

مقایسه روش‌های عددی حجم محدود برای حل معادله فرارفت - پراکندگی در محیط‌های غیراشباع

رزا اسدی^۱، سعید داوری^۲

۱- استادیار دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی
۲- کارشناس ارشد مهندسی منابع آب، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

Email: * asadi@kntu.ac.ir

پذیرش: [۱۴۰۳/۳/۸]

دریافت: [۱۴۰۳/۰۲/۲۵]

چکیده

با توجه به محدودیت و عدم دسترسی به منابع آب شیرین، آب زیرزمینی به‌عنوان یک منبع شناخته شده، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در این مطالعه، از یک روش نوین حجم محدود موسوم به (Dual Discrete Finite Volume) DDFV برای مدل‌سازی جریان و انتقال آلودگی در آب زیرزمینی استفاده شده است. در این روش، از شبکه‌بندی‌های ساختاریافته و ساختارنیافته استفاده شده که می‌تواند هندسه‌های پیچیده را مورد بررسی قرار دهد و معادلات جریان و انتقال آلودگی به دقت برای هر المان شبکه مثلثی مدل شده و غلظت آلودگی در مرکز و رئوس هر المان به دست آید. در ابتدا، معادله جریان در محیط غیراشباع حل شد و پارامترهای محتوای رطوبت و تراز سطح آب زیرزمینی محاسبه شد. سپس با توجه به نتایج به‌دست آمده، سرعت حرکت آب در خاک برآورد شد. در نهایت، معادله آلودگی در محیط غیراشباع استخراج شد و مقدار غلظت در رئوس هر المان محاسبه شد. این مدل در حالت‌های جریان ناپایدار در یک بعد و دو بعد با دقت بالا درستی‌آزمایی شده است. با مقایسه حالت دوبعدی با حالت یک‌بعدی، مشخص شد که نوسانات در حالت دوبعدی وجود ندارد.

واژگان کلیدی: محیط متخلخل غیراشباع، معادله ریچاردز، فرارفت، پراکندگی، مدل‌سازی عددی، روش حجم محدود

۱-مقدمه

مواجهه هستند. طبق پیش‌بینی‌های به‌عمل‌آمده تا سال ۲۰۵۰ میلادی این تعداد به ۶۶ کشور با جمعیت حدود دو سوم جمعیت جهان خواهد رسید. در این میان بیشترین مصرف

با توجه به کمبود شدید آب در جهان، در حال حاضر ۲۴ کشور با جمعیتی بیش از ۳۰۰ میلیون نفر با کمبود شدید آب

مربوط به بخش کشاورزی با ۹۴ درصد کل آب مصرف شده است که بیشتر از آب‌های زیرزمینی به عنوان یکی از منابع اصلی تأمین آب استفاده می‌کند. متأسفانه استفاده بی‌رویه از منابع آب زیرزمینی بیشتر با آلوده ساختن این منابع به علت واردکردن فاضلاب‌ها و عدم کنترل دیگر منابع آلوده‌کننده، همراه است که مشکل کمبود آب را دوچندان می‌سازد [1].

آب‌های زیرزمینی به منابع آبی گفته می‌شود که در لایه‌های آبدار و اشباع زیرزمینی جمع شده‌اند و از طریق چاه‌ها، قنات‌ها و به صورت طبیعی از چشمه‌ها درون زمین به سطح زمین خروج پیدا می‌کنند. این منابع، به ویژه در مناطق خشک و نیمه‌خشک، به عنوان منبع اصلی تأمین آب مورد استفاده قرار می‌گیرند. منطقه غیراشباع، بین سطح خاک و تراز آب‌های زیرزمینی قرار دارد. به عبارت دیگر جریان غیراشباع در بالای سطح تراز آب و حاشیه مویینگی^۱ رخ می‌دهد و عمق آن متغیر است و به عوامل زمین‌شناسی و اقلیمی بستگی دارد [2]. آلودگی در خاک‌های غیراشباع از مسائل مهم در منابع آب به شمار می‌رود. در طی چند دهه گذشته، تلاش گسترده‌ای برای حل پیچیدگی‌های مختلف فرایندهای فیزیکی، شیمیایی و میکروبیولوژیکی مؤثر بر انتشار و انتقال آلودگی توسط جریان غیراشباع انجام شده است [3]. برای دستیابی به این هدف، ابتدا معادله جریان در محیط غیراشباع حل شده و سپس توزیع زمانی و مکانی غلظت آلاینده‌ها تعیین می‌شود. در بسیاری از مطالعات ناحیه غیراشباع، فرض می‌شود حرکت سیال از معادله کلاسیک ریچاردز^۲ پیروی می‌کند. از آنجا که این معادلات غیرخطی هستند، راه‌حل تحلیلی جز موارد خاص امکان‌پذیر نیست؛ بنابراین روش عددی برای حل معادله جریان غیراشباع استفاده می‌شود [4]. همچنین در انتشار آلودگی‌ها در آب‌های زیرزمینی و آب‌های زیرسطحی مطالعات زیادی با استفاده از روش‌های تفاضل محدود، المان محدود و حجم محدود انجام شده است که به اختصار به بررسی و مرور تعدادی از آن‌ها پرداخته شده است [5].

Berlin و همکاران یک مدل عددی را برای پیش‌بینی غلظت گونه‌های مختلف نیتروژن حاصل از تغییر اکسیژن محلول در فاز مایع در محیط غیراشباع به روش تفاضل محدود در یک سیستم یک‌بعدی ایجاد کردند. در این مدل جریان گذرا در نظر گرفته شده و نتایج مدل عددی با حل تحلیلی مقایسه شد. نتایج عددی این مدل نشان می‌داد که حرکت غلظت گونه‌های مختلف نیتروژن در محیط غیراشباع به شدت تحت تأثیر ویژگی‌های هیدرولیکی خاک غیراشباع و همچنین هد فشار و هدایت هیدرولیکی است و همچنین سرعت بالای انتقال جرم اکسیژن به طور قابل توجهی نیتروژن موجود در نیترات را در محیط غیراشباع به ویژه در عمق‌های بیشتر افزایش می‌دهد و در نهایت روی کیفیت آب زیرزمینی تأثیر می‌گذارد [6]. با وجود مدل‌های عددی متعدد بر پایه روش تفاضل محدود، برای حل معادله جریان و انتقال در مرزهای پیچیده نیاز است که در اینگونه مرزها مش تاحد زیادی ریز شود [7, 8, 9]. همچنین با وجود مزیت روش المان محدود نسبت به روش تفاضل محدود در مدل‌سازی هندسه‌های نامنظم، این روش بقای جرم را به صورت محلی حفظ نمی‌کند و در محیط‌های چند لایه نوسانات عددی در حل معادلات ایجاد می‌شود [10-12].

در روش حجم محدود در مقایسه با دو روش دیگر قانون بقای جرم در المان حفظ شده که منجر به کاهش خطا می‌شود. این روش مانند روش المان محدود برای هندسه‌های پیچیده و خمیده مناسب است [13]. در سال‌های اخیر، تلاش‌های زیادی روی روش حجم محدود انجام شده و این روش برای مسائل مختلف توسعه یافته و به کلاس‌های متعددی تقسیم شده است. به عنوان نمونه در مرجع [14] یک رویکرد جدید گسسته‌سازی حجم محدود برای حل معادله آلودگی در محیط غیراشباع دوبعدی ارائه شد. روش پیشنهادی مبتنی بر یک گسسته‌سازی حجم محدود سلول محور^۳ مرتبه دوم روی شبکه‌های ساختارنیافته^۴ است. این روش با استفاده از توسعه سری تیلور^۵ در زمان، بقای جرم را تضمین می‌کند.

3 Cell-centered
4 Unstructured grid
5 Taylor series

1 Capillary Fringe
2 Richards' equation

ناپایدار، معادله جریان با معادله انتقال همبسته شد و نتایج مدل عددی با نتایج مدل MODFLOW درستی آزمایی شد. در ادامه مدل همبسته جریان و انتقال در محیط با غیرهمگنی بالا مورد استفاده قرار گرفته که نتایج نشان از پایداری مدل مورد نظر می‌دهد. همچنین با استفاده از مدل عددی مورد نظر نتایج معادلات جریان و انتقال آلودگی عاری از هر گونه نوسانات عددی است [16].

با توجه به مطالعات صورت گرفته، در این تحقیق برای اولین بار روش DDFV برای گسسته‌سازی معادله انتقال آلودگی محلول در محیط غیراشباع به کار گرفته شده است. سازوکارهای انتقال آلودگی شامل پراکندگی^۸، فرارفت^۹، تجزیه زیستی^{۱۰} و جذب^{۱۱} می‌باشد. در این تحقیق، مدل انتقال آلودگی و معادله جریان غیراشباع به صورت هم‌بسته در نظر گرفته شده است. به این ترتیب که ابتدا معادله ریچاردز با استفاده از روش DDFV حل شده، مقدار هد، محتوای رطوبت و سایر پارامترها مانند نفوذپذیری نسبی و ظرفیت موینیگی در مراکز سلول‌ها به دست آمده، سپس مقدار هد در رئوس درونیابی شده و سرعت جریان در وجوه المان محاسبه می‌شود. در گام بعدی ضرایب پراکندگی و سرعت تراوش به دست آمده و معادله انتقال آلودگی با روش فوق‌الذکر حل خواهد شد. همچنین در این مطالعه به بررسی اثر جریان غیراشباع روی انتقال آلودگی پرداخته می‌شود.

در تحقیق پیش رو در بخش دوم، مواد و روش‌ها شامل معادلات ریاضی و فرمولاسیون عددی معادلات ریچاردز و انتقال آلودگی به تفکیک ارائه شده و در بخش سوم نتایج در نمونه‌های مختلف یک و دو بعدی بررسی می‌شود. بخش پایانی نیز به جمع‌بندی و تحلیل نتایج اختصاص دارد.

۲- مواد و روش‌ها

در این بخش ابتدا معادلات ریاضی حاکم بر محیط غیراشباع ارائه شده و سپس فرمولاسیون عددی روش DDFV برای

همچنین از روش پیکارد^۶ برای حل مسئله جبری غیرخطی حاصل در هر مرحله زمانی استفاده شده است. عملکرد روش از طریق مسائل مختلف، از جمله مسائل نفوذ، محیط‌های اشباع - غیراشباع، ناهمگنی‌های خاک ارزیابی شده است [14].

Asadi و Zamani روش پیشرفته حجم محدود DDFV⁷ برای مدل‌سازی عددی معادله ریچاردز استفاده کردند. سه نوع معادله ریچاردز از جمله فرم مبتنی بر هد، بر مبنای محتوای رطوبت و فرم مختلط را با یک خطی‌سازی پیکارد اصلاح‌شده، در دامنه دو بعدی توسعه دادند. نمونه‌های مختلف با استفاده از ویژگی‌های خاک‌های مختلف، شرایط مرزی متنوع و ساختارهای شبکه‌ای مختلف حل شده‌اند. نتایج هماهنگی بسیار خوبی با نتایج راه حل‌های تحلیلی در هر دو محیط متخلخل یک‌نواخت و لایه‌ای دارند. انواع مختلف معادله به نسبت دقت، تعداد تکرارها و نسبت تعادل جرم مقایسه شده‌اند. برای موارد آزمایشی مورد بررسی در این مطالعه، نسخه محتوای رطوبت به عنوان روش برتر به دلیل خطای تعادل جرم کم، دقت بالا و تعداد کمتر تکرارها تعیین شده است. همچنین، نسخه پیکارد اصلاح‌شده نسبت به روش مبتنی بر هد کارایی و دقت را بهبود می‌بخشد. نتایج نشان می‌دهند که برای فرم مبتنی بر هد، نیاز به گام زمانی کوچکی برای به دست آوردن تعادل دقیق جرم داریم، در حالی که دو روش دیگر نتایج با تعادل جرم برتری را حتی برای گام زمانی بزرگتر ارائه می‌دهند. علاوه بر این، روش حجم محدود پیشنهادی برای تمام موارد آزمایشی بدون نوسان عددی نتایج پایداری نشان می‌دهد [15].

Asadi و Azizi در تحقیقی معادله انتقال آلودگی در محیط اشباع را با استفاده از روش نوین حجم محدود DDFV مدل‌سازی کردند که با استفاده از این روش غلظت آلودگی در مرکز و رئوس هر المان بدست می‌آید. مدل ارائه شده روی مش مثلثی ساختارنیافته اعمال شده است که برای مدل‌سازی مرزهای هندسی پیچیده مناسب می‌باشد. در حالت جریان

6 Picard
7 Dual discrete finite volume

8 Dispersion
9 Advection
10 Biodegradation
11 Adsorption

حل معادله ریچاردز و فرارفت- پراکندگی به دست آمده است.

۲-۱- معادلات ریاضی

معادلات ریاضی حاکم بر مساله شامل معادلات ریچاردز در محیط غیراشباع و انتقال آلودگی می باشد که به صورت هم بسته حل می شود [17]:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla(K(h)\nabla(h+z)) \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial(\theta c)}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i \theta c) = \theta \frac{\partial c}{\partial t} + \theta \lambda c - q c_1 - W \quad (2)$$

در رابطه اول θ محتوای رطوبت، K هدایت هیدرولیکی، h هد فشاری و z هد ارتفاعی است. در معادله دوم، D_{ij} تانسور پراکندگی است و از رابطه (۳) به دست می آید. c غلظت آلاینده، c_1 غلظت آلاینده تزریقی^{۱۲} و W نرخ جریان توزیعی آلاینده در واحد حجم است [17, 18].

$$D_{ij} = \alpha_l |v| \delta_{ij} + (\alpha_l - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{|v|} + D^* \theta \tau \delta_{ij} \quad (3)$$

در رابطه (۳)، δ_{ij} دلتا برونکر، α_l و α_T ضرایب پراکندگی در برای طولی و عرضی و τ اختلاط است که معمولاً برابر با یک فرض می شود. همچنین برای یک سیستم سه بعدی داریم [17, 18]:

$$v_i = -k_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (4)$$

در تحقیق پیش رو برای تعریف معادله مشخصه از مدل ون گن آختن استفاده شده است. در این مدل رابطه میان هد فشار و محتوای رطوبت به صورت زیر می باشد [19, 20]:

$$\theta = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (\alpha h)^n)^m} \quad (5)$$

در رابطه (۵)، n ، m و α ثابت های تجربی هستند که به ترتیب معرف ضریب شکل منحنی شیب کنترل و ضریب شکل و پارامتر مقیاس هستند و همچنین θ_r و θ_s به ترتیب

معرف محتوای رطوبت خاک در حالت اشباع و محتوای رطوبت خاک در حالت خشک هستند [19, 20].

همچنین می توان رابطه ونگن آختن را میان هدایت هیدرولیکی و محتوای رطوبت حجمی نیز به شکل زیر بیان نمود [19, 20]:

$$\frac{K(\theta)}{K_s} = \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \left(1 - \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{1}{m}} \right)^m \right)^2 \quad (6)$$

در رابطه (۶)، K_s و K_θ به ترتیب معرف هدایت هیدرولیکی در محیط اشباع و هدایت هیدرولیکی در محیط غیراشباع هستند [19, 20].

۲-۲- فرمولاسیون عددی

۲-۲-۱- فرمولاسیون عددی معادله ریچاردز

فرم مبتنی بر هد معادله ریچاردز را می توان به کمک روش حجم محدود روی حجم کنترلی Ω_i به صورت زیر نوشت [15]:

$$\int_{\Omega_i} \left(C_h \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla(K \nabla h) \right) d\Omega = 0 \quad (7)$$

در رابطه فوق C_h ظرفیت مویبگی است. با اعمال قضیه گوس- گرین، معادله بقای جرم را می توان به صورت زیر نوشت [15]:

$$C_h \frac{\partial h_i}{\partial t} |\Omega_i| + \sum_{\Gamma_{ij} \in \partial \Omega_i} V_{ij} |\Gamma_{ij}| = 0 \quad (8)$$

در معادله فوق، هد در مرکز حجم کنترلی و با استفاده از ترم h_i تعریف می شود. مرز مشترک میان دو حجم کنترلی Ω_i و Ω_j می باشد ($\Omega_i \cap \Omega_j = \Gamma_{ij}$). نشان دهنده طول وجه مشترک Γ_{ij} ، V_{ij} معرف شار عبوری و $|\Omega_i|$ مساحت حجم کنترلی می باشد. [15, 21]. جزییات مربوط به محاسبه شار عددی در مرجع [15] ذکر شده است.

در رابطه بالا H_{ij} مجموع فواصل عمود مرکز المان‌ها از وجه F_{ij} است. همچنین در رابطه فوق داریم [16]:

$$\xi = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} Dd\Gamma = \begin{bmatrix} \xi_{nn} & \xi_{nt} \\ \xi_{tn} & \xi_{tt} \end{bmatrix} \text{in} (n_{ij} \cdot t_{ij}) \quad (16)$$

بردارهای n_{ij} و t_{ij} به ترتیب بردارهای نرمال و مماس بر مرز F_{ij} می‌باشد. در ادامه شار فرارفت به صورت زیر گسسته سازی شده است:

$$F_{ij}^{adv} = -\frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \left(\frac{v_n(c_i - c_j)\theta_i}{2} \right) \quad (17)$$

v_n سرعت نرمال بر وجه F_{ij} می‌باشد.

۲-۳- محاسبه خطا

۲-۳-۱- خطای $RMSE^{13}$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{n}} \quad (18)$$

۲-۳-۲- خطای $NRMSE^{14}$

$$NRMSE = \frac{RMSE}{\frac{\sum y_i}{n}} \quad (19)$$

در روابط (۱۸) و (۱۹)، n تعداد نمونه‌ها، \hat{y}_i مقدار پارامتر محاسبه شده و y_i مقدار واقعی پارامتر است.

۳- نتایج

در این بخش به بررسی مدل حجم محدود دوبعدی DDFV پرداخته شده و با حل سه مثال، اعتبارسنجی این مدل با در نظر گرفتن سازوکارهای انتقال مختلف انجام شده است. ارزیابی جواب‌ها در هر دو بخش از شکل‌های مختلف، از جمله دقت نتایج و تعداد مرتبه تکرار مورد نیاز برای دستیابی به جواب انجام شده است. تمام کدهای مورد استفاده در این پژوهش با استفاده از زبان برنامه‌نویسی MATLAB انجام شده و خروجی‌ها با این نرم‌افزار است و همچنین از نرم‌افزار

۲-۲-۲- گسسته‌سازی دوبعدی معادله فرارفت- پراکندگی

با فرض حجم کنترلی Ω_i و اعمال روش حجم محدود روی معادله آلودگی، فرم انتگرالی این معادله به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\int_{\Omega_i} \left(\theta \frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(F) \right) d\Omega = \int_{\Omega_i} W d\Omega \quad (9)$$

در رابطه فوق F شار عبوری آلاینده است. سپس معادله بقای جرم به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\int_{\Omega_i} \theta \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) d\Omega + \int_{\partial\Omega_i} \mathbf{n} \cdot \mathbf{F} d\Gamma = \int_{\Omega_i} W d\Omega \quad (10)$$

در رابطه فوق، n بردار واحد عمود بر مرز $\partial\Omega_i$ می‌باشد. فرم گسسته‌سازی شده رابطه (۱۰) به شکل زیر است:

$$\frac{\partial \theta c_i}{\partial t} |\Omega_i| + \sum_{\Gamma_{ij} \in \partial\Omega_i} F_{ij} |\Gamma_{ij}| = W_i |\Omega_i| \quad (11)$$

در رابطه‌ی (۱۱)، $(\theta c)_i$ معرف غلظت در مرکز حجم کنترلی است. شار عبوری از مرز F_{ij} با F_{ij} نشان داده شده و شامل شار فرارفت F_{ij}^{adv} و پراکندگی F_{ij}^{disp} است [16]، روابط زیر معرف شار فرارفت و پراکندگی است:

$$F_{ij} = F_{ij}^{disp} + F_{ij}^{adv} \quad (12)$$

$$F_{ij}^{disp} = -\frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^{disp} d\Gamma = -\frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{n} \cdot \theta \bar{D} \nabla c d\Gamma \quad (13)$$

$$F_{ij}^{adv} = -\frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^{adv} d\Gamma = -\frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{n} \cdot v\theta c d\Gamma \quad (14)$$

رابطه (۱۳) را می‌توان به فرم گسسته زیر نوشت:

$$F_{ij}^{disp} = \theta \left(-\xi_{nn} \frac{c_j - c_i}{H_{ij}} - (\xi_{nt} - \cot \alpha \xi_{nn}) \frac{c_j - c_l}{|\Gamma_{ij}|} \right) \quad (15)$$

غلظت در مرکز المان i را با c_i و در مرکز المان j را c_j نشان می‌دهیم همچنین c_l و c_j غلظت در رئوس F_{ij} است که با استفاده از میانگین گیری وزنی به دست می‌آید [24-22, 12].

13 Root mean square error

14 Normalized root mean square error

FEATool و Netgen برای مش‌بندی‌های ساختاریافته و ساختارنایافته بهره گرفته شده است.

۳-۱- نمونه اول: پخش با منبع آلودگی پیوسته و جریان دو بعدی، حالت غیردائم

در نمونه اول یک ستون خاک غیراشباع به طول ۵۰ سانتی‌متر در نظر گرفته شده است که منبع آلودگی پیوسته‌ای با غلظت یک میکروگرم بر سانتی‌متر مکعب در سمت راست آن قرار دارد. هد اولیه در تمام نقاط برابر با ۳۰۰ cm- و هد در نقطه مرزی سمت راست برابر با ۷۵ cm- در نظر گرفته شده است. محتوای رطوبت در حالت اشباع در این نمونه برابر ۰.۳۶۸ و محتوای رطوبت باقی مانده برابر با ۰.۱۰۲ است. هدایت هیدرولیکی در حالت اشباع ۰.۰۰۹۲۲ cm/s و ضریب آلفا در مدل ون گن آختن برابر با 0.0335 cm^{-1} در نظر گرفته شده است [25,26]. کل زمان مدلسازی برابر با ۱۲ ساعت است. این نمونه با فرض اینکه سرعت انتشار آلودگی صفر است و تنها دلیل انتشار آلودگی پخش است، حل شده است.

در این نمونه از شبکه‌بندی ساختارنایافته ساخته شده توسط نرم‌افزار Netgen استفاده شده است. در این شبکه‌بندی سایز مش برابر با ۰.۵ سانتی‌متر در نظر گرفته شده است که شامل ۳۰۳ نود و ۴۰۰ المان است.

شکل ۱. مقایسه تغییرات محتوای رطوبت در حالت یک‌بعدی و دو بعدی

پس از اتمام ۱۲۰ ساعت

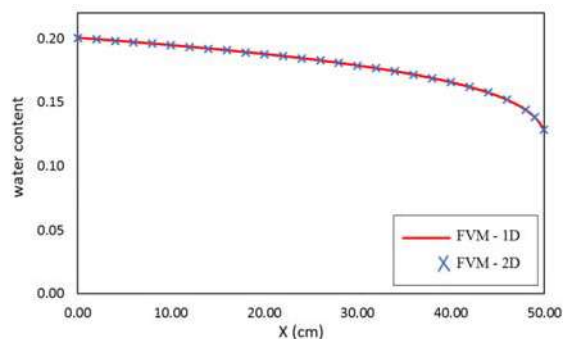


Fig. 1. The variation of water content at the final time of 120 hr for the one-dimensional and two-dimensional finite volume methods

در حل این نمونه ابتدا باید با استفاده از معادلات ریچاردز و ونگن آختن مقدار محتوای رطوبت خاک، هد آب زیرزمینی و روند جریان در نقاط هر مش‌بندی برای حالت یک‌بعدی و دو بعدی به دست آمده است. محتوای رطوبت پس از گذشت ۱۲۰ ساعت از شروع روند مدلسازی برای حالت‌های یک‌بعدی و دو بعدی در شکل (۱) نشان داده شده است.

بررسی روند تغییرات محتوای رطوبت خاک پس از ۱۲۰ ساعت نشان می‌دهد که مدل دو بعدی کاملاً منطبق بر مدل یک‌بعدی عمل کرده است و پاسخ به دست آمده قابل قبول است. در ادامه روند پخش آلودگی برای فرایند پخش در زمان‌های ۱۲، ۶۰، ۶۰۰ و ۶۰۰۰ ساعت در دو حالت یک‌بعدی و دو بعدی به شکل زیر محاسبه شده است:

شکل ۲. مقایسه تغییرات غلظت آلودگی در ستون خاک در حالت

یک‌بعدی و دو بعدی در زمان‌های مختلف

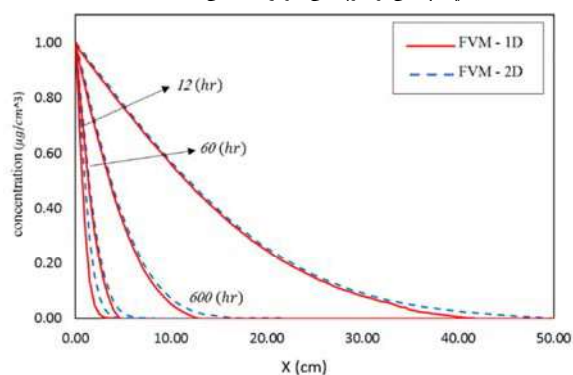


Fig. 2. The variation of concentration at the different final times for the one-dimensional and two-dimensional finite volume methods

با بررسی نتایج به دست آمده در شکل (۲)، می‌توان دریافت که نتایج مدل دو بعدی روی نتایج حاصل از مدل یک‌بعدی منطبق هستند. نتایج مدل دو بعدی در انتهای هر یک از زمان‌های مدلسازی نسبت به نتایج حاصل از مدل یک‌بعدی از نوسانات عددی کمتری برخوردار است، این موضوع در نتایج مربوط به مدلسازی ۶۰۰۰ ساعته به شکل بهتری قابل مشاهده است.

محدود یک بعدی با سایز مش ۰.۰۱ سانتی متر ترسیم شده است، با کوچک کردن اندازه مش نوسانات کاهش پیدا کرده اما حذف نشده است.

۳-۳ مثال سوم: پراکندگی، فرارفت و تجزیه زیستی با منبع آلودگی پیوسته و جریان دوبعدی غیردائم

در این نمونه علاوه بر دو سازوکار پراکندگی و فرارفت، تجزیه زیستی نیز لحاظ شده است. ضریب زوال (hr^{-1}) 0.00001 در نظر گرفته شده است [26]. در حل این نمونه سایز مش ۰.۰۵ در نظر گرفته شده است و نتایج به صورت زیر است:

شکل ۵. مقایسه تغییرات غلظت در ستون خاک در حالت یک بعدی و دوبعدی پس از اتمام ۱۲ ساعت

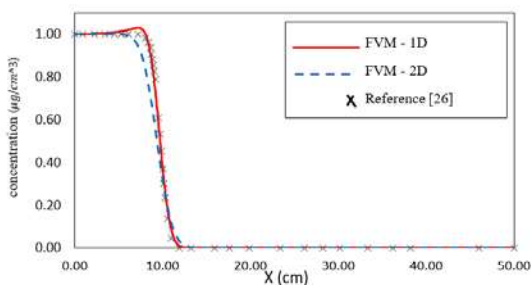


Fig. 5. The variation of concentration at the final time of 12 hr for the one-dimensional and two-dimensional finite volume methods

نمودار پخش آلودگی در محیط دوبعدی به شکل زیر نشان داده می‌شود:

شکل ۶. انتشار آلودگی همراه با زوال تجزیه زیستی، بعد از اتمام ۱۲ ساعت

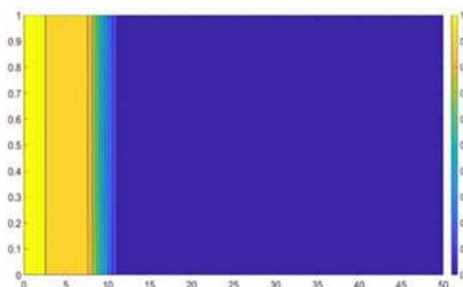


Fig. 6. The contour of concentration at the final time of 12 hr by considering biodegradation

۲-۳ نمونه دوم: پراکندگی و فرارفت با منبع آلودگی پیوسته و جریان دوبعدی غیردائم

این نمونه نیز مشابه با مثال بررسی شده قبلی است با این تفاوت که در این حالت سرعت مخالف صفر بوده و فرارفت فرارفت در نظر گرفته شده است [26]. نتایج غلظت برای گام‌های زمانی و مکانی مختلف در شکل (۳) نشان داده شده است.

شکل ۳. مقایسه تغییرات غلظت در ستون خاک در حالت یک بعدی و دوبعدی پس از اتمام ۱۲ ساعت برای گام مکانی ۰.۵ سانتی متر

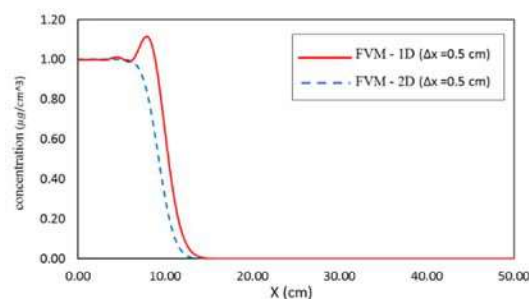


Fig. 3. The variation of concentration at the final time of 12 hr for the one-dimensional and two-dimensional finite volume methods ($\Delta x=0.5$ cm)

شکل ۴. مقایسه تغییرات غلظت در ستون خاک در حالت یک بعدی و دوبعدی پس از اتمام ۱۲ ساعت برای گام مکانی ۰.۰۱ سانتی متر

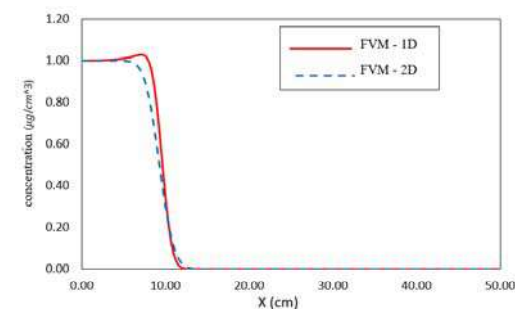


Fig. 4. The variation of concentration at the final time of 12 hr for the one-dimensional and two-dimensional finite volume methods ($\Delta x=0.01$ cm)

همان‌گونه که در شکل نشان داده شده است، در روش حجم محدود یک بعدی نوسانات عددی مشاهده می‌شود، در حالی که روش ارایه شده در این مقاله عاری از هرگونه نوسانات عددی است. در شکل بعدی نتایج روش حجم

برای ارزیابی و بررسی مدل‌ها و کدها، سه مسئله درستی‌آزمایی شده است. مسائل شامل سازوکار پخش، فرارفت - پراکندگی و فرارفت - پراکندگی - تجزیه زیستی است که با روش ضمنی کامل حل شده است. در نمونه دوم نتایج به دست آمده از مدل دوبعدی نسبت به یک بعدی در شرایط یکسان، نتایج بسیار بهتر و بدون نوسانات عددی را ارائه می‌دهد. در واقع در مدل‌های دوبعدی با گام‌های زمانی و مکانی بزرگ‌تر نسبت به مدل یک‌بعدی نتایج با خطا و نوسانات عددی کمتری همراه بودند. آنالیز حساسیت برای مثال سوم بخش دوبعدی انجام گرفته است و نتایج خطاهای $RMSE$ و $NRMSE$ به دست آمده نشان‌دهنده دقت و عملکرد مدل برای شبکه‌بندی‌ها و گام‌های زمانی متفاوت است.

مراجع

[1] Ondrasek, G., 2013. Water scarcity and water stress in agriculture. In *Physiological Mechanisms and Adaptation Strategies in Plants Under Changing Environment: Volume 1*. New York, NY: Springer New York.

[2] Nielsen D.R., Van Genuchten M., & Biggar J.W. 1986. Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone. *Water Resources Research* 22:89S-108S

[3] Szymkiewicz A. 2013 *Modelling Water Flow in Unsaturated Porous Media: Accounting for Nonlinear Permeability and Material Heterogeneity*. *GeoPlanet: Earth and Planetary Sciences* 9:1

[4] Celia M.A., Bouloutas E.T., Zarba R.L. 1990. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Research* 26:1483-1496

[5] Naghdi S., Bozorg-Haddad O., Khorsandi M., Chu X. 2021. Multi-objective optimization for allocation of surface water and groundwater resources. *Science of The Total Environment* 776:146026

[6] Berlin M., Kumar G.S., Nambi I.M. 2014 Numerical Modeling on the Effect of Dissolved Oxygen on Nitrogen Transformation and Transport in Unsaturated Porous System. *Environmental Modeling and Assessment* 19:283-299

[7] Gao Y., Shuping Y., Chunmiao Z. 2021. Efficient simulation of groundwater solute transport using the multipoint flux approximation method with arbitrary polygon grids. *Journal of Hydrology* 601, 126637.

برای بررسی‌های خطا و حساسیت مدل نسبت به مش‌بندی، نتایج با مش‌بندی‌های متفاوت مورد بررسی و مطالعه قرار می‌دهیم. برای بررسی خطاهای موجود از دو پارامتر $RMSE$ و $NRMSE$ استفاده می‌کنیم. در این حالت نتایج مدل با مرجع [۲۶] بررسی شده است. باتوجه به نمودارهای آنالیز حساسیت این نمونه و خطاهای $RMSE$ و $NRMSE$ به دست آمده، با کوچک کردن سایز مش‌بندی و گام زمانی در پایان زمان مدل‌سازی، دقت مدل‌سازی افزایش پیدا می‌کند و خطا کاهش می‌یابد. با توجه به نمودارهای انتشار آلودگی نیز مشخص است که نتایج به دست آمده دقت بسیار بالایی دارند و به نتایج مرجع نزدیک هستند.

شکل ۷. نمودار مقایسه خطای $RMSE$ برای مدل عددی $DDFV$

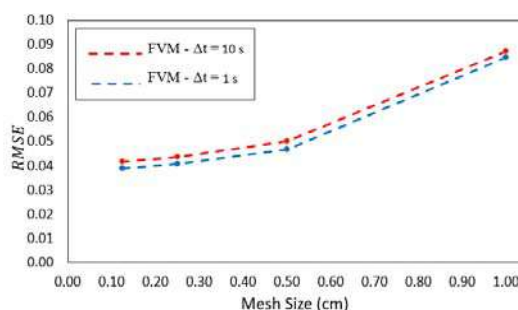


Fig. 7. The values of RMSE for the numerical model of DDFV

شکل ۸. نمودار مقایسه خطای $NRMSE$ برای مدل عددی $DDFV$

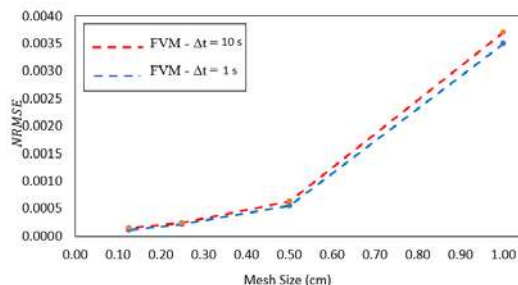


Fig. 8. The values of NRMSE for the numerical model of DDFV

۴- جمع‌بندی

در پژوهش حاضر روش نوین حجم محدود $DDFV$ برای حل معادلات جریان و آلودگی در محیط متخلخل غیراشباع توسعه داده شده است.

- [20] Van Genuchten, M.T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science society of America journal*, 44(5), 892-898.
- [21] Asadi R., Ataie-Ashtiani B. 2015. A comparison of finite volume formulations and coupling strategies for two-phase flow in deforming porous media. *Computers and Geotechnics*. 67:17-32
- [22] Asadi, R., Ataie-Ashtiani, B., 2021. Hybrid finite volume-finite element methods for hydro-mechanical analysis in highly heterogeneous porous media. *Computers and Geotechnics*, 132, p.103996.
- [23] Coudière Y., Vila J.P., Villedieu P. 1999. Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 33:493-516.
- [24] Coudière Y., Villedieu P. 2000. Convergence rate of a finite volume scheme for the linear convection-diffusion equation on locally refined meshes. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 34:1123-1149.
- [25] Praveen Kumar R., Dodagoudar G.R., Rao B.N. 2007. Meshfree modelling of one-dimensional contaminant transport in unsaturated porous media. *Geomechanics and Geoengineering* 2:129-136
- [26] Praveen Kumar R., Dodagoudar G.R. 2010. Meshfree analysis of two-dimensional contaminant transport through unsaturated porous media using EFGM. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*. 26:1797-1816
- [8] Gao, Yulong, Shengyan Pu, Chunmiao Zheng, and Shuping Yi. An improved method for the calculation of unsaturated-saturated water flow by coupling the FEM and FDM. *Scientific Reports* 9, no. 1 (2019): 1-9.
- [9] Mehl, S., Hill, M.C., 2004. Three-dimensional local grid refinement for block-centered finite-difference groundwater models using iteratively coupled shared nodes: a new method of interpolation and analysis of errors. *Advances in Water Resources*, 27(9), 899-912.
- [10] Di Giammarco, P., Todini, E., Lamberti, P., 1996. A conservative finite elements approach to overland flow: the control volume finite element formulation. *Journal of Hydrology*. 175 (1-4), 267-291.
- [11] Asadi, R., Ataie-Ashtiani, B., Simmons, C.T., 2014. Finite volume coupling strategies for the solution of a Biot consolidation model. *Computers and Geotechnics*. 55, 494-505.
- [12] Asadi, R., Ataie-Ashtiani, B., 2016. Numerical modeling of subsidence in saturated porous media: A mass conservative method. *Journal of Hydrology*. 542, 423-436.
- [13] Mategaonkar M. 2022. Numerical modeling of groundwater flow and contaminant transport. *Groundwater Contamination in Coastal Aquifers: Assessment and Management* 181-189.
- [14] Manzini, G., Ferraris, S., 2004. Mass-conservative finite volume methods on 2-D unstructured grids for the Richards' equation. *Advances in Water Resources*. 27 (12), 1199-1215.
- [15] Asadi R., Zamani Aliabadi Z. 2023. Comparison of numerical methods for the solution of Richards' equation in layered porous media. *Numerical Methods in Civil Engineering*. <https://doi.org/10.52547/NMCE.2302.1007>
- [16] Asadi R., Azizi K. 2023. Numerical modeling of contamination transport equation in porous media for transient flow regime by finite volume method. *Modares Civil Engineering journal* 23:193-205
- [17] Gambolati G., Paniconi C., Putti M. 1993. Numerical Modeling of Contaminant Transport in Groundwater. *Migration and Fate of Pollutants in Soils and Subsoils*. 381-410
- [18] Bedient P.B., Rifai H.S., Newell C.J. 1994. Ground water contamination: transport and remediation. *Ground water contamination: transport and remediation*.
- [19] Berardi M., Difonzo F., Lopez L. 2020. A mixed MoL-TMoL for the numerical solution of the 2D Richards' equation in layered soils. *Computers & Mathematics with Applications* 79:1990-2001.

Comparison of Finite Volume Methods for the Solution of Advection-Dispersion Equation in Unsaturated Porous Media

Roza Asadi^{1*}, Saeed Davari¹

1- Department of Civil Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran.

Email: * asadi@kntu.ac.ir

Abstract

Due to the scarcity of freshwater resources, especially in arid and semi-arid regions, groundwater has become an essential alternative. However, the increasing contamination of groundwater globally has raised significant concerns about the sustainability of this vital resource. Contaminants, often originating from sources like landfills and agricultural runoff, are typically released near the land surface. These pollutants travel through the unsaturated soil zone, known as the vadose zone, eventually reaching groundwater reservoirs. The movement of contaminants through the vadose zone is complex and poses significant environmental challenges. Therefore, understanding and accurately modeling the processes governing contaminant transport in this zone is critical for protecting groundwater quality. The equations governing pollutant transport in unsaturated porous media are complex and depend heavily on specific problem characteristics. Various mechanisms, including advection, dispersion, and biodegradation, must be considered as they influence the fate and transport of contaminants. Advection describes the movement of contaminants with the water flow through the porous medium, while dispersion accounts for the spreading of contaminants due to variations in flow velocities. Biodegradation involves the breakdown of contaminants by microorganisms, significantly altering pollutant concentrations during their movement through the soil. One of the key complexities in modeling contaminant transport in unsaturated porous media is the dependence of dispersion coefficients and seepage velocities on soil moisture content, which varies both spatially and temporally. To address these challenges, this study first solves the flow equation in an unsaturated medium using Richards' equation, a widely recognized model for unsaturated flow. Parameters such as moisture content and hydraulic head were computed, followed by the estimation of seepage velocity and hydrodynamic dispersion coefficients. These parameters are crucial for predicting how contaminants move through the vadose zone and were used to solve the contaminant transport equation to determine concentration distribution within the computational domain.

Given that analytical solutions to these equations are typically limited by the need for simplified boundary conditions and geometries, numerical methods offer a more flexible approach. Numerical methods can handle the non-linearity and variability inherent in flow and transport equations, making them well-suited for more complex scenarios. The most commonly used numerical techniques in this field include finite difference, finite element, and finite volume methods. In this research, a novel numerical method called Dual Discrete Finite Volume (DDFV) was developed specifically for modeling flow and contaminant transport in both saturated and unsaturated porous media. This method uses structured and unstructured grids to effectively handle complex geometries often encountered in real-world scenarios. Flow and contaminant transport equations were accurately modeled for each triangular element within the grid. By solving the flow equation, the study was able to determine moisture content and hydraulic head at both the center and vertices of each element. Flow velocities at the interfaces of these elements were then calculated, allowing for the determination of dispersion coefficients. The developed model was validated against three different examples. The first example involved pure diffusion with two-dimensional transient flow. The second example dealt with the advective-dispersive equation with continuous contaminant injection. By comparing the two-dimensional case with the one-dimensional case, it was found that no numerical oscillations occurred in the two-dimensional case, regardless of mesh size or time step. The third example considered the fate of contaminants undergoing biodegradation. In this scenario, root mean square errors (RMSE) and normalized root mean square error (NRMSE) values were calculated for different mesh sizes and time steps. Mesh refinement was found to decrease the error values, and all results demonstrated the high accuracy of the proposed numerical model.

Keywords: Unsaturated porous media, Richards' equation, Advection, Dispersion, Numerical modeling, Finite volume method.