ۳- دسته‌های اصلی نرم‌افزار به صورت طبقه‌بندی شده در نسخه ۴/۱ بانک اطلاعاتی MARS

طبقه‌بندی	اصطلاح	شرح
۱۰	پارامتر IDجریان اشباع	محاسبه پارامترهای تابع هیدرولیک خاک از اندازه‌گیری آزمایشگاهی
۱۱	مدل معکوس‌سازی	مدل‌های عددی برای شناسایی پارامترهای جریان و یا انتقال توزیع داده شده در منطقه اشباع
۱۲	آنالیزهای آزمایش آبخوان	مدل‌های تحلیلی و عددی برای ارزیابی پارامترهای جریان آبخوان توسط آزمایش‌های پمپاژ
۱۳	آنالیزهای آزمایش موادردیاب	مدل‌های تحلیلی و عددی برای ارزیابی پارامترهای انتقال آبخوان توسط آزمایشهای مواد ردیاب
۱۴	جریان آب و بخار	مدل‌های انتقال حرارت به صورتی که هر دو فازهای مایع و بخار توضیح داده شود و به تغییرات فاز توجه شده است
۱۵	جریان آب شیرین و شور	روند یافتن مرز صریح[1] با جریان آب شیرین و همچنین و هم جریان در هر دو منطقه آب شیرین و شور
۱۶	جریان چند فازی	جریان آب، NAPL و یا هوا و بخار
۱۷	رواناب حوزه آبریز	رواناب آب‌های سطحی، نهرها و آب‌های زیرزمینی حوزه آبریز
۱۸	روانآبهای سطحی	جریان عادی رواناب نهرها
۱۹	انتقال مواد رسوبی	انتقال مواد رسوبی سطحی
۲۰	انتقال ویروس	انتقال ویروس‌ها
۲۱	تغییر شکل بیوشیمیایی	مدل‌های هیدروشیمیایی یا انتقال مواد محلول که شامل واکنش‌های بیوشیمیایی خاص و معادلات رشد و مرگ و میر جمعیت
۲۲	پیش‌پردازی و پس‌پردازی	آماده‌سازی ورودی مدل و اصلاح خروجی یا نمایش آن‌ها
۲۳	شبیه‌سازی نامعین	شامل آنالیزهای مونت کارلو[2]
۲۴	زمین آماری	کراگنیگ
۲۵	آنالیزهای در معرض خطر	مدل‌های آنالیز ارزشیابی در معرض خطر برای آب‌های زیرزمینی، آب‌های سطحی و مسیرهای جوی
۲۶	سیستم کارشناسی	سیستم مشاوره‌ای جهت آب‌های زیرزمینی
۲۷	بانک اطلاعاتی	بانک اطلاعاتی جهت کاربرد آب‌های زیرزمینی
۲۸	رتبه‌بندی و نمایش	طبقه‌بندی؛ بدون شبیه‌سازی
۲۹	شبکه شکسته	بدون تخلخل اولیه، صرفاً شکستگی‌های متصل شده؛ شبکه مجزا از اتصال شکستگی‌ها در گره‌های شبکه
۳۰	محیط متخلخل	نوع محیط تعریف شده، صرفاً تخلخل اولیه
۳۱	محیط تخلخل دوتایی	محیط تخلخل شکسته شده با بلوک‌های متخلخل به وسیله شکستگی‌های متصل شده یا متصل نشده تقسیم شده‌اند؛ مبادله جرم بین بلوک‌های شکسته و متخلخل
۳۲	محیط متخلخل، شکستگی‌ها	محیط متخلخل با شکستگی‌های منحصر به فرد
۳۳	کارست	مدل‌های اختصاصی طراحی شده برای سیستم‌های کارستی (جریان لوله‌ای، جریان غیر دارسی و غیره)
۳۴	بیلان آب	روش‌های یکپارچه سازی پارامترها برای جریان آب‌های زیرزمینی
۳۵	بیلان حرارت	روش‌های یکپارچه سازی پارامترها برای جریان حرارت
۳۶	تعادل وزنی شیمیایی	روش یکپارچه سازی پارامترها برای انتقال مواد محلول
۳۷	تبدیل سطح آب	تبدیل سطح آب مشاهده شده به سرعت‌های استفاده شده در قانون دارسی

1- Sharp interface approach

2- Monte Carlo

اساس اصل بقای جرم و حرکت، پایه گذاری شده‌اند. بقای جرم به وسیله معادله پیوستگی بیان شده است. قانون خطی دارسی برای جریان لایه‌ای، یک معادله حرکت که در بسیاری از حالت‌های جریان اشباع کاربرد دارد فراهم کرده است. اگرچه راه حل‌های تحلیلی برای بعضی مدل‌های نسبتاً ساده پذیرفته شده‌اند، ولی بیشتر مدل‌های پیچیدهٔ آب زیرزمینی ترکیبی از روش‌های حل عددی تفاضل‌های محدود یا عناصر محدود توسط معادلات حاکم بر دیفرانسیل جزیی می‌باشند. در یک مدل عددی، حوزه پیوسته به وسیله یک حوزه جدا شده که شامل آرایه‌ای از گره‌ها و سلول‌های اشتراکی تفاضل‌های محدود و عناصر محدود می‌باشد، جایگزین شده است. چارچوب مدل عددی نوعی از شبکه گره‌ای می‌باشد. ضرایب هدایت هیدرولیکی و ذخیره که از خصوصیات سیستم آب‌های زیرزمینی است برای هر گره، سلول یا جزء (المان) مشخص شده‌اند. معادلات حاکم برای هر موقعیت شبکه و توزیع ارتفاع‌ها و سرعت‌ها که بر طبق آن محاسبه می‌شود فرمول‌سازی شده‌اند.

شرایط مرزی و اولیه در فرمول سازی یک مدل برای سیستم آب زیرزمینی ویژه، اختصاص یافته‌اند. شرایط مرزی دستورات ریاضی برای مشخص نمودن متغیر وابسته (ارتفاع) یا مشتق متغیر وابسته (جریان[1]) در مرزهای حوزه مورد مطالعه هستند. مرزهای فیزیکی سیستم‌های جریان آب زیرزمینی به وسیله یک سطح غیر قابل نفوذ از سنگ یا سطح وسیعی از آب‌های سطحی تبیین می‌شود. به عبارت دیگر جداسازی آب‌های زیرزمینی به صورت مرزهای هیدرولیکی یا خط جریان می‌باشد. شرایط مرزی برای شبیه‌سازی جریان می‌توانند به صورت ارتفاع معلوم[2]، جریان معلوم[3] و جریان وابسته به ارتفاع[4] طبقه‌بندی شوند. مدل‌های جریان متلاطم (ناپایدار) به مشخصات شرایط اولیه نیاز دارند، که شامل توزیع ارتفاع در سرتاسر سیستم در آغاز شبیه‌سازی می‌باشد. حل ارتفاع پایدار که به وسیله یک مدل واسنجی شده به وجود آمده است اغلب به عنوان شرایط اولیه در مدل‌های ناپایدار استفاده می‌شود.

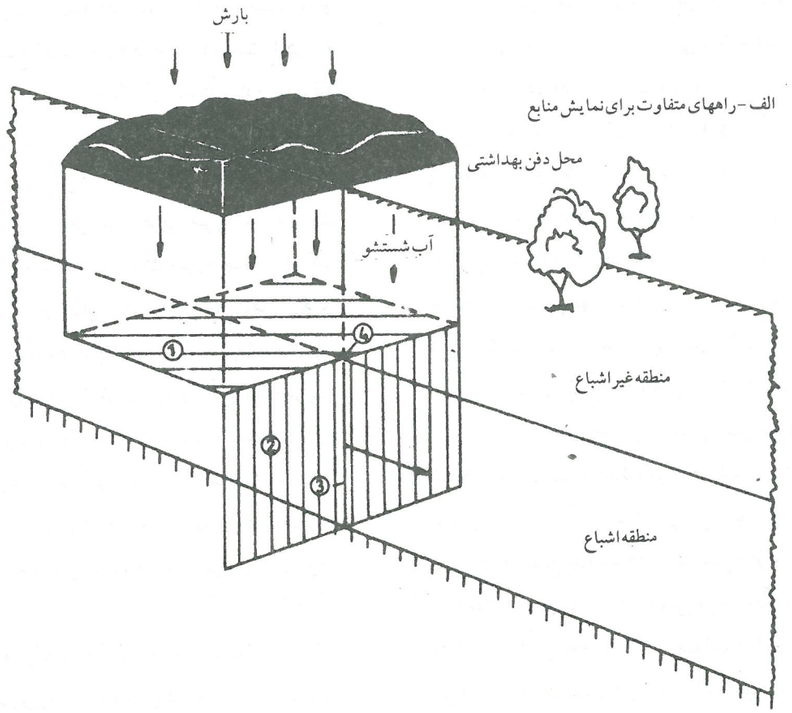
مدل‌های انتقال آلاینده، مدل کامل‌تر و توسعه یافتهٔ مدل‌های جریان سیال می‌باشند. انتقال مواد شیمیایی محلول و مواد زنده از قبیل باکتری‌ها و ویروس‌ها مستقیماً به جریان آب بستگی دارد. به هر حال انتقال آلاینده درگیر عامل پیچیده‌ای از فرایندهای بسیار مهم می‌باشد. بسیاری از ترکیبات موجود در آب‌های زیرزمینی به طور فیزیکی و شیمیایی با همدیگر و با محیط جامد در فعل و انفعال هستند. انتقال مواد محلول درگیر در هر دو فرایند انتقال فیزیکی (از قبیل حرکت توده افقی[5] و پراکندگی[6]) و فعل و انفعالات فیزیکی و شیمیایی (از قبیل جذب سطحی و پراکندگی، تعویض یونی، حل‌ناپذیری و ته‌نشینی، اکسیداسیون و احیاء و تلاشی رادیواکتیو) می‌باشد. به علاوه تغییرات موجودات زنده[7] نیز می‌توانند نقش مهمی در تغییر ترکیب‌بندی آب‌های زیرزمینی داشته باشد.

مدل‌های انتقال مواد محلول بر اساس کاربرد اصل بقای جرم برای هر یک از اجزای شیمیایی مورد نظر پایه گذاری شده‌اند. معادلات حاصله، بیان کنندهٔ فرایندهای فیزیکی، شیمیایی و زیستی[8] (بیوتیک) و فعل و انفعالات بین اجزای مواد حل شده و سطح جامد محیط متخلخل و از جمله تغییرات خود مواد حل شده می‌باشند. در بعضی موارد چگونگی معادلات در مدل، مشتمل بر انعکاس تأثیر تغییرات دما و غلظت ماده حل شونده در جریان سیال به واسطه تأثیر تغییرات بر جرم حجمی و لزجت می‌باشند.

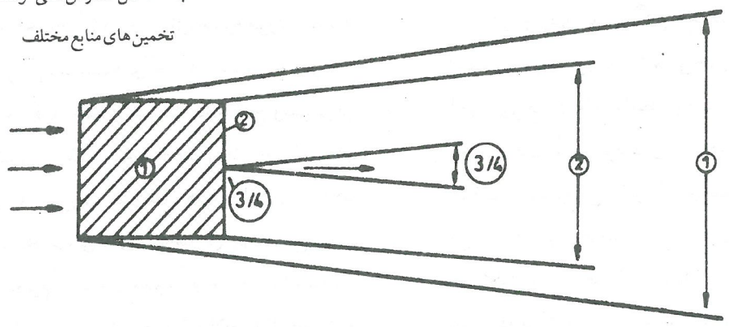
در مواردی که آلودگی با غلظت‌های بالا در فاضلاب‌ها یا آب‌های بسیار شور به چشم می‌خورد، تغییرات در غلظت‌ها، الگوهای جریان را به واسطهٔ ایجاد تغییرات در جرم حجمی و لزجت تحت تأثیر خود قرار می‌دهد که به نوبهٔ خود جهت حرکت و پخشیدگی[9] آلودگی و غلظت‌ها را تحت تأثیر قرار می‌دهد. در این وضعیت، مدل بایستی هم به طور توأم[10] و هم با حل تکراری[11]، معادلات جریان و انتقال مواد محلول را ترکیب نماید. در دیگر مواردی که غلظت آلودگی کم می‌باشد و تفاوت قابل صرفنظر در وزن مخصوص بین آلودگی و آب ایجاد

1- Flux
2- Specified head
3- Specified flux
4- Head - dependent flux
5- Advection
6- Dispersion
7- Biotransformation
8- Biotic
9- Spreading
10- Simultaneous
11- Iterative solution

الف - راههای متفاوت برای نمایش منابع

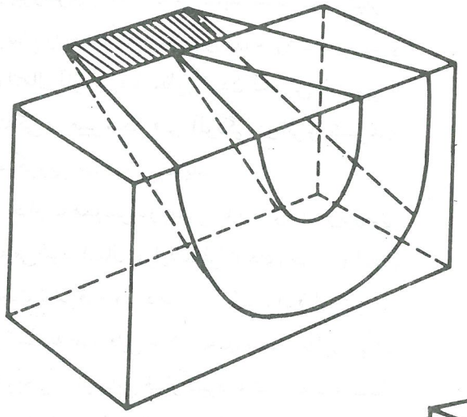


ب - حاصل گسترش افقی توسط
تخمین های منابع مختلف

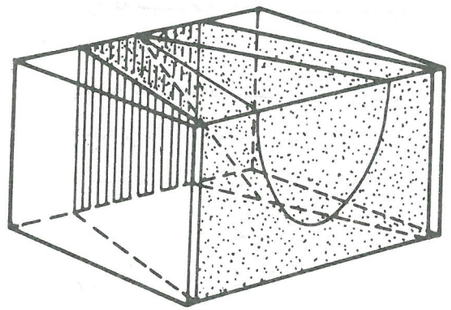


شکل ۱ - تعریفی از شرایط مرزی منبع تحت تراوش دفن بهداشتی
(شماره‌های ۱ تا ۴ ارجاع به موارد ۱ تا ۴ می‌باشند [۲۲].

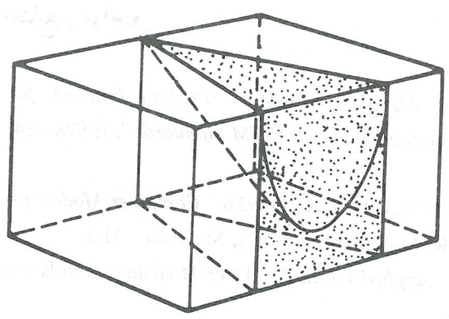
ج - نمایش جزئیات پراکندگی سه بعدی جهت
راههای متفاوت برای نمایش مرزهای منبع



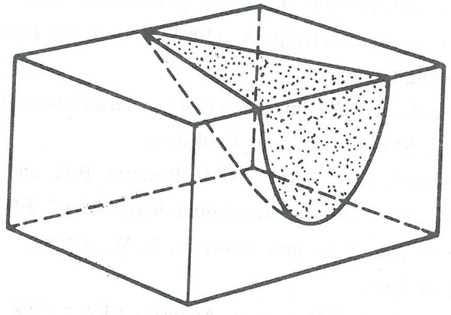
مورد ۱:
منبع سطحی دو بعدی افقی در بالای
آبخوان (برای مدل سازی سه بعدی)



مورد ۲:
منبع دو بعدی عمودی در آبخوان
(برای مدل سازی متوسط افقی،
به طور عمودی دو یا سه بعدی)



مورد ۳:
منبع خطی عمودی یک بعدی در آبخوان
(برای مدل سازی متوسط افقی، به طور
عمودی، مقطع عرضی دو یا سه بعدی)



مورد ۴:
منبع نقطه‌ای در بالای آبخوان
(برای مدل سازی دو یا سه بعدی)

ادامه شکل ۱

می‌گردد، مدل آب‌های زیرزمینی ممکن است از یک زیر مدل جریان و یک زیر مدل کیفیت ساخته شود. مدل جریان ارتفاع‌های پیزومتری را محاسبه می‌نماید. سپس مدل کیفیت، داده‌های ارتفاع را جهت به دست آوردن سرعت‌هایی برای تغییر مکان انتقال آلودگی، با منظور کردن گسترش افزایشی از طریق پراکندگی و تغییر شکل‌های آلودگی در اثر واکنش‌های شیمیایی و میکروبی استفاده می‌نماید.

انتقال حرارت همچنین در بعضی مدل‌های آب زیرزمینی در نظر گرفته می‌شود. انتقال حرارت، فرایندهای جریان و انتقال آلاینده را تحت تأثیر قرار می‌دهد. برعکس، انتقال حرارت خود ممکن است به طور قابل ملاحظه‌ای تحت تأثیر دیگر فرایندهای فیزیکی و شیمیایی قرارگیرد. منشأ معادله انتقال حرارت کاربرد اصل تعادل انرژی مربوط به انتقال، ذخیره و منابع تغذیه و تخلیه بیرونی حرارت می‌باشد. متغیرهای وابسته ممکن است دما یا انتالپی[1] باشند.

مسائل معدودی از جریان و انتقال آلاینده‌های آب زیرزمینی وجود دارد که می‌توانند با اطمینان به صورت مدل در آیند [۱۸]. تا این زمان بیشترین نتایج رضایت بخش مربوط به مدل‌های جریان آب یا انتقال یک آلاینده واکنش ناپذیر واحد در یک محیط متخلخل اشباع می‌باشد. فرایندهایی که جریان آب‌های زیرزمینی اشباع راکنترل می‌کنند به طور مستدل به خوبی درک شده‌اند و اگر داده‌های کافی در اختیار مدل‌های استاندارد این فرایندها قرار بگیرد به طور کلی قابلیت‌هایی برای به دست آوردن پیش‌بینی‌های مطمئن تأمین می‌نمایند. غیرهمجنس بودن سیستم‌های آب زیرزمینی محیط طبیعی یک مسأله اصلی در توسعه داده‌های ورودی می‌باشد. همان طور که سیستم‌ها به علت شرایط غیراشباع، شکستگی، حضور چندین سیال متحرک یا وجود آلودگی‌های واکنش‌زا بیشتر پیچیده شوند سؤالات بسیاری در بارهٔ تضمین کفایت و یا اعتبار مدل‌های بالا به وجود می‌آید [۲۰].

1- Enthalpy

منابع و مراجع

1- American Society for Testing and Materials (ASTM), (1984). " *Standard Practices for Evaluating Environmental Fate Models of Chemical: Annual Book of ASTM Standards* ", E 978 - 84, ASTM, Philadelphia, PA.

2- Anderson, M. P., Ward, D. S. Lappala, E.G. and Prickett, T.A., (1993). " *Computer Models for Subsurface Water* ", Handbook of Hydrology (D. R. Maidment, editor), McGraw - Hill.

3- Anderson, M. P., and Woessner, W.W., (1992). " *Applied Ground - Water Modeling, Simulation of Flow and Advective Transport* ", Academic Press.

4- Bear, J., and Verruijt, A., (1987). " *Modeling Ground - Water Flow and Pollution* ", D. Reidel Publishing Company.

5- Bear, J., and Bachmat, Y. (1990). " *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media* ", Kluwer Academic Publishers.

6- Boutwell, S.H., Brown, S.M., Roberts, B.R. and Atwood, D.F., (1985). " *Modeling Remedial Actions at Uncontrolled Hazardous Waste Sites* ", EPA 540/2 - 85/001.

7- Domenico, P.A., and Schwatrz, F. W., (1990). " *Physical and Chemical Hydrogeology* ", John Wiley & Sons.

8- Environmental Protection Agency (EPA), (1987). " *The Use of Models in Managing Ground - Water Protection Programs* ", EPA 600/8 - 87/003.

9- Environmetntal protection Agency (EPA), (1988). " *Selection Criteria for Mathematical Models Used in Exposure Asseessment* ", Ground - Water Molels, EPA 600/80/75.

10- Fetter, C. W., (1993). " *Contaminant Hydrogeology* ", Mcmillan.

11- Freeze, R. A., Cherry, J . A., (1979). " *Ground - Water* ", Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ.

12- Geraghty and Miller, Inc., (1991). " *Geraghty & Miller's Ground - Water Bibliography.* " 5th edition, Water Information Center, Inc., Syosset, New York.

13- Holcomb Research Institute, (1976). " *Environmetnal Modeling and Decision - Making* ", Praeger Publishers, New York.

14- Istok, J., (1989). " *Ground - Water Modeling by the Finite Element Method* ", Water Resources Monograph 13, American Geophysical Union, Washington, D.C.

15- Iverson, D. C. and Alston, R. M. (1986). " *The Genesis of FORPLAN: A Historical and Analytical Review of Forest Service Planning Models* ", GTR - INT - 214. U.S. Forest Service Intermountain Research Station, Ogden, UT.

16- Javandel, I., Doughty, C. and Tsang, C.F., (1984). " *Ground - Water Transport: Handbook of Mathematical Models: AGU* ", Water Resources Monograph, No. 10., American Geophysical Union, Washington, D.C.

17- Khan, I. A. (1986). " *Inverse Problem in Ground Water: Model Development* ", Ground Water Vol.24, No.1, pp.32-38.

18- National Research Council Committee on Ground Water Modeling Assessment,(1990). " *Ground Water Models: Scientific and Regulatory Applications* ", National Academy Press, Washington, D.C.

19- Office of Technology Assessment (OTA), (1982). " *Use of Models for Water Resources Management, Planning, and Policy* ", OTA, Washington, D.C.

20- Ralph, A., W., (1995). " *Water Management Models, A Guide to Software* ", Prentice Hill, PTR.

21- Van der Heijde, P.K.M. (1985). " *The Role of Modeling in Development of Ground - Water Protection Policies* ", Ground Water Modeling Newsletter, Vol. 4, No.2.

22- Vand der Heijde, P.K.M., EI - Kadi, A.I. and Williams, S.A. (1988). " *Ground - Water Modeling: An Overview and Status Report* ", International Ground Water Modeling, Butler University, Indianapolis, IN.

23- Van der Heijde, P.K.M., EI - Kadi, A.I. and Williams, S.A. (1988). " *Ground - Water Modeling: An Overview and Status Report* ", EPA/600/2 - 89/028, U.S.EPA, December.

24- Van der Heijde, P.K.M., (1996). " *Compilation of Saturated and Unsaturated Zone Modeling Software* ", EPA/600/SR-96/009, U.S.EPA, National Risk Management Research Laboratory, Ada, Oklahoma.

25- Van der Heijde, P.K.M. and Elnawawy, O.A. (1993). " *Compilation of Ground - Water Models* ", EPA/600/R-93/118, U.S.EPA, Robert, S. Kerr Environmental Research Laboratory, Ada, Oklahoma.

26- Walton, W.C., (1992). " *Ground - Water Modeling Utilities* ", Lewis Publishers.

27- Yeh, W. W- G., (1992). " *Systems analysis in ground - water planing and management* ", Journal of Water Resources Planning and Management, American Society of Civil Engineers, Vol. 118, No. 3, May / June.