

## مدل سازی عددی انتقال آلاینده در آبراهه های با پهنه ماندابی و جریان غیریکنواخت با استفاده از معادله جابه جایی-پراکندگی کسری

محمد حاتم جعفری<sup>۱</sup> - مهدی مظاهری<sup>۲\*</sup> - جمال محمد ولی سامانی<sup>۳</sup>

تاریخ دریافت: ۱۳۹۵/۰۱/۱۷

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۵/۱۰/۲۸

### چکیده

پیش بینی انتقال آلاینده ها در پهنه های آبی در مدیریت و جلوگیری از آلودگی آب های سطحی از اهمیت ویژه ای برخوردار است. ناهمگونی و عدم یکنواختی در مورفولوژی و خصوصیات فیزیکی در تمام طول رودخانه، که به پهنه های ماندابی شناخته می شوند، انتقال یکنواخت آلاینده ها به پائین دست را با مشکل مواجه می کند. مدل های یک بعدی که بر پایه معادله جابه جایی-پراکندگی کلاسیک قرار دارند، قادر به شبیه سازی دقیق پدیده انتقال در این گونه رودخانه ها نیستند. یکی از روش های جایگزین که در صورت به کارگیری صحیح می تواند منجر به پیش بینی مناسب از پدیده انتقال در حالت مذکور گردد، معادله جابه جایی-پراکندگی کسری است. در این تحقیق با بهره گیری از روش های حل عددی مشتقات جزئی کسری، یک روش حل برای معادله جابه جایی-پراکندگی کسری که حالت عمومی معادله جابه جایی-پراکندگی کلاسیک است، در حالت جریان غیریکنواخت ارائه شده است. برای برآورد پارامترهای تاثیرگذار در پیش بینی انتقال ماده آلاینده حل شده، روش بهینه سازی ریاضی مورد استفاده قرار گرفت. جهت صحت سنجی، مدل ارائه شده با داده های واقعی برداشت شده از نهر یواس کریک در کالیفرنیا مقایسه شده است. بر اساس آزمایش مذکور ماده ردیاب کلراید بصورت پیوسته در این نهر تزریق شده و در ایستگاه های پایین دست غلظت آن اندازه گیری شده است. خروجی مدل انطباق قابل قبولی با داده های مشاهده ای داشته و نشان می دهد که روش حل ارائه شده، روشی دقیق و قابل قبول در شبیه سازی انتقال ماده حل شده با استفاده از معادله جابه جایی-پراکندگی کسری در آبراهه های دارای پهنه ماندابی است.

**واژه های کلیدی:** انتقال جرم، رودخانه، مشتق کسری، نگهداشت موقت، نواحی مرده

### مقدمه

شدید بین گروه های مختلف منتفع از رودخانه ها در بهره برداری از خدمات زیست محیطی آنها بوجود آمده است. در حالی که در ابتدا رودخانه ها به عنوان مسیل تخلیه حوضه آبریز شناخته می شدند، تحقیقات اخیر نشان داده است که تبادل پیوسته سیال بین مسیر اصلی رودخانه با رسوبات بستر، سواحل رودخانه و منطقه اشباع زیر بستر، احتمال فعالیت های بیولوژیکی و شیمیایی را افزایش می دهد، اما همزمان موجب ایست ماده حل شده در پهنه آبی می گردد که در انتقال آلاینده به پایین دست تاخیر ایجاد می کند (۱ و ۲). بنابراین آنچه برای اکوهیدرولوژی و فرآیندهای شیمیایی حوضه آبریز اهمیت دارد، مسیر کلی رودخانه و نه فقط آبراهه سطحی آن است (۳). از دیرباز برای پیش بینی انتقال ماده حل شده آلاینده در رودخانه ها از معادله معادله جابه جایی-پراکندگی کلاسیک<sup>۴</sup> که معادله ای استاندارد برای مدل سازی انتقال در رودخانه ها است استفاده می شد (۴):

رودخانه ها از مهم ترین پهنه های آبی بر روی زمین هستند. بسیاری از فرآیندهای زمین شناسی و اکولوژیکی مانند، فرسایش و چرخه مواد مغذی در آنها اتفاق می افتد. همچنین از نظر بیولوژیکی در میان آن دسته از اکوسیستم های آبی قرار می گیرند که به حفظ پویایی و افزایش بهره وری آبراهه های پایین دست و آب های ساحلی کمک می کنند. از سوی دیگر رودخانه ها از ارزش بالایی نیز برای جامعه برخوردارند. از این پهنه های آبی بعنوان منبع تامین آب شرب، منبع انرژی تجدیدپذیر برای تولید انرژی و همچنین محیطی مناسب برای اوقات فراغت انسان ها بهره برده می شود. در سال های اخیر با افزایش روزافزون نرخ تغییر در کاربری اراضی و تغییرات آب و هوایی، رقابتی

۱، ۲ و ۳ - به ترتیب فارغ التحصیل کارشناسی ارشد، استادیار و استاد گروه سازه های آبی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران  
\* - نویسنده مسئول: (Email: m.mazaheri@modares.ac.ir)

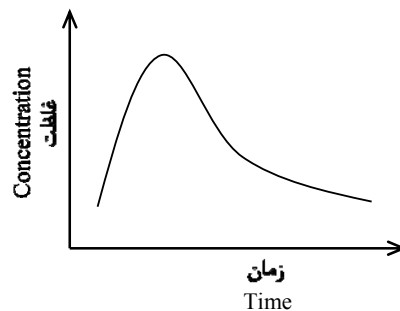
روی پراکندگی در رودخانه‌ها مطالعه می‌کردند نیز دریافتند که معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک، پروفیل غلظت ماده ردیاب و دنباله‌های کم‌غلظت آن را به خوبی پیش‌بینی نمی‌کند. این دنباله‌های کم‌غلظت نتیجه ورود ذره آلاینده به منطقه نگهداشت<sup>۲</sup> هستند، که منجر به تغییر در سرعت طولی ذره و ضریب پراکندگی می‌شود. از آنجایی شکل منحنی غلظت بستگی به تغییرات سرعت در آبراهه و ضریب پراکندگی آن (که هر دو از مقادیری هستند که به‌طور تقریبی اندازه‌گیری می‌شوند) دارد، تاثیر مناطق نگهداشت به‌صورت دنباله‌های بلند در منحنی مذکور ظاهر می‌گردد. یکی از اولین مطالعات دقیق در راستای درک نقش نواحی نگهداشت یا ماندابی در انتقال ماده حل‌شده در آبراهه‌ها توسط بنکالا و والترز (۵) انجام شد که نتیجه آن ارائه مدل نگهداشت موقت<sup>۳</sup> بود. این معادله برپایه معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک بنا شده‌است. برای وارد کردن اثر نگهداشت موقت در معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک در سمت راست معادله ترم نگهداشت اضافه شده‌است که با معادله‌ای دیگر که توصیف‌کننده اختلاط در منطقه نگهداشت است، ارتباط دوسویه دارد (معادله ۲). این دو معادله به‌طور هم‌زمان برای کل رودخانه حل می‌شوند (۵):

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( UC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) = \alpha (C_s - C) \\ \frac{dC_s}{dt} = -\alpha \frac{A}{A_s} (C_s - C) \end{cases} \quad (2)$$

که در آن  $C$  غلظت آلاینده در ناحیه اصلی جریان،  $U$  سرعت جریان در ناحیه اصلی رودخانه،  $D$  ضریب پخش در ناحیه اصلی جریان،  $A$  سطح مقطع جریان،  $A_s$  سطح مقطع منطقه نگهداشت،  $x$  فاصله از محل تزریق،  $t$  مدت زمان سپری شده پس از تزریق،  $C_s$  غلظت در منطقه نگهداشت و  $\alpha$  ضریب تبادل ذخیره‌ای آبراهه می‌باشند. این مدل برای مواد حل‌شده واکنش‌ناپذیر کاربرد دارد و فرض شده‌است که جریان در آبراهه از نوع یک‌بعدی ماندگار بدون جریان جانبی باشد. انتقال بین آبراهه اصلی و همچنین نواحی نگهداشت از قانون انتقال جرم مرتبه اول تبعیت می‌کند. در حالتی که هیچ ناحیه نگهداشتی در آبراهه وجود نداشته باشد، مقدار  $\alpha$  برابر با صفر خواهد بود که مدل نگهداشت موقت را به معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک تبدیل می‌کند. در این مدل توزیع زمان ماند ذره در ناحیه نگهداشت به‌طور ضمنی، نمائی فرض شده‌است، که سبب می‌گردد تا خروجی‌ها در کوتاه‌مدت به میزان قابل قبولی با داده‌های مشاهداتی همخوانی داشته باشد. اما هنگامی که زمان نگهداشت، بازه‌های زمانی بزرگتری را تجربه می‌کند، مدل مقادیر غلظت را کمتر

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial(UC)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (1)$$

در این معادله  $C$  غلظت آلاینده در مسیر طولی رودخانه،  $U$  سرعت جریان،  $D$  ضریب پراکندگی،  $t$  مدت زمان سپری شده بعد از تخلیه ماده آلاینده و  $x$  فاصله از نقطه تخلیه می‌باشند. مفروضات حاکم بر معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک، کاربرد آن را برای انتقال در رودخانه‌ها محدود می‌سازد. یکی از فرض‌های بنیادی این معادله اینست که توزیع جابه‌جایی ذرات و زمان‌های ماند آنها در طول آبراهه دارای واریانس محدود است و بنابراین از توزیع نرمال پیروی می‌کند. این فرض سبب می‌گردد که معادله مذکور تنها برای مجموعه‌ای از حرکت ذرات و یا ملکول‌های ماده حل‌شده که توزیع سرعت در آنها گسترده نیست، قابل استفاده باشد. از سوی دیگر این معادله بر پایه توصیف براونی از حرکت به‌همراه جابه‌جایی یا فرآیند پخشیدگی فیک<sup>۱</sup> استوار است. اما فرآیند غالب در رودخانه‌ها با فرض‌های حاکم بر این معادله همخوانی ندارد. به عبارت دیگر معادله (۱) بر اساس فرض‌های سرعت و ضریب پراکندگی همگن در مقطع عرضی رودخانه استخراج شده است و وجود نواحی مرده در رودخانه فرض مذکور را نقض می‌کند. فیشر و همکاران (۴) دریافتند که منحنی اندازه‌گیری شده غلظت-زمان در پایین‌دست، مطابق با آنچه معادله پیش‌بینی می‌کند نیست، بلکه دنباله‌ای بلند دارد. این محققین عدم اختلاط کامل در آبراهه را دلیل این ناهمخوانی دانستند (شکل ۱).



شکل ۱- شکل کلی منحنی غلظت-زمان در یک آبراهه طبیعی با وجود نواحی مرده

Figure 1- Schematic of long-tailed breakthrough curve in a natural stream

فیشر و همکاران (۴) همچنین در ادامه تحقیق خود برای غلبه بر این محدودیت معادله، ضابطه‌ای پیشنهاد دادند که با بهره‌گیری از آن می‌شد نقطه‌ای در پایین‌دست، که پس از آن خروجی معادله با داده‌های برداشت‌شده همخوانی داشت، را تعیین کرد. محققینی که بر

2- Storage zone

3- Transient storage model (TSM)

1- Fickian diffusion

مشتقات کسری زمانی و مکانی است، که مطابق با آنچه بیان شد از تعمیم فرضیات پایه‌ای سرچشمه می‌گیرد. کاربرد قضیه حد مرکزی تعمیم‌یافته و توصیف حرکت ذرات، منجر به تولید چنین معادله‌ای گشته است. تفاوت بین مشتق مرتبه صحیح و مشتق مرتبه اعشاری، در رفتار محلی یا غیرمحلی آنهاست. در حالی که مشتق مرتبه صحیح شیب تابع در یک بازه بسیار کوچک تعریف شده‌است، مشتق مرتبه اعشاری یا کسری بسته به وضعیت کل تابع است (۱۶). از این‌رو در مشتق‌گیری از مرتبه اعشاری خصوصیت کل تابع در مشتق یک نقطه شرکت داده می‌شود. در دهه اخیر محققین با بهره‌گیری از مشتقات کسری و تغییر در حالت کلاسیک معادله جابه‌جایی-پراکندگی، چندین مدل برای پیش‌بینی توزیع ماده حل‌شده در رودخانه ارائه داده‌اند. مهم‌ترین گام را در این زمینه دنگ و همکاران (۱۷) برداشتند، آنها با تغییر در جمله پراکندگی معادله و تبدیل آن به پراکندگی کسری به‌خوبی داده‌های برداشت شده از رودخانه‌های موناکیسی و میزوری را مدل کردند. از دیگر تحقیقات قابل توجه در این زمینه می‌توان به استفاده از مشتقات کسری در مدل نگهداشت موقت اشاره کرد (۱۸). نتایج مدل آنها همخوانی بهتری را نسبت به وقتی که از مشتقات جزئی کسری در مدل نگهداشت موقت استفاده نمی‌شد، نشان داد. معادلات در این تحقیقات همگی برای جریان ماندگار و یکنواخت حل شده‌اند.

از آنجایی که به دلیل تغییر در مشخصات فیزیکی رودخانه (مانند سطح مقطع، شیب و زبری) جریان در رودخانه‌ها غیریکنواخت (عمق و سرعت متغیر نسبت به مکان) است، در نظر گرفتن غیریکنواختی جریان در حل معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری حایز اهمیت است. در این تحقیق حل عددی معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری برای حالت جریان غیریکنواخت در رودخانه ارائه شده است. همچنین برای بهینه‌سازی متغیرهای واسنجی موجود در معادله از روش بهینه‌سازی ریاضی استفاده شده است. در انتها روش ارائه شده با داده‌های برداشت شده از یک آبراهه طبیعی قیاس شده‌است و مقایسه بین خروجی معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری و جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک برای همان آبراهه، به‌علاوه تحلیل حساسیت پارامترهای مؤثر در معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری آورده شده است.

نوآوری اصلی این تحقیق در متغیر بودن پارامترهای معادله جابه‌جایی-پراکندگی می‌باشد. با توجه به تغییرات عواملی مانند توپوگرافی، شیب بستر، مقطع عرضی و غیره، جریان در آبراهه‌های طبیعی، غیریکنواخت بوده و سرعت و ضریب پراکندگی در معادله انتقال جرم متغیر می‌باشند. تحقیقات مرتبط با حل معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری عموماً مقادیر ثابتی را برای این پارامترها فرض می‌کنند. در این تحقیق پارامترهای مذکور بصورت غیریکنواخت و متغیر لحاظ می‌گردند.

از مقادیر واقعی تخمین می‌زند (۶ و ۷). از این رو وقتی که این مدل برای آبراهه‌های حاوی دامنه نگهداشت نامحدود اجرا می‌شود، دو پارامتر  $A_s$  و  $\alpha$  حساسیت بالایی به مدت زمان مورد نظر برای مدل‌سازی دارند. به عبارت دیگر مدل نگهداشت موقت در آبراهه‌های با نواحی مرده قابل توجه و با طول زیاد (رودخانه‌های با تغییرات چشمگیر سطح مقطع) در زمان‌های طولانی جواب‌های مناسبی را دست نمی‌دهد. علاوه بر مدل نگهداشت موقت مدل‌های دیگری نیز برای پیش‌بینی رفتار پیچیده ماده حل‌شده در آبراهه‌ها با پهنه ماندابی ارائه شده‌اند. از مهمترین آنها می‌توان به مدل انتقال جرم چندرنه<sup>۱</sup> (۸ و ۹)، مدل مسیر نگهداشت انتقالی<sup>۲</sup> (۶)، مدل گام تصادفی پیوسته در زمان<sup>۳</sup> (۱۰، ۱۱ و ۱۲) و مدل انتقال ماده حل‌شده در رودخانه<sup>۴</sup> (۱۳ و ۱۴) اشاره کرد. در تمامی این مدل‌ها محققین با وارد کردن تابع حافظه و توزیع زمانی برای زمان ماند، توصیفات متفاوتی از انتقال در آبراهه‌ها را به مدل خود ارائه کردند. هر یک از مدل‌های ارائه شده با داده‌های مشاهداتی صحت‌سنجی شد. اما به دلیل پیچیدگی ریاضی مدل‌ها، نیاز بالای این‌ها به بررسی‌های دقیق آبراهه مانند زمان ماند ماده حل‌شده و همچنین یکتا نبودن توابع به‌کار رفته به‌عنوان تابع حافظه، جز در موارد محدود از آنها استفاده نشد. راهکار دیگری که به خوبی معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک را برای در نظر گرفتن اثر نگهداشت موقت آماده می‌کند، بهره‌گیری از حساب دیفرانسیل و انتگرال کسری<sup>۵</sup> است. این بخش از ریاضیات با تغییر در فرض‌های بنیادی معادله دیفرانسیل جزئی حاکم، به معادله عمومیت می‌بخشد، بنابراین در این مدل حالت عمومی معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک برای آبراهه حل می‌شود. این معادله که جابه‌جایی-پراکندگی کسری نیز نامیده می‌شود، برای حالت غیریکنواخت و غیرماندگار به صورت زیر بیان می‌گردد (۱۷):

$$\frac{\partial^{\gamma} (AC)}{\partial t^{\gamma}} = -\frac{\partial (QC)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( AD \frac{\partial^{1-\alpha} C}{\partial x^{1-\alpha}} \right) \quad (3)$$

که در آن هم مشتق مکانی و هم مشتق زمانی در جمله پراکندگی با مشتقاتی از مرتبه کسری جایگزین شده‌است. مشتقات کسری شاید ناآشنا به نظر آیند، اما این شاخه در ریاضیات به طور مفصل مورد مطالعه قرار گرفته‌است (۱۰ و ۱۵). تفاوت معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری با معادله جابه‌جایی-پراکندگی، در

- 1- Multirate mass transfer model (MRMT)
- 2- Advective storage path model (ASP)
- 3- Continuous time random walk (CTRW)
- 4- Solute transport in rivers model (STIR)
- 5- Fractional Calculus

## مواد و روش‌ها

معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری که در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفته است به صورت زیر می‌باشد (۲۱):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = \left( (1-\beta)D_- \frac{\partial^{\alpha-1} C}{\partial (-x^{\alpha-1})} + (1+\beta)D_+ \frac{\partial^{\alpha-1} C}{\partial (+x^{\alpha-1})} \right) \frac{\partial 1}{\partial x} \quad (۴)$$

در این معادله  $\beta$  ضریب چولگی منحنی غلظت-زمان است که در محدوده  $-1 \leq \beta \leq 1$  تغییر می‌کند؛ هر چه مقدار  $\beta$  به  $-1$  نزدیکتر باشد، تاثیر گره‌های پایین دست بیشتر خواهد بود و بالعکس هر چه مقدار  $\beta$  به  $1$  نزدیکتر گردد، گره‌های بالادست مقادیر غلظت بالاتری را به سمت گره مورد نظر گسیل می‌دارند و در حالت  $\beta$  برابر با صفر، تاثیر گره‌های بالادست و پائین دست بر غلظت گره مورد نظر یکسان خواهد بود. همچنین  $\alpha$  مرتبه مشتق است که بین  $1$  و  $2$  تغییر می‌کند؛ در واقع مرتبه مشتق کسری در معادله (۴) بین  $0$  و  $1$  متغیر است. همان‌طور که در جدول ۱ نشان داده شده است، فاصله گرفتن  $\alpha$  از  $1$  تاثیر نقاط همسایه را بر نقطه مورد نظر افزایش می‌دهد، این امر سبب ایجاد دنباله در مدل می‌گردد. همچنین از داده‌های جدول مشخص است که به ازای  $\alpha$  برابر با  $1$  مقادیر وزن‌های مذکور برابر با صفر می‌شود که این امر با تعاریف کلاسیک مشتق عددی هم‌خوانی دارد.  $D$  نیز ضریب پراکندگی است که دارای مقادیر متفاوتی برای ذرات مقیم در بالادست و پائین دست گره مورد نظر است. معادله (۴) در حالت  $\alpha = 2$  به معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک تقلیل می‌یابد. همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، مشتق مرتبه اعشاری یا کسری بسته به وضعیت کل تابع است. از این رو می‌توان آن را به دو بخش پیش‌رونده (که با علامت  $+x$  در معادله (۴) مشخص شده‌است) و پس‌رونده (علامت  $-x$ ) تقسیم کرد (۱۹). یکی از روش‌ها در تخمین این مشتقات بهره‌بردن از روش گرونوالد است (۲۰). هرچند حالت استاندارد روش گرونوالد در گسسته‌سازی تفاضل محدود، فارغ از چگونگی تشکیل سیستم معادلات، ناپایدار است (۲۱)، اما این در حالی اتفاق می‌افتد که مقادیر مرتبه مشتق کسری بین  $1$  و  $2$  متغیر باشند. در حالی که در معادله مورد نظر این تحقیق مرتبه مشتق کسری بین  $0$  و  $1$  متغیر است، بنابراین بایستی از حالت استاندارد بهره‌برد. حالت استاندارد روش گرونوالد به صورت زیر است:

$$\frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^N C(x-kh, t) \quad (۵)$$

در این معادله  $h$  گام مکانی و  $\Gamma(\cdot)$  تابع گاما است و رابطه (۵) برای دو حالت پیشرو و پسرو که در معادله (۴) آمده‌است، به‌طور تقریبی به صورت زیر ساده خواهد شد:

$$\frac{\partial^\alpha C}{\partial (+x^\alpha)} \approx \frac{\theta_k}{h^\alpha} \sum_{k=0}^N C_{i+k} \quad (۶)$$

$$\frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x^\alpha)} \approx \frac{\theta_k}{h^\alpha} \sum_{k=0}^N C_{i-k} \quad (۷)$$

همچنین  $\theta_k$  از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\theta_k = \frac{\Gamma(k - (\alpha - 1))}{\Gamma(-(\alpha - 1))\Gamma(k + 1)} \quad (۸)$$

ضریب  $\theta_k$  میزان تاثیر غلظت نقاط دیگر بر نقطه مورد نظر  $i$  است. مقادیر مختلف این ضریب برای مقادیر مختلف  $\alpha$  و  $k$  به اختصار در جدول ۱ ارائه شده است.

مشتقات مرتبه اول معادله (۴) نیز به صورت زیر گسسته شده‌اند:

$$\frac{\partial C}{\partial x} \approx \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x} \quad (۹)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} \quad (۱۰)$$

معادله (۴) به‌طور کاملاً ضمنی در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفته است. بنابراین گسسته‌سازی با استفاده از تفاضل محدود معادله به صورت ادامه خواهد بود:

## واسنجی و صحت‌سنجی مدل

برای واسنجی مدل از داده‌های آبراهه یواس کریک<sup>۱</sup> استفاده شده‌است (شکل ۲). از آنجایی که داده‌های موجود تنها یکبار به صورت برداشت میدانی جمع‌آوری گشته‌اند، امکان صحت‌سنجی با استفاده از داده‌های مستقل از داده‌های واسنجی برای آبراهه فراهم نبود.

جدول ۱- مقادیر مقادیر  $\theta_k$  برای  $\alpha$  و  $k$ های مختلف

Table 1-  $\theta_k$  values for different  $\alpha$  and  $k$

$k \backslash \alpha$	1.0000	2.0000	3.0000	4.0000	5.0000	6.0000	7.0000	8.0000	9.0000	10.0000
1.0	1.0000	-1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.9	1.0000	-0.9000	-0.4500	-0.0165	-0.0086	-0.0053	-0.0036	-0.0026	-0.0020	-0.0016
0.8	1.0000	-0.8000	-0.0800	-0.0320	-0.0176	-0.0112	-0.0078	-0.0058	-0.0045	-0.0036
0.7	1.0000	-0.7000	-0.0150	-0.0455	-0.0261	-0.0172	-0.0123	-0.0093	-0.0073	-0.0059
0.6	1.0000	-0.6000	-0.1200	-0.0560	-0.0336	-0.0228	-0.0167	-0.0129	-0.0103	-0.0085
0.5	1.0000	-0.5000	-0.1250	-0.0625	-0.0390	-0.0273	-0.0205	-0.0161	-0.0130	-0.0109

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = -U_i \frac{C_i^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{1}{A_i} \frac{1}{\Delta x} \left[ \frac{D_i}{2} \left( \left( (1 + \beta) \left( \frac{1}{\Delta x^{\alpha-1}} \sum_{k=1}^{i+1} \theta_k C_{i-k+2} \right) + (1 - \beta) \left( \frac{1}{\Delta x^{\alpha-1}} \sum_{k=1}^{m-i+2} \theta_k C_{i+k-2} \right) \right) \right) \right]^{n+1} - \frac{1}{A_i} \frac{1}{\Delta x} \left[ \frac{D_{i-1}}{2} \left( \left( (1 + \beta) \left( \frac{1}{\Delta x^{\alpha-1}} \sum_{k=1}^i \theta_k C_{i-k+1} \right) + (1 - \beta) \left( \frac{1}{\Delta x^{\alpha-1}} \sum_{k=1}^{m-i+3} \theta_k C_{i+k-3} \right) \right) \right) \right]^{n+1} \quad (11)$$

مدل است. هر نماینده بهترین مقدار خود و مکان  $x$  و  $y$  آن نقطه را می‌داند. این اطلاعات مقایسه تجربیات شخصی هر نماینده است و مقایسه آگاهی از چگونگی رفتار نماینده‌های اطراف آن‌ها می‌باشد. برای صحت‌سنجی مدل عددی ارائه شده برای معادله جابه‌جایی-پراکنندگی کسری همانطور که در بخش پیشین نیز بیان شده، از داده‌های آبراهه یواس کریک که توسط زند و همکاران (۲۳) برداشت شده است، استفاده گردیده است. جریان در این آبراهه ماندگار اما غیریکنواخت بوده است. در این آزمایش که اواخر تابستان و در زمان کم‌آبی آبراهه (دبی  $0.125$  مترمکعب در ثانیه) انجام پذیرفته است، ماده کلراید با نرخ ثابت به مدت سه ساعت به این آبراهه تزریق گردیده است. این تزریق، غلظت ماده حل‌شده کلراید را در محل بلافاصله بعد از نقطه تزریق در آبراهه به  $11/9$  میلی‌گرم بر لیتر رساند. غلظت پایه در این آبراهه پیش و به هنگام تزریق برابر با  $3/7$  میلی‌گرم بر لیتر بوده است. اندازه‌گیری غلظت در پایین‌دست در پنج ایستگاه انجام پذیرفت. اطلاعات ایستگاه‌ها و بازه‌های رودخانه در جدول ۲ آمده است.

### نتایج و بحث

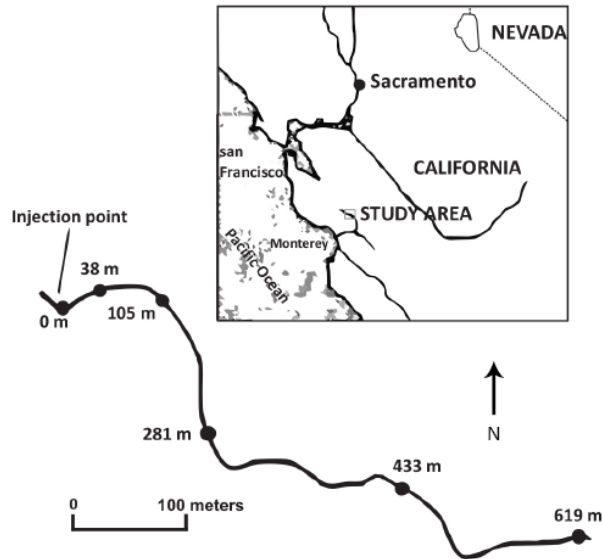
همان‌طور که در مقدمه اشاره شد، معادله جابه‌جایی-پراکنندگی کلاسیک در پیش‌بینی انتقال در آبراهه‌ها با خصوصیات متغیر در

به‌همین جهت از روش صحت‌سنجی متقاطع<sup>۱</sup> استفاده شد. به این صورت که ابتدا به صورت تصادفی داده‌های مشاهداتی به زیرمجموعه‌هایی تقسیم می‌شدند و یکی از آنها برای صحت‌سنجی کنار گذاشته شده و باقی زیرمجموعه‌ها برای واسنجی پارامترها توسط الگوریتم بهینه‌سازی استفاده می‌شدند. همانطور که در معادله (۴) می‌توان به وضوح دید مقادیر  $\alpha$  و  $\beta$  پارامترهایی هستند که به خصوصیات آبراهه بستگی دارند و نیازمند واسنجی هستند، بنابراین با بهینه‌سازی آنها می‌توان مدل را برای یک آبراهه واسنجی نمود. برای بهینه‌سازی این پارامترها در تحقیق حاضر از الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات<sup>۲</sup> استفاده شده است. ابره‌ارت و کندی (۲۲) بر اساس گروه پرندگان و دسته ماهی‌ها این روش را معرفی کردند. در این روش رفتار هر نماینده در ازدحام را می‌توان با بردارهای ساده ای مدل کرد. محل هر نماینده با مختصات آن روی محورهای  $x$  و  $y$  نمایش داده می‌شود. سرعت این نماینده نیز به صورت  $v_x$  (سرعت در راستای  $x$ ) و  $v_y$  (سرعت در راستای  $y$ ) نمایش داده می‌شود. تغییرات مکان هر نماینده را با اطلاعات مکان و سرعت می‌توان دریافت. دسته پرندگان یک تابع هدف مشخص را بهینه می‌کنند که در این تحقیق، تابع هدف، RMSE داده‌های مشاهداتی و خروجی‌های

- 1- Cross validation
- 2- Particle swarm optimization

بهره‌گیری از روشی مناسب برای گسسته‌سازی می‌توان انتقال در این-گونه آبراهه‌ها را به‌دقت پیش‌بینی کرد. مقایسه نتایج به‌دست‌آمده از مدل حاضر با خروجی‌های مدل جابجایی-پراکندگی کلاسیک در شکل‌های ۳-۷ آمده است.

مورفولوژی و جریان موفق عمل نمی‌کند معادله مذکور در حالت یک-بعدی توانایی پیش‌بینی دقیق انتقال ماده حل‌شده در آبراهه‌ها با نواحی نگهداشت را ندارد. درحالی‌که، با تعمیم فرض‌های حاکم بر معادله جابجایی-پراکندگی و استفاده از حالت کسری آن معادله و

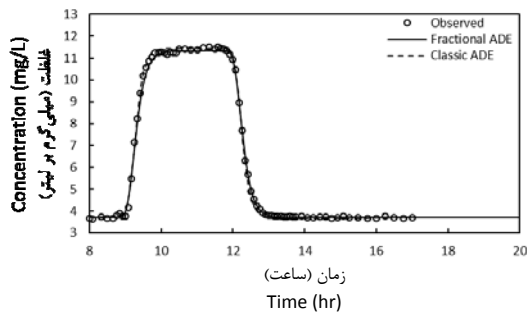


شکل ۲- شکل شماتیک آزمایش ماده ردیاب یواس کریک  
Figure 2- Schematic of Uvas Creek tracer experiment

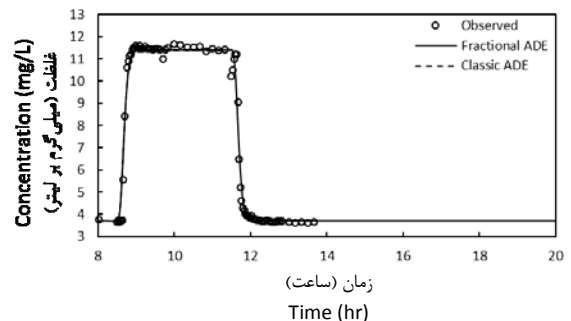
جدول ۲-اطلاعات ایستگاه‌ها و بازه‌های آبراهه یواس کریک

Table 2- Hydraulic and morphological properties of Uvas Creek reaches

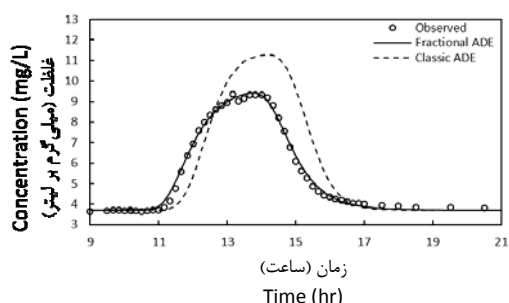
شماره ایستگاه	فاصله تا ایستگاه قبل (متر)	فاصله تا محل تزریق (متر)	دبی (مترمکعب بر ثانیه)	ضریب پخشیدگی (مترمربع بر ثانیه)	سطح مقطع جریان (مترمربع)
Station No.	Distance between consecutive reaches (m)	Distance to the injection point (m)	Discharge (m <sup>3</sup> /s)	Dispersion coefficient (m <sup>2</sup> /s)	Cross section area (m <sup>2</sup> )
1	38	38	0.0125	0.12	0.30
2	67	105	0.0125	0.15	0.42
3	176	281	0.0133	0.24	0.36
4	152	433	0.0136	0.31	0.41
5	186	619	0.0140	0.40	0.52



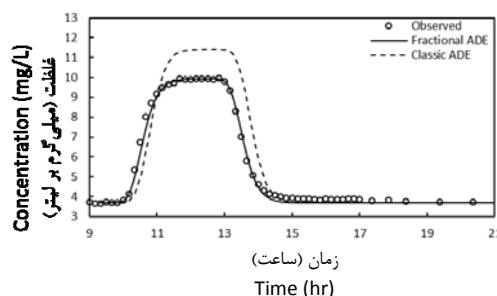
شکل ۴- مقایسه بین داده‌های مشاهداتی در ایستگاه دو با خروجی مدل کسری و پیش‌بینی معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک  
Figure 4- Observed concentration in station two vs prediction of fractional ADE and classic ADE



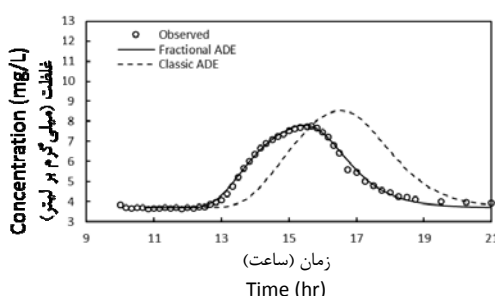
شکل ۳- مقایسه بین داده‌های مشاهداتی در ایستگاه یک با خروجی مدل کسری و پیش‌بینی معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک  
Figure 3- Observed concentration in station one vs prediction of fractional ADE and classic ADE



شکل ۶- مقایسه بین داده‌های مشاهداتی در ایستگاه چهار با خروجی مدل کسری و پیش‌بینی معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک  
Figure 6- Observed concentration in station four vs prediction of fractional ADE and classic ADE



شکل ۵- مقایسه بین داده‌های مشاهداتی در ایستگاه سه با خروجی مدل کسری و پیش‌بینی معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک  
Figure 5- Observed concentration in station three vs prediction of fractional ADE and classic ADE



شکل ۷- مقایسه بین داده‌های مشاهداتی در ایستگاه پنج با خروجی مدل کسری و پیش‌بینی معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک  
Figure 7- Observed concentration in station five vs prediction of fractional ADE and classic ADE

معادله) فاصله بگیرد، اثر نقاط نزدیک بر گره موردنظر کاهش می‌یابد (به نسبت حالت کلاسیک) و نقاط دورتر نیز در تعیین غلظت آن نقطه مشارکت می‌کنند. به طبع، هرچه مقدار  $\alpha$  از مقدار آن در حالت کلاسیک فاصله بگیرد، تاثیر نقاط دور دست بر تعیین غلظت گره موردنظر افزایش می‌یابد. از این رو واسنجی و تعیین مقادیر بهینه برای این دو مقدار ضروری است. مقادیر بهینه شده  $\alpha$  و  $\beta$  که توسط الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات محاسبه شده است، در جدول ۳ ارائه شده است.

برای تطبیق منحنی‌های آمده در شکل‌های ۳-۷ همانطور که پیش‌تر توضیح داده شد، در مرحله واسنجی از یک روش بهینه‌سازی ریاضی استفاده شده است. پارامترهای واسنجی در معادله جابجایی-پراکندگی کسری،  $\alpha$  و  $\beta$  هستند، که به ترتیب میزان مشارکت نقاط بالادست/پائین دست و تاثیر نقاط دور از گره موردنظر در بالادست/پائین دست را بر گره موردنظر نشان می‌دهند. به این صورت که هرچه  $\beta$  از صفر دور شود (چه به سمت ۱- یا ۱) نقاط آن جهت اثر بیشتری در پیش‌بینی غلظت گره موردنظر خواهند داشت. به همین ترتیب، برای  $\alpha$  نیز هرچه مقدار از ۱ (حالت کلاسیک

جدول ۳- مقادیر بهینه شده  $\alpha$  و  $\beta$  با استفاده از الگوریتم ازدحام ذرات برای بازه‌های مختلف

Table 3- Optimized values of  $\alpha$  and  $\beta$  for each reach using PSO algorithm

شماره ایستگاه Station No.	1	2	3	4	5
$\alpha$	2	1.89	1.5	1.73	1.53
$\beta$	اثری ندارد	0.85	0.85	0.7	0.75

جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک تقلیل می‌دهد. این تقلیل حکایت از عدم تاثیر پهنه‌های ماندابی در بازه اول آزمایش دارد. در ایستگاه‌های

همانطور که در جدول ۳ می‌توان دید، در ایستگاه ۱ مقدار  $\alpha$  برابر با ۲ است، که معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری را به معادله

بعدی تاثیر نگهداشت به وضوح در معادله دیده می‌شود. هر چه مقادیر  $\alpha$  کمتر می‌شود، تاثیر مناطق نگهداشت بر انتقال ماده حل شده افزایش می‌یابد و در نتیجه دنباله‌های بلندتر و منحنی‌های چوله‌تری را ایجاد می‌کند. از سوی دیگر مقادیر  $\beta$  برای ایستگاه‌های ۲ تا ۵ بسیار بالاتر از صفر است که نشان از انتقال کند آلاینده از گره‌های پایین دست به سمت گره‌های بالادست دارد؛ به تعبیر دیگر فروپخشیدگی در این آبراهه سبب می‌گردد تا ماده حل شده بسیار

کندتر از زمان مورد انتظار به پایین دست انتقال یابد. برای مقایسه کمی مقادیر خروجی‌های مدل‌های ریاضی با داده‌های مشاهداتی بهترین راه محاسبه مقادیر خطای مدل‌ها در پیش‌بینی آن داده‌هاست. جهت مقایسه کمی بین مدل جابجائی-پراکندگی کلاسیک و کسری، مقادیر RMSE و  $R^2$  برای معادله جابجائی-پراکندگی کلاسیک در جدول ۴ آورده شده‌است.

جدول ۴- مقادیر RMSE و  $R^2$  خروجی مدل کسری و کلاسیک برای ایستگاه‌های مختلف

نوع مدل Model Type	$R^2$		RMSE	
	Classic	FADE	Classic	FADE
ایستگاه Station				
1	0.9872	0.9872	0.3951	0.3951
2	0.9875	0.9983	0.1943	0.1743
3	0.0151	0.9892	1.4878	0.2727
4	0.0184	0.9947	1.6304	0.1738
5	0.0220	0.9728	1.4941	0.1652

برای هر سه این ایستگاه‌ها بسیار از صفر بیشتر است، که نشان از محبوس شدن ذرات آلاینده در بالادست گره مورد نظر دارد. این پدیده که به فروپخشیدگی شناخته می‌شود، سبب می‌شود که نقاط اوج پائین تری به نسبت معادله کلاسیک به دست آید. از سوی دیگر، از مقایسه روش مشتقات کسری با معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک می‌توان دریافت که در بررسی انتقال آلاینده در آبراهه‌ها با پهنه ماندابی استفاده از معادله کلاسیک نه تنها منجر به خطا در پیش‌بینی دنباله‌ها می‌گردد، بلکه خطا در پیش‌بینی مقدار اوج، زمان اوج و حتی زمان انتقال نیز حادث می‌شود. در حقیقت با ازدیاد نواحی نگهداشت درجه مشتق کسری از حالت استاندارد معادله فاصله می‌گیرد و به تبع آن نیز چولگی منحنی غلظت-زمان نیز افزایش می‌یابد. از این رو استفاده از معادله یک‌بعدی جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک برای شبیه‌سازی انتقال در این گونه آبراهه‌ها توصیه نمی‌گردد. برای پیش‌بینی بهتر از انتقال در این گونه آبراهه‌ها استفاده از معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری می‌توان برآورد بسیار مناسبی از این پدیده داشت.

**بررسی حساسیت مدل به پارامتر  $\alpha$  مرتبه مشتق کسری**  
پارامتر  $\alpha$  تاثیرگذارترین پارامتر در مدل معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری است. در واقع این پارامتر نماینده مناطق نگهداشت در مدل است، هر چه مقدار این پارامتر افزایش یابد و به ۲ نزدیک‌تر

از مقایسه مقادیر خطای دو مدل در جدول ۴ نکات جالبی را می‌توان دریافت. همانطور که توضیح داده شد، با توجه به جدول ۳، مطابق انتظار باید خطاها در ایستگاه ۱ برابر می‌بود، زیرا در واقع هر دو از یک معادله واحد با شروط مرزی یکسان بهره برده‌اند. در ایستگاه ۲ به رغم کاهش ۰/۱۱ در مرتبه مشتق و افزایش قابل توجه  $\beta$  اما مقادیر خطا تفاوت فاحشی با یکدیگر ندارند. این ختلاف ناچیز نشان می‌دهد، که همچنان رفتار معادله جابجائی-پراکندگی کسری به معادله جابجائی-پراکندگی کلاسیک نزدیک است و این کاهش در مرتبه مشتق تاثیر قابل ملاحظه‌ای بر خروجی‌ها ندارد. هر چند نباید عملکرد بهتر معادله جابجائی-پراکندگی کسری را نادیده گرفت، زیرا همانطور که در جدول ۴ آمده‌است، این مدل قدری بهتر از حالت کلاسیک عمل می‌کند. اما، کارائی بهتر مدل حاضر در ایستگاه‌های ۴، ۵ و ۶ معلوم می‌گردد، ایستگاه‌هایی که به‌گواه منحنی‌های غلظت زمان برداشت شده و پارامتر واسنجی شده  $\alpha$  شدیداً متاثر از نواحی نگهداشت هستند. بنابراین، معادله جابجائی-پراکندگی دیگر قادر به ارائه توصیفی درست از انتقال ماده حل شده در بازه‌های منتهی به این ایستگاه‌ها نیست. در حالی که مدل حاضر به خوبی و با دقت بالائی توانائی پیش‌بینی فرآیند انتقال در این بازه‌ها را دارد. همانطور که در جدول ۳ آمده است، مقادیر  $\alpha$  در بازه‌های منتهی به ایستگاه‌های ۴، ۵ و ۶ بسیار از ۲ (مرتبه مشتق برای حالت کلاسیک) فاصله می‌گیرد. این کاهش در مرتبه مشتق منجر به مشارکت موثرتر نقاط دور دست در تعیین غلظت گره مورد نظر می‌گردد. از سوی دیگر، مقادیر  $\beta$



افزایش و چه کاهش در این پارامتر منجر به تغییرات به نسبت شدیدی در خروجی مدل می‌گردد. بنابراین در برآورد این پارامتر باید متناسب با دقت مورد انتظار برای نتایج نهایی مدل، دقت کافی به خرج داده شود. نتایج بررسی حساسیت مدل به پارامتر  $\alpha$  در جدول ۵ آمده‌است.

جدول ۵- بررسی حساسیت مدل به تغییرات مرتبه مشتق کسری برای خروجی مدل در ایستگاه ۴

Table 5- Sensitivity of the FADE model to the changes in the order of fractional derivatives for station four

تغییرات Variations	$\alpha + 10\%$	$\alpha + 5\%$	$\alpha + 2\%$	$\alpha + 1\%$	$\alpha$	$\alpha - 1\%$	$\alpha - 2\%$	$\alpha - 5\%$	$\alpha + 10\%$
$R^2$ (%)	86.9	92.2	95.4	96.4	99.5	98.3	98	99.5	96
RMSE(mg/L)	0.748	0.536	0.404	0.362	0.174	0.231	0.266	0.272	0.498

مدنظر است. هر چه ضریب چولگی از صفر به یک نزدیک گردد، آلاینده با تاخیر بیشتری رو به پایین دست انتقال می‌یابد. جدول ۶ نشان از آن دارد که تغییرات این پارامتر به طور قابل ملاحظه‌ای بر نتایج خروجی تاثیر دارد. تغییر در روند مقادیر  $\beta$  مقدار همروندی کاهش می‌یابد و مقادیر خطا بیش از ۲ برابر افزایش می‌یابد، بنابراین در برآورد این پارامتر نیز بایستی تا حد امکان با دقت عمل کرد.

جدول ۶- بررسی حساسیت مدل به تغییرات ضریب چولگی برای خروجی مدل در ایستگاه ۴

Table 6- Sensitivity of model to the changes in the skewness coefficient for station four

تغییرات Variations	$\beta + 20\%$	$\beta + 10\%$	$\beta + 5\%$	$\beta$	$\beta - 5\%$	$\beta - 10\%$	$\beta - 20\%$
$R^2$ (%)	96.4	97.7	97.5	99.5	98	97.1	96.8
RMSE(mg/L)	0.399	0.322	0.308	0.174	0.341	0.399	0.417

نواحی نگهداشت بسیار دقیق عمل می‌کند. برای ساخت مدلی کاربردی نیاز است تا پارامترهای تاثیرگذار بر این معادله با دقت واسنجی شوند. در معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری، پارامترهای مرتبه مشتق و ضریب چولگی وجود دارند که بر شکل کلی نمودار اثرگذار هستند و به تطبیق بهتر خروجی مدل بر داده‌های مشاهداتی کمک می‌کنند و بنابراین این پارامترها بایستی با دقت بالایی برآورد شوند. نتایج حاکی از برتری مدل ارائه‌شده برای پیش‌بینی انتقال در آبراه‌ها با نواحی نگهداشت دارد و از آن می‌توان به‌عنوان جایگزینی مناسب برای معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک بهره‌برد. همچنین از آنجائی که معادله کسری همچنان توانائی معادله کلاسیک را در خود دارد، از انعطاف بالایی در مدلسازی برخوردار است و قادر به پیش‌بینی انتقال در حالات متنوعی از نظر فیزیک آبراه خواهد بود. این موارد نشان از توانایی چشم‌گیر مدل معادله جابه‌جایی-پراکندگی

گردد، نشان از کاهش نواحی نگهداشت در آبراهه دارد و بالعکس. بنابراین سنجش حساسیت مدل نسبت به این پارامتر از نظر فیزیکی حساسیت مدل را به تغییرات سطح مقطع نواحی نگهداشت نشان می‌دهد. به طور کلی هر چه نواحی نگهداشت بیشتر باشند، حرکت ماده حل شده آهسته‌تر صورت می‌گیرد و از آنجایی که ارتباط مستقیمی بین تغییرات پارامتر  $\alpha$  و سطح مقطع ناحیه نگهداشت وجود دارد، چه

### بررسی حساسیت مدل به پارامتر $\beta$ ، ضریب چولگی

ضریب چولگی در مدل معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری نشان‌دهنده توزیع ناهمگون ماده حل‌شده در پهنه آبی است. این ناهمگونی می‌تواند رو به بالادست و یا رو به پایین دست باشد. بنابراین می‌توان گفت ضریب چولگی از نظر فیزیکی نشان‌دهنده جهت حرکت غالب ماده حل‌شده است. این بدان معنا نیست، که ماده حل‌شده رو به بالادست حرکت می‌کند، بلکه کند شدن حرکت ماده

### نتیجه‌گیری کلی

در این تحقیق یک حل عددی برای معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری در حالت جریان غیریکنواخت و ماندگار ارائه گردید. برای گسسته‌سازی مشتقات کسری جزئی از تعریف گرونوالد استاندارد بهره‌برده شد و معادله به صورت کاملاً ضمنی حل شده است. مدل ارائه‌شده با استفاده از داده‌های یک آبراهه طبیعی که دارای پهنه ماندابی بود، در بوته آزمایش قرار گرفت. برای به دست آوردن مقادیر دقیق پارامترهای موثر برای آبراهه مورد نظر از روش تصدیق متقاطع بهره‌برده شد و برای واسنجی مدل از الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات استفاده گردید. مقایسه نتایج حاصل از مدل معادله جابه‌جایی-پراکندگی کسری با معادله جابه‌جایی-پراکندگی کلاسیک و داده‌های مشاهداتی، نشان داد که حالت کسری معادله در پیش‌بینی انتقال در آبراهه‌ها با

همچنین تعیین استانداردهای تخلیه منابع آلاینده به آبهای سطحی استفاده نمود.

کسری در پیش‌بینی انتقال آلودگی در آبراهه‌های طبیعی دارد و می‌توان از مدل ارایه شده در عمل برای پیش‌بینی توزیع غلظت مکانی و زمانی ناشی از منابع آلاینده نقطه‌ای و غیرنقطه‌ای و

## منابع

- 1- Buffington J.M., and Tonina D. 2009. Hyporheic exchange in mountain rivers II: effects of channel morphology on mechanics, scales, and rates of exchange. *Geography Compass*, 3(3):1038-1062.
- 2- Jones J.B., and Mulholland P.J. 1999. *Streams and ground waters*. Academic Press.
- 3- Fleckenstein, J.H., Krause S., Hannah D.M., and Boano, F. 2010. Groundwater-surface water interactions: New methods and models to improve understanding of processes and dynamics. *Advances in Water Resources*, 33(11):1291-1295.
- 4- Fischer, H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger, J. and Brooks, N.H. 1979. Mixing in inland and coastal waters.
- 5- Bencala, K.E. 1983. Simulation of solute transport in a mountain pool and riffle stream with a kinetic mass transfer model for sorption. *Water Resources Research*, 19(3):732-738.
- 6- Wörman, A., Packman, A.I., Johansson, H. and Jonsson, K. 2002. Effect of flow induced exchange in hyporheic zones on longitudinal transport of solutes in streams and rivers. *Water Resources Research*, 38(2):1-15.
- 7- Gooseff, M.N., Bencala, K.E., Scott, D.T., Runkel, R.L. and McKnight, D.M. 2005. Sensitivity analysis of conservative and reactive stream transient storage models applied to field data from multiple-reach experiments. *Advances in Water Resources*, 28(2):479-492.
- 8- Haggerty, R., McKenna, S.A. and Meigs, L.C. 2000. On the late time behavior of tracer test breakthrough curves. *Water Resources Research*, 36(5):3467-3479.
- 9- Haggerty, R., Wondzell, S.M. and Johnson, M.A. 2002. Power law residence time distribution in the hyporheic zone of a 2nd order mountain stream. *Geophysical Research Letters*, 29(18):1-4.
- 10- Metzler, R. and Klafter, J. 2000. Subdiffusive transport close to thermal equilibrium: From the Langevin equation to fractional diffusion. *Physical Review*, 61(1):6308- 6311.
- 11- Berkowitz, B., Cortis, A., Dentz, M. and Scher, H. 2006. Modeling non-Fickian transport in geological formations as a continuous time random walk. *Reviews of Geophysics*, 44.
- 12- Boano, F., Packman, A., Cortis, A., Revelli, R. and Ridolfi, L. 2007. A continuous time random walk approach to the stream transport of solutes. *Water resources research*, 43(5):12-21.
- 13- Marion, A. and Zaramella, M. 2005. A residence time model for stream-subsurface exchange of contaminants. *Acta Geophysica Polonica*, 53(1):527-534.
- 14- Marion, A., Zaramella, M. and Bottacin Busolin, A. 2008. Solute transport in rivers with multiple storage zones: The STIR model. *Water resources research*, 44(4):38-50.
- 15- Meerschaert, M.M. and Sikorskii, A., 2012. *Stochastic models for fractional calculus (Vol. 43)*. Walter de Gruyter.
- 16- Blank, L., 1996. *Numerical treatment of differential equations of fractional order*. University of Manchester, Department of Mathematics.
- 17- Deng, Z.Q., Singh, V.P. and Bengtsson, L. 2004. Numerical solution of fractional advection-dispersion equation. *Journal of Hydraulic Engineering*, 130(3):422-431.
- 18- Shen, C. and Phanikumar, M.S. 2009. An efficient space-fractional dispersion approximation for stream solute transport modeling. *Advances in Water Resources*, 32(10):1482-1494.
- 19- Schumer, R., Benson, D.A., Meerschaert, M.M. and Wheatcraft, S.W. 2001. Eulerian derivation of the fractional advection-dispersion equation. *Journal of Contaminant Hydrology*, 48(5):69-88.
- 20- Oldham, K.B., Spanier, J. and Ross, B. 1974. *Fractional calculus*.
- 21- Meerschaert, M.M. and Tadjeran, C. 2004. Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 172(1):65-77.
- 22- Eberhart, R.C. and Kennedy, J. 1995, October. A new optimizer using particle swarm theory. In *Proceedings of the sixth international symposium on micro machine and human science*, 1(1):39-43.
- 23- Zand, S.M., Kennedy, V.C., Zellweger, G.W. and Avanzino, R.J. 1976. Solute transport and modeling of water quality in a small stream. *United States Geological Survey*.



## Numerical Solution for Non-Uniform Fractional Advection Dispersion Equation

M. Hatam Jafari<sup>1</sup> – M. Mazaheri<sup>2\*</sup> – J.M.V. Samani<sup>3</sup>

Received: 05-04-2016

Accepted: 17-01-2017

**Introduction:** Solute transport modeling in water bodies and especially rivers, provides a useful tool for decision-makers and consumers, to take a timely decision in order to prevent or avoid any catastrophic consequences. Many factors such as velocity, cross-section area, bedform and etc. affect the transport of any solute particle in the media. The aforementioned factors vary both in width and depth, which cause some of the particles to deviate from the main channel to areas in which the particle stays for a longer time. Those particles are released to the main channel gradually causing a heavy-tailed breakthrough curve in downstream of the injection point. The areas where solute spends more time than the main channel is called deadzones. Any area in the channel that reduces the velocity field to relatively zero could be categorized as deadzones, such as areas behind a boulder, in pocket beside the river, behind or inside a vegetation cluster. In streams containing deadzones the classical advection-dispersion equation (ADE) cannot meet the requirements. Scholars proposed many different approaches to capture the heavy-tailed behavior. One of the renowned and novel approaches to quantify the role of deadzones in natural streams is using Fractional Calculus. This field of mathematics helps to change the fundamental assumption of ADE, which is laid upon "central limit theorem" and subsequently generate a new equation based on fractional partial derivatives, The Fractional Advection-Dispersion Equation (FADE). The FADE provides a better description of solute movement in natural streams, because of its general form and non-locality.

**Materials and Methods:** In this research, FADE for a non-uniform but steady condition in natural streams has been investigated. FADE is a product of central limit theorem generalization and hence can capture the anomalous behavior of solute transport in streams containing deadzones. One of the important points that can be inferred from tracer study in such streams is that the concentration of a point is influenced by the point in far upstream; that is either the solute particle comes faster than the main cloud or slower and defies the basic assumption. Since classic ADE just considers the points in the closest proximity of the study point to calculate the breakthrough curve (BTC), it cannot be used in cases that the deadzones are involved; which calls for a more comprehensive consideration of the stream. Interestingly, fractional derivatives are non-local; fractional derivatives consider the state of the function in its whole domain. Hence, FADE can accurately describe and calculate the BTC in streams affected by deadzones. The big difference between FADE and classic ADE is that, the former is based on Levy motion while the later developed and shows Brownian motion. Also, the order of spatial derivative in FADE is a value  $1 < \alpha \leq 2$ , unlike the classic ADE in which the order is fixed to 2. To investigate the FADE in depth standard Grunwald definition of fractional derivatives were employed for discretization, and an algorithm is proposed. The more the order of the fractional partial derivative decreases, the more would be the effect of the deadzones, this means that while the order is equal to 2, the streamflow does not experience any deadzones in its way. In order to fit the data, two variables in the FADE need to be calibrated; the unknown parameters were estimated using Particle Swarm Optimization (PSO) technique.

**Conclusion:** The model was validated using a set of data from a small stream. The comparison shows that the model can accurately recreate the BTC and perform dramatically better than classic ADE which even in some stations is incapable of predicting the peak concentration and the arrival time of the particle to the station. Quantitatively, the difference between the FADE and observation represented by RMSE in average is 0.236 while for classic ADE is around 4 times higher. The difference in the first two stations is negligible for the stream does not contain any deadzones. This shows that not only the FADE is capable of considering deadzones, but also if needed it can easily reduce to classic ADE. This flexibility offers vast opportunity for application. In addition, the sensitivity of the model to the calibration parameter was analyzed, the analysis shows that both variables (order of the derivative and skewness parameter) should be treated with great care, since a little

1, 2 and 3- Graduate Student, Assistant Professor and Professor of Water Structures, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

(\* - Corresponding Author Email: m.mazaheri@modares.ac.ir)

variation in their value drastically alter the shape of the BTC, and decrease the accuracy of the prediction. In this research, the capability of FADE were investigated and proved that this model performing far better in predicting solute transport in natural streams in which the variability of the morphology may hinder the solutes movement.

**Keywords:** Deadzones, Fractional advection dispersion equation, Numerical solution, Pollutant transport, Stream