

مدلسازی عددی انتقال آلودگی در محیط متخلخل در حالت جریان ناپایدار با استفاده از روش حجم محدود

رزا اسدی^{۱*}، کوثر عزیزی^۲

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

* asadi@kntu.ac.ir

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۹/۱۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۶/۰۸

چکیده

آب زیرزمینی یک منبع آب شیرین حائز اهمیت است، که در مقایسه با آب سطحی کمتر مستعد آلودگی بوده و دسترسی به این منبع با ارزش، مقرون به صرفه است. این مسائل باعث می شود آب زیرزمینی به عنوان یک منبع کارآمد در کمبود آب سطحی مانند خشکسالی به ویژه در کشورهای خشک و نیمه خشک شناخته شود. در این تحقیق معادله انتقال آلودگی در آب زیرزمینی با استفاده از روش نوین حجم محدود DDFV مدلسازی شده که با استفاده از این روش غلظت آلودگی در مرکز و رئوس هر المان بدست می آید. مدل ارائه شده روی مش مثلثی ساختارنیافته اعمال شده است که برای مدلسازی مرزهای هندسی پیچیده مناسب است. در حالت جریان ناپایدار، معادله جریان با معادله انتقال همبسته شد و نتایج مدل عددی با نتایج مدل مادفلو درستی آزمایی شد. در ادامه مدل هم بسته جریان و انتقال در محیط با غیرهمگنی بالا مورد استفاده قرار گرفته که نتایج نشان از پایداری مدل مورد نظر می دهد. همچنین با استفاده از مدل عددی مورد نظر نتایج معادلات جریان و انتقال آلودگی عاری از هر گونه نوسانات عددی است.

واژگان کلیدی: انتقال آلودگی، فرارفت، پراکندگی، مدلسازی عددی، روش حجم محدود.

۱-مقدمه

جهان و تشدید بهره برداری از آب، مشکل کیفیت به یک عامل محدود کننده در توسعه و استفاده از منابع آب تبدیل شده است. امروزه آلودگی آب های زیرزمینی به عنوان یک مشکل جهانی از سویی سلامتی انسان ها و از سویی دیگر محیط زیست را به شدت تهدید می کند [2]. تحقیقات متعدد در نقاط مختلف جهان در خلال دهه های اخیر نشان می دهد که آب های زیرزمینی به شدت توسط یون های محلول حاصل از فعالیت های صنعتی و کشاورزی

آب های زیرزمینی بخشی از آب قابل دستیابی از زیرسطح زمین است که از طریق چاه ها، گالری ها و قنوات به سطح زمین انتقال داده شده و یا بطور طبیعی توسط چشمه ها از درون زمین تخلیه می شود [1]. آب های زیرزمینی منبع عمده تامین آب شیرین در بسیاری از مناطق دنیا به ویژه در اقلیم های خشک و نیمه خشک مانند ایران است. از سویی افزایش تقاضا برای آب در بیشتر نقاط

پذیری، دقت بیشتر در شبیه‌سازی هندسه با مرزهای نامنظم دارد و خطای این روش نسبت به مدلسازی با مادفلو کمتر است [16]. در سال‌های اخیر روش حجم محدود برای مسائل مختلف توسعه داده شده و این روش به کلاس‌های متعددی تقسیم شده است [19]. یکی از ساده‌ترین روش‌های حجم محدود، روش تخمین شار دو نقطه‌ای^۸ است که در این روش شار در وجه مشترک دو جزء حجمی از گرادیان هد در مراکز دو سلول مجاور به دست می‌آید. روش فوق با وجود سادگی و پرکاربرد بودن در مش‌های ساختارنیافته^۹ دقت پایینی دارد، زیرا در حالت کلی خطی که مراکز دو سلول مجاور را به هم وصل می‌کند بر وجه مشترک عمود نیست [17-20]. در دهه‌های اخیر تلاش گسترده‌ای برای توسعه مدل‌های نوین و پیشرفته حجم محدود در مش‌های نامنظم صورت گرفته است [3, 9, 15-24] که یکی از این روش‌ها روش DDFV¹⁰ است [14, 15, 19, 21-24]. در مراجع [21, 22] این روش برای حل معادله همرفت-دیفیوژن^{۱۱} در حالت پایدار^{۱۲} توسعه داده شده و همگرایی آن به اثبات رسید. در مراجع [23, 24] از روش DDFVM برای حل معادله ریچاردز در محیط غیراشباع استفاده شد که نتایج قابل قبولی در نمونه‌های متعدد حاصل شد. اسدی و عطایی آشتیانی از این روش برای گسسته‌سازی معادله جریان در مدل بیو^{۱۳} که بر مبنای فشار و ترم های کرنش است، استفاده کردند. معادلات همبسته^{۱۴} جریان و تغییر شکل برای محیط متخلخل تغییر شکل‌پذیر مدلسازی شد. آنها نتایج روش حجم محدود را با روش المان محدود و حل تحلیلی مقایسه کردند و این مقایسه نشان داد که روش المان محدود دارای نوسانات عددی است، در صورتی که روش حجم محدود بر حل تحلیلی هماهنگ است و نشان دادند که روش گفته شده از دقت و نرخ بالای همگرایی برخوردار است [14].

آلوده شده است [2]. از این رو مدل‌های حاکم بر انتقال آلودگی^۱ محلول نقش مهمی در تعیین توزیع زمانی و مکانی آلاینده‌ها در آبخوان‌ها^۲ دارد [3].

مدل‌های زیادی از جمله مدل‌های تحلیلی، نیمه تحلیلی و عددی برای مدلسازی جریان آب زیرزمینی و انتقال آلودگی توسعه داده شده است [3-7]. با توجه به اینکه مدل‌های عددی قابلیت در نظر گرفتن هندسه‌های پیچیده و شرایط مرزی متفاوت را دارند، نسبت به سایر مدل‌ها ارجحیت دارند [7]. رایج‌ترین روش‌های عددی برای تخمین معادلات دیفرانسیل جزئی جریان و انتقال جرم، روش تفاضل محدود^۳، روش المان محدود^۴ و روش حجم محدود^۵ می‌باشد [8, 9]. روش تفاضل محدود روش منعطفی برای حل معادله انتقال در مرزهای پیچیده محسوب نمی‌شود و از دقت کافی برای تقریب غلظت آلاینده برخوردار نیست از این رو نیاز است که در اینگونه مرزها مش تاحد زیادی ریز شود [3, 10, 11]. با وجود آنکه روش المان محدود نسبت به روش تفاضل محدود انعطاف بیشتری در مدلسازی هندسه‌های پیچیده دارد اما در این روش بقای جرم به صورت محلی حفظ نشده و همچنین در مرزهای ناهمگن نوسانات عددی را در حل معادلات نشان می‌دهد [12-14]. در روش حجم محدود قانون بقای جرم در سطح المان حفظ می‌شود، که این امر سبب کاهش خطا خواهد شد. در عین حال این روش برای هندسه‌های خمیده، شعاعی و پیچیده مناسب است [9, 14-24]. به عنوان نمونه Loudyi و همکاران با استفاده از روش حجم محدود با شبکه غیرمتعامد چهارضلعی و روش سلول مرکزی^۶، معادله جریان آب زیرزمینی را در حالت دو بعدی مدل کردند. آنها مدل خود را برای آبخوانی در نزدیکی رودخانه‌ای در انگلستان استفاده کردند و نتایج را با مدل مادفلو^۷ و داده‌های مشاهداتی مقایسه کردند. نتیجه این مقایسه نشان داد که روش حجم محدود انعطاف

8. Two point flux approximation
9. Unstructured grid
10. Dual-Discrete finite volume
11. Convection-Diffusion
12. Steady state
13. Biot
14. Coupled

1. Contaminant transport
2. Aquifer
3. Finite difference method
4. Finite element method
5. Finite volume method
6. Cell-center
7. Modflow

بسیاری از مطالعات نشان داده است که مدل‌های عددی در شرایط غیر همگن^۱ و ناهمسان^۲ نتایج ناپایداری از خود نشان می‌دهند [15, 17-19]. از این رو اسدی و عطایی آشتیانی در مرجع [15] دو روش نوین حجم محدود MPFA^۳ و DDFV را برای مدل‌سازی معادله جریان و تغییر شکل در محیط با غیرهمگنی بالا مقایسه نمودند. نتایج نشان داد روش DDFV از پایداری و دقت بالاتری برخوردار است.

با توجه به مطالعات صورت گرفته، در این تحقیق برای اولین بار روش DDFV برای گسسته‌سازی معادله انتقال آلودگی محلول به کار گرفته شده است. سازوکارهای پخش آلودگی شامل پراکندگی^۴ و فرارفت^۵ است. در این تحقیق، مدل انتقال آلودگی به صورت هم‌بسته با معادله جریان در نظر گرفته شده است. به این ترتیب که ابتدا معادله جریان با استفاده از روش DDFV حل شده، مقدار هد 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 DDFV حل خواهد شد. همچنین در این مطالعه پایداری روش فوق در مدل‌سازی معادله انتقال آلودگی در محیط‌هایی با غیرهمگنی بالا نیز بررسی شده است.

ساختار مقاله به این صورت است که در بخش دوم، مواد و روش‌ها شامل معادلات ریاضی و فرمولاسیون عددی ارائه شده و در بخش سوم نتایج در نمونه‌های مختلف بررسی می‌شود. بخش پایانی نیز به جمع‌بندی اختصاص داده شده است.

۲- مواد و روش‌ها

در این بخش ابتدا معادلات ریاضی حاکم ارائه شده و سپس فرمولاسیون عددی روش DDFV برای حل معادله جریان و انتقال آلودگی به دست آمده است.

۲-۱- معادلات ریاضی

معادلات ریاضی حاکم بر مساله شامل معادلات جریان و انتقال آلودگی است که به صورت هم‌بسته حل می‌شود. با توجه به اینکه

هر دو معادله وابسته به زمان می‌باشد، در هر گام زمانی ابتدا معادله جریان در حالت ناپایدار حل شده مقادیر هد در مرکز و رئوس هر المان به دست آمده، سپس با استفاده از تخمین شار چندنقطه‌ای مقدار سرعت تراوش محاسبه می‌شود. در مرحله بعدی ضرایب معادله انتقال آلودگی شامل سرعت تراوش و ضرایب پراکندگی هیدرودینامیکی به دست آمده و مقدار غلظت با حل معادله دوم حاصل می‌شود. لازم به ذکر است که معادله جریان در آبخوان محصور و معادله انتقال آلودگی با سازوکارهای فرارفت و پراکندگی و در محیط دوبعدی فرض شده است. در روابط زیر معادلات دیفرانسیلی جریان و انتقال آلودگی به ترتیب ارائه شده است:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v} = f \quad (1)$$

در رابطه بالا S_s ضریب ذخیره ویژه $[L^{-1}]$ ، h هد هیدرولیکی $[L]$ ، t زمان $[T]$ ، $\mathbf{v}$ بردار سرعت داریسی $[LT^{-1}]$ و f ترم چشمه و چاه $[T^{-1}]$ است.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{v}}c) - \nabla \cdot (D \nabla c) = W \quad (2)$$

در رابطه فوق c غلظت آلودگی $[ML^{-3}]$ ، $\bar{\mathbf{v}}$ بردار سرعت تراوش $[ML^{-3}]$ ، D تانسور پراکندگی $[L^2T^{-1}]$ و W ترم منبع و چاه $[ML^{-3}T^{-1}]$ است.

۲-۲- فرمولاسیون عددی

۲-۲-۱- گسسته‌سازی معادله جریان با استفاده از روش

حجم محدود

با اعمال روش حجم محدود روی معادله جریان و بر حجم کنترلی Ω_i فرم انتگرالی این معادله را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\int_{\Omega_i} \left(S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v} \right) d\Omega = \int_{\Omega_i} f d\Omega \quad (3)$$

با اعمال قضیه گوس-گرین در رابطه فوق، معادله بقای جرم را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\int_{\Omega_i} \left(S_s \frac{\partial h}{\partial t} \right) d\Omega + \int_{\partial\Omega_i} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} d\Gamma = \int_{\Omega_i} f d\Omega \quad (4)$$

این پارامترها در شکل (۱) نشان داده شده‌اند. با جایگذاری معادله (۷) در رابطه (۶)، شار عددی بر روی مرز Γ_{ij} مطابق زیر بدست می‌آید [14, 21, 22]:

$$V_{ij} = -\kappa \psi_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij} \quad (8)$$

در رابطه فوق κ ماتریس هدایت هیدرولیکی معادل و متناظر با مختصات محلی $(\mathbf{n}_{ij}, \mathbf{t}_{ij})$ است [14, 21, 22]:

$$\kappa = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \bar{\mathbf{K}} d\Gamma = \begin{bmatrix} \kappa_{nn} & \kappa_{nt} \\ \kappa_{tn} & \kappa_{tt} \end{bmatrix} \text{ in } (\mathbf{n}_{ij}, \mathbf{t}_{ij}) \quad (9)$$

با اعمال روابط (۷ و ۹) در معادله (۸)، شار عددی را می‌توان به صورت زیر بیان نمود [14, 21, 22]:

$$V_{ij} = -\kappa_{nn} \frac{h_j - h_i}{|\Gamma_{ij}|} - (\kappa_{nt} - \cot \theta \kappa_{nn}) \frac{h_j - h_i}{|\Gamma_{ij}|} \quad (10)$$

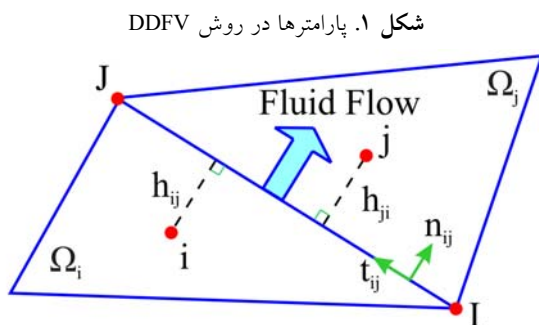


Fig. 1. Parameters in DDFV scheme

برای کامل نمودن روش گسسته‌سازی CCFV، نیاز به درونیابی مقادیر هد در رئوس (h_I و h_J) بر اساس میانگین وزنی مقادیر هد در مراکز سلول‌های مجاور است. به این منظور از روش حداقل مربعات برای تعیین توابع وزنی موردنظر استفاده می‌شود. با اعمال این روش برای مقدار هد h_I داریم:

$$h_I = \sum_{i=1}^{N_I} w_i h_i \quad (11)$$

در رابطه (۱۱) تعداد حجم‌های کنترلی مجاور راس I ($N_I > 2$) و w_i تابع وزنی متناظر با حجم کنترلی i می‌باشد. [14, 21, 22]

در نهایت با جایگذاری رابطه (۱۰) در فرمول مربوط به شار عددی، فرم نهایی گسسته‌سازی شده معادله بقا بدست می‌آید. با به دست آوردن هد در مرکز و رئوس هر المان سرعت در راستای

در رابطه فوق $\partial \Omega_i$ مرز حجم کنترلی Ω_i و $\mathbf{n}$ بردار واحد عمود بر مرز $\partial \Omega_i$ است. فرم گسسته شده معادله به صورت زیر است:

$$S_s \frac{\partial h_i}{\partial t} |\Omega_i| + \sum_{\Gamma_{ij} \in \partial \Omega_i} V_{ij} |\Gamma_{ij}| = f_i |\Omega_i| \quad (5)$$

در معادله فوق، هد و ترم چشمه/چاه در مرکز حجم کنترلی و با استفاده از ترم‌های h_i و f_i تعریف می‌شود. Γ_{ij} مرز مشترک میان دو حجم کنترلی Ω_i و Ω_j می‌باشد ($\Omega_i \cap \Omega_j = \Gamma_{ij}$). $|\Gamma_{ij}|$ نشان دهنده طول وجه مشترک Γ_{ij} و $|\Omega_i|$ مساحت حجم کنترلی می‌باشد. V_{ij} معرف شار عبوری از مرز Γ_{ij} می‌باشد که با استفاده از رابطه زیر تعریف می‌شود [14, 21, 22]:

$$V_{ij} = -\frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{K}} \nabla h d\Gamma \quad (6)$$

در رابطه فوق $\bar{\mathbf{K}}$ تانسور هدایت هیدرولیکی می‌باشد. با توجه به اینکه تابع مجهول در مرکز سلول تعریف می‌شود، این روش در گروه روش‌های حجم محدود سلول مرکزی^۱ (CCFVM) قرار می‌گیرد.

از آنجایی که در شبکه‌بندی بدون ساختار مثلثی، خط اتصال دهنده مراکز سلول‌های مجاور در حالت کلی عمود بر مرز مشترک نیست، برای تخمین شار عبوری از مرز مشترک بیش از دو نقطه مورد نیاز است. روش چندنقطه‌ای مورد استفاده در این تحقیق روش دیاموند^۲ است [14, 21, 22]. در این روش برای تخمین شار، علاوه بر مقادیر هد در مراکز سلول‌ها نیاز به مقادیر هد در رئوس وجوه نیز هست. به این ترتیب که گرادیان هد بر روی مرز سلول به صورت رابطه زیر گسسته می‌شود.

[14, 21- 24]

$$\psi_{ij} = \left(\frac{h_j - h_i}{|\Gamma_{ij}|} - \cot \theta \frac{h_j - h_i}{|\Gamma_{ij}|} \right) \mathbf{n}_{ij} + \frac{h_j - h_i}{|\Gamma_{ij}|} \mathbf{t}_{ij} \quad (7)$$

$\mathbf{n}_{ij}$ و $\mathbf{t}_{ij}$ به ترتیب بردارهای یک‌ه عمود و مماسی بر وجه Γ_{ij} می‌باشد. به گونه‌ای که $\mathbf{n}_{ij}$ در راستای شار و به سمت خارج از حجم کنترلی Ω_i فرض شده است. همچنین I و J رئوس وجه Γ_{ij} در جهت $\mathbf{t}_{ij}$ و I و J مراکز هندسی دو سلول چپ و راست hs_j در رابطه بالا $H_{ij} = h_{ij} + h_{ji}$ تصویر بردار $\vec{IJ}$ در جهت بردار نرمال $\mathbf{n}_{ij}$ و h_{ij} و h_{ji} به ترتیب فاصله عمودی بین مراکز I و J و وجه سلول است. پارامتر θ نیز زاویه میان دو بردار $\vec{IJ}$ و $\mathbf{t}_{ij}$ است [14, 21-24].

در رابطه (۱۹) c_i غلظت در مرکز سلول i ، c_j غلظت در مرکز سلول j و Γ_{ij} مقدار غلظت در رئوس است. همچنین تانسور ξ با استفاده از معادله (۲۰) به دست می‌آید.

$$\xi = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} D \, d\Gamma = \begin{bmatrix} \xi_{nn} & \xi_{nt} \\ \xi_{tn} & \xi_{tt} \end{bmatrix} \text{ in } (n_{ij}, t_{ij}) \quad (20)$$

با اعمال روابط (۱۹ و ۲۰) در معادله (۱۸) شار عددی پراکندگی را می‌توان به صورت زیر تعریف نمود:

$$F_{ij}^{disp} = -\xi_{nn} \frac{c_j - c_i}{H_{ij}} - (\xi_{nt} - \cot \theta \xi_{nn}) \frac{c_j - c_i}{|\Gamma_{ij}|} \quad (21)$$

شار عددی فرارفت نیز روی مرز Γ_{ij} مطابق رابطه (۲۲) بدست می‌آید:

$$F_{ij}^{adv} = -\frac{1}{|\Gamma_{ij}|} v_n (c_i - c_j) / 2 \quad (22)$$

در ادامه با استفاده از درونیابی می‌توان مقادیر غلظت را در رئوس (c_i و c_j) بر اساس میانگین وزنی مقادیر غلظت در مراکز سلول‌های مجاور بدست آورد. در این بخش نیز از روش حداقل مربعات برای تعیین توابع وزنی مورد نظر استفاده می‌شود. با اعمال این روش برای مقدار غلظت c_i داریم

$$[14, 21, 22]:$$

$$c_i = \sum_{i=1}^{N_i} w_i c_i \quad (23)$$

در نهایت با جایگذاری رابطه (۲۱، ۲۲ و ۲۳) در رابطه (۱۴) معادله نهایی گسسته‌سازی شده حاصل می‌شود.

۳- نتایج

در این بخش برای درستی‌آزمایی مدل ارائه شده به روش حجم محدود به حل نمونه‌هایی پرداخته شده است. حل به دست آمده با استفاده از مدل عددی با نتایج به دست آمده از کد مادفلو مقایسه شده که نشان دهنده هماهنگی بالایی میان نتایج است. همچنین نمونه‌ها به گونه‌ای انتخاب شده که جریان در حالت‌های یک بعدی و دوبعدی و شرایط مرزی متفاوت را دربرگیرد. در نهایت مسئله با ناهمگنی بالا مدل‌سازی شده و پایداری مدل ارائه شده مورد بررسی قرار گرفت. لازم به ذکر است روش حجم محدود در محیط متلب کدنویسی شده است.

۳-۱ مسئله فرارفت-پراکندگی با فرض جریان یک بعدی و ناپایدار

t و n به دست خواهد آمد و با استفاده از ماتریس چرخش، سرعت در راستای x و y محاسبه می‌شود و در ادامه ضرایب پراکندگی در راستای x و y به دست می‌آید.

لازم به ذکر است که در مسائل غیرهمگن به هر سلول یک تانسور هدایت هیدرولیکی اختصاص داده شده و همچنین در مرز مشترک میان دو سلول ضریب هدایت هیدرولیکی با استفاده از میانگین هارمونیک بدست می‌آید.

۱-۲-۲ گسسته‌سازی معادله انتقال آلودگی با استفاده از روش حجم محدود

با روندی مشابه و با اعمال روش حجم محدود روی معادله آلودگی و روی حجم کنترلی Ω_i فرم انتگرالی این معادله را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\int_{\Omega_i} \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} \right) d\Omega = \int_{\Omega_i} W d\Omega \quad (12)$$

با اعمال قضیه گوس-گرین معادله فوق را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\int_{\Omega_i} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) d\Omega + \int_{\partial \Omega_i} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{F}) d\Gamma = \int_{\Omega_i} W d\Omega \quad (13)$$

فرم گسسته‌شده معادله (۱۳) به صورت زیر است:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} |\Omega_i| + \sum_{\Gamma_{ij} \in \partial \Omega_i} F_{ij} |\Gamma_{ij}| = W_i |\Omega_i| \quad (14)$$

در معادله (۱۴)، غلظت در مرکز حجم کنترلی با c_i تعریف می‌شود. F_{ij} معرف شار عبوری ماده آلاینده از مرز Γ_{ij} است که شامل شار فرارفت F_{ij}^{adv} و پراکندگی F_{ij}^{disp} بوده و با استفاده از روابط زیر تعریف می‌شود:

$$F_{ij} = F_{ij}^{disp} + F_{ij}^{adv} \quad (15)$$

$$F_{ij}^{disp} = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^{disp} d\Gamma = -\frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \nabla c d\Gamma \quad (16)$$

$$F_{ij}^{adv} = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^{adv} d\Gamma = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{v}} c D \gamma \quad (17)$$

شار عددی پراکندگی روی مرز Γ_{ij} مطابق رابطه زیر بدست می‌آید:

$$F_{ij}^{disp} = -\xi_{ij} \gamma_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij} \quad (18)$$

در رابطه فوق γ_{ij} گرادیان غلظت روی مرز سلول است و از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\gamma_{ij} = \left(\frac{c_j - c_i}{H_{ij}} - \cot \theta \frac{c_j - c_i}{|\Gamma_{ij}|} \right) \mathbf{n}_{ij} + \frac{c_j - c_i}{|\Gamma_{ij}|} \mathbf{t}_{ij} \quad (19)$$

در شکل (۴) تغییرات غلظت در زمان‌های ۱ و ۵ روز محاسبه شده است که در این شکل نیز با توجه به هماهنگی حل عددی بر نتایج مدل مادفلو، دقت بالای مدل حجم محدود نشان داده شده است.

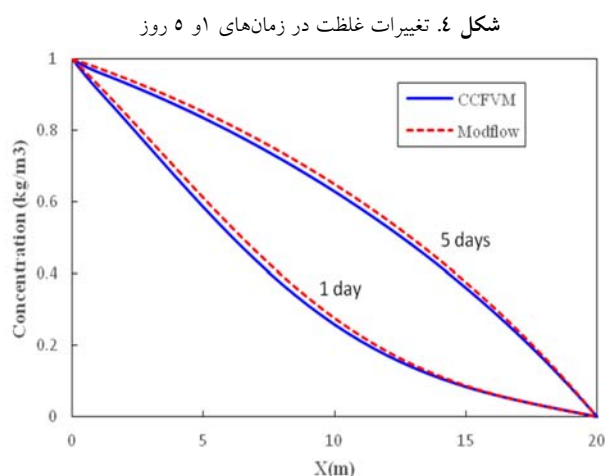


Fig. 4. The variation of concentration at the final times of 1 and 5 days

۳-۲- مسئله فرارفت-پراکندگی در حالت جریان دو بعدی و ناپایدار

این مساله با اندکی تغییرات از مرجع [25] در نظر گرفته شده است. آبخوانی به طول و عرض ۲۵ متر فرض شده است. هدایت هیدرولیکی این آبخوان ۱.۰۸ متر بر روز، ضریب پخش مولکولی ۸.۴۶ مترمربع بر روز، پراکندگی طولی ۱۰ متر و پراکندگی عرضی صفر است. تخلخل ۰.۲۶ و ذخیره ویژه ۰.۰۰۰۲ بر روز است. شرایط مرزی به این صورت است که مرز شمالی و غربی دیریکله و مرز جنوبی و شرقی نفوذناپذیر می‌باشد. مقدار هد در مرز شمالی و غربی ۱۰ متر و مقدار غلظت در مرز شمالی ۱ کیلوگرم بر مترمکعب و در مرز غربی صفر است. شرایط اولیه برای هد و غلظت صفر می‌باشد. نتایج ارائه شده برای هد و غلظت در مختصات $y=24m$ و با گام مکانی ۰.۵ متر در نظر گرفته شده است (شکل‌های ۶ و ۷).

شکل (۵) مش‌بندی مسئله را نشان می‌دهد که در این مسئله سایز مش ۰.۵ متر فرض شده و تعداد نودها ۳۰۰۱ و تعداد المان‌ها ۵۷۹۶ است.

در نمونه اول آبخوانی محصور به طول ۲۰ متر و عرض ۱ متر در نظر گرفته شده است. هدایت هیدرولیکی این آبخوان ۱.۰۸ متر بر روز، ضریب پخش مولکولی ۸.۴۶ مترمربع بر روز، پراکندگی طولی ۱۰ متر و پراکندگی عرضی صفر است. تخلخل ۰.۲۶ و ذخیره ویژه برای آبخوان محصور ۰.۰۰۰۲ بر متر است. شرایط مرزی به این صورت است که مرز بالا و پایین نیومن^۱ و مرز چپ و راست دیریکله^۲، مقدار هد در مرز چپ ۱۰ متر و در مرز راست ۰ است. همچنین مقدار غلظت در مرز چپ ۱ کیلوگرم بر متر مکعب و در مرز راست ۰ است. شرایط اولیه هد و غلظت صفر است.

شکل ۲. مش‌بندی مسئله ۱-۳

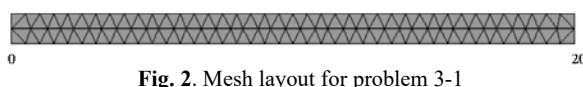


Fig. 2. Mesh layout for problem 3-1

شکل ۳. تغییرات هد هیدرولیکی در زمان‌های ۰.۰۰۱، ۰.۰۱ و ۰.۱ روز با فرض گام زمانی ۰.۰۰۱ روز

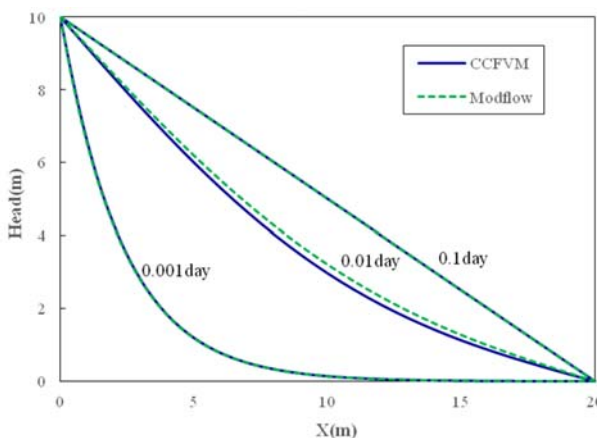


Fig. 3. The variation of hydraulic head at the final times of 0.001, 0.01 and 0.1 day with timestep of 0.001 day

شکل (۲) مش‌بندی مثالی ساختار نیافته را نشان می‌دهد، که سایز مش در این مسئله ۰.۵ متر است. تعداد نودها در این مسئله ۱۲۲ و تعداد المان‌ها ۱۵۸ است. نتایج ارائه شده برای هد و غلظت با گام مکانی ۰.۵ متر در نظر گرفته شده است. شکل (۳) تغییرات هد در زمان‌های ۰.۰۰۱، ۰.۰۱ و ۰.۱ روز و گام زمانی ۰.۰۰۱ روز را نشان می‌دهد که حل عددی حجم محدود بر نتایج مدل مادفلو تطابق دارد.

شکل ۷. تغییرات غلظت در زمان‌های ۱، ۵، ۱۰ و ۳۰ روز

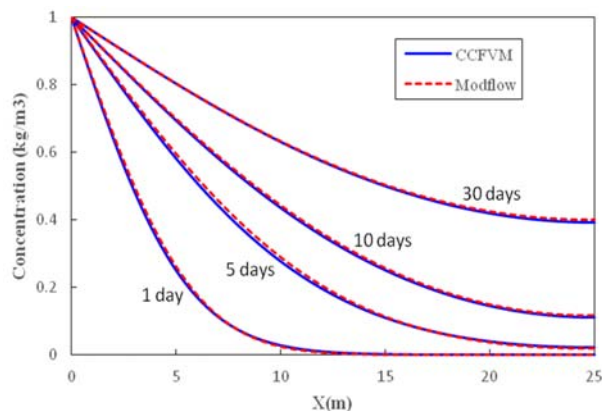


Fig. 7. The variation of concentration at the final times of 1, 5, 10 and 30 days

شکل ۸. نقشه کانتور غلظت در زمان ۳۰ روز با استفاده از روش حجم محدود

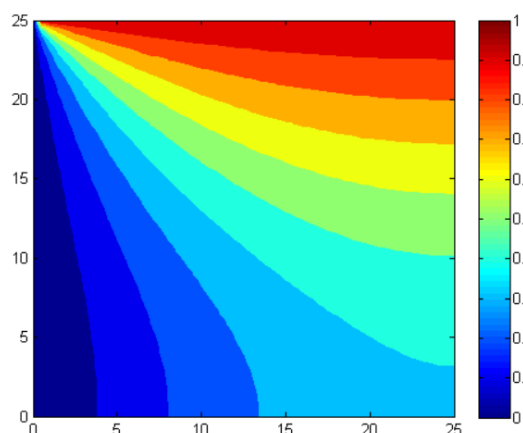


Fig. 8. Contour map of concentration at the final time of 30 days with the FVM

در شکل‌های (۸) و (۹) نیز به ترتیب کانتور غلظت حاصل از مدل حجم محدود و مادفلو جهت مقایسه و صحت سنجی مقایسه شده است.

شکل ۵. مش‌بندی مسئله ۳-۲

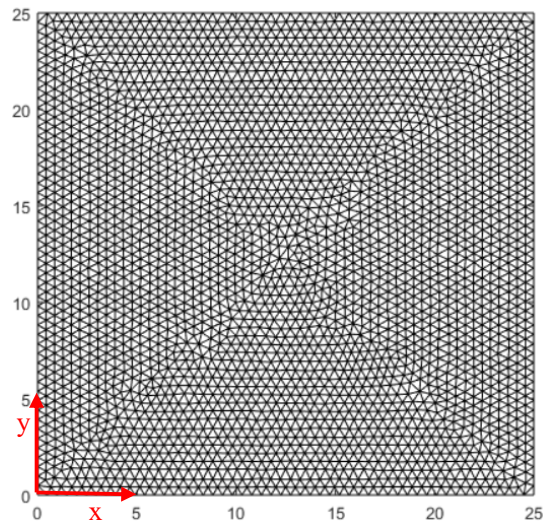


Fig. 5. Mesh layout for problem 3-2

شکل (۶)، تغییرات هد در زمان‌های ۰.۰۰۱، ۰.۰۱ و ۰.۱ روز و گام زمانی ۰.۰۰۱ روز نشان می‌دهد. که حل مدل مادفلو به حل عددی حجم محدود بسیار نزدیک است.

شکل (۷) تغییرات غلظت در زمان‌های ۱، ۵، ۱۰ و ۳۰ روز را نشان می‌دهد که حل مدل مادفلو با حل عددی هماهنگی بسیار زیادی دارد.

شکل ۶. تغییرات هد هیدرولیکی در زمان‌های ۰.۰۰۱، ۰.۰۱ و ۰.۱ روز با فرض گام زمانی ۰.۰۰۱ روز

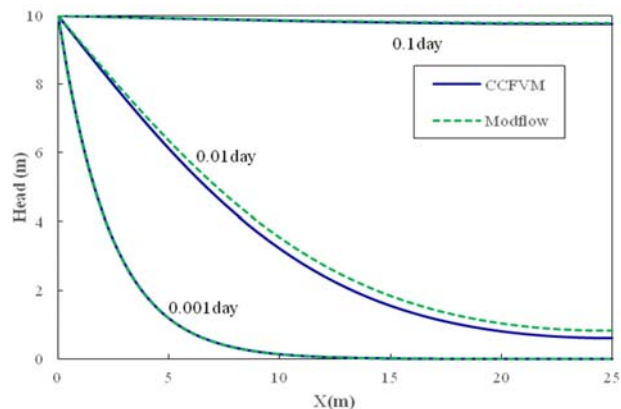


Fig. 6. The variation of hydraulic head at the final times of 0.001, 0.01 and 0.1 day with time step of 0.001 day

شکل ۱۱. تغییرات هد هیدرولیکی در زمانهای ۱، ۵ و ۱۰ روز با فرض گام زمانی ۰.۰۵ روز

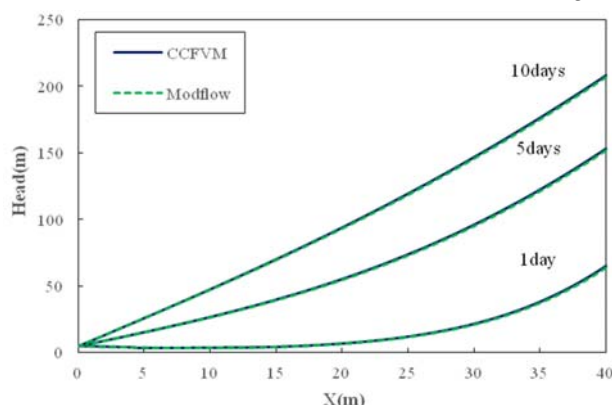


Fig. 11. The variation of hydraulic head at the final times of 1, 5 and 10 days with time step of 0.05 day

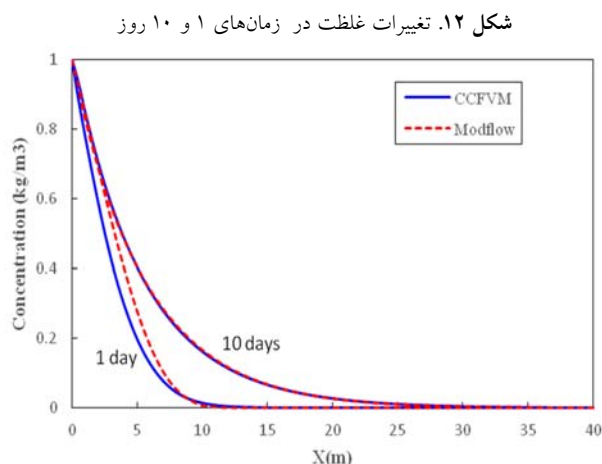
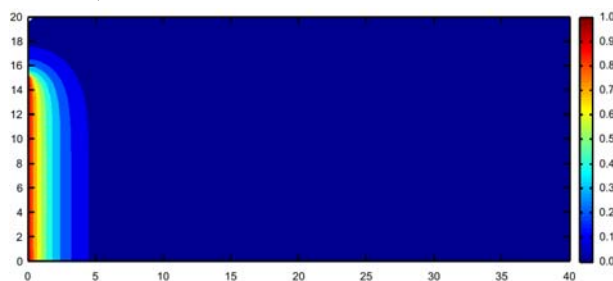


Fig. 12. The variation of concentration at the final times of 1 and 10 days

در این مسئله سایز مش ۰.۵ متر در نظر گرفته شده است و تعداد نودها ۳۷۷۷ و تعداد المان‌ها ۷۳۱۲ است. نتایج ارائه شده برای هد و غلظت در مختصات $y=10m$ و گام مکانی ۰.۵ متر در شکل‌های (۱۱ و ۱۲) نمایش داده شده است.

شکل ۱۳. نقشه کانتور غلظت در زمان ۱ روز با استفاده از مدل حجم محدود



شکل ۹. نقشه کانتور غلظت در زمان ۳۰ روز با استفاده از مدل مادفلو

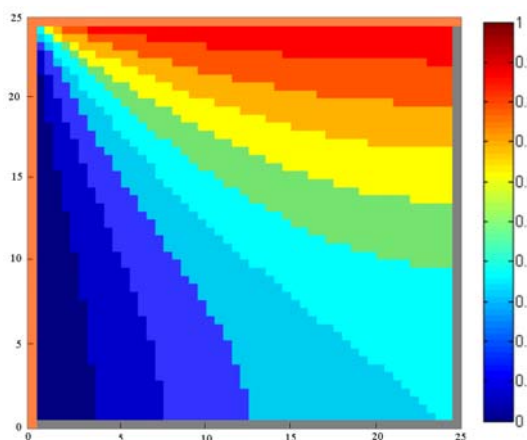


Fig. 9. Contour map of concentration at the final time of 30 days with Modflow

۳-۳- مسئله فراغت-پراکندگی در حالت جریان دو بعدی، ناپایدار و شرایط مرزی شار ثابت

این نمونه با اندکی تغییرات از مرجع [26] در نظر گرفته شده است. آبخوانی به طول ۴۰ و عرض ۲۰ متر فرض شده است. هدایت هیدرولیکی این آبخوان ۰.۸۴۶ متر بر روز، ضریب پخش مولکولی ۳ مترمربع بر روز، پراکندگی طولی و عرضی ۰.۰۳۵ متر و تخلخل ۰.۳۵ است. ذخیره ویژه ۰.۰۱ بر متر است. همان‌گونه که در شکل (۱۰) نشان داده شده است مرز بالا و پایین نفوذناپذیر و شار جریان از مرز شرقی به مقدار ۵.۷ متر بر روز وارد می‌شود. مقدار غلظت در این مرز صفر است. در مرز غربی شرط مرزی برای هد از نوع دیریکله و مقدار آن ۵ متر است و شرط مرزی غلظت در ۱۵ متری از پایین به بالا از نوع دیریکله و مقدار آن ۱ کیلوگرم بر مترمکعب و ۵ متر دیگر شرط مرزی غلظت از نوع نیومن و مقدار آن صفر است. هندسه و شرایط مرزی مساله در شکل (۱۰) نشان داده شده است.

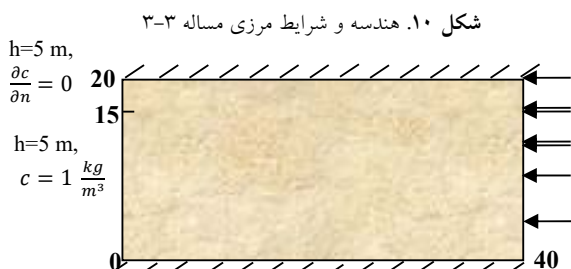


Fig. 10. The geometry and boundary condition of problem 3-3

و چون مقدار عددی پراکندگی طولی بیشتر شده، پخش شدگی آلودگی نیز با گذشت زمان افزایش یافته است.

شکل ۱۶. نقشه کانتور غلظت در زمان ۱ روز با استفاده از مدل حجم محدود (ضریب پراکندگی طولی = ۰.۵ متر)

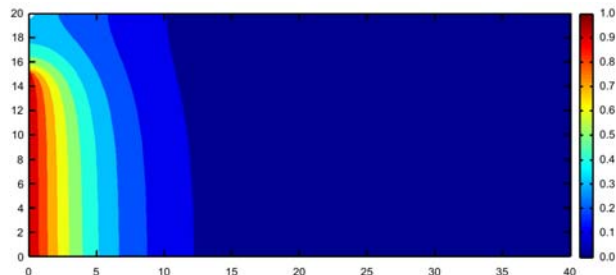


Fig. 16. Contour map of concentration at the final time of 1 day with the FVM (Longitudinal dispersion=5.5 m)

شکل ۱۷. نقشه کانتور غلظت در زمان ۱ روز با استفاده از مدل مادفلو (ضریب پراکندگی طولی = ۰.۵ متر)

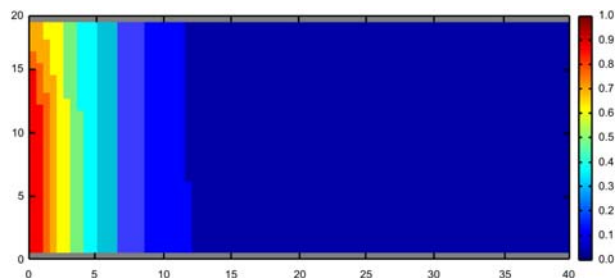


Fig. 17. Contour map of concentration at the final time of 1 day with Modflow (Longitudinal dispersion=5.5 m)

۳-۴- مسئله فرارفت-پراکندگی، با جریان دو بعدی و محیط ناهمگن، حالت ناپایدار

به منظور بررسی پایداری مدل حجم محدود در حل مسائل با غیرهمگنی بالا، در این نمونه، مسئله ۳-۲ با در نظر گرفتن محیط ناهمگن و ثابت ماندن سایر متغیرها حل شده است. با توجه به اینکه در این حالت ضریب نفوذپذیری و هدایت هیدرولیکی برای هر المان متفاوت است، برای تولید تصادفی نفوذپذیری از توزیع لوگ نرمال استفاده شده است. به این منظور، در این نمونه متوسط نفوذپذیری 8×10^{-12} ، طول همبستگی ۵ متر و واریانس 10^{-19} و در نظر گرفته شده است. به این ترتیب نقشه نفوذپذیری به صورت تصادفی در هر بار اجرای برنامه تولید شده و هدایت هیدرولیکی با رابطه زیر به دست خواهد آمد:

$$K = \frac{k \times \rho g}{\mu} \quad (24)$$

Fig. 13. Contour map of concentration at the final time of 1 day with the FVM

شکل ۱۴. نقشه کانتور غلظت در زمان ۱ روز با استفاده از مدل مادفلو

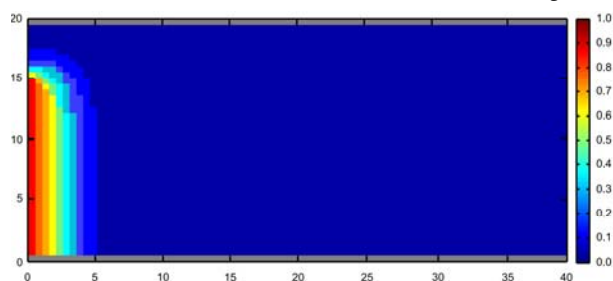


Fig. 14. Contour map of concentration at the final time of 1 day with Modflow

مطابق شکل (۱۲) می توان نتیجه گرفت که با گذشت زمان به دلیل وجود شار جریان از سمت راست، غلظت آلودگی کاهش یافته است. همچنین می توان تایید کرد که مدل ارائه شده نتایج قابل قبولی برای تخمین غلظت آلودگی آب زیرزمینی دارد زیرا نتایج حل عددی با نتایج مدل مادفلو هماهنگی خوبی دارد. همچنین در شکل های (۱۳ و ۱۴) کانتور غلظت حجم محدود و مدل مادفلو در زمان ۱ روز مقایسه شده است.

در صورتی که پراکندگی طولی ۰.۵ متر و پراکندگی عرضی ۳.۵ متر در نظر گرفته شود و سایر اطلاعات مسئله ثابت بماند، غلظت در شکل (۱۵) نشان داده شده است.

شکل ۱۵. تغییرات غلظت در زمان های ۱ و ۱۰ روز

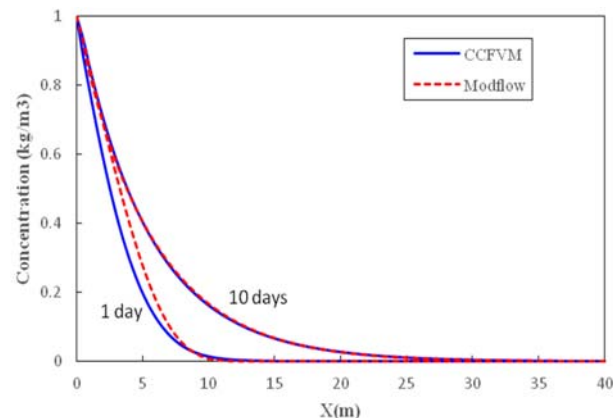


Fig. 15. The variation of concentration at the final times of 1 and 10 days

شکل های (۱۶ و ۱۷) کانتور غلظت حجم محدود و مدل مادفلو را نشان می دهد، که کانتورها از هماهنگی خوبی برخوردار هستند.

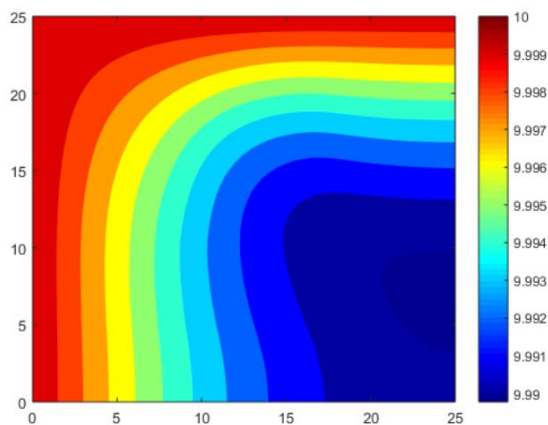


Fig. 19. Contour map of hydraulic head at the final time of 1 day

شکل ۲۰. نقشه کانتور غلظت در زمان ۱ روز

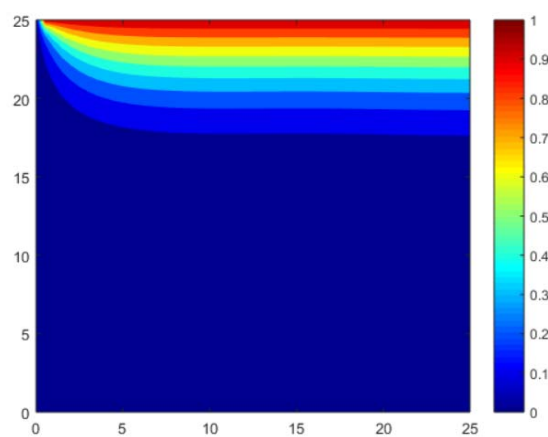


Fig. 20. Contour map of concentration at the final time of 1 day

شکل ۲۱. تغییرات هد هیدرولیکی در زمانهای ۰.۰۵، ۰.۱ و ۱ روز

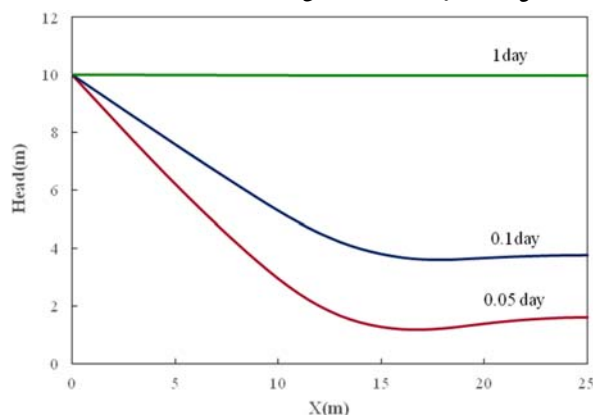


Fig. 21. The variation of hydraulic head at the final times of 0.05, 0.1 and 1 day

شکل ۲۲. تغییرات غلظت در زمانهای ۰.۰۵، ۰.۱ و ۱ روز

در رابطه فوق k نفوذپذیری و μ ویسکوزیته دینامیکی است، که در این نمونه 0.001 پاسکال ثانیه در نظر گرفته شده است. ρ چگالی سیال و g شتاب گرانش است. نتایج کانتور نقشه‌های نفوذ پذیری، هد و غلظت با استفاده از مدل حجم محدود در شکل های (۱۸) تا (۲۰) ترسیم شده‌اند. لازم به ذکر است که نفوذپذیری در راستای x و y برابر فرض شده است.

شکل ۱۸. نقشه نفوذپذیری ($\log_{10}(k)$)

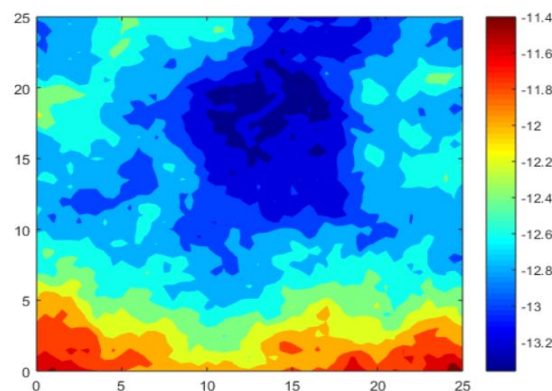


Fig. 18. The permeability map ($\log_{10}(k)$)

شکل (۲۱) تغییرات هد در زمان های ۰.۰۵، ۰.۱ و ۱ روز با گام زمانی ۰.۰۰۱ روز را نشان می‌دهد که این نتایج در مختصات $y=12.5m$ در راستای x ترسیم شده‌اند. همانگونه که این شکل نشان می‌دهد نتایج هد با گذشت زمان به حالت جریان پایدار می‌رسد. تغییرات غلظت نیز در زمان های ۰.۰۵، ۰.۱ و ۱ روز را در شکل (۲۲) ترسیم شده است که این نتایج در مختصات $x=12.5m$ در راستای y می‌باشد. همانگونه که این شکل نشان می‌دهد غلظت با گذشت زمان بیشتر در محیط پخش خواهد شد. شکل های (۲۱ و ۲۲) نشان می‌دهد که هیچ نوسانی در زمان های مختلف مشاهده نشده و جواب ها پایدار و همگرا و عاری از نوسانات عددی است.

شکل ۱۹. نقشه کانتور هد هیدرولیکی در زمان ۱ روز

- [3] 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.
- [4] Elrick D.E., Mermoud A. & Monnier, T. 1994 An analysis of solute accumulation during steady-state evaporation in an initially contaminated soil. *Journal of Hydrology*, 155, 27–38.
- [5] Connell L.D. 2007 Simple models for subsurface solute transport that combine unsaturated and saturated zone pathways. *Journal of Hydrology*, 332, 361–373.
- [6] Diersch H.J.G. 2005 Reference Manual. DHI-WASY Software FEFLOW-Finite Element Subsurface Flow & Transport Simulation System. DHI-WASY GmbH, Berlin, German.
- [7] Zhu Y., Liangsheng S., Jinzhong Y., Jingwei W., & Deqiang M. 2013 Coupling methodology and application of a fully integrated model for contaminant transport in the subsurface system. *Journal of hydrology*, 501, 56-72.
- [8] Wang H.F. & Anderson M.P. 1995 Introduction to groundwater modeling: finite difference and finite element methods. Academic Press.
- [9] Zhu Y., Shi L., Lin L., Yang J., & Ye M. 2012 A fully coupled numerical modeling for regional unsaturated-saturated water flow. *Journal of hydrology*. 475, 188–203.
- [10] Gao Y., Pu S., Zheng C. & Yi S. 2019 An improved method for the calculation of unsaturated-saturated water flow by coupling the FEM and FDM. *Scientific Reports*, 9(1), 1-9.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] Asadi R. & Ataie-Ashtiani B. 2016 Numerical modeling of subsidence in saturated porous media: A mass conservative method. *Journal of hydrology*, 542, 423-436.
- [15] Asadi R. & Ataie-Ashtiani B. 2021 Hybrid finite volume-finite element methods for hydro-

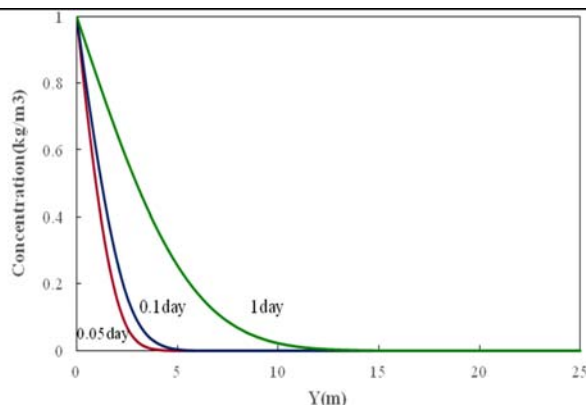


Fig. 22. The variation of concentration at the final times of 0.05, 0.1 and 1 day

۴-جمع بندی

در پژوهش حاضر روش حجم محدود نوین برای مدل سازی معادله انتقال آلودگی در آب زیرزمینی مورد ارزیابی قرار گرفت، برای دستیابی به این مهم از روش DDFV برای بدست آوردن غلظت در مرکز و رئوس هر المان استفاده شده است. این مدل عددی به صورت هم بسته با معادله جریان برای حل همزمان هد هیدرولیکی و غلظت توسعه داده شد.

برای درستی آزمایی مدل ارائه شده در سه مثال متفاوت نتایج با مدل مادفلو مقایسه شده است. در مسئله اول و دوم به ترتیب مسئله فرارفت-پراکندگی با فرض جریان ناپایدار یک بعدی و دو بعدی مدل سازی شد. همچنین در مسئله سوم مسئله فرارفت پراکندگی در حالت جریان دو بعدی، ناپایدار و شرایط مرزی شار ثابت حل شد. نتایج تغییرات هد و غلظت در هر سه نمونه هماهنگی بسیار خوبی با نتایج مادفلو داشته است. در بخش آخر برای بررسی پایداری مدل در مسائل با ناهمگنی بالا، با استفاده از توزیع لوگ نرمال نقشه نفوذپذیری و هدایت هیدرولیکی تولید شد. نتایج نشان داده که مدل ارائه شده قادر به حل مسائل با ناهمگنی قوی بوده و حل پایدار و عاری از نوسانات عددی است.

مراجع

- [1] Ataie-Ashtiani B. & Ketabchi H. 2014 Hydraulic and contamination of groundwater, Sharif university of technology, Tehran, Iran.
- [2] Ray S.S. & Elango L. 2019 Deterioration of groundwater quality: implications and management,. In: Water Governance: Challenges and Prospects. Springer, 87–101.

- ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 33(3), 493-516.
- [22] 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(6), 1123-1149.
- [23] 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.
- [24] Bevilacqua I., Canone D. & Ferraris S. 2011 Acceleration techniques for the iterative resolution of the Richards equation by the finite volume method. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 27(8), 1309-1320.
- [25] Milašinović M., Randelović A., Jaćimović N. & Prodanović, D. 2019 Coupled groundwater hydrodynamic and pollution transport modelling using Cellular Automata approach. *Journal of Hydrology*, 576, 652-666.
- [26] Gambolati G., Paniconi C. & Putti M. 1993 Numerical modeling of contaminant transport in groundwater. In *Migration and Fate of Pollutants in Soils and Subsoils*. Springer, Berlin, Heidelberg.
- mechanical analysis in highly heterogeneous porous media. *Computers and Geotechnics*, 132, 103996.
- [16] Loudyi D., Falconer R.A. & Lin, B. 2007 Mathematical development and verification of a non-orthogonal finite volume model for groundwater flow applications. *Advances in water resources*, 30(1), 29-42.
- [17] Aavatsmark I. 2002 An introduction to multipoint flux approximations for quadrilateral grids. *Computational Geosciences*, 6(3), 405-432.
- [18] Aavatsmark I. 2008 Comparison of monotonicity for some multipoint flux approximation methods. In *Finite Volumes for Complex Applications*. New York: 5, Wiley-ISTE.
- [19] Droniou J. & Eymard, R. 2006 A mixed finite volume scheme for anisotropic diffusion problems on any grid. *Numerische Mathematik*, 105(1), 35-71.
- [20] Lewis R.W., Masters I. & Rees, I. 2006 Coupled and uncoupled contaminant transport using advanced finite volume methods. *Computational Mechanics*, 37(4), 292-310.
- [21] Coudière Y., Vila J.P. & Villedieu P. 1999 Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem.

Numerical modeling of contamination transport equation in porous media for transient flow regime by finite volume method

Roza Asadi^{1*}, Kosar Azizi¹,

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

asadi@kntu.ac.ir

Abstract

Groundwater is an essential source of fresh water, which is less prone to pollution in comparison to surface water, and access to this valuable resource is affordable. These issues make groundwater a viable source during surface water shortages such as drought, especially in arid and semi-arid countries. Hence, groundwater flow and contaminant transport modeling is an efficient tool in monitoring the aquifers. Since the analytical methods are limited to the simplified cases, the numerical models are applied to assess the quality and quantity of groundwater in real aquifers. Therefore, in this research, the equation of contamination transport is modeled by a novel dual discrete finite volume method (DDFVM). The solution domain for this study is two-dimensional, anisotropic, heterogeneous and saturated. The mechanisms considered in the solute transport equation include advection, diffusion and dispersion with no chemical reactions. Contrary to the classical finite volume methods using two points to approximate fluxes across the element's interfaces, in the method proposed in this study, the values of hydraulic head and contamination concentrations are obtained at the center and vertices of each element. This numerical method is considered as a cell centered FVM which preserves local mass conservation. This model has been applied to an unstructured triangular mesh that could be fitted to complex geometric boundaries. For the transient flow regimes, the flow equation has been coupled with the contaminant transport problem, and the results of the numerical model are validated with the model of MODFLOW. For this purpose, first the flow equation is solved to obtain the hydraulic head and seepage velocity. Subsequently, the dispersion coefficients are calculated for the solution of transport equation at each time step. In the first example, the one-dimensional flow has been considered for the verification of flow and transport equation. To solve this problem the confined aquifer is discretized with the mesh size of 0.5 m and 0.001 day. The second problem includes the two-dimensional domain in which the north and west boundaries are the first type boundary condition, and the east and south boundaries are no-flow boundary conditions, respectively. The mesh size and time step in this problem are similar to the first example. In the third example, two-dimensional aquifer with the prescribed flux boundary condition have been discretized into 3777 nodes and 7312 elements. In these three problems, the results for the two parameters of hydraulic head and solute concentration at different time lapses, show excellent agreement between the DDFV method and the model of MODFLOW. Since the numerical schemes usually suffer from numerical oscillations and instabilities in the heterogeneous domain, in the last problem the flow and transport FV coupled model has been applied in a porous media with strong heterogeneity. The log-normal distribution has been assumed for the permeability map with the average value of $8 \times 10^{-12} \text{ m}^2$, correlation length of 5 m and variance of 10^{-19} and different permeability maps were generated randomly. The free-oscillation solutions for the two parameters of hydraulic head and pollutant concentration demonstrate the stability of the model.

Keywords: Contamination transport, Advection, Dispersion, Numerical modeling, Finite volume method