

## حساسیت سنجی در مدل سازی انتقال آلاینده های محلول در آب زیرزمینی

ناهید سادات جعفری<sup>۱\*</sup>، سعید علیمحمدی<sup>۲</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد سازه هیدرولیکی، دانشگاه شهید بهشتی تهران، ایران.

۲- دانشیار دانشگاه شهید بهشتی تهران، ایران.

\*نویسنده مسئول: [nahid4225205@gmail.com](mailto:nahid4225205@gmail.com)

### چکیده

مدل سازی کیفی آب های زیرزمینی ابزاری مفید برای شناسایی چگونگی انتقال آلاینده ها در محیط متخلخل آبخوان است. این مدل ها شامل پارامترهای متعددی هستند که اغلب بر اساس مطالعات پیشین یا قضاوت کارشناسی برآورد می شوند، یا در بهترین شرایط بر اساس اندازه گیری های محدود میدانی برآورد می گردند. در نتیجه داده های ورودی به مدل های شبیه سازی دقیق نیستند و همراه با خطاهایی هستند و لازم است در ابتدا پارامترهای مؤثر و حساس نسبت به خروجی های مدل مشخص شوند. هدف این مطالعه تحلیل حساسیت پارامترهای مدل جریان و مدل انتقال آلاینده محلول در آب زیرزمینی و تعیین پارامترهای حساس بر انتقال آلاینده است. با استفاده از مدل سازی مثالی از راهنمای MT3DMS و تحلیل حساسیت به روش موضعی، پارامترهای حساس بر انتقال آلاینده محلول در آب زیرزمینی تعیین شده است. پارامترهای مؤثر بر غلظت آلاینده محلول از تحلیل حساسیت موضعی به ترتیب هدایت هیدرولیکی، ضریب کاهشی، تخلخل، ضریب توزیع و ضریب پخشیدگی و پارامترهای مؤثر بر زمان به ترتیب هدایت هیدرولیکی، ضریب توزیع، تخلخل، ضریب پخشیدگی و ضریب کاهشی بودند.

واژه های کلیدی: آب زیرزمینی، آلاینده محلول، تحلیل حساسیت، MOFLOW، MT3DMS

### ۱- مقدمه

زمین شناسی تا حدودی شناخته شده است و اندازه گیری های خصوصیات زیرسطحی یا هد آب زیرزمینی پراکنده و متمایل به داشتن خطا است، برای مقابله با این مشکلات استفاده از تکنیک های شبیه سازی یک روش مفید و قدرتمند در تعیین سناریوهای مدیریتی و طراحی برای توسعه و بهره برداری بهینه از منابع آب زیرزمینی می باشد. مدل های شبیه سازی سیستم آب زیرزمینی توانایی شبیه سازی پاسخ های سیستم به سناریوهای مدیریتی معلوم را دارند (Rojas R. et al. 2008).

آب های زیرزمینی یکی از منابع مهم و اصلی برای مصارف مختلف از جمله کشاورزی، صنعت و نیازهای شهری است ولی این منبع مهم در سال های اخیر با مشکلاتی از جمله افت سطح و آلودگی های محلول یا نامحلول دچار شده است.

با افزایش فشارهای بشر و اقلیم بر روی منابع آب، پیش بینی های دقیق از حجم آب برای شیوه های مدیریت پایدار امری ضروری است، با این وجود عموماً، ساختار

حالتی که در منابع طبیعی و انجام تجزیه و تحلیل مناسب در جایی که مقدار زیادی اطلاعات و داده‌های موجود مشاهداتی وجود ندارد.

ریمونتی و موری مدل‌های جریان آب زیرزمینی تصادفی سه‌بعدی و مدل حمل و نقل آلاینده برای بهینه‌سازی محدودیت‌های آب زیرزمینی در یک محل صنعتی در ایتالیا استفاده کرده‌اند و توزیع آلودگی آینده در این مکان تحت سناریوهای مختلف اصلاح شده است، مورد بررسی قرار داده‌اند. منطقه مورد مطالعه در مرکز ایتالیا واقع شده است و یک کارخانه شیمیایی فعال که محصولات دارویی را تولید می‌کند. در ابتدا با استفاده از یک رویکرد قطعی برای شبیه‌سازی شرایط هیدروشیمیایی کالبره می‌شود، سپس یک شبیه‌سازی احتمالی برای پیش‌بینی غلظت آلودگی‌های آینده انجام می‌شود و در نهایت استخراج آب‌های زیرزمینی بهینه می‌شود. این رویکرد تصادفی این امکان را می‌دهد که عدم قطعیت پارامترهای هیدروژئولوژی و شیمیایی در مدل بعد از بهینه‌سازی نرخ پمپاژ چاه‌های بهره‌برداری تخمین زده شود. برای شبیه‌سازی منطقه مورد نظر از نرم‌افزار *GMS* از مدل شبیه‌سازی *MODFLOW* برای شبیه‌سازی کمی و از مدل شبیه‌سازی *MT3D* برای شبیه‌سازی کیفی استفاده شده است. برای نشان دادن عدم قطعیت در پارامترهای شبیه‌سازی شده از روش مونت کارلو استفاده شده است، مجموعه‌ای از مقادیر پارامترهای انتخاب شده در توزیع‌های آماری مختلف در چندین مدل اجرا می‌شوند. بر اساس مقادیر تجربی و قضاوت حرفه‌ای، برای پارامترهای دارای عدم قطعیت توزیع احتمالاتی در نظر گرفته می‌شود. در این پژوهش سناریوهایی جهت بهبود غلظت آلاینده‌ها در آینده به کار برده شده است و هر کدام توسط مدل شبیه‌سازی اجرا شدند و از نتایج به دست آمده می‌توان در بهبود شرایط منطقه مورد مطالعه استفاده کرد (Michele Remonti and Piero Mori, 2016).

مدل‌سازی آب زیرزمینی و تصمیم‌گیری‌های مدیریتی در این مورد، با عدم قطعیت‌هایی نشأت گرفته از آگاهی ناقص از سیستم زیرسطحی یا عدم قطعیت‌های نشأت گرفته از تغییرپذیری‌های طبیعی در فرآیندهای سیستم و شرایط میدانی، همراه شده است. در مدل‌سازی و آنالیز انتقال آلودگی در آب‌های زیرزمینی به دلیل عوامل مختلفی همچون کمبود اطلاعات و تصادفی بودن پیامدها با عدم قطعیت‌هایی مواجه هستیم. کمبود اطلاعات مربوط به خصوصیات محیط‌های متخلخل و چگونگی حرکت آب و انتقال آلاینده مورد نظر در محیط متخلخل است. تصادفی بودن پیامدها از جمله، بارش باران، تبخیر و تعرق و... شامل می‌شود. عدم قطعیت را می‌توان کمبود اطلاعات در مورد پدیده‌ها، داده‌های تعریف شده در مسئله و حل مسئله تعریف کرد. به صورت ساده‌تر، پیشامدهایی که ناشی از حادثه‌هایی که در واقع غیرقابل کنترل هستند تعریف کرد (Mays & Tung 1992).

به دلیل وجود عدم اطمینان در بیشتر کارهای پژوهشی تحقیقاتی و تأثیر بسیار این عدم اطمینان‌ها بر روی نتیجه پژوهش‌های مورد نظر، مطالعات بسیاری در زمینه تحلیل عدم قطعیت‌های موجود در پژوهش مورد نظر انجام شده است.

مهاجرانی و همکاران (۲۰۱۷) مطالعه‌ای در زمینه مدیریت منابع آب زیرزمینی را با استفاده از شبکه تصمیم‌گیری بیزی (BDN) ارائه داده‌اند. منطقه کردکوی در شمال شرقی ایران به عنوان منطقه مورد مطالعه انتخاب شده است، این منطقه بر اساس ضریب انتقال (T) و هدایت الکتریکی (EC) به سه بخش تقسیم‌بندی شده است. نتایج نشان داده است که احتمال پایین آمدن تراز سطح آب‌های زیرزمینی مناطق جنوبی در مقایسه با مناطق دیگر نسبتاً بالا است. خروج آب از مناطق شمالی و شمال غربی منطقه مورد مطالعه باید با توجه به مشکلات کیفیت آب زیرزمینی مرتبط به آب‌های کم‌عمق زیرزمینی این دو منطقه محدود شود. توانایی شبکه تصمیم‌گیری بیزی برای در نظر گرفتن عدم اطمینان کلیدی است برای

زیرزمینی، زمان محاسباتی بالا است و تحلیل عدم قطعیت را به چالش می‌کشد. مدل پیش‌بینی باید همراه با تعیین عدم قطعیت مرتبط باشد. در این پژوهش از تحلیل عدم قطعیت خطی که ابزار مؤثر است، استفاده شده است. شبیه‌سازی با استفاده از مدل شبیه‌سازی MODFLOW-2005 انجام شده است. پیش و پس پردازنده با بسته Flopy Python (Bakker et al. 2013) و Qgis (Pryet et al. 2015) از QGIS (2015) انجام می‌شود. این مدل دارای مرزهای بدون جریان به غیر از مرز جنوبی است. مقادیر پارامترها مرجع برای یک اقلیم با آب و هوای معتدل در یک حوضه رسوبی انتخاب می‌شوند. همان‌طور که در Doherty (2015) توضیح داده شده است، روش‌های متعددی برای تجزیه و تحلیل عدم قطعیت غیرخطی بر اساس نمونه‌گیری مونت کارلو برای مدل‌های آب‌زیرزمینی قابل استفاده است. با این حال این روش‌ها نیاز به چندین اجرای مدل دارند و در اجرا معمولاً برای به‌کارگیری مدل‌های مدیریتی با زمان اجرای طولانی، چالش‌برانگیز هستند. Hill et al. (2015) بر این باورند که وابستگی تقریباً انحصاری به روش‌های فشرده محاسباتی برای تحلیل عدم قطعیت برای مدل‌های پیچیده ناپایدار هستند. زمانی که روش‌های مونت کارلو غیرواقعی هستند، تحلیل عدم قطعیت را بر پایه مدل خطی شده انجام می‌دهد و ممکن است یک ابزار تشخیص عملیاتی فراهم آورد. در این پژوهش هم از همین روش تحلیل خطی عدم قطعیت استفاده شده است (H. Delottier et al. 2015).

با توجه به بررسی‌های انجام شده در این مطالعه به تحلیل حساسیت پارامترهای کیفی ورودی به مدل انتقال آلاینده محلول در آب‌زیرزمینی و همچنین تعیین پارامترهای مؤثر در انتقال آلاینده محلول در آب‌زیرزمینی پرداخته شده است که تا کنون تعیین درجه حساسیت پارامترهای ورودی کیفی مدل‌های شبیه‌سازی آب‌های زیرزمینی در سطح کشور انجام نشده است. این نتایج را می‌توان برای

هلتون در سال ۱۹۹۳ روش‌های تحلیل حساسیت و عدم قطعیت در ارزیابی عملکرد دفع زباله‌های رادیواکتیو بررسی کرده است. خلاصه روش‌ها به این صورت است: تجزیه و تحلیل دیفرانسیلی، تجزیه و تحلیل مونت کارلو، روش سطح پاسخ<sup>۱</sup>، تست حساسیت تبدیل فوریه است. از بین این روش‌ها، مشخص شده است که روش مونت کارلو در ارزیابی عملکرد دفع زباله‌های رادیواکتیو کاربرد بسیار گسترده‌ای دارد. این روش دارای پنج مرحله می‌باشد: انتخاب محدوده و توزیع بری هر متغیر ورودی، به وجود آوردن یک نمونه از متغیرهای ورودی، انتشار نمونه از طریق مدل تحت نظر، تجزیه و تحلیل عدم قطعیت، تجزیه و تحلیل حساسیت است. این مراحل همراه با تجزیه و تحلیل عملکردی به‌عنوان بخشی از ارزیابی عملکرد اولیه برای انجام جداسازی زباله‌های رادیواکتیو مورد بحث واقع شده‌اند (Jon C. Helton, 1993).

برای اهمیت پیش‌بینی و در نظر گرفتن عدم قطعیت در مدل‌های آب‌زیرزمینی می‌توان با استفاده از یک مثال ساده نشان داده شود و همچنین پارامترهایی که کالیبره شده‌اند، می‌توانند مدل را پایدار کنند. کالیبراسیون یک مدل آب‌زیرزمینی با روش دستی سعی و خطا کار خسته‌کننده و زمان‌بر است. به کار بردن الگوریتم‌های کالیبراسیون برای صرفه‌جویی زمان و تحلیل عدم قطعیت مناسب است. دلوتیر و همکارانش برای اثبات این موضوع پژوهشی در سال ۲۰۱۵ انجام داده‌اند، این پژوهش دارای سه بخش کلی است: ابتدا در مورد بی‌میلی مدل‌های آب‌زیرزمینی به پیشرفت‌های جدید در مدل‌های معکوس بحث شده است. سپس یک مدل مدیریت مصنوعی برای افزایش توجه کاربران و مدیران آب به اهمیت تعیین و پیش‌بینی عدم قطعیت ارائه شده و در انتها پژوهش پیشنهادی واقع‌بینانه برای مدل‌سازی عملیاتی آب‌زیرزمینی پیشنهاد داده شده است. یکی از مشخصه‌های اصلی مدل‌های مدیریت بزرگ آب‌های

<sup>1</sup> Response surface methodology

تحلیل حساسیت به دو روش موضعی یا جامع صورت می‌گیرد. در این مطالعه از تحلیل حساسیت موضعی استفاده شده است، به صورتی که در هر قسمت مقدار یک پارامتر تغییر یافته و سپس به‌طور جداگانه هر پارامتر تغییر یافته وارد مدل می‌شود و خروجی‌های مورد نظر به دست آورده شده‌اند.

## ۲-۲- معادلات جریان و انتقال آلاینده در آب‌زیرزمینی

برای شبیه‌سازی منطقه مورد نظر، از مدل کمی MODFLOW و مدل کیفی MT3DMS استفاده شده است. این مدل‌ها، معادلات حاکم بر جریان و انتقال آلاینده محلول در آب‌زیرزمینی را در شرایط پایدار و ناپایدار به روش عددی تفاضل محدود حل می‌نمایند. این مدل‌ها پرکاربردترین مدل‌ها در شبیه‌سازی جریان و انتقال آلاینده آب‌زیرزمینی هستند. مدل MODFLOW این مدل نخستین بار در سال ۱۹۸۴ توسط McDonald و Harbaugh در سازمان زمین‌شناسی ایالات متحده (USGS) تهیه شده است. این مدل به‌طور متوالی در سال‌های اخیر به‌روزرسانی شده است.

مدل سه‌بعدی انتقال آلاینده محلول که به‌صورت خلاصه (Modular Transport Three-Dimension Model System) MT3DMS نامیده می‌شود، در سال ۱۹۹۰ توسط Zheng در موسسه پاپادوپولوس و شرکا توسعه داده شده است. نرم‌افزارهای واسط مانند GIS و امکانات گرافیکی فراهم می‌نمایند، برای این‌گونه تحلیل‌ها بسیار مفید هستند.

رابطه زیر جریان آب‌زیرزمینی را در یک محیط غیرهمگن غیرهمسانگرد تحت شرایط ناپایدار در مختصات دکارتی توصیف می‌کند:

تعیین پارامترهای مهم کیفی جهت واسنجی استفاده شود.

## ۲-موارد و روش‌ها

### ۲-۱- تحلیل حساسیت

مدل‌های شبیه‌سازی کمی و کیفی استفاده شده در این مطالعه دارای عملیات ریاضی پیچیده‌ای هستند که فرایندهای فیزیکی مربوطه را با استفاده از پارامترهای متنوعی بیان می‌کنند. این پارامترهای ورودی به دلایل مختلفی از جمله خطا در اندازه‌گیری و کمبود دانش و عوامل دیگر دارای خطا و عدم قطعیت هستند، پس انتظار می‌رود خروجی این مدل‌ها دقیق نباشد. در این مواقع که با عدم قطعیت مواجه می‌شویم به‌طور معمول تحلیل حساسیت انجام می‌شود تا درجه حساسیت خروجی‌های مدل نسبت به تغییرات پارامترهای ورودی مدل مشخص شود. تحلیل حساسیت تأثیرات تغییرات پارامترهای ورودی بر روی خروجی‌های مدل را مشخص می‌کند و علاوه بر این اطلاعاتی در مورد اهمیت نسبی پارامترهای ورودی فراهم می‌کند به‌طوری‌که کدام پارامتر ورودی مدل برای کالیبراسیون و صحت سنجی لازم و ضروری است. در این روش ابتدا تغییراتی بر روی پارامترهای ورودی انجام شده است سپس مدل را با پارامترهای تغییر یافته اجرا شده است و خروجی‌ها را ثبت می‌شوند. برای توصیف احساسیت از ضریب حساسیت که به‌صورت زیر تعریف می‌شود استفاده می‌شود:

$$s_k = \left( \frac{\partial W}{\partial x_k} \right)_k \approx \frac{\Delta W}{\Delta x} \quad (1)$$

$$= \frac{w(x_0 + \Delta x_k e_k) - W(x_0)}{\Delta x}$$

$S_k$ : ضریب حساسیت

$\Delta W$ : تغییرات ورودی

$\Delta X$ : تغییرات خروجی (در این مطالعه غلظت ماکسیمم آلاینده محلول و زمان مربوطه)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) \pm W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2)$$

که در آن

$\theta$ : تخلخل مواد

$C^k$ : غلظت محلول آلاینده  $k$

$T$ : زمان

$X_{i,j}$ : فاصله در راستای محورهای مختصات کارترین

$D_{i,j}$ : تانسور ضریب انتشار هیدرودینامیکی

$V_i$ : سرعت آب در محیط‌های متخلخل یا سرعت جریان

دارسی

$Q_s$ : نرخ جریان حجمی در واحد حجم آبخوان

$C_s^k$ : غلظت آلاینده  $k$  جریان چاه و چشمه

$\sum R_n$ : واحد واکنش شیمیایی

$K_{zz}$  و  $K_{xx}$ ,  $K_{yy}$ : ضرایب هدایت هیدرولیکی در راستای  $z$  و  $x$ ,  $y$

$h$ : تراز سطح آب زیرزمینی برحسب واحد طول

$W$ : میزان تغذیه یا تخلیه برحسب حجم

$S_s$ : ضریب ذخیره<sup>۱</sup>

$t$ : زمان

توسعه رابطه جریان آب زیرزمینی به فرم تفاضل محدود به کمک معادله پیوستگی امکان پذیر است. با فرض ثابت بودن چگالی آب زیرزمینی، معادله پیوستگی که بیان گر بیان (تعادل) جریان برای یک سلول می باشد به صورت زیر تعریف می گردد.

$$\sum Q_i = S_s \times \frac{\Delta h}{\Delta t} \times \Delta v \quad (3)$$

که در آن:

$Q_i$ : نرخ جریان به سلول

$S_s$ : ضریب ذخیره

$\Delta V$ : حجم سلول

$\Delta h$ : تغییر سطح آب در بازه زمانی  $\Delta t$

معادله حاکم بر انتقال آلودگی به صورت زیر بیان می شود:

$$\frac{\partial(\theta C^k)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C^k) + q_s C_s^k + \sum R_n \quad (4-2)$$

قسمت سمت راست رابطه (۴-۲) از چندین ترم تشکیل شده است. ترم اول پخشیدگی نام دارد، که اساس آن پخش آلاینده به دلیل حرکت آب زیرزمینی است. در این ترم هر دو حالت پخشیدگی و پخش مولکولی در نظر گرفته شده است. پخشیدگی که به دلیل اختلاف بین سرعت میانگین حرکت آب با سرعت ذرات است و پخش مولکولی که به دلیل گرادیان غلظت به وجود می آید. پخش مولکولی معمولاً مقدار کمی دارد و صرف نظر می شود، ولی زمانی که آب ساکن باشد یا سرعت پایینی داشته باشد، قابل توجه است. مجموع این دو اثر پخشیدگی هیدرودینامیک نام دارد، و به عنوان ضریبی به نام ضریب پخشیدگی هیدرودینامیکی نام دارد.

ترم بعدی جابجایی است، و حرکت آلاینده‌های محلول با سرعتی برابر با سرعت آب زیرزمینی نشان می دهد.  $q_i$  سرعت دارسی نام دارد که از رابطه زیر به دست می آید:

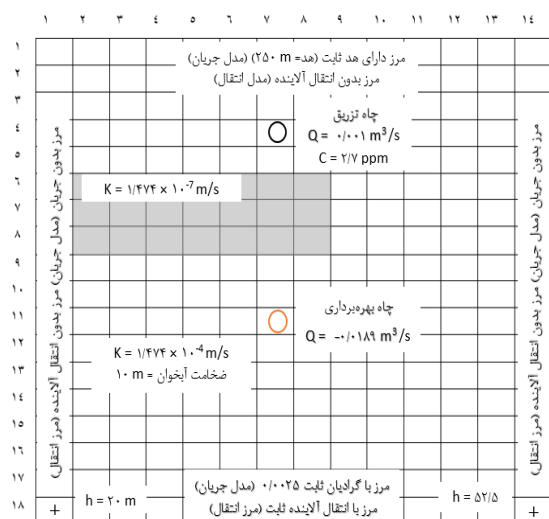
$$q_i = k_i \times \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (5-2)$$

<sup>۱</sup>specific storage

کم هدایت هیدرولیکی نسبت به قسمت های دیگر شبکه بندی، نفوذپذیری کمی دارد. در این مثال یک چاه تغذیه با دبی  $0/001$  مترمکعب بر ثانیه و دارای غلظت  $2/7$  ppm و یک چاه بهره برداری با دبی  $0/0189$  مترمکعب بر ثانیه در نظر گرفته شده است.

در این مدل فرضی جذب از نوع جذب خطی با ضریب توزیع  $10^{-11}$  و واکنش شیمیایی از نوع جنبشی مرتبه اول با مقدار ضریب کاهش  $0/005$  در نظر گرفته شده است.

به منظور تحلیل حساسیت در این مسئله شش پارامتر در نظر گرفته شده است: هدایت هیدرولیکی  $^1(K)$ ، تخلخل  $^2$  ( $\theta$ )، پخش شدگی طولی  $^3(DL)$ ، پخش شدگی عرضی  $^4(DV)$ ، ضریب توزیع  $^5(Kd)$ ، ضریب کاهشی آلاینده حل شونده و جذب شونده  $^6(\lambda)$ .



شکل ۱- تصویر منطقه مثال مورد نظر شامل انتقال در

یک آبخوان با شیب گرادیان زیاد

**Fig1- Configuration of the test problem involving transport in a heterogeneous aquifer with a strong regional gradient**

<sup>1</sup>Hydraulic conductivity

<sup>2</sup> Porosity

<sup>3</sup> Longitudinal Dispersivity

<sup>4</sup>Ratio of horizontal transverse to longitudinal dispersivity

<sup>5</sup>Distribution coefficient

<sup>6</sup>decay rate constant

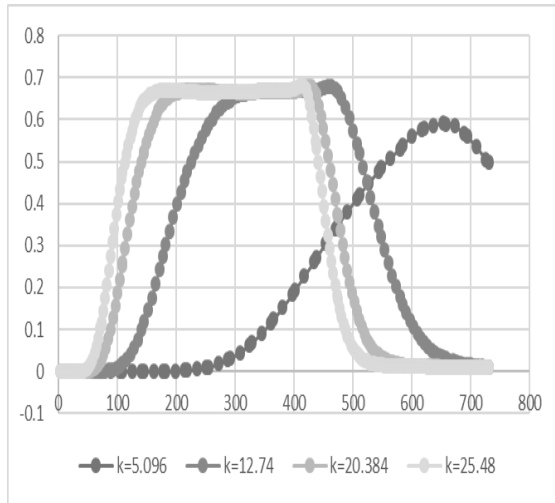
ترم بعدی چاه و چشمه که مقدار آلاینده ورودی از چشمه یا خروجی از چاه در آبخوان بیان می کند. در مدل MT3DMS برای چشمه ها تعیین غلظت آلاینده جریان ورودی مهم می باشد و برای چاه ها غلظت آلاینده جریان خروجی برابر با غلظت آلاینده آب زیرزمینی است.

ترم آخر واکنش شیمیایی است که تغییرات جرم آلاینده ناشی از N واکنش شیمیایی را نشان می دهد. این ترم شامل واکنش های جذب تعادلی-کنترل شده (که انتقال جرم بین فاز نامحلول و خاک را بیان می کند)، واکنش های جنبشی فروپاشی رادیواکتیو مرتبه اول، واکنش های جنبشی مونوود و واکنش های جنبشی چند نوعی است.

### ۳- نتایج تحلیل

برای تعیین درجه حساسیت پارامترها در جریان و انتقال آلاینده در آب زیرزمینی مثالی از راهنمای نرم افزار MT3DMS در نظر گرفته شده است. در این مثال یک شبکه بندی دارای ۲۵۲ سلول فعال دارای ابعاد ۱۰۰ متر، ضخامت شبکه بندی ۱۰ متر، تخلخل ثابت  $0/3$  و پخشیدگی طولی و عرضی به ترتیب  $20$  و  $0/2$  متر در نظر گرفته شده است. جریان به صورت دوبعدی از مرز شمالی با تراز ثابت ۲۵۰ متر وارد و از مرز جنوبی که دارای تراز آب با گرادیان ثابت  $0/025$  از تراز آب ۲۰ متر به تراز آب  $52/5$  از غرب به شرق افزایش می یابد، خارج می شود. مرزهای شرقی و غربی بدون جریان ورودی و خروجی در نظر گرفته شده اند.

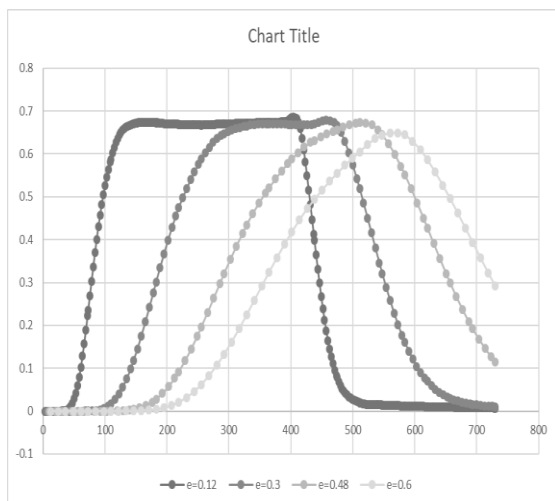
با توجه به شکل (۱)، هدایت هیدرولیکی دارای دو مقدار برای دو قسمت متفاوت در شبکه بندی دارد، به طوری که در قسمت تیره مشخص شده در شکل (۱) به دلیل مقدار



شکل ۳- تغییرات غلظت آلاینده چاه بهره‌برداری نسبت به تغییرات هدایت هیدرولیکی

**Fig3- changes in concentrations at the pumping well versus changes in Hydraulic conductivity**

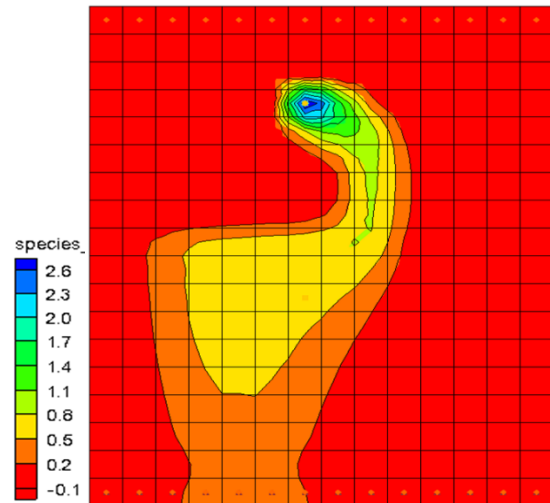
در شکل (۳) با افزایش مقدار هدایت هیدرولیکی سرعت حرکت آب‌زیرزمینی زیاد می‌شود و غلظت آلاینده محلول در چاه بهره‌برداری سریع‌تر به بیشترین مقدار خود می‌رسد.



شکل ۴- تغییرات غلظت آلاینده چاه بهره‌برداری نسبت به تغییرات تخلخل

**Fig4- changes in concentrations at the pumping well versus changes in Porosity**

در شکل (۴) با افزایش مقدار تخلخل سرعت حرکت آب‌زیرزمینی کم شده و حرکت آلاینده محلول کند

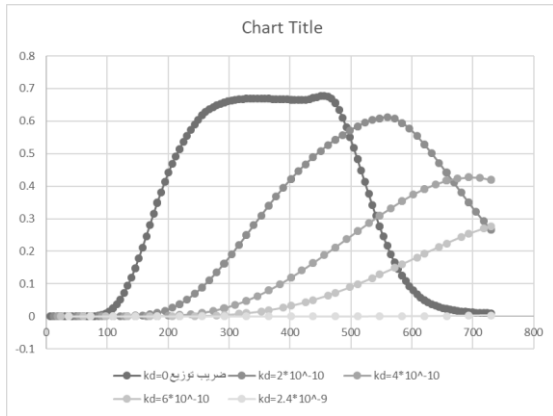


شکل ۲- منطقه شبیه‌سازی شده در MT3DMS (روز ۳۶۵م)

**Fig2- Simulated area by using MT3DMS software(365 days)**

ابتدا منطقه مورد نظر را با استفاده از مقدار اصلی خود پارامترهای داده شده در مثال، شبیه‌سازی شده و غلظت آلاینده محلول در چاه بهره‌برداری به دست آورده شده است. سپس بر روی پارامترهای مورد نظر به‌طور جداگانه تغییراتی اعمال شده ( $\pm 100$ ،  $\pm 60$  و ۰) و مدل برای هر مقدار به‌طور جداگانه اجرا شده است. تغییرات غلظت آلاینده محلول در چاه بهره‌برداری ناشی از تغییرات پارامتر و طی مدت دو سال در قالب نمودارهای زیر آورده شده است.

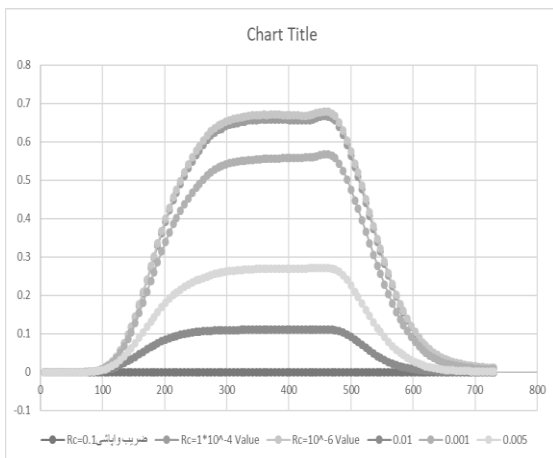
در شکل‌های (۳) تا (۸) در تمامی حالت‌ها با افزایش زمان، غلظت آلاینده محلول در چاه بهره‌برداری ابتدا افزایش و در نهایت کاهش می‌یابد.



شکل ۷- تغییرات غلظت آلاینده چاه بهره برداری نسبت به تغییرات ضریب توزیع

Fig7- changes in concentrations at the pumping well versus changes in Distribution coefficient

همان طور که در شکل (۷) مشاهده می شود با افزایش ضریب توزیع زمان رسیدن غلظت آلاینده محلول در چاه بهره برداری بیشتر می شود و مقدار ماکسیمم غلظت کاهش می یابد.

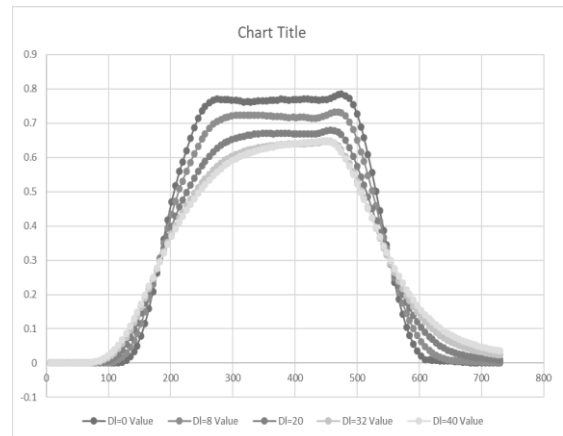


شکل ۸- تغییرات غلظت آلاینده چاه بهره برداری نسبت به تغییرات ضریب کاهشی

Fig8- changes in concentrations at the pumping well versus changes in decay rate constant

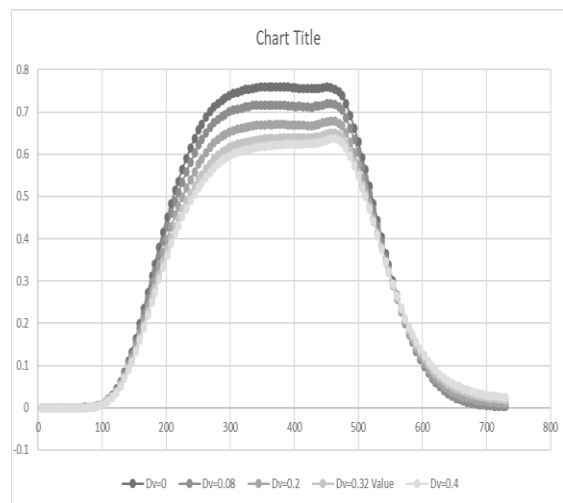
در شکل (۸) با افزایش ضریب کاهشی مقدار غلظت آلاینده محلول در چاه بهره برداری به شدت کاهش می یابد، ولی زمان رسیدن به مقدار ماکسیمم غلظت تغییری نمی کند.

می شود پس غلظت آلاینده محلول در چاه بهره برداری دیرتر به بیشترین مقدار خود می رسد.



شکل ۵- تغییرات غلظت آلاینده چاه بهره برداری نسبت به تغییرات ضریب پخش شدگی طولی

Fig5- changes in concentrations at the pumping well versus changes in Longitudinal Dispersivity



شکل ۶- تغییرات غلظت آلاینده چاه بهره برداری نسبت به تغییرات ضریب پخش شدگی عرضی

Fig6- changes in concentrations at the pumping well versus changes in Ratio of horizontal transverse to longitudinal dispersivity

در شکل (۵) و (۶) با افزایش یا کاهش پخشیدگی زمان رسیدن به بیشترین مقدار غلظت آلاینده محلول در چاه بهره برداری تغییر نمی کند ولی با افزایش مقدار پخشیدگی غلظت ماکسیمم آلاینده محلول کاهش می یابد.



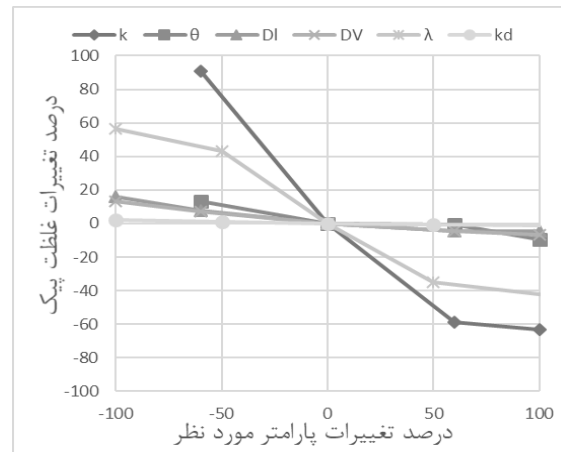
با توجه به این گرافها میزان حساسیت هر پارامتر را بر خروجی مدل که زمان یا غلظت آلاینده است، محاسبه می‌شود. بدین صورت که هر چه شیب نمودار پارامتر مورد نظر بیشتر باشد حساسیت آن پارامتر بر خروجی مدل بیشتر است.

#### ۴- نتیجه‌گیری

مسئله مورد نظر ابتدا با استفاده از مدل جریان MODFLOW و مدل انتقال MT3DMS شبیه‌سازی شده است و سپس مدل را با پارامترهای تغییر یافته اجرا شده است و در هر حالت نمودار تغییرات غلظت آلاینده محلول در چاه بهره‌برداری در طی مدت دو سال به دست آورده شده است. سپس تحلیل حساسیت موضعی انجام شده به طوری که نسبت تغییرات خروجی‌های مدل نسبت به تغییرات ورودی‌های مدل برآورد شده است. با توجه به این نتایج پارامترهای مؤثر بر غلظت آلاینده محلول در چاه بهره‌برداری به ترتیب (۱) هدایت هیدرولیکی (۲) ضریب کاهش (۳) تخلخل (۴) ضریب توزیع (۵) ضریب پخشیدگی طولی (۶) ضریب پخشیدگی عرضی می‌باشند و همچنین پارامترهای مؤثر بر زمان رسیدن به غلظت ماکسیمم در چاه بهره‌برداری به ترتیب (۱) هدایت هیدرولیکی (۲) ضریب توزیع (۳) تخلخل (۴) ضریب پخشیدگی طولی (۵) ضریب کاهش (۶) ضریب پخشیدگی عرضی

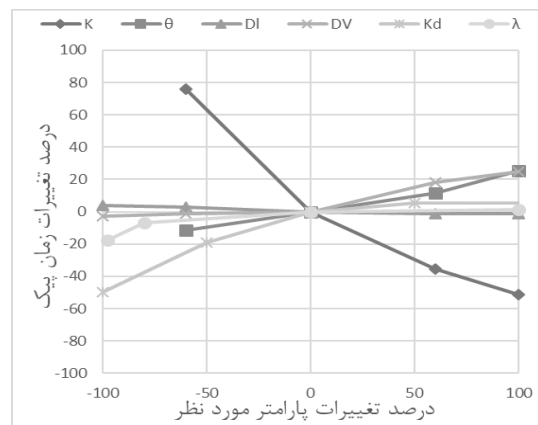
در جدول (۱) رتبه‌بندی پارامترهای حساس بر انتقال آلاینده محلول در آب‌زیرزمینی براساس نتایج تحلیل حساسیت به روش موضعی آورده شده است. این رتبه‌بندی با توجه به شیب نمودارهای شکل ۹ و ۱۰ انجام شده است. به این صورت که هرچه شیب نمودار پارامتر مورد نظر بیشتر باشد، میزان حساسیت پارامتر مورد نظر بر خروجی (زمان یا غلظت آلاینده) مدل بیشتر است.

بعد از اجرای مدل برای تمامی حالت‌ها تحلیل حساسیت موضعی برای خروجی‌های غلظت پیک و زمان رسیدن به غلظت پیک در چاه بهره‌برداری انجام شده است. نتایج مورد نظر در قالب دو گراف که نسبت تغییرات خروجی مدل (غلظت پیک و زمان مربوطه) به تغییرات پارامتر ورودی نشان داده شده به صورت زیر آورده شده است.



شکل ۹- تغییرات غلظت آلاینده چاه بهره‌برداری در مقابل تغییرات پارامترهای ورودی

Fig9- changes in concentrations at the pumping well versus changes in input parameters



شکل ۱۰- تغییرات زمان در مقابل تغییرات پارامترهای ورودی

Fig10- changes in time versus changes in input parameters

جدول ۱- رتبه بندی پارامترهای حساس

Table1- Ranking Sensitive parameters

$\lambda$	Kd	Dv	DI	$\theta$	K	پارامتر خروجی
۲	۴	۶	۵	۳	۱	غلظت (mg/l)
۵	۲	۶	۴	۳	۱	زمان (day)

[8] Michele Remonti, Piero Mori, (2016), "The Stochastic Approach in Groundwater Modeling for the Optimization of Hydraulic Barriers", Remediation Journal.

[9] Pryet A., Atteia O., Delottier H., Cousquer Y., (2015), "Flexible Environmental Modeling with Python and Open-GIS", In: EGU General Assembly Conference Abstracts, vol 17, p 9733.

[10] Rojas, R., Feyen, L., Dassargues, A., (2008), "Conceptual model uncertainty in groundwater modeling: combining generalized likelihood uncertainty estimation and Bayesian model averaging", Water Resour. Res. 44 (12), W12418.

[11] Zheng C., Wang P., (1999), "MT3DMS, A modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems", (Release DoD\_3.50. A), Documentation and User's Guide.

[12] Zhu K., Cui Z., Jiang B., Yang G., Chen Z., Meng Q., Yao Y., (2013), "A DEM-based residual kriging model for estimating groundwater levels within a large-scale domain: a study for the Fuyang River Basin", Clean Techn Environ Policy 15:687-698.

منابع

[1] Bakker M., Post V., Hughes J., Langevin C., Francés A., White J., (2013). "Enhanced FloPy scripts for constructing and running MODFLOW-based models", In: Proceedings of the 2013 MODFLOW and More Conference.

[2] Doherty J., Hunt R.J., (2009), "Two statistics for evaluating parameter identifiability and error reduction", J Hydrol 366(1):119-127.

[3] H. Delottier, A. Pryet, A. Dupuy (2016), "Why Should Practitioners be Concerned about Predictive Uncertainty of Groundwater Management Models?", Water Resources Management.

[4] Hadis Mohajerani, Majid Kholghi, Markus Casper, Abolfazl Mosaedi, Raziye Farmani-Amir Sadoddin, (2017), "Application of Bayesian Decision Networks for Groundwater Resources Management Under the Conditions of High Uncertainty and Data Scarcity", Water Resources Management

[5] Hill M.C., Kavetski D., Clark M., Ye M., Arabi M., Lu D., Foglia L., Mehl S., (2015), "Practical use of computationally frugal model analysis methods", Groundwater

[6] Jon C. Helton, (1993), "Uncertainty and sensitivity analysis techniques for use in performance assessment for radioactive waste disposal", Reliability Engineering & System Safety.

[7] Mays, L. W., and Y. K. Tung, (1992), "Hydrosystems Engineering and Management", McGraw-Hill, New York.



## **Sensitivity analysis in simulating the transfer of groundwater solute pollutants**

**Nahid sadat jafary<sup>1\*</sup>, Saeed Alimohamadi<sup>2</sup>**

**1- Master's student in hydraulic structure, Shahid Beheshti University, Tehran,**

**2- Associate Professor of Shahid Beheshti University.**

**\* Corresponding author: [nahid4225205@gmail.com](mailto:nahid4225205@gmail.com)**

### **Abstract**

Groundwater is one of the main sources for supplying needs, including drinking water and agriculture. With increasing human and climate pressures on groundwater resources, accurate forecasts of groundwater flow and quality for sustainable management are essential. Underground water quality modeling is a useful tool for identifying how to transfer pollutants in a the porous aquifer. These models include several parameters that are often estimated based on previous studies or expert judgment, Or in the best cases, based on Measurements in plaeses. In conclusion, the input data to the simulation models are not accurate and are accompanied by errors, so it is necessary to first define the effective and sensitive parameters relative to the outputs of the model. In this paper, a problem with the MODFLOW-2010 and MT3DMS programs was first simulated and the desired pollutant concentrations in wells were estimated according to the parameters given over a two-year period. Sensitivity analysis for time outs and Maximum concentration has been done during these two years. According to the statistical characteristics of the outputs, effective parameters are estimated on the maximum concentration and time. The results show that the effective parameters on the concentration of solute pollutants in the wells are 1 ) Reduction coefficient 2) Distribution coefficient 3) Longitudinal diffusion 4) Hydraulic conductivity 5) Transverse diffusion coefficient 6) Porosity Respectively. Also effective parameters on the time associated with the maximum concentration in the well operation are 1) Hydraulic conductivity 2) Distribution coefficient 3) Porosity 4) Transverse distribution coefficient 5) Reduction coefficient 6) Longitudinal diffusion.

**Keywords:** Groundwater, Solute Contaminants, Sensitivity Analysis, MOFLOW, MT3DMS