





# برنامه شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب WASP ( ششم و هشتم )

مؤلف:

تیم ای وول، روبرت بی آمبروس، جیمز ال مارتین و ادوارد ای کومر

ترجمه:

علی شاهنظری

استاد دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری

مریم میرهاشمی

دانشجوی ارشد مدیریت منابع آب دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری

کامران نصیراحمدی

مدرس دانشگاه

پاییز ۱۴۰۰

عنوان و نام پدیدآور	: برنامه شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب WASP (ششم و هشتم) / مولف تیم ای وول ... او دیگران؛ ترجمه علی شاهنظری، مریم میرهاشمی، کامران نصیراحمدی.
مشخصات نشر	: ساری: دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری، ۱۴۰۰.
مشخصات ظاهری	: ۵۷۸ ص.: مصور(رنگی)، جدول، نمودار.
شابک	: 978-622-6860-57-4
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
یادداشت	: عنوان اصلی: Water quality analysis simulation program (WASP), version 6.0 ,
یادداشت	: مولف تیم ای وول، روبرت بی آمبروس، جیمز ال مارتین و ادوارد ای کومر.
موضوع	: دبلیو.ا.اس. پی.
موضوع	: آب -- کیفیت -- شبیه‌سازی WASP Water quality-- Simulation methods.
شناسه افزوده	: وول، تیم ا.
شناسه افزوده	: Wool, Tim A.
شناسه افزوده	: شاه‌نظری، علی، ۱۳۵۱ - مترجم
شناسه افزوده	: میرهاشمی، مریم، ۱۳۷۱ - مترجم
شناسه افزوده	: نصیراحمدی، کامران، مترجم
شناسه افزوده	: دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری
رده بندی کنگره	: TD۳۷۰
رده بندی دیویی	: ۶۲۸/۱۶۱
شماره کتابشناسی ملی	: ۸۷۵۹۳۴۲
اطلاعات رکورد کتابشناسی	: فیپا

### داوری علمی و تأیید شده در معاونت پژوهشی دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری

برنامه شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب WASP (ششم و هشتم)

مترجمان	: علی شاهنظری، مریم میرهاشمی، کامران نصیراحمدی
ناشر	: دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری
تیراژ	: ۱۰۰۰ نسخه
نوبت چاپ	: اول، ۱۴۰۰
قیمت	: ۲۰۰۰۰۰ تومان
چاپ	: نوروزی

هر گونه چاپ و تصویربرداری به هر شکل و تکثیر صفحات کتاب ممنوع می‌باشد.

مرکز نشر و پخش: تلفن: ۰۱۱۳۳۶۸۷۴۳۷، فاکس: ۰۱۱۳۳۶۸۷۴۴۲



# تقديم

پروفیسور میرخاق ضیاء تبار احمدی

## پیشگفتار مترجمان

آلودگی آب، پدیده‌ای است که در آن کیفیت شیمیایی، فیزیکی و بیولوژیکی آب‌های طبیعی به واسطه ورود فاضلاب‌ها، زباله‌ها و دیگر زائدات ناشی از فعالیت‌های صنعتی، شهری و کشاورزی تغییر می‌کند. افزایش جمعیت و توسعه شهری، کشاورزی و صنعتی کشور به همراه خشکسالی‌ها اهمیت توجه به کیفیت منابع آبی موجود را بیش از پیش نمایان ساخته است. شبیه‌سازی کمی و کیفی منابع آب و ارزیابی اثرات تخلیه پساب‌ها به منابع پذیرنده در دهه‌های اخیر به‌طور چشم‌گیری رواج یافته‌است. یکی از مدل‌های مفید در این زمینه مدل WASP است که به‌وسیله سازمان حفاظت محیط‌زیست آمریکا تدوین شده‌است و با استفاده از ابزارهای ریاضی چون روش اجزاء محدود، معادلات حاکم بر فرآیندهای شیمیایی و بیولوژیکی را حل می‌نمایند. این مدل امکان شبیه‌سازی دوبعدی و سه‌بعدی را ارائه می‌دهد و می‌تواند برای شبیه‌سازی هیدرولیکی و کیفی مخازن، رودخانه‌ها، جویبارها، خورها و تالاب‌ها مورد استفاده قرار گیرد. مدل WASP قابلیت شبیه‌سازی ۱۴ پارمتر کیفی را داراست و با ساختار دینامیکی برای محیط‌های آبی، فرآیندهای متغییر زمانی همانند جابه‌جایی، پراکندگی، بار جرم‌های نقطه‌ای و غیرنقطه‌ای و شرایط مرزی را در نظر می‌گیرد. معادله‌ای اصلی این مدل بر اساس بقای جرم می‌باشد. باتوجه به کاربرد توانایی این نرم‌افزار در شبیه‌سازی و بررسی کیفیت آب و همچنین نبود یک منبع جامع فارسی برای آموزش و یادگیری مدل، این کتاب به منظور تسهیل در امر آموزش و یادگیری این نرم‌افزار ترجمه شده‌است. این کتاب از دو قسمت کلی تشکیل شده‌است. قسمت اول که شامل ۱۱ بخش است و راهنمای نسخه ۶ مدل WASP می‌باشد. قسمت دوم که شامل ۸ بخش است، ترجمه‌ی راهنمای نسخه ۸ مدل WASP است. در واقع قسمت دوم این کتاب جهت تکمیل مستندات نسخه ۶ مدل WASP تدوین شده‌است.

در بخش اول (قسمت اول) نویسندگان به ارائه یک پیشگفتار برای معرفی کاربردهای نرم‌افزار WASP 6 و تقدیر از اشخاص و سازمان‌هایی که در تدوین نسخه اصلی این کتاب همکاری داشته‌اند پرداخته‌اند. در بخش دوم به بررسی اجمالی سیستم مدل‌سازی WASP، تعریف نوار ابزار، مراحل مختلف شبیه‌سازی، معرفی پارامترهای ورودی، شرایط مرزی و همچنین پردازش‌های مختلفی که بر روی داده‌های ورودی در بخش‌های مختلف برای ارائه‌ی یک خروجی مناسب از تمام فرآیندها انجام می‌گیرد،

پرداخته می‌شود. در بخش سوم قابلیت ارائه‌ی نتایج خروجی مدل به‌صورت گرافیکی با استفاده از پس‌پردازنده تعبیه‌شده در نرم‌افزار موردبررسی قرار می‌گیرد. در بخش چهارم مدل پایه کیفیت آب، معادله تعادل جرم، شبکه‌ی مدل، طرح انتقال مدل و کاربرد مدل تشریح می‌شود. در بخش پنجم انتقال ردیاب‌های شیمیایی، نحوه‌ی مدل‌سازی ردیاب‌ها، نحوه‌ی ایجاد پیوند هیدرودینامیک بین مدل و مدل‌های هیدرودینامیکی، ستون آب، انتشار در ستون آب، پردازش‌های مختلف بر روی فرآیندهای بارگذاری و مرزی و همچنین پارامترهای ورودی مربوط به این بخش مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد. در بخش ششم به بررسی اجمالی فرآیند انتقال رسوب در محیط‌های آبی، پارامترهای ورودی و عوامل مؤثر بر این فرآیند پرداخته می‌شود. در بخش هفتم به بررسی اجمالی اکسیژن محلول در مدل WASP و فرآیندهای مؤثر بر میزان این پارامتر در محیط‌های آب شامل: هوادهی مجدد، نیتروژن‌زدایی، نیتروژن‌زدایی، ته‌نشینی، رشد و مرگ فیتوپلانکتون‌ها و تقاضای اکسیژن رسوب و همچنین معادلات حاکم بر غلظت این پارامتر مانند معادله استریتر-فلیس پرداخته می‌شود. در بخش هشتم پدیده تغذیه‌گرایی و فرآیندهای مؤثر بر این پدیده شامل چرخه فسفر، چرخه نیتروژن، اکسیژن محلول، رشد، مرگ و فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون‌ها و عوامل مؤثر بر هرکدام از این فرآیندها مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد. در بخش نهم فرآیندهای مربوط به سموم ساده و گزینه‌های مختلف تعبیه‌شده در مدل WASP به‌منظور شبیه‌سازی این سموم تشریح می‌گردد. در بخش دهم به بررسی مواد شیمیایی آلی واکنش‌های مختلف این مواد در محیط‌های آبی شامل: جذب، یونیزاسیون، فراریت، هیدرولیز، فتولیز، اکسیداسیون، تجزیه بیولوژیکی و همچنین عوامل مؤثر بر انجام این واکنش‌ها پرداخته می‌شود. در بخش یازدهم منابع مورد استفاده به‌منظور تدوین نسخه اصلی این کتاب ارائه شده‌است.

قسمت دوم- این قسمت برای تکمیل مستندات مربوط به نسخه ۶ مدل WASP در قالب بخش‌های مربوط به نسخه ۸ مدل WASP تدوین شده‌است. در بخش دوازدهم به محاسبه pH، معادلات حاکم بر pH و فرآیندهایی مانند قلیائیت، هیدرولیز فسفرآلی، هیدرولیز نیتروژن آلی و جذب و دفع مواد مغذی توسط فیتوپلانکتون‌ها که تحت تأثیر میزان pH هستند و همچنین پارامترهای ورودی و ثابت‌های موردنیاز برای انجام مراحل شبیه‌سازی pH در مدل پرداخته می‌شود. در بخش سیزدهم فرآیند انتقال و معادلات حاکم بر این فرآیند، میدان‌های انتقال، عوامل مؤثر بر این فرآیند و همچنین ورودی و ثابت‌های موردنیاز جهت شبیه‌سازی این فرآیند و مستندات ضمیمه جهت درک بهتر این فرآیند ارائه می‌شود. در بخش چهاردهم به فرآیند انتقال جامدات در محیط‌های آبی که تأثیر به‌سزایی بر کیفیت منابع آب سطحی دارد، پرداخته می‌شود. در این بخش فرآیندهایی مانند ته‌نشینی، تعلیق، فرسایش، انباشت و دفع جامدات و معادلات حاکم بر هرکدام از این فرآیندها که بر انتقال مواد جامد در ستون‌های

آب تأثیر می‌گذارند برای درک بهتر این فرآیند در محیط‌های آبی مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد. در بخش پانزدهم به بررسی جلبک‌ها در محیط‌های آبی عامل مؤثر بر رشد آن‌ها مانند رشد فیتوپلانکتون‌ها، دما، مواد مغذی، نور و همچنین پارامترها و ثابت‌های مورد نیاز جهت شبیه‌سازی آن‌ها در مدل WASP ۸ ارائه می‌شود. در بخش شانزدهم تئوری مدل WASP ۸ در زمینه شبیه‌سازی فرآیندهای مؤثر در انتقال سوبات، معادلات حاکم بر انتقال سوبات، پارامترها و ثابت‌های ورودی جهت انجام مراحل شبیه‌سازی این فرآیند و همچنین ضمیمه‌های مورد نیاز جهت درک بهتر رفتار سوبات در محیط‌های آبی مورد بررسی قرار می‌گیرد. در بخش هفدهم به توسعه فرآیندها و معادلات حاکم بر جلبک‌های چندگانه که در بخش پانزدهم مورد بررسی قرار گرفته‌اند، پرداخته می‌شود. در بخش هجدهم به بررسی دما و معادلات حاکم بر فرآیندها و واکنش‌های مختلفی که در محیط‌های آبی تحت تأثیر دما رخ می‌دهند و همچنین مراحل شبیه‌سازی این پارامتر در مدل WASP ۸ پرداخته می‌شود. در بخش نوزدهم به بررسی نور و تأثیراتی که بر رشد فیتوپلانکتون‌ها و جلبک‌ها در محیط‌های آبی می‌گذارد، پرداخته می‌شود.

این کتاب توسط Edward A. Comer، James L. Martin، Robert B. Ambrose، Tim A. Wool تدوین و توسط سازمان حفاظت محیط‌زیست آمریکا (EPA) انتشار یافته‌است. این کتاب برای کارشناسان، دانشجویان رشته‌های مهندسی آب، محیط‌زیست، شیلات و مؤسساتی که در زمینه‌ی بررسی کیفیت آب در محیط‌های مختلف آبی پژوهش می‌کنند، توصیه می‌شود. این کتاب نیز مانند هر کتاب دیگری خالی از اشکال و نقص نیست، لذا خواهشمند است نظرات ارزشمند خود را برای تکمیل این نوشتار به نشانی ایمیل یکی از مترجمان ارسال نمایید. در نهایت مترجمان از انتشارات دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری و دانشجویان کارشناسی ارشد گروه مهندسی آب که در بازبینی فایل اولیه همکاری نموده‌اند، تقدیر و تشکر می‌نمایند.

مترجمان

علی شاهنظری

مریم میرهاشمی

کامران نصیراحمدی

[aliponh@yahoo.com](mailto:aliponh@yahoo.com)

[m.mirhashemi27871@gmail.com](mailto:m.mirhashemi27871@gmail.com)

[nasirahmadi\\_k@yahoo.com](mailto:nasirahmadi_k@yahoo.com)

## فهرست

۱	فصل اول پیشگفتار.....
۲	۱-۱- پیشگفتار.....
۳	۲-۱- تقدیر و تشکر.....
۵	فصل دوم مقدمه.....
۷	۱-۲- بررسی اجمالی سیستم مدل سازی WASP6.....
۹	۲-۲- نصب و راه اندازی.....
۹	۳-۲- پشتیبانی فنی.....
۹	۴-۲- تعریف نوار ابزار.....
۱۱	۵-۲- منوی فایل.....
۱۲	۱-۵-۲- وارد کردن فایل های ورودی نسخه قدیمی WASP.....
۱۳	۲-۵-۲- ارسال فایل های ورودی نسخه قدیمی WASP.....
۱۲	۳-۵-۲- تنظیمات برگزیده کاربر.....
۱۴	۶-۲- فایل های پروژه.....
۱۵	۱-۶-۲- جدید.....
۱۵	۲-۶-۲- باز کردن.....
۱۵	۳-۶-۲- ویرایش.....
۱۵	۴-۶-۲- ذخیره.....
۱۵	۵-۶-۲- ذخیره در.....
۱۶	۷-۲- پارامتر ورودی.....
۱۷	۱-۷-۲- شرح مجموعه داده.....
۱۷	۲-۷-۲- نوع مدل.....
۱۸	۳-۷-۲- نظرات.....
۱۸	۴-۷-۲- گزینه های راه اندازی مجدد.....
۱۸	۵-۷-۲- تاریخ و زمان.....
۱۸	۶-۷-۲- فایل منبع غیر نقطه ای.....
۱۹	۷-۷-۲- هیدرودینامیک.....
۱۹	۸-۲- سیستم.....
۲۰	۱-۸-۲- گزینه های سیستم.....
۲۱	۲-۸-۲- پراکنندگی / جریان فرعی.....

۲۱	جرم مخصوص.....۳-۸-۲
۲۱	حداکثر غلظت.....۴-۸-۲
۲۱	فاکتور مقیاس مرزی / بار و فاکتور تبدیل.....۵-۸-۲
۲۲	صفحه‌نمایش قطعه‌بندی.....۹-۲
۲۲	تعریف قطعه.....۱-۹-۲
۲۴	پارامترهای محیطی بخش.....۲-۹-۲
۲۵	غلظت‌های اولیه.....۳-۹-۲
۲۶	کسر محلول.....۴-۹-۲
۲۷	فاکتورهای مقیاس پارامتر بخش.....۱۰-۲
۲۸	پراکندگی.....۱۱-۲
۲۹	میدان‌های تبادل.....۱-۱۱-۲
۳۰	تابع پراکندگی.....۲-۱۱-۲
۳۱	تابع زمان پراکندگی.....۳-۱۱-۲
۳۱	جریان‌ها.....۱۲-۲
۳۲	تابع جریان.....۱-۱۲-۲
۳۳	تابع زمان جریان.....۲-۱۲-۲
۳۳	مرزی.....۱۳-۲
۳۴	تابع زمان مرزی.....۱-۱۳-۲
۳۴	بارها.....۱۴-۲
۳۵	تابع زمان بار.....۱-۱۴-۲
۳۵	مقیاس و تبدیل بارها.....۱۵-۲
۳۶	گام زمانی.....۱-۱۵-۲
۳۷	فواصل چاپ.....۱۶-۲
۳۸	تابع زمان.....۱۷-۲
۳۹	ثابت‌ها.....۱۸-۲
۴۱	پر کردن / محاسبه و نمودار.....۱۹-۲
۴۴	تعریف نوار ابزار.....۱-۱۹-۲
۴۴	صحت‌سنجی.....۲۰-۲
۴۵	اجرای مدل.....۲۱-۲

۴۷	فصل سوم پس پردازنده ویزوال گرافیک
۵۰	۱-۳- تعریف نوار ابزار
۵۱	۲-۳- انتخاب خروجی مدل
۵۲	۱-۲-۳- بازکردن خروجی مدل
۵۳	۳-۳- تجزیه و تحلیل گرافیکی فضایی
۵۴	۱-۳-۳- بررسی اجمالی
۵۵	۲-۳-۳- نوار ابزار شبکه فضایی
۵۶	۳-۳-۳- رابط سیستم اطلاعات جغرافیایی
۵۸	۴-۳-۳- ایجاد فایل Digitize با BMG
۵۹	۵-۳-۳- کنترل تجزیه و تحلیل مکانی
۶۱	۶-۳-۳- انتخاب مجموعه داده‌ها
۶۲	۷-۳-۳- انتخاب برش/هندسه
۶۲	۸-۳-۳- انتخاب متغیر
۶۳	۹-۳-۳- انتخاب زمان
۶۴	۱۰-۳-۳- نوار رنگی
۶۴	۱۱-۳-۳- انیمیشن
۶۴	۱۲-۳-۳- حالت طرح
۶۵	۱۳-۳-۳- پیکربندی GIS
۶۵	۱۴-۳-۳- لایه‌ها
۶۶	۱۵-۳-۳- GIS
۶۷	۴-۳- نمودار x/y
۶۷	۱-۴-۳- بررسی اجمالی
۶۷	۲-۴-۳- نوار ابزار
۶۹	۳-۴-۳- ایجاد نمودار x/y
۸۰	۴-۴-۳- اجرا/لغو
۸۰	۵-۴-۳- بزرگ‌نمایی محورها
۸۴	۶-۴-۳- اضافه کردن یک منحنی اضافی
۸۵	۷-۴-۳- نماد رنگی/سیاه سفید
۸۵	۸-۴-۳- داده‌های مشاهده شده / اندازه‌گیری شده
۸۸	۹-۴-۳- چاپ نتایج
۸۹	۱۰-۴-۳- ایجاد جدول داده‌ها

۹۱	..... محاسبات منحنی	۳-۴-۱۱
<b>۹۹</b>	<b>..... فصل چهارم مدل پایه کیفیت آب</b>	
۱۰۰	..... ۱-۴- معادله عمومی تعادل جرم	۴-۱-۱
۱۰۲	..... ۲-۴- شبکه مدل	۴-۲-۱
۱۰۸	..... ۳-۴- برنامه انتقال مدل	۴-۳-۱
۱۰۸	..... ۴-۴- کاربرد مدل	۴-۴-۱
<b>۱۱۱</b>	<b>..... فصل پنجم انتقال ردیاب شیمیایی</b>	
۱۱۲	..... ۱-۵- بررسی اجمالی انتقال ردیاب WASP 6	۵-۱-۱
۱۱۳	..... ۲-۵- فرآیندهای انتقال	۵-۲-۱
۱۱۳	..... ۱-۲-۵- پیوند هیدرودینامیکی	۵-۲-۱-۱
۱۱۶	..... ۲-۲-۵- هندسه هیدرولیک	۵-۲-۲-۱
۱۱۹	..... ۳-۲-۵- جذب آب منفذی	۵-۲-۳-۱
۱۲۰	..... ۴-۲-۵- پراکندگی ستون آب	۵-۲-۴-۱
۱۲۱	..... ۵-۲-۵- پراکندگی آب منفذی	۵-۲-۵-۱
۱۲۲	..... ۶-۲-۵- فرآیندهای مرزی	۵-۲-۶-۱
۱۲۳	..... ۷-۲-۵- فرآیندهای بارگذاری	۵-۲-۷-۱
۱۲۳	..... ۸-۲-۵- پیوند منبع غیر نقطه‌ای	۵-۲-۸-۱
۱۲۵	..... ۹-۲-۵- شرایط اولیه	۵-۲-۹-۱
۱۲۶	..... ۳-۵- پیاده‌سازی مدل	۵-۳-۱
۱۲۶	..... ۴-۵- پارامترهای ورودی مدل	۵-۴-۱
۱۲۶	..... ۱-۴-۵- پارامترهای محیط	۵-۴-۱-۱
۱۳۰	..... ۲-۴-۵- پارامترهای انتقال	۵-۴-۲-۱
۱۳۱	..... ۳-۴-۵- پارامترهای مرزی	۵-۴-۳-۱
۱۳۲	..... ۴-۴-۵- پارامترهای تبدیل	۵-۴-۴-۱
۱۳۳	..... ۵-۴-۵- فایل‌های ورودی خارجی	۵-۴-۵-۱
<b>۱۳۵</b>	<b>..... فصل ششم انتقال سوب</b>	
۱۳۶	..... ۱-۶- مروری بر انتقال سوب WASP	۶-۱-۱
۱۳۷	..... ۱-۱-۶- فرآیندهای انتقال سوب	۶-۱-۱-۱
۱۴۰	..... ۲-۱-۶- بارگذاری رسوب	۶-۱-۲-۱



۱۴۱	۳-۱-۶- بستر رسوب
۱۴۶	۲-۶- پیاده سازی مدل
۱۴۶	۱-۲-۶- پارامترهای ورودی مدل
۱۴۶	۲-۲-۶- پارامترهای محیطی
۱۴۷	۳-۲-۶- پارامترهای مرزی
<b>۱۴۹</b>	<b>فصل هفتم اکسیژن محلول</b>
۱۵۰	۱-۷- نمای کلی اکسیژن محلول WASP 6
۱۵۲	۲-۷- فرآیندهای اکسیژن محلول
۱۵۴	۱-۲-۷- هوادهی
۱۵۷	۲-۲-۷- اکسیداسیون کربن
۱۵۹	۳-۲-۷- نیتروژن زایی
۱۵۹	۴-۲-۷- نیتروژن زدایی
۱۶۰	۵-۲-۷- ته نشینی
۱۶۰	۶-۲-۷- رشد فیتوپلانکتون
۱۶۱	۷-۲-۷- مرگ فیتوپلانکتون
۱۶۱	۸-۲-۷- تقاضای اکسیژن رسوب
۱۶۳	۳-۷- پیاده سازی مدل
۱۶۴	۱-۳-۷- استریتور-فلپس
۱۶۵	۲-۳-۷- پارامترهای محیط
۱۶۵	۳-۳-۷- پارامترهای انتقال
۱۶۶	۴-۳-۷- پارامترهای مرزی
۱۶۶	۵-۳-۷- پارامترهای تبدیل
۱۶۸	۴-۷- استریتور-فلپس اصلاح شده
۱۷۰	۱-۴-۷- پارامترهای محیطی
۱۷۰	۲-۴-۷- پارامترهای انتقال
۱۷۱	۳-۴-۷- پارامترهای مرزی
۱۷۲	۴-۴-۷- پارامترهای انتقال
۱۷۳	۵-۷- تعادل خطی DO
۱۷۴	۱-۵-۷- پارامترهای محیط
۱۷۵	۲-۵-۷- پارامترهای انتقال
۱۷۵	۳-۵-۷- پارامترهای مرزی

۱۷۶	پارامترهای تبدیل	۴-۵-۷
۱۷۷	تبادل غیرخطی DO	۶-۷
<b>۱۸۱</b>	<b>فصل هشتم غنی سازی</b>	
۱۸۲	مروری بر تغذیه گرایي WASP 6	۱-۸
۱۸۴	چرخه فسفر	۱-۱-۸
۱۸۴	چرخه نیتروژن	۲-۱-۸
۱۸۴	اکسیژن محلول	۳-۱-۸
۱۸۵	فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون	۴-۱-۸
۱۸۶	رشد فیتوپلانکتون	۵-۱-۸
۱۹۴	مرگ فیتو پلانکتون ها	۶-۱-۸
۱۹۶	ته نشینی فیتوپلانکتون ها	۷-۱-۸
۱۹۶	خلاصه	۸-۱-۸
۱۹۸	استوکیومتری و درک فرآیند جنبشی	۹-۱-۸
۲۰۰	چرخه فسفر	۲-۸
۲۰۱	رشد فیتو پلانکتون ها	۱-۲-۸
۲۰۱	مرگ فیتو پلانکتون ها	۲-۲-۸
۲۰۲	معدنی شدن	۳-۲-۸
۲۰۲	جذب	۴-۲-۸
۲۰۴	ته نشینی	۵-۲-۸
۲۰۴	چرخه نیتروژن	۳-۸
۲۰۶	رشد فیتو پلانکتون ها	۱-۳-۸
۲۰۷	مرگ فیتو پلانکتون ها	۲-۳-۸
۲۰۸	معدنی شدن	۳-۳-۸
۲۰۸	ته نشینی	۴-۳-۸
۲۰۸	نیتروژن زایی	۵-۳-۸
۲۰۹	نیتروژن زدایی	۶-۳-۸
۲۰۹	تبادل اکسیژن محلول	۴-۸
۲۱۰	اثرات متقابل لایه بتیک -ستون آب	۱-۴-۸
۲۱۱	شبیه سازی لایه بتیک	۲-۴-۸

۲۱۶.....	۵-۸- پیاده‌سازی مدل.....
۲۱۷.....	۶-۸- فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی ساده.....
۲۱۹.....	۱-۶-۸- پارامترهای محیطی.....
۲۱۹.....	۲-۶-۸- پارامترهای انتقال.....
۲۱۹.....	۳-۶-۸- پارامترهای مرزی.....
۲۲۱.....	۴-۶-۸- پارامترهای تبدیل.....
۲۲۳.....	۷-۸- فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی میانی.....
۲۲۴.....	۱-۷-۸- پارامترهای محیطی.....
۲۲۴.....	۲-۷-۸- پارامترهای انتقال.....
۲۲۵.....	۳-۷-۸- پارامترهای مرزی.....
۲۲۶.....	۴-۷-۸- پارامترهای تبدیل.....
۲۲۹.....	۸-۸- فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی میانی با لایه بنتیک.....
<b>۲۳۱.....</b>	<b>فصل نهم سموم ساده.....</b>
۲۳۵.....	۱-۹- فرآیند جنبشی تبدیل ساده.....
۲۳۵.....	۱-۱-۹- روش ۱: فروپاشی مرتبه اول کل توده.....
۲۳۵.....	۲-۱-۹- روش ۲: تبدیل مرتبه اول منحصربه‌فرد.....
۲۳۶.....	۲-۹- تعادل جذب.....
۲۳۷.....	۳-۹- تبدیل و بازده فرعی.....
۲۳۸.....	۴-۹- پیاده‌سازی مدل.....
۲۳۸.....	۱-۴-۹- پارامترهای ورودی مدل.....
۲۳۹.....	۲-۴-۹- پارامترهای محیطی.....
۲۳۹.....	۳-۴-۹- پارامترهای انتقال.....
۲۴۰.....	۴-۴-۹- پارامترهای مرزی.....
۲۴۱.....	۵-۴-۹- پارامترهای تبدیل.....
<b>۲۴۷.....</b>	<b>فصل دهم مواد شیمیایی آلی.....</b>
۲۵۰.....	۱-۱۰- واکنش‌های سمی و تبدیل.....
۲۵۲.....	۲-۱۰- پیاده‌سازی مدل.....
۲۵۲.....	۱-۲-۱۰- پارامترهای ورودی مدل.....
۲۵۲.....	۲-۲-۱۰- پارامترهای تبدیل.....
۲۵۴.....	۳-۱۰- یونی‌زاسیون.....

۲۵۴	۱-۳-۱۰ - بررسی واکنش‌های یونیزاسیون در TOXI
۲۵۸	۱-۴-۱۰ - پیاده سازی مدل
۲۶۰	۱-۵-۱۰ - تعادل جذب
۲۶۱	۱-۵-۱۰ - نمای کلی از واکنش‌های جذب TOXI
۲۶۲	۱-۵-۲ - محاسبه ضرایب تقسیم
۲۶۳	۱-۵-۳ - گزینه‌ی ۱: ضرایب تقسیم‌بندی اندازه‌گیری شده
۲۶۳	۱-۵-۴ - گزینه‌ی ۲: ضریب تقسیم کربن آلی ورودی
۲۶۴	۱-۵-۵ - گزینه‌ی ۴: محاسبه تقسیم‌بندی وابسته به جامدات
۲۶۶	۱-۵-۶ - روش ۱: ضریب تقسیم اندازه‌گیری شده
۲۶۶	۱-۵-۷ - گزینه‌ی ۲: ضریب تقسیم کربن آلی ورودی
۲۶۷	۱-۵-۸ - گزینه‌ی ۳: محاسبه ضریب تقسیم کربن آلی
۲۶۷	۱-۵-۹ - گزینه‌ی ۴: تقسیم‌بندی وابسته به مواد جامد
۲۶۸	۱-۶-۱۰ - فراریت
۲۶۸	۱-۶-۱۰ - بررسی فراریت در TOXI
۲۷۰	۱-۶-۲ - گزینه‌ی ۱ فراریت
۲۷۰	۱-۶-۳ - گزینه‌ی ۲ فراریت
۲۷۱	۱-۶-۴ - گزینه‌ی ۳ فراریت
۲۷۱	۱-۶-۵ - گزینه‌ی ۴ فراریت
۲۷۳	۱-۶-۶ - گزینه‌ی ۵ فراریت
۲۷۶	۱-۶-۷ - گزینه‌ی ۱ فراریت
۲۷۷	۱-۶-۸ - گزینه‌ی ۲ فراریت
۲۷۸	۱-۶-۹ - گزینه‌ی ۳ فراریت
۲۷۸	۱-۶-۱۰ - گزینه‌ی ۴ فراریت
۲۷۹	۱-۶-۱۱ - گزینه‌ی ۵ فراریت
۲۷۹	۱-۷-۱۰ - هیدرولیز
۲۷۹	۱-۷-۱۰ - بررسی واکنش‌های هیدرولیز در TOXI
۲۷۹	۱-۷-۲ - گزینه‌ی ۱: هیدرولیز مرتبه اول
۲۸۰	۱-۷-۳ - گزینه‌ی ۲: هیدرولیز مرتبه دوم
۲۸۴	۱-۸-۱۰ - فوتولیز

۲۸۴	۱-۸-۱۰	بررسی واکنش‌ها فوتولیز TOXI
۲۸۵	۲-۸-۱۰	گزینه‌ی ۱ فوتولیز
۲۸۹	۳-۸-۱۰	گزینه‌ی ۲ فوتولیز
۲۹۱	۴-۸-۱۰	گزینه‌ی ۱ فوتولیز
۲۹۴	۵-۸-۱۰	گزینه‌ی ۲ فوتولیز
۲۹۵	۹-۱۰	اکسیداسیون
۲۹۵	۱-۹-۱۰	مروری بر واکنش‌های اکسیداسیون TOXI
۲۹۸	۱۰-۱۰	تجزیه بیولوژیکی
۲۹۹	۱-۱۰-۱۰	بررسی واکنش‌های تجزیه بیولوژیکی TOXI
۳۰۳	۱۱-۱۰	واکنش اضافی
۳۰۳	۱-۱۱-۱۰	بررسی واکنش‌های اضافی TOXI
<b>۳۰۵</b>		<b>فصل یازدهم منابع</b>
<b>۳۱۵</b>		<b>فصل دوازدهم محاسبات pH و قلیائیت</b>
۳۱۶	۱-۱۲	مقدمه
۳۱۶	۲-۱۲	محاسبه pH
۳۱۸	۱-۲-۱۲	کربن معدنی کل (CT)
۳۱۹	۲-۲-۱۲	کربن دی‌اکسید اشباع
۳۲۰	۳-۲-۱۲	تأثیر ساختارهای کنترل: CO <sub>2</sub>
۳۲۱	۴-۲-۱۲	قلیائیت (ALK)
۳۲۲	۵-۲-۱۲	نیترژن زایی
۳۲۲	۶-۲-۱۲	نیترژن زدایی
۳۲۲	۷-۲-۱۲	هیدرولیز P آلی
۳۲۳	۸-۲-۱۲	هیدرولیز N آلی
۳۲۳	۹-۲-۱۲	فتوستتر فیتوپلانکتون
۳۲۴	۱۰-۲-۱۲	جذب مواد مغذی فیتوپلانکتون
۳۲۴	۱۱-۲-۱۲	دفع مواد مغذی فیتوپلانکتون
۳۲۵	۱۲-۲-۱۲	جذب مواد مغذی جلبک
۳۲۶	۱۳-۲-۱۲	دفع مواد مغذی جلبک کف
۳۲۶	۳-۱۲	ورودی مدل
۳۲۶	۱-۳-۱۲	سیستم

۳۲۷	..... توابع زمان ۱۲-۳-۲
۳۲۸	..... ثابت‌ها ۱۲-۳-۳
۳۲۹	..... متغیرهای خروجی ۱۲-۳-۴
۳۳۰	..... منابع ۱۲-۴
۳۳۳	<b>فصل سیزدهم راهنمای انتقال جریان آب</b>
۳۳۴	..... ۱-۱۳ چکیده
۳۳۵	..... ۲-۱۳ مقدمه
۳۳۶	..... ۳-۱۳ ضمیمه
۳۳۶	..... ۱۳-۳-۱ میدان‌های انتقال WASP
۳۳۷	..... ۱۳-۳-۲ جریان آب سطحی WASP
۳۳۷	..... ۱۳-۳-۱-۱ گزینه‌های جریان توصیفی آب سطحی WASP
۳۳۸	..... ۱۳-۳-۲-۲ گزینه‌ی موج جنبشی جریان نهر WASP
۳۳۸	..... ۱۳-۴-۱ توسعه معادلات
۳۳۸	..... ۱۳-۴-۱-۱ هیدروژنومتري
۳۴۲	..... ۱۳-۴-۲-۲ معادلات جریان حاکم
۳۴۳	..... ۱۳-۴-۲-۱-۱ جریان موج جنبشی
۳۴۴	..... ۱۳-۴-۲-۲-۲ جریان سرریز حوضچه
۳۴۵	..... ۱۳-۴-۲-۳-۳ جریان پویا
۳۴۶	..... ۱۳-۴-۳-۳ پیاده سازی معادلات
۳۴۶	..... ۱۳-۴-۳-۱-۱ جریان موج جنبشی
۳۴۸	..... ۱۳-۴-۳-۲-۲ جریان سرریز حوضچه
۳۴۹	..... ۱۳-۴-۴-۴ جریان پویا
۳۵۱	..... ۱۳-۵-۱ ورودی‌های مدل انتقال جریان آب
۳۵۲	..... ۱۳-۵-۱-۱ صفحه‌نمایش مجموعه داده
۳۵۲	..... ۱۳-۵-۱-۱-۱ گزینه‌های راه‌اندازی
۳۵۳	..... ۱۳-۵-۱-۲ تاریخ و زمان
۳۵۴	..... ۱۳-۵-۱-۳ هیدرودینامیک
۳۵۵	..... ۱۳-۵-۱-۴ تکنیک راه‌حل
۳۵۵	..... ۱۳-۵-۱-۵ تعریف گام زمانی

۳۵۶	..... صفحه‌نمایش بخش‌ها	۱۳-۵-۲
۳۵۶	..... نام بخش	۱۳-۵-۲-۱
۳۵۶	..... نوع بخش	۱۳-۵-۲-۲
۳۵۷	..... بخش پایین	۱۳-۵-۲-۳
۳۵۷	..... حالت انتقال	۱۳-۵-۳
۳۵۸	..... هندسه کانال	۱۳-۵-۴
۳۵۹	..... حجم	۱۳-۵-۴-۱
۳۵۹	..... طول	۱۳-۵-۴-۲
۳۵۹	..... عرض	۱۳-۵-۴-۳
۳۶۰	..... ارتفاع	۱۳-۵-۴-۴
۳۶۰	..... شیب	۱۳-۵-۴-۵
۳۶۰	..... حداقل عمق	۱۳-۵-۴-۶
۳۶۰	..... زبری بخش	۱۳-۵-۴-۷
۳۶۰	..... عمق اولیه	۱۳-۵-۴-۸
۳۶۱	..... ارتفاع اولیه سطح	۱۳-۵-۴-۹
۳۶۱	..... عمق (ضریب و توان)	۱۳-۵-۴-۱۰
۳۶۱	..... سرعت (ضریب و توان)	۱۳-۵-۴-۱۱
۳۶۲	..... صفحه‌نمایش جریان	۱۳-۵-۵
۳۶۳	..... میدان جریان	۱۳-۵-۵-۱
۳۶۴	..... تابع جریان	۱۳-۵-۵-۲
۳۶۵	..... تابع مسیر جریان	۱۳-۵-۵-۳
۳۶۶	..... تابع زمان جریان	۱۳-۵-۵-۶
۳۶۷	..... صفحه‌نمایش تبادل	۱۳-۵-۶
۳۶۸	..... میدان تبادل	۱۳-۵-۶-۱
۳۶۹	..... تابع تبادل	۱۳-۵-۶-۲
۳۶۹	..... تابع مسیر	۱۳-۵-۶-۳
۳۷۰	..... تابع زمانی تبادل	۱۳-۵-۶-۴
۳۷۱	..... منابع	۱۳-۶
۳۷۲	..... پیوست ۱: استخراج معادلات	۱۳-۷
۳۷۲	..... توان‌های هیدرولیک برای جریان موج سینماتیک	۱۳-۷-۱
۳۷۳	..... پیوست ۲: تست‌های تأیید مدل	۱۳-۸

۳۷۳	..... تست‌های موج سینماتیک	۱-۸-۱۳
۳۷۳	..... تست ۱ انتقال جریان آب	۱-۱-۸-۱۳
۳۷۳	..... تست ۲ انتقال جریان	۲-۱-۸-۱۳
۳۷۴	..... تست ۳ انتقال جریان	۳-۱-۸-۱۳
۳۷۴	..... تست ۴ انتقال جریان	۴-۱-۸-۱۳
۳۷۴	..... تست ۵ انتقال جریان	۵-۱-۸-۱۳
۳۷۴	..... تست تأیید سرریز بند	۲-۸-۱۳
۳۷۵	..... تست ۱ سرریز بند- جریان ثابت	۱-۲-۸-۱۳
۳۷۵	..... تست ۲ سرریز بند- جریان متغیر	۲-۲-۸-۱۳
۳۷۵	..... تست ۳ سرریز بند- جریان پویا بلندمدت	۳-۲-۸-۱۳
۳۷۵	..... تست‌های تأیید جریان پویا	۳-۸-۱۳
۳۷۵	..... تست ۱ جریان پویا- مرداب ثابت	۱-۳-۸-۱۳
۳۷۶	..... تست ۲ جریان پویا- جریان ثابت، ارتفاع	۲-۳-۸-۱۳
۳۷۶	..... تست ۳ جریان پویا- جریان متغیر ثابت	۳-۳-۸-۱۳
۳۷۶	..... تست ۴ جریان پویا- جریان EFDC	۴-۳-۸-۱۳
۳۷۶	..... تست ۵ جریان پویا- جریان جزر و مدی	۵-۳-۸-۱۳
۳۷۶	..... تست ۶ جریان پویا- جریان جزر و مدی دوبعدی	۶-۳-۸-۱۳
۳۷۶	..... پیوست ۳: فایل پیوند هیدرودینامیکی API	۹-۱۳
۳۷۷	..... مفهوم عمومی	۱-۹-۱۳
۳۷۸	..... بررسی API (Application Program Interface) (رابط برنامه کاربردی)	۲-۹-۱۳
۳۷۹	..... مقارنه اولیه و توابع	۳-۹-۱۳
۳۸۷	..... اطلاعات بخش و توابع	۴-۹-۱۳
۳۸۸	..... اطلاعات جریان و توابع	۵-۹-۱۳
۳۸۸	..... پایان لحظه	۱۰-۱۳
۳۸۹	..... بستن فایل	۱۱-۱۳
۳۸۹	..... راهنمای تدوین	۱۲-۱۳
۳۹۰	..... فایل رابط	۱۳-۱۳
۳۹۶	..... مثال برنامه	۵-۱۳



## فصل چهاردهم مازول جامدات ..... ۴۱۳

- ۴۱۴-۱-۱۴- مقدمه.....
- ۴۱۵-۲-۱۴- سیستم‌های جامدات.....
- ۴۱۶-۳-۱۴- بخش‌های بدنه آب.....
- ۴۱۷-۴-۱۴- رژیم‌های رسوب‌گذاری جریان.....
- ۴۱۹-۵-۱۴- انتقال جامدات توصیفی.....
- ۴۲۰-۶-۱۴- انتقال جامد مبتنی بر فرآیند.....
- ۴۲۷-۷-۱۴- تولید و انحلال جامدات زیستی.....
- ۴۲۸-۸-۱۴- دفن جامدات.....
- ۴۳۰-۹-۱۴- ضمیمه ۱: راه‌حل تحلیلی برای ته‌نشینی.....

## فصل پانزدهم تئوری مدل و راهنمای کاربر جلبک چندگانه WASP 8 ..... ۴۳۳

- ۴۳۴-۱-۱۵- توجه.....
- ۴۳۴-۲-۱۵- مقدمه.....
- ۴۳۸-۳-۱۵- مروری بر ثابت‌های مدل و فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی MPM.....
- ۴۳۸-۱-۳-۱۵- واحدهای زیست‌توده و استوکیومتری.....
- ۴۳۹-۲-۳-۱۵- فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون‌ها.....
- ۴۳۹-۱-۲-۳-۱۵- رشد فیتو پلانکتون‌ها.....
- ۴۳۹-۲-۲-۳-۱۵- دما.....
- ۴۴۰-۳-۲-۳-۱۵- نور.....
- ۴۴۲-۴-۲-۳-۱۵- مواد مغذی.....
- ۴۴۳-۵-۲-۳-۱۵- تلفات فیتو پلانکتون‌ها.....
- ۴۴۵-۳-۳-۱۵- تعادل سیلیس.....
- ۴۴۵-۱-۳-۳-۱۵- سیلیس پلانکتونی.....
- ۴۴۵-۲-۳-۳-۱۵- سیلیس فرسایشی.....
- ۴۴۶-۳-۳-۳-۱۵- سیلیس آلی محلول.....
- ۴۴۷-۴-۳-۳-۱۵- سیلیس غیرآلی و حل‌نشده.....
- ۴۴۸-۴-۱۵- پارامترهای MPM و تابع زمان.....
- ۴۵۰-۵-۱۵- منابع.....

فصل شانزدهم تکمیل مستندات کاربر برنامه شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب (WASP).....	۴۵۳
روال دیاژنز (تغییرات فیزیکی، شیمیایی و زیست شناختی) رسوبات WASP: تئوری مدل و راهنمای کاربر .....	۴۵۳
۱-۱۶- مقدمه.....	۴۵۴
۲-۱۶- بررسی اجمالی تئوری.....	۴۵۶
۳-۱۶- ورودی مدل.....	۴۵۹
۴-۱۶- اجرای مدل دیاژنز.....	۴۶۷
۵-۱۶- گزینه‌های راه‌اندازی مدل SOD.....	۴۷۴
۶-۱۶- خروجی مدل دیاژنز.....	۴۷۵
۷-۱۶- منابع.....	۴۷۶
۸-۱۶- ضمیمه A: توصیف تفصیلی مدل رسوب دیاژنز.....	۴۷۷
فصل هفدهم ماکرو جلبک- تئوری مدل و راهنمای کاربر .....	۴۷۹
ضمیمه مستندات کاربر برنامه شبیه‌سازی تحلیل آب (WASP8).....	۴۷۹
۱-۱۷- مقدمه.....	۵۰۶
۲-۱۷- ضمیمه WASP.....	۵۰۷
۳-۱۷- مواد محلول و معلق.....	۵۰۸
۴-۱۷- متغیرهای حالت WASP 8.....	۵۰۸
۵-۱۷- نور و گرما.....	۵۰۹
۶-۱۷- واکنش‌های تشکیل دهنده و فرآیند جنبشی.....	۵۱۰
۱-۶-۱۷- نیتروژن آلی محلول.....	۵۱۰
۲-۶-۱۷- نیتروژن آمونیاکی.....	۵۱۱
۳-۶-۱۷- نیتروژن نیتراتی.....	۵۱۱
۴-۶-۱۷- فسفر آلی محلول.....	۵۱۱
۵-۶-۱۷- فسفر معدنی.....	۵۱۱
۶-۶-۱۷- اکسیژن محلول.....	۵۱۲
۷-۶-۱۷- کل کربن معدنی.....	۵۱۲

۵۱۲	.....(Alk) قلیائیت ۸-۶-۱۷
۵۱۳	.....جامدات معدنی ۷-۱۷
۵۱۳	.....دیاژنز رسوبات ۱-۷-۱۷
۵۱۴	.....الگوریتم‌های مدل ماکرو جلبک ۸-۱۷
۵۱۴	.....فرم‌های شبیه‌سازی شده ۱-۸-۱۷
۵۱۷	.....انتقال ۲-۸-۱۷
۵۱۷	.....آبشستگی ۳-۸-۱۷
۵۱۸	.....کشش ۴-۸-۱۷
۵۱۹	.....واکنش‌های ماکرو جلبک و فرآیند جنبشی ۹-۱۷
۵۱۹	.....استوکیومتری زیست‌توده ماکرو جلبک ۱-۹-۱۷
۵۲۰	.....زیست‌توده ماکرو جلبک (aMA) ۲-۹-۱۷
۵۲۱	.....فتوستنتر ۳-۹-۱۷
۵۲۲	.....اثر دما ۴-۹-۱۷
۵۲۳	.....اثر محدودیت غذایی ۵-۹-۱۷
۵۲۴	.....اثر محدودیت نور ۶-۹-۱۷
۵۲۸	.....تأثیر نور بر ماکرو جلبک ۷-۹-۱۷
۵۲۹	.....اثر شوری ۸-۹-۱۷
۵۳۱	.....تلفات ۱-۸-۹-۱۷
۵۳۱	.....تنفس ۲-۸-۹-۱۷
۵۳۱	.....مرگ ۳-۸-۹-۱۷
۵۳۳	.....مواد مغذی سلول ماکرو جلبک (qP, qN) ۱۰-۱۷
۵۳۶	.....مواد مغذی معدنی خارجی ۱-۱۰-۱۷
۵۳۷	.....ماده آلی خارجی ۲-۱۰-۱۷
۵۳۸	.....اکسیژن محلول ۳-۱۰-۱۷
۵۴۱	.....خروجی ماکرو جلبک ۱۱-۱۷
۵۴۱	.....متغیرها و ضرایب خروجی جلبک چندگانه (نه شامل ماکرو جلبک) WASP 8 ۱-۱۱-۱۷
۵۴۷	.....منابع ۱۲-۱۷
۵۴۹	.....فصل هجدهم ماژول دما تئوری مدل و راهنمای کاربر WASP 8
۵۵۰	.....مقدمه ۱-۱۸
۵۵۱	.....تئوری مدل ۲-۱۸

۵۵۱	..... معادله عمومی تعادل جرم	۱-۲-۱۸
۵۵۳	..... فرآیند کیفیت آب	۲-۲-۱۸
۵۵۳	..... دما	۱-۲-۲-۱۸
۵۵۳	..... تبادل گرمای سطح	۲-۲-۲-۱۸
۵۵۶	..... تبادل گرمای رسوب	۳-۲-۲-۱۸
۵۵۶	..... پوشش یخ	۴-۲-۲-۱۸
۵۶۱	..... جرم مخصوص	۵-۲-۲-۱۸
۵۶۱	..... ورودی مدل	۳-۱۸
۵۶۲	..... پارامترهای مدل	۱-۳-۱۸
۵۶۴	..... ثابت‌های مدل	۲-۳-۱۸
۵۶۷	..... توابع زمان جنبشی	۳-۳-۱۸
۵۶۹	..... منابع	۲-۱۸
<b>۵۷۱</b>	<b>..... فصل نوزدهم ماژول نور</b>	
۵۷۲	..... تابش خورشیدی	۱-۱۹
۵۷۴	..... تابش ورودی کل	۲-۱۹
۵۷۶	..... کاهش نور در بالای سطح آب	۳-۱۹
۵۷۷	..... کاهش نور از طریق ستون آب	۴-۱۹

## فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۲ ساختار پایه WASP و سیستم‌های جنبشی..... ۸
- شکل ۲-۲ فهرست انتخاب فایل..... ۱۲
- شکل ۳-۲ تنظیمات کاربر..... ۱۳
- شکل ۴-۲ منوی پروژه WASP6..... ۱۴
- شکل ۵-۲ تعریف فایل پروژه..... ۱۶
- شکل ۶-۲ پارامتره کردن مجموعه داده‌ها..... ۱۷
- شکل ۷-۲ Bypass سیستم WASP6 و فاکتورهای مقیاس جهانی..... ۲۰
- شکل ۸-۲ تعریف قطعه..... ۲۲
- شکل ۹-۲ پارامترهای محیطی..... ۲۵
- شکل ۱۰-۲ بخش غلظت‌های اولیه..... ۲۶
- شکل ۱۱-۲ کسر اجزاء محلول..... ۲۷
- شکل ۱۲-۲ بخش فاکتور مقیاس پارامترها..... ۲۸
- شکل ۱۳-۲ فرم‌های وارد کردن پراکندگی..... ۲۹
- شکل ۱۴-۲ فرم ورود جریان..... ۳۲
- شکل ۱۵-۲ تعریف غلظت‌مرزی..... ۳۴
- شکل ۱۶-۲ صفحه تعریف بار فاضلاب..... ۳۵
- شکل ۱۷-۲ مقیاس بار فاضلاب و فاکتورهای تبدیل..... ۳۶
- شکل ۱۸-۲ صفحه‌نمایش تعریف گام زمانی مدل..... ۳۷
- شکل ۱۹-۲ تعریف فاصله زمانی چاپ WASP 6..... ۳۸
- شکل ۲۰-۲ تعریف تابع زمان محیطی WASP6..... ۳۹
- شکل ۲۱-۲ انتخاب گروه ثابت جنبشی..... ۴۰
- شکل ۲۲-۲ تعاریف ثابت جنبشی..... ۴۱
- شکل ۲۳-۲ گزینه‌ی Fill/Calculate برای محاسبه..... ۴۲
- شکل ۲۴-۲ گزینه‌ی نمودار سری زمانی..... ۴۳
- شکل ۲۵-۲ گزینه‌ی بزرگ‌نمایی نمودار..... ۴۴
- شکل ۲۶-۲ بررسی صحت مجموعه داده‌ها..... ۴۵
- شکل ۲۷-۲ بازیابی داده‌های مدل..... ۴۶

۴۷	.....	شکل ۲-۲۸ شبکه زمان اجرا WASP6
۵۲	.....	شکل ۳-۱۱ کادر گفت‌گویی فایل
۵۵	.....	شکل ۳-۲ شماتیک آنالیز فضایی
۵۷	.....	شکل ۳-۳ تعاریف بانک اطلاعاتی مدل
۶۰	.....	شکل ۳-۴ پیکربندی تجزیه و تحلیل فضایی (غیر GIS)
۶۱	.....	شکل ۳-۵ نمایش تجزیه و تحلیل فضایی GIS
۶۳	.....	شکل ۳-۶ انتخاب متغیر برای نمایش
۶۵	.....	شکل ۳-۷ پیکربندی طرح فضایی GIS
۶۷	.....	شکل ۳-۸ مثال نمودار
۷۰	.....	شکل ۳-۹ نمایش ویژگی منحنی نمودار
۷۱	.....	شکل ۳-۱۰ مشخصات نمودار X/Y
۷۲	.....	شکل ۳-۱۱ برچسب‌زدن دامنه نمودار
۷۳	.....	شکل ۳-۱۲ برچسب‌گذاری محور Y
۷۴	.....	شکل ۳-۱۳ برچسب‌گذاری محور ثانویه Y
۷۶	.....	شکل ۳-۱۴ انتخاب فایل ورودی
۸۱	.....	شکل ۳-۱۵ بزرگ‌نمایی محور x
۸۲	.....	شکل ۳-۱۶ بزرگ‌نمایی محور x
۸۳	.....	شکل ۳-۱۷ بزرگ‌نمایی محور y
۸۴	.....	شکل ۳-۱۸ محور بزرگ‌نمایی
۸۵	.....	شکل ۳-۱۹ یک نمونه از نمودار سیاه و سفید
۸۷	.....	شکل ۳-۲۰ ایجاد بانک اطلاعات داده مشاهده شده
۹۰	.....	شکل ۳-۲۱ نمونه داده‌های جدولی از نمودار
۹۲	.....	شکل ۳-۲۲ نمونه محاسبه منحنی
۹۳	.....	شکل ۳-۲۳ ساخته شده در توابع محاسبه منحنی
۱۰۱	.....	شکل ۴-۱ سیستم مختصات برای معادله تعادل جرم
۱۰۳	.....	شکل ۴-۲ طرح تقسیم‌بندی مدل
۱۰۵	.....	شکل ۴-۳ مقیاس‌های مکانی مورد استفاده در تجزیه و تحلیل دریاچه انتاریو

- شکل ۴-۴ توزیع فروانی مقادیر مشاهده شده و محاسبه شده از یک متغیر کیفی..... ۱۰۶
- شکل ۱-۵ پیوند هیدرودینامیکی لینک-گره با WASP..... ۱۱۴
- شکل ۱-۶ رژیم‌های انتقال رسوب (Graf 1971)..... ۱۴۰
- شکل ۲-۶ دفن رسوبات WASP..... ۱۴۴
- شکل ۱-۷ تعامل متغیر کیفیت EUTRO..... ۱۵۱
- شکل ۲-۷ معادلات تعادل اکسیژن..... ۱۵۲
- شکل ۳-۷ منابع BOD در محیط‌های آبی..... ۱۵۷
- شکل ۴-۷ معادلات تعادل اکسیژن لایه اعماق..... ۱۶۲
- شکل ۵-۷ استریتر-فلیس اصلاح شده..... ۱۶۹
- شکل ۶-۷ تعادل خطی DO..... ۱۷۳
- شکل ۱-۸ متغیرهای کیفیت EUTRO..... ۱۸۳
- شکل ۲-۸ فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون‌ها..... ۱۸۵
- شکل ۳-۸ اثرات محدودیت موادمغذی بر نرخ رشد..... ۱۹۴
- شکل ۴-۸ معادلات فسفر..... ۲۰۰
- شکل ۵-۸ معادلات چرخه نیتروژن..... ۲۰۵
- شکل ۶-۸ ترجیح آمونیاک..... ۲۰۷
- شکل ۷-۸ تبادل رسوب-آب..... ۲۱۱
- شکل ۸-۸ معادلات موادمغذی اعماق..... ۲۱۲
- شکل ۱-۱۲ غلظت ثبت شده دی‌اکسید کربن در جو مطابق رصدخانه ماونا لوی، هاوایی..... ۳۲۰
- شکل ۲-۱۲ متغیرهای کیفیت WASP برای محاسبه pH..... ۳۲۷
- شکل ۳-۱۲ عملکرد زمان برای فشار جزئی اتمسفر CO<sub>2</sub>..... ۳۲۸
- شکل ۴-۱۲ ثابت فشار نسبی اتمسفر برای CO<sub>2</sub>..... ۳۲۹
- شکل ۵-۱۲ متغیرهای خروجی WASP برای محاسبه pH..... ۳۳۰
- شکل ۱-۱۳ شبکه مدل با مسیرهای انتقال پراکنده..... ۳۳۶
- شکل ۲-۱۳ سطح مقطع هیدرولیکی کانال..... ۳۴۱
- شکل ۳-۱۳ طرح تعریف برای جریان حوضچه..... ۳۴۴
- شکل ۴-۱۳ نوار ابزار اصلی صفحه نمایش WASP، دکمه‌های ورودی داده..... ۳۵۲
- شکل ۵-۱۳ پارامتری کردن مجموعه داده‌ها..... ۳۵۸

شکل ۱۳-۶ صفحه‌نمایش تعریف بخش.....	۳۵۸
شکل ۱۳-۷ صفحه‌نمایش تعریف بخش WASP.....	۳۵۹
شکل ۱۳-۸ صفحه‌نمایش جریان‌ها.....	۳۶۲
شکل ۱۳-۹ مثال ورودی جریان WASP.....	۳۶۳
شکل ۱۳-۱۰ صفحه‌نمایش تغییرات.....	۳۶۸
شکل ۱۳-۱۱ بررسی اجمالی HYDROLINK.....	۳۷۸
شکل ۱۳-۱۲ مؤلفه‌های API.....	۳۷۹
شکل ۱۴-۱ رژیم‌های رسوب‌گذاری جریان.....	۴۱۹
شکل ۱۴-۲ فرسایش غیرچسبنده و تعلیق.....	۴۲۳
شکل ۱۵-۱ طبقه‌بندی تاکسونومیک گروه‌های عمده فیتوپلانکتونی در مقایسه با سایر گروه‌ها.....	۴۳۵
شکل ۱۶-۱ ساختار اصلی مدل دیاژنز.....	۴۵۷
شکل ۱۶-۲ گام زمانی زیر مدل SOD.....	۴۶۰
شکل ۱۶-۳ انتخاب مبنای پارامترهای ورودی کاربر.....	۴۶۱
شکل ۱۶-۴ انتخاب شرایط اولیه برای ذرات ماده‌ی آلی در لایه‌ی دیاژنز و قطعات کلاس G.....	۴۶۱
شکل ۱۶-۵ انتخاب شرایط اولیه با فرض حالت پایدار برای رسوب.....	۴۶۳
شکل ۱۶-۶ چارچوب مدل دیاژنز.....	۴۷۸
شکل ۱۷-۱ مدل تغذیه‌گرایی WASP8.....	۵۰۹
شکل ۱۷-۲ ساختار مدل دیاژنز رسوب WASP.....	۵۱۴
شکل ۱۷-۳ مثال‌هایی از گروه‌های تولیدکننده‌ی اولیه در پهنه‌های جزر و مدی، انواع زیستگاه‌های آب کم‌عمق و عمیق در خورها یافت می‌شوند (از سوتولا و همکاران ۲۰۱۱).....	۵۱۵
شکل ۱۷-۴ متغیرها و فرآیندهای حالت در مدل اصلاح‌شده.....	۵۱۶
شکل ۱۷-۵ تعریف تاثیر ارتفاع سایبان بر محاسبه نور.....	۵۱۶
شکل ۱۸-۱ پارامترهای تقسیم‌بندی برای ماژول دما.....	۵۲۲
شکل ۱۸-۲ ثابت‌های جهانی برای ماژول دما.....	۵۱۶
شکل ۱۸-۳ ثابت‌های محاسبه دما.....	۵۱۶
شکل ۱۸-۴ توابع زمان جنبشی برای ماژول دما.....	۵۱۶





فهرست جدول‌ها

جدول ۳-۱-	اطلاعات مربوط به متغیرها و کاربردهای از پیش تعریف شده.....	۹۴
جدول ۵-۱-	متغیرهای حالت در مدل شیمیایی آلی (TOXI).....	۱۱۲
جدول ۵-۲-	مقایسه توان هیدرولیک.....	۱۱۷
جدول ۵-۳-	مقدار پراکندگی عددی (مترمربع در ثانیه).....	۱۲۸
جدول ۶-۱-	سرعت ته‌نشینی استوک (m/day) در $20^{\circ}\text{C}$ .....	۱۳۸
جدول ۷-۱-	شرایط واکنشی CBOD و DO.....	۱۵۳
جدول ۷-۲-	CBOD لایه اعماق و شرایط واکنش DO.....	۱۶۳
جدول ۷-۳-	خلاصه متغیرهای EUTRO مورد استفاده در تعادل DO.....	۱۶۴
جدول ۸-۱-	نمونه اشعه خورشیدی.....	۱۸۹
جدول ۸-۲-	تخمین از تأثیر غلظت موادمغذی بر کربن/کلروفیل a.....	۱۹۲
جدول ۸-۳-	شرایط رشد خالص فیتو پلانکتون‌ها.....	۱۹۷
جدول ۸-۴-	نسبت کربن به نیتروژن، نسبت کربن به فسفر.....	۱۹۹
جدول ۸-۵-	اصطلاحات واکنش فسفر.....	۲۰۰
جدول ۸-۶-	شرایط واکنش نیتروژن.....	۲۰۵
جدول ۸-۷-	ضرایب واکنش موادمغذی اعماق.....	۲۱۳
جدول ۸-۸-	خلاصه متغیرهای EUTRO.....	۲۱۷
جدول ۹-۱-	مروری بر سموم ساده WASP6.....	۲۳۳
جدول ۹-۲-	نمادهای مرتبط با تمرکز استفاده شده در معادلات ریاضی.....	۲۳۴
جدول ۹-۳-	نرخ تبدیل مرتبه‌ی اول ساده.....	۲۴۲
جدول ۹-۴-	ضریب تقسیم‌بندی ثابت.....	۲۴۳
جدول ۹-۵-	ضرایب تقسیم ثابت برای مواد شیمیایی.....	۲۴۴
جدول ۱۰-۱-	مروری بر مواد شیمیایی آلی WASP.....	۲۴۹
جدول ۱۰-۲-	نمونه‌ای از پارامترهایی که برای مدل توصیف شده‌اند.....	۲۵۰
جدول ۱۰-۳-	تعریف نمادهای به کار رفته در مدل به همراه واحدهای آنان.....	۲۵۳
جدول ۱۰-۴-	توصیف عبارات به کار رفته در معادلات.....	۲۵۷
جدول ۱۰-۵-	ثابت‌های مختلف متغیرهای ورودی.....	۲۵۸
جدول ۱۰-۶-	دامنه و توصیف داده‌های زیر مدل TOXI.....	۲۶۴

۲۶۵.....	جدول ۷-۱۰ مقادیر ثابت‌های مختلف برای گزینه‌های متغیر.....
۲۷۴.....	جدول ۱۰-۸ مشخصات داده‌های فراریت TOXI.....
۲۷۵.....	جدول ۱۰-۹- ثابت‌های موردنیاز برای گزینه‌های فراریت.....
۲۸۱.....	جدول ۱۰-۱۰- مشخصات داده‌های هیدرولیز TOXI.....
۲۸۲.....	جدول ۱۰-۱۱ ثابت‌های هیدرولیز اسیدی.....
۲۸۶.....	جدول ۱۰-۱۲ ضرایب کاهش نور برای طول موج‌های کمتر از ۳۷۰.....
۲۸۷.....	جدول ۱۰-۱۳ ضرایب کاهش نور برای طول موج‌های بیشتر از ۳۷۰.....
۲۹۰.....	جدول ۱۰-۱۴ مشخصات داده‌های فوتولیز TOXI.....
۲۹۲.....	جدول ۱۰-۱۵ ثابت‌های مختلف برای ملکول خنثی.....
۲۹۷.....	جدول ۱۰-۱۶ ویژگی‌های داده‌های اکسیداسیون TOXI.....
۲۹۷.....	جدول ۱۰-۱۷ ثابت‌های مختلف برای مولکول‌های خنثی.....
۳۰۰.....	جدول ۱۰-۱۸- ویژگی‌های داده‌های تجزیه بیولوژیکی TOXI.....
۳۰۱.....	جدول ۱۰-۱۹ ثابت‌های مختلف سرعت تجزیه‌ی زیستی.....
۳۰۲.....	جدول ۱۰-۲۰ غلظت‌های باکتری هر بخش.....
۳۰۵.....	جدول ۱۰-۲۱ داده‌های ورودی.....
۳۲۱.....	جدول ۱۲-۱- فرآیندهایی که اثر قلیائی دارند.....
۳۳۷.....	جدول ۱۳-۱- گزینه‌های انتقال جریان WASP8.....
۳۴۰.....	جدول ۱۳-۲- توان هیدرولیکی برای شکل ۲.....
۳۴۱.....	جدول ۱۳-۳- مقایسه توان‌های تجربی هیدرولیکی.....
۴۱۵.....	جدول ۱۴-۱- طبقه‌بندی اندازه ذرات.....
۴۳۷.....	جدول ۱۵-۱- متغیرهای حالت MPM.....
۴۳۸.....	جدول ۱۵-۲- ثابت‌های استوکیومتری MPM برای گروه فیتوپلانکتون $i (i=1-3)$ .....
۴۴۱.....	جدول ۱۵-۳- ثابت دما MPM برای گروه فیتوپلانکتون $i (i=1-3)$ .....
۴۴۰.....	جدول ۱۵-۴- ثابت نور MPM.....
۴۴۳.....	جدول ۱۵-۵- ثابت مربوط به رشد موادمغذی MPM برای گروه فیتوپلانکتون $i (i=1-3)$ .....
۴۴۴.....	جدول ۱۵-۶- ثابت‌های روند تلفات برای فیتوپلانکتون گروه $i$ .....
۴۴۸.....	جدول ۱۵-۷- ثابت‌های سیلیس MPM.....
۴۴۸.....	جدول ۱۵-۸- پارامترهای مدل MPM.....

جدول ۱۵-۹- توابع زمان مدل MPM.....	۴۴۹
جدول ۱۶-۱- انتخاب شرایط اولیه با فرض حالت پایدار برای رسوب (توضیح تصویر بالا).....	۴۶۴
جدول ۱۶-۲- ثابت‌های عمومی و خواص دیاژنز رسوب.....	۴۷۰
جدول ۱۶-۳- ضرایب مدل دیاژنز و ثابت‌های مربوط به اختلاط و انتقال.....	۴۷۰
جدول ۱۶-۴- ضرایب مدل دیاژنزی و ثابت‌های مربوط به تفکیک موادالی در ستون آب (برای جریان به رسوبات).....	۴۷۱
جدول ۱۶-۵- ضرایب مدل دیاژنز و ثابت‌های مربوط به دیاژنز ماده آلی.....	۴۷۱
جدول ۱۶-۶- ضرایب مدل دیاژنزی و ثابت‌های مربوط به واکنش‌ها.....	۴۷۲
جدول ۱۶-۷- خروجی رسوب دیاژنز.....	۴۷۴
جدول ۱۷-۱- فرآیندهای موجود در WASP که بر قلبیائیت تأثیر می‌گذارد.....	۵۱۲
جدول ۱۷-۲- گزینه‌ی مشخصه‌ی ماکرو جلبک.....	۵۱۶
جدول ۱۷-۳- گزینه‌های انتقال و آبستگی.....	۵۱۸
جدول ۱۷-۴- ثابت‌ها برای استوکیومتری.....	۵۱۹
جدول ۱۷-۵- ثابت‌های مدل برای رشد.....	۵۲۲
جدول ۱۷-۶- ثابت‌های مدل مربوط به دما.....	۵۲۳
جدول ۱۷-۷- ثابت‌های مربوط به موادمغذی.....	۵۲۴
جدول ۱۷-۸- ثابت‌های نور.....	۵۲۷
جدول ۱۷-۹- ثابت‌های ظرفیت حمل.....	۵۲۹
جدول ۱۷-۱۰- ثابت‌های اثر شوری.....	۵۳۰
جدول ۱۷-۱۱- ثابت‌های مرتبط با مرگومیر و دفع.....	۵۳۱
جدول ۱۷-۱۲- ثابت‌های مرتبط با دفع موادمغذی داخلی.....	۵۳۵
جدول ۱۷-۱۳- اولویت آمونیاک و ثابت‌های بازیافت.....	۵۳۷
جدول ۱۷-۱۴- خلاصه ثابت‌های جنبشی ماکرو جلبک (ادامه).....	۵۳۸
جدول ۱۷-۱۵- خلاصه ثابت‌های جنبشی ماکرو جلبک (ادامه).....	۵۴۰
جدول ۱۷-۱۶- مقادیر خروجی مدل چند جلبکی WASP8 (ادامه).....	۵۴۱
جدول ۱۸-۱- توضیحات پارامترهای بخش برای ماژول دما.....	۵۶۳
جدول ۱۸-۲- ثابت‌های جهانی برای ماژول گرمایی WASP8.....	۵۶۵

- جدول ۱۸-۳- ثابت‌های جنبشی دما برای ماژول گرما WASP8..... ۵۶۶
- جدول ۱۸-۴- توابع زمان محیطی برای ماژول دما..... ۵۶۸
- جدول ۱۹-۱- تقسیم تشعشعات خورشیدی کل به کلاس‌های موجی..... ۵۷۲
- جدول ۱۹-۲- اشعه ماورای بنفش و طولموج مرئی، با کسری عرض جغرافیایی..... ۵۷۳
- جدول ۱۹-۳- ضرایب میرایی نور توسط باند موج..... ۵۷۷



# فصل اول

## پیشگفتار

### ۱-۱- پیشگفتار

WASP 6 یک نسخه ویندوز پیشرفته از برنامه شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب WASP (USEPA) است. WASP 6 برای کمک به مدل‌سازان در اجرای WASP ایجاد شده‌است؛ و دارای ویژگی‌هایی از جمله پیش‌پردازنده، پردازش‌گر سریع داده و پس‌پردازنده گرافیکی است که مدل‌ساز را قادر می‌سازد، WASP را سریع‌تر و آسان‌تر اجرا کند و نتایج مدل را هم به صورت عددی و هم گرافیکی ارزیابی کند. با استفاده از WASP 6، مدل ده‌برابر سریع‌تر از نسخه‌ی قبلی WASP USEPA DOS اجرا می‌شود. با این وجود، WASP 6 از همان الگوریتم‌های نسخه WASP DOS برای حل مسائل کیفیت آب استفاده می‌کند.

WASP 6 شامل (۱) یک رابط کاربرپسند مبتنی بر ویندوز، (۲) پیش‌پردازنده برای کمک به مدل‌سازان در پردازش داده‌ها به یک فرمت قابل‌استفاده در WASP، (۳) پردازشگر سریع مدل WASP با سرعت بالا، تغذیه‌گرایی و پردازنده‌های مدل شیمیایی آلی و (۴) یک پس‌پردازنده گرافیکی برای مشاهده نتایج WASP و مقایسه‌ی آن با داده‌های میدانی مشاهده‌شده می‌باشد.

به دلیل ساختار مورداستفاده در طراحی WASP 6، توسعه‌ی سایر ماژول‌های جنبشی WASP نسبتاً آسان خواهد بود. در حال حاضر، در حال توسعه‌ی یک مدل تغذیه‌گرایی پیشرفته هستیم که شامل متغیرهای کیفیت زیر نیز می‌شود:

۲ گروه جلبک اضافی، شوری، تعادل کامل گرما، کلیرم‌ها، گروه دوم BOD، مدل رسوب‌زایی.



## ۲-۱- تقدیر و تشکر

سازمان حفاظت محیط‌زیست آمریکا مایل است تا از کمک‌های سخاوتمندانه‌ای که شرکت ASci با انتشار نسخه ویندوز WASP به EPA و عموم مردم انجام داده‌است، قدردانی کند. همکاری این مجموعه و تلاش برای ارائه‌ی توانایی‌هایشان قابل‌تحسین است و کمک بزرگی به منافع زیست‌محیطی می‌باشد. علاوه‌بر این، نویسندگان از آقای جیم گرینفیلد، (منطقه 4 EPA) به دلیل حمایت و تلاش در توسعه و پیشرفت WASP 6 تقدیر می‌نمایند. هم‌چنین از آقای محمد لاهلومو نیز به‌خاطر حمایت و تلاش‌هایشان در معرفی WASP 6 به حوزه عمومی تشکر و قدردانی می‌شود.



## فصل دوم

### مقدمه

برنامه شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب (WASP 6)، تکمیل‌کننده WASP اصلی (دی‌تورو و همکاران، ۱۹۸۳؛ کانولی و وینفیلد، ۱۹۸۴؛ امروز، R.B. و همکاران، ۱۹۸۸) است. مدل WASP 6، این امکان را به کاربران می‌دهد تا تغییرات کیفیت آب نسبت به پدیده‌های طبیعی و آلودگی‌های ناشی از فعالیت‌های انسانی را برای اتخاذ تصمیم‌های مختلف در مورد مدیریت آلودگی، تفسیر و پیش‌بینی نمایند. WASP 6 یک برنامه مدل‌سازی محفظه‌ی پویا برای سیستم‌های آبی، از جمله ستون آب و لایه بنتیک است. فرآیندهای متغیر زمانی شامل؛ جابه‌جایی، پراکندگی، بارگذاری جرم (پراکنده و نقطه‌ای) و تبادل مرز در برنامه اصلی نشان داده شده‌است.

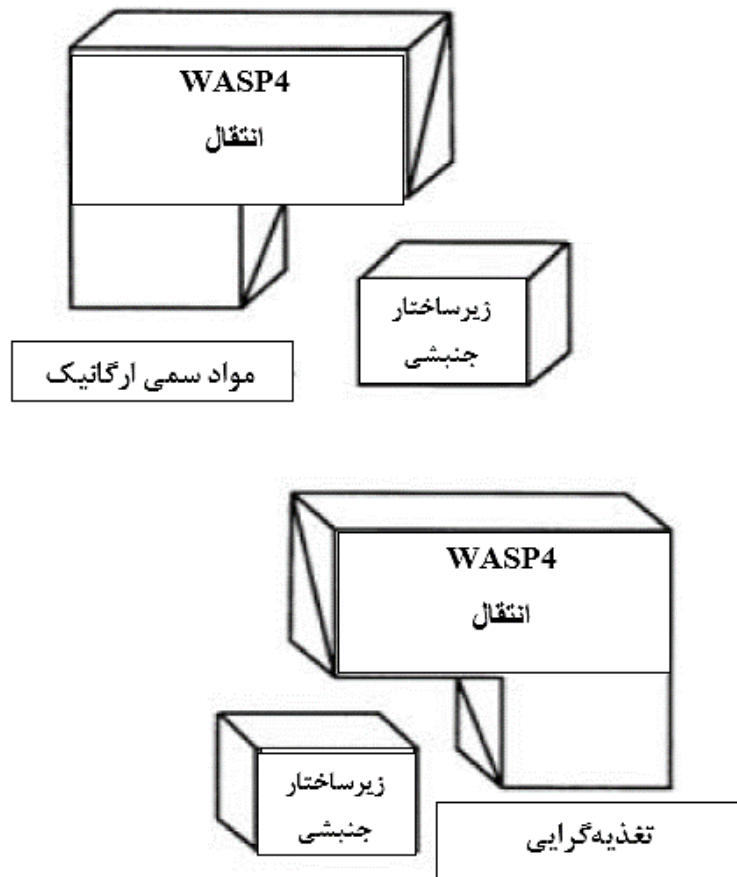
فرآیندهای کیفیت آب که در زیرروال‌های جنبشی تعریف شده نمایش داده می‌شوند؛ یا از یک منبع داده‌ای برنامه فراخوان می‌شوند و یا توسط کاربر وارد مدل می‌گردند. WASP به‌گونه‌ای طراحی شده‌است که اجازه جایگزینی آسان زیرروال‌های جنبشی را برای کل مجموعه فراهم می‌کند، تا مدل‌های ویژه برای مسئله تشکیل شود. WASP 6 دارای دو مدل TOXI برای سموم و EUTRO برای کیفیت معمولی آب ارائه شده‌است. علاوه بر طرح‌های اجرایی بی‌شماری که از WASP استفاده - شده‌است (تورو و همکاران، ۱۹۸۳) از نسخه‌های قبلی آن برای بررسی سمیت تغذیه‌گرایی خلیج تمپا، بارگذاری فسفر در دریاچه‌ی اوکیوبوبی، تغذیه‌گرایی در مدخل و رودخانه‌ی Neuse، تغذیه‌گرایی و آلودگی PCB از دریاچه‌های بزرگ (Thomann 1979، ۱۹۷۵؛ Thomann et al.، ۱۹۷۶؛ Thomann et al.) (دی‌تورو و کانولی، ۱۹۸۰)، تغذیه‌گرایی از رودخانه‌ی Potomac (تومن و فیتزپاتریک، ۱۹۸۲)، آلودگی کپون مدخل رودخانه جیمز (اوکانر و همکاران، ۱۹۸۳)، آلودگی آلی سبک در مدخل رودخانه دلاور (امروز، ۱۹۸۷) و آلودگی فلزات سنگین رودخانه‌ی دیپ کارولینای شمالی (JRB، ۱۹۸۴) استفاده شده‌است.

انعطاف‌پذیری این مدل در شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب منحصر به فرد است. WASP 6 اجازه‌ی طراحی مدل‌های یک، دو و سه‌بعدی را به مدل‌ساز می‌دهد و امکان تعیین ضرایب تبدیل متغیر- زمان، جریان‌های پراکنده، ورودی فاضلاب و شرایط مرزی کیفیت آب را میسر می‌سازد. از طرف دیگر استفاده از ساختارهای موجود بدون نیاز به نوشتن یا بازنویسی بخش‌های بزرگی از کد کامپیوتری را نیز فراهم می‌آورد. دو مدل کاربردی TOXI و EUTRO در WASP 6، مدل کلی و عمومی هستند. علاوه بر این، کاربران ممکن است ساختارهای جنبشی یا فعال جدیدی ایجاد کنند. با این حال، این امر نیاز به سنجش بیش‌تری از نظر کارشناسی، بینش و تجربه برنامه‌نویسی از سوی مدل‌ساز دارد. زیرروال جنبشی در WASP که با WASPB نشان داده می‌شود، که بخشی مجزا از کد می‌باشد، با زیرروال‌های خود در صورت تمایل نگهداشته می‌شود.

## ۲-۱- بررسی اجمالی سیستم مدل سازی WASP 6

سیستم WASP 6 از دو برنامه رایانه‌ای مستقل، 5 DYNHYD و WASP 6 تشکیل شده است که می‌توانند به صورت جداگانه و یا هم‌زمان اجرا شوند. برنامه هیدرودینامیک 5 DYNHYD؛ حرکت آب و برنامه کیفیت آب WASP 6، حرکت و اثر متقابل آلاینده‌ها در داخل آب را شبیه‌سازی می‌کند. در هنگام اجرای 5 DYNHYD با WASP 6، سایر برنامه‌های هیدرودینامیکی نیز که با WASP پیوند داده دارند، اجرا می‌گردند. RIVMOD جریان ناپایدار در رودخانه‌های یک‌بعدی را کنترل می‌کند، درحالی‌که SED 3D جریان ناپایدار و سه‌بعدی در دریاچه‌ها و مصب‌ها را کنترل می‌کند (برای در دسترس بودن با CEAM تماس بگیرید).

WASP 6 با دو مدل فرعی جنبشی ارائه می‌شود تا دو کلاس اصلی مشکلات کیفیت آب (آلودگی معمولی (شامل اکسیژن محلول، BOD، مواد مغذی و تغذیه‌گرایی) و آلودگی سمی (شامل مواد شیمیایی آلی، فلزات و رسوبات) را شبیه‌سازی کند. پیوند هر دو مدل فرعی با برنامه WASP 6 به ترتیب از طریق مدل‌های EUTRO و TOXI انجام می‌شود. این امر در شکل (۲-۱) به وسیله بلوک‌هایی که باید در مدل ناقص WASP 6 جایگزین شوند، نشان داده شده است. بلوک ردیاب که یک زیرمدل فرعی ساختگی محسوب می‌شود، می‌تواند برای موادی استفاده شود که اثر متقابل جنبشی در مدل ایجاد نکند. در بیش‌تر موارد، ردیاب‌های استفاده‌شده در TOXI با مشخصه مواد فاسدنشدنی هستند.



شکل ۱-۲ ساختار پایه WASP و سیستم‌های جنبشی

اصل اساسی هیدرودینامیک و برنامه کیفیت آب، اصل بقا جرم است. حجم آب و مواد تشکیل دهنده آن با استفاده از یک سری معادلات تعادل جرم، با در نظر گرفتن زمان و مکان مورد بررسی قرار گرفته، ردیابی و محاسبه می‌شوند. برنامه هیدرودینامیک اصل پایستگی زمان و جرم را در نظر می‌گیرد. WASP نسخه ۶ یک طراحی مجدد کامل را در عملکرد، ظاهر و ساختار برنامه شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب (WASP) نشان می‌دهد. WASP از کد منبع مدل EPA به عنوان موتور اصلی مدل استفاده می‌کند؛ این مدل به کمک یک پیش‌پردازنده مبتنی بر ویندوز که در چارچوب مدل‌سازی گنجانده شده است، توسعه یافت. با این تغییرات هیچ تفاوتی بین مدل و پیش‌پردازنده وجود ندارد. درحقیقت، مدل تغذیه‌گرایی یک منبع داده‌های پویا (DLL) است که توسط پیش‌پردازنده اجرا می‌شود. با وجود داده‌های

موجود، WASP دیگر به فایل‌های ورودی برای اجرای هر بخش نیاز ندارد و داده‌های موردنیاز برای اجرای مدل با استفاده از تبادل داده‌های پویا به مدل DLL منتقل می‌شود. روند خواندن مجموعه داده‌های ورودی مدل حذف شده‌اند؛ این کار برای ایجاد ابزاری کارآمدتر برای ذخیره‌سازی مجموعه داده ورودی مدل و رفع نگرانی درمورد کلیه مسائل مربوط به چارچوب مدل مبتنی بر DOS انجام شده‌است.

## ۲-۲- نصب و راه‌اندازی

نصب WASP 6 درست مانند نصب هر نرم‌افزار دیگری در ویندوز انجام می‌شود. برای شروع نصب: CD WASP 6 را در درایو CD-ROM خود قرار دهید. از منوی Windows شروع/ اجرا را انتخاب کنید. d:/ setup را وارد کنید (اگر CD-ROM شما درایو D را راه‌اندازی نمی‌کند، به جای آن حرف مناسب را تایپ کنید). انتخاب OK، برای تکمیل نصب، دستورالعمل‌های روی صفحه را دنبال کنید.

## ۲-۳- پشتیبانی فنی

## ۲-۴- تعریف نوار ابزار

هنگامی که کاربر برای اولین بار WASP 6 را بارگذاری می‌کند، نوار ابزار نمایش داده می‌شود. این نوار ابزار به کاربر اجازه می‌دهد تا گزینه‌ها و فرم‌های مختلف ورود داده برنامه را بررسی کند. بسته به تنظیمات موجود در اولویت‌های برگزیده کاربر (شکل ۳-۳) تمام یا برخی از نمادهای نوار ابزار قابل مشاهده هستند. اگر نماد نوار ابزار قابل مشاهده باشد، اما رنگی نباشد، این نشان می‌دهد که عملکرد هنوز در دسترس نیست. این به‌طور معمول به این معناست که برخی از پیش‌نیازها هنوز تهیه نشده‌است.

این نماد به برنامه دستور می‌دهد تا یک فایل جدید را آغاز کند.



این نماد امکان بازیابی فایل ورودی مدل یا فایل پروژه‌ای که قبلاً ایجاد شده را می‌دهد.



این نماد باعث ذخیره فایل فعال در دیسک می‌شود. توجه داشته باشید که Save-as از ساختار



File menu موجود است.

این نماد آیکن‌های تعیین‌کننده ورودی را روشن/خاموش می‌کند.



این نماد مدل را بر اساس فایل ورودی مناسب بارگیری شده اجرا می‌کند.



این نماد فقط در صورت فعال بودن مدل موجود است. کاربر می‌تواند با فشاردادن این نماد شبیه‌سازی



مدل را متوقف کند.

توجه: ممکن است چند ساعت طول بکشد تا مدل متوقف شود.

این نماد پس‌پردازنده گرافیکی را بارگیری می‌کند. اگر کاربر دارای یک پروژه ورودی یا فایل



ورودی مدل باشد، این اطلاعات به پس‌پردازنده ارسال می‌شود.

وارد کردن پارامترهای مدل،



صفحه تعریف گام زمانی مدل،



فاصله زمانی شبیه‌سازی مدل،



صفحه تعریف مقطع مدل،



تعریف سیستم مدل،




فاکتورهای مقیاس پارامتر قطعه،





تعریف ثابت جنبشی مدل،







 تعریف سری زمانی بار فاضلاب،

 تعریف سری زمانی محیطی،

 ورود داده‌های پراکندگی،

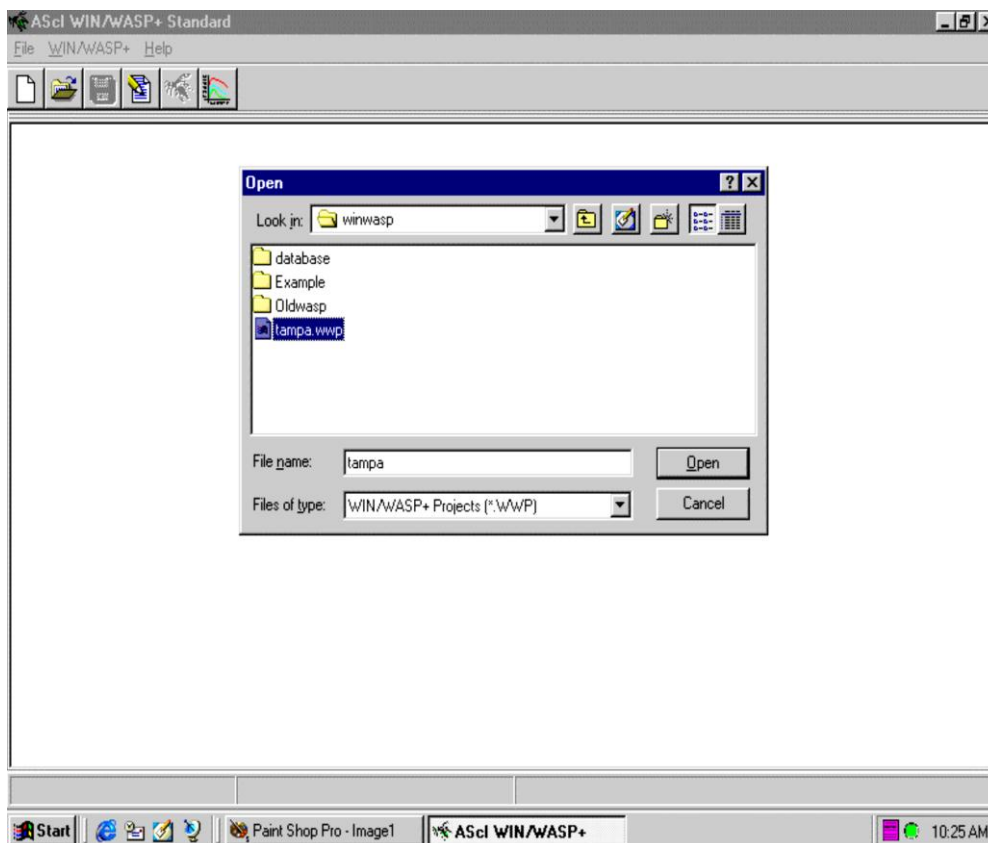
 ورود داده‌های جریان،

 سری زمانی شرایط مرزی،

 بررسی میزان صحت داده‌های ورودی،

## ۲-۵- منوی فایل

از آن جا که WASP، روش‌های قبل که در آن‌ها داده‌های ورودی مدل ذخیره می‌شوند، را تغییر داده است، ممکن است کاربر، مجبور به وارد کردن مجموعه داده‌های قدیمی در ساختار جدید باشد. فایل‌های ورودی نسخه قدیمی WASP دارای یک پسوند INP بودند، که مخفف فایل ورودی است. فایل‌های ورودی سبک قدیمی فایل‌هایی با فرمت ASCII بودند که می‌توانستند توسط اکثر پردازشگرهای متنی و ویرایشگرهای متن برنامه خوانده شوند. WASP هنوز داده‌های ورودی مدل را در فایل‌های مجزا ذخیره می‌کند، اما اکنون پرونده‌های ورودی WASP دارای پسوند WIF می‌باشند. فایل ورودی سبک جدید باینری است که امکان ذخیره و بازیابی سریع اطلاعات را فراهم می‌کند و پیش‌پردازنده تنها می‌تواند این فایل را به شکلی معنادار مشاهده کند. WASP 6 هم‌چنین از فرمت فایل پروژه پشتیبانی می‌کند که در آن کاربر می‌تواند سایر فایل‌های مرتبط WASP 6 را تهیه کند. فایل‌های پروژه از آیم منوی پروژه ویرایش می‌شوند.



شکل ۲-۲ فهرست انتخاب فایل

### ۲-۵-۱- وارد کردن فایل‌های ورودی نسخه قدیمی WASP

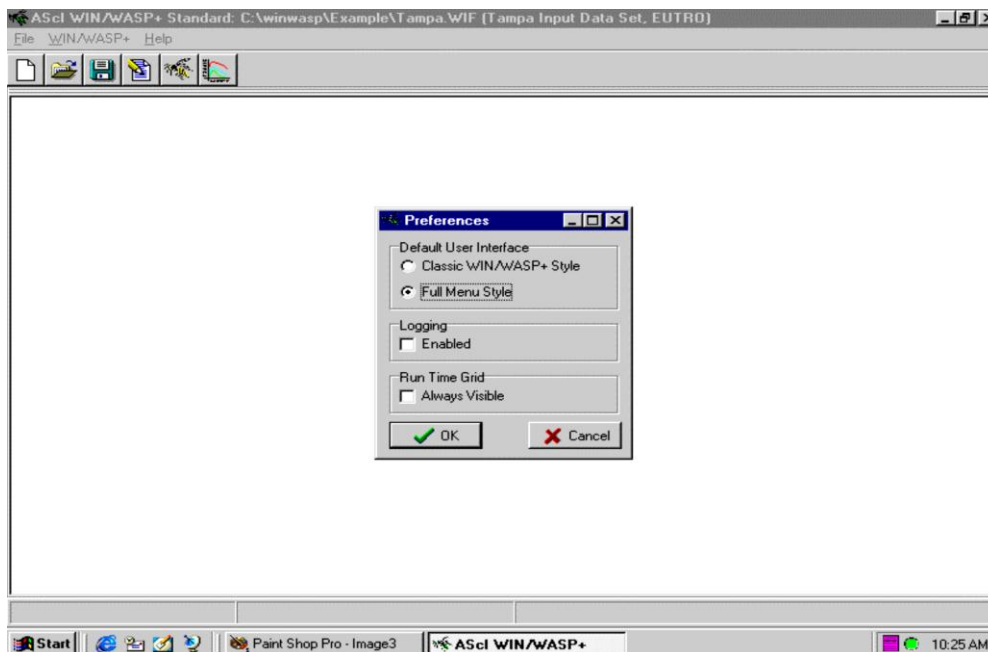
اگر نسخه قبلی فایل‌های ورودی WASP را دارید، می‌توانید آن‌ها را در ساختار جدید فایل وارد کنید. برای این که یک فایل قدیمی با موفقیت در ساختار جدید وارد شود، باید یک فایل ورودی معتبر WASP باشد (نسخه‌ای که توسط نسخه DOS WASP خوانده می‌شود و خروجی منطقی داده‌است). اگر فایلی که قصد وارد کردن آن را دارید، ناقص باشد یا توسط نسخه DOS WASP به‌طور موفقیت‌آمیز خوانده نشود، ممکن است وارد کردن فایل تنها تا حدودی موفقیت‌آمیز باشد. برای وارد کردن فایل، کاربر باید فایل قدیمی را با پیش‌پردازنده باز کند؛ در این حالت وارد کردن داده‌ها در مدل آغاز می‌شود. با پیشرفت ورودی‌ها، کاربر توضیحات فعالیت‌ها را مشاهده می‌کند.

### ۲-۵-۲- ارسال فایل‌های ورودی نسخه قدیمی WASP

WASP 6 می‌تواند یک فرمت WIF را با فرمت فایل نسخه قبلی WASP ارسال کند. این کار برای به اشتراک‌گذاری فایل‌های ورودی با افراد دیگری که از WASP 6 استفاده نمی‌کنند، مفید خواهد بود. عملکرد Export از فهرست فایل در دسترس است. از شما خواسته می‌شود نامی را برای فایل خروجی ایجاد کنید.

### ۲-۵-۳- تنظیمات برگزیده کاربر

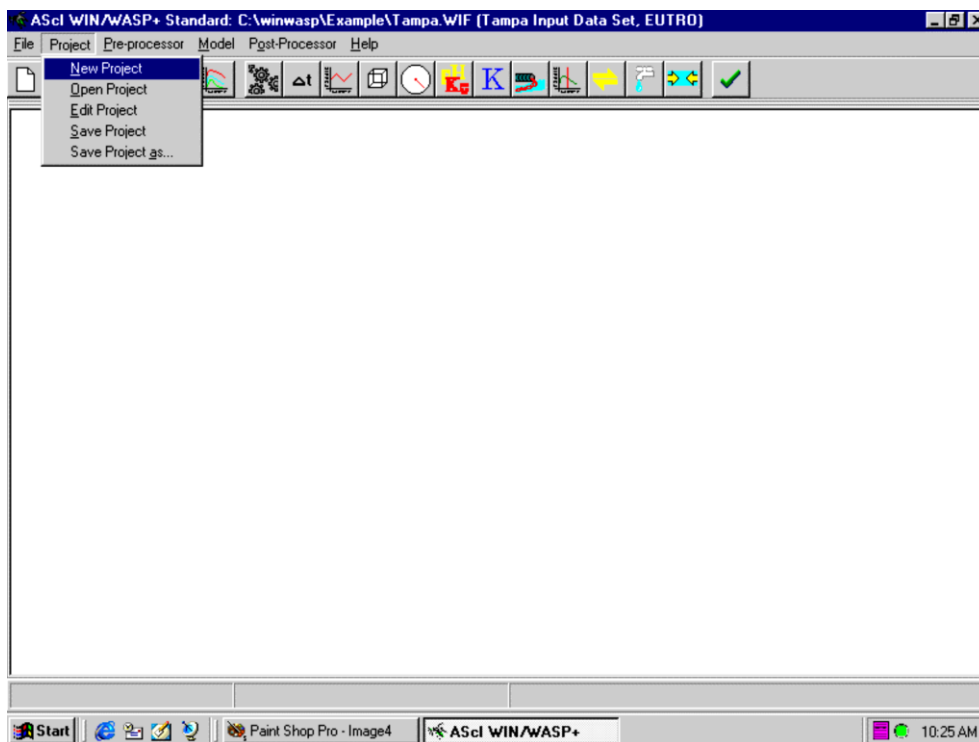
کاربر توانایی تنظیم چندین گزینه در WASP 6 را دارد. اولین گزینه این است که آیا یک بخش از نوار ابزار نمایش داده شود، یا نوار ابزار به صورت کامل. کاربر همچنین توانایی فعال کردن برقراری ارتباط بین زیربخش‌ها را دارد. این گزینه تنها به منظور رفع اشکال استفاده می‌شود. تابع برقراری ارتباط (logging) امکان پیوند بین WASP 6 و منبع داده‌های مدل (DLL) را ایجاد می‌کند. گزینه‌ی آخر امکان مشاهده زمان‌بندی اجرای مدل را به کاربر می‌دهد و مشخص می‌کند که مدل در حال اجرا است یا خیر. این روش، روش مناسبی برای بررسی مقادیر نهایی پیش‌بینی شده توسط مدل (ها) است.



شکل ۳-۲ تنظیمات کاربر

## ۶-۲- فایل‌های پروژه

کاربر می‌تواند مجموعه داده‌های ورودی WASP را بدون استفاده از گزینه‌ی فایل پروژه، ایجاد کند. فایل پروژه این امکان را به کاربر می‌دهد تا تمام فایل‌هایی را که برای یک فایل ورودی/خروجی معین مشخص شده‌اند، در یک مکان جمع‌آوری کند. کاربر می‌تواند با انتخاب New Project از منو Project، یک فایل پروژه ایجاد کند.



شکل ۲-۴ منوی پروژه WASP 6

سه نوع فایل وجود دارد که می‌توانند به منوی پروژه اضافه شوند: (۱) WIF- فایل‌های ورودی WASP 6، (۲) DB- فایل‌های پایگاه داده شامل داده‌های مشاهده شده و (۳) SHP- فایل‌های شکل ArcInfo/ARC. پس از ایجاد یک پروژه، در صورت لزوم کاربر می‌تواند آن را اصلاح و یا تغییر دهد. وقتی کاربر یک فایل پروژه را باز می‌کند، فایل WIF توسط WASP 6 بارگذاری می‌شود. هنگامی که پس پردازنده فایل نتیجه مرتبط با WIF را بارگذاری می‌کند، هر فایل DB یا SHP به‌طور خودکار خوانده می‌شود.

**۲-۶-۱- جدید**

آیتم New Project یک فایل پروژه جدید ایجاد می‌کند. کاربر می‌تواند تعداد زیادی از سه نوع فایل پذیرفته‌شده در بالا را به فایل پروژه اضافه کند. پس از ایجاد فایل و اضافه کردن فایل‌ها، کاربر باید از تابع save برای ذخیره فایل پروژه به دیسک استفاده کند.

**۲-۶-۲- باز کردن**

این آیتم از منو به کاربر اجازه می‌دهد تا یک فایل پروژه که قبلاً ایجاد شده را باز کند. در صفحه‌ای که باز می‌شود، یک کادر استاندارد به کاربر داده می‌شود. توجه داشته باشید که فایل‌های پروژه دارای پسوند WWP هستند.

**۲-۶-۳- ویرایش**

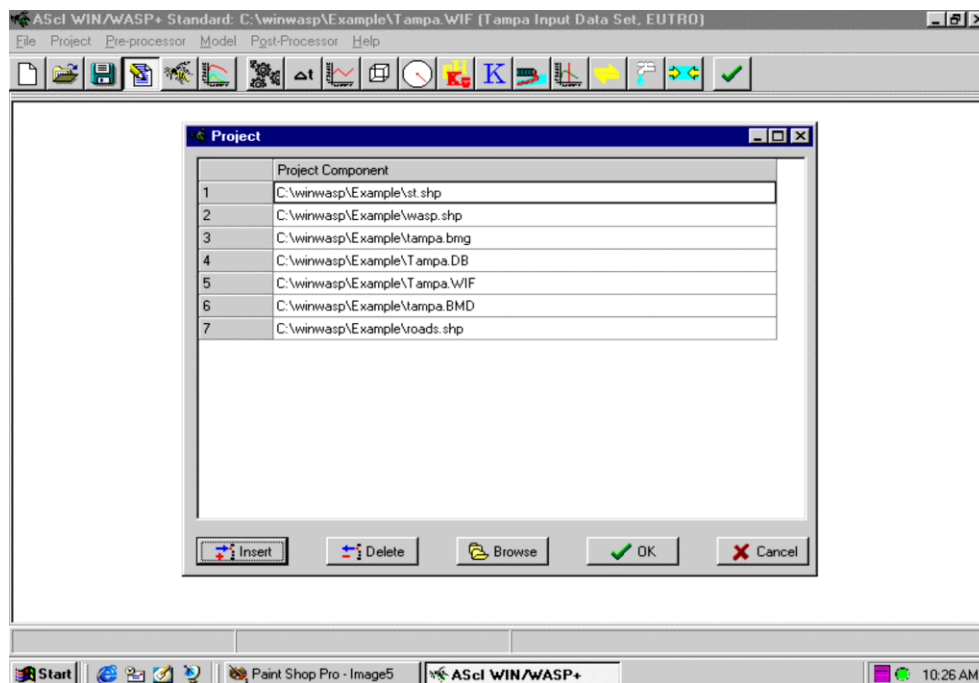
آیتم edit این امکان را به کاربر می‌دهد تا محتوای فایل پروژه باز شده را اصلاح کند. کاربران می‌توانند فایل‌ها را حذف/ به اضافه کنند.

**۲-۶-۴- ذخیره**

آیتم Save اطلاعات فایل پروژه را روی دیسک می‌نویسد. زمانی که این گزینه انتخاب می‌شود فایل بدون دخالت کاربر نوشته می‌شود.

**۲-۶-۵- ذخیره در**

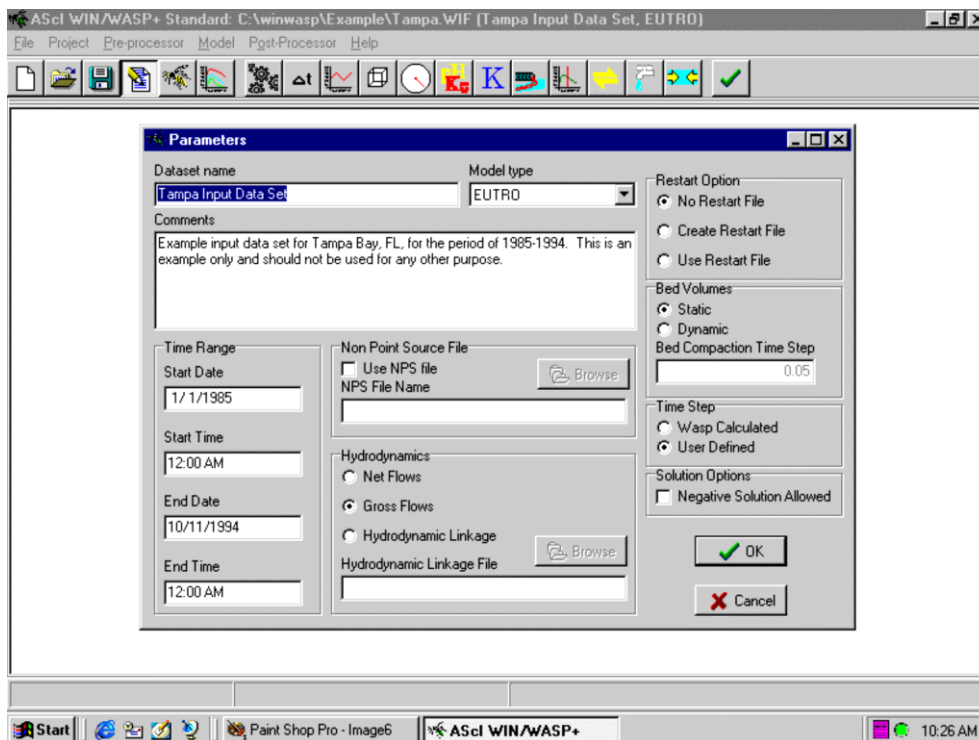
آیتم Save as به کاربر امکان می‌دهد تا فایل پروژه‌ی قبلاً بارگذاری شده را به نام فایل دیگری ذخیره کند. این کار هنگام انجام تجزیه و تحلیل حساسیت مفید است و زمانی که نمی‌خواهیم پروژه اولیه را از دست بدهیم. هنگامی که کاربر عملکرد Save as را انتخاب می‌کند، پنجره انتخاب فهرست نمایش داده می‌شود.



شکل ۲-۵ تعریف فایل پروژه

## ۷-۲- پارامتر ورودی

هنگام ایجاد یک مجموعه داده ورودی جدید، اولین موردی که باید تکمیل شود فرم متناسب‌سازی داده‌هاست. این فرم، اطلاعات پایه‌ای را ارائه می‌دهد که توسط برنامه برای متناسب‌کردن دیگر فرم‌های ورود داده‌ها مورد نیاز است. این صفحه به برنامه اطلاع می‌دهد که چه نوع فایل WASP 6 را می‌خواهید ایجاد کنید.



شکل ۲-۶ پارامتره کردن مجموعه داده‌ها

### ۲-۷-۱- شرح مجموعه داده

این قسمت یک توصیف‌کننده تک‌خطی را برای فایل داده‌ی ورودی تعریف‌شده فراهم می‌کند. این توصیف‌کننده بر روی خط پوششی پنجره اصلی WASP 6 نمایش داده می‌شود.

### ۲-۷-۲- نوع مدل

فهرست انتخاب نوع مدل به کاربر اجازه می‌دهد نوع مدل (EUTRO/ TOXI) WASP 6 را برای مجموعه داده ورودی ایجاد شده مشخص کند. تعیین نوع مدل تنظیمات WASP 6 را برای آن نوع مدل خاص متناسب می‌کند. توجه داشته باشید که اگر یک مدل را یک نوع تعریف کنید و انواع دیگر را تغییر دهید، تمام داده‌های خاص نوع مدل دوباره تنظیم خواهند شد (توابع زمان، فرآیند جنبشی، پارامترها، مرزها، شرایط اولیه، بارها).

### ۲-۷-۳- نظرات

این فهرست فضایی را برای کاربر فراهم می‌کند تا اطلاعات مهم در مورد مجموعه داده‌ها را شرح دهد. توضیحات وارده به این بخش در مدل استفاده نمی‌شود.

### ۲-۷-۴- گزینه‌های راه‌اندازی مجدد

WASP 6 امکان استفاده از فایل‌های راه‌اندازی مجدد بین اجرای شبیه‌سازی را برای کاربر فراهم می‌کند. فایل راه‌اندازی مجدد یک "تصویر سریع" از شرایط مدل در پایان شبیه‌سازی است. از این "تصویر سریع" می‌توان شرایط اولیه برای اجرای مدل در آینده استفاده کرد.

سه گزینه برای راه‌اندازی مجدد وجود دارد:

- بدون فایل راه‌اندازی مجدد- WASP 6 فایل راه‌اندازی مجدد ایجاد نمی‌کند (پیش‌فرض).
- با فایل راه‌اندازی مجدد- WASP 6 یک فایل راه‌اندازی مجدد ایجاد می‌کند که شامل حجم و غلظت نهایی برای هر یک از بخش‌ها و سیستم‌ها است.
- ایجاد/خواندن فایل راه‌اندازی مجدد- WASP 6 همان‌طور که در بالا توضیح داده شد، فایلی را ایجاد می‌کند، اما حجم و غلظت اولیه را از یک فایل راه‌اندازی مجدد که قبلاً ایجاد شده است می‌خواند.

### ۲-۷-۵- تاریخ و زمان

نسخه‌های قبلی WASP نیازی به نشان دادن توابع زمان مدل در قالب تاریخ میلادی نداشتند؛ در صورتی که WASP 6 نیاز دارد تمام توابع زمان به صورت میلادی نمایش داده شود ( mm/dd/yr ) (hh:mm:ss). کاربر در فهرست انتخاب Start Time باید تاریخ و زمان شروع را مشخص کند. این تاریخ و زمان مطابق با زمان صفر در نسخه قدیمی مدل است.

### ۲-۷-۶- فایل منبع غیرنقطه‌ای

فایل منبع غیرنقطه‌ای یک فایل خارجی است که شامل یک سری زمانی مقادیر (کیلوگرم در روز) برای یک بخش و سیستم مشخص شده می‌باشد. این فایل به‌طور معمول یا توسط کاربر یا با استفاده از نرم‌افزارهای دیگر مانند مدل مدیریت بارش-رواناب (SWMM) در رابطه با اتصال مدل حوضه آبخیز/بیکره آبی ایجاد می‌شود. این فایل می‌تواند برای ارائه اطلاعات بارگذاری به WASP 6 در هر مقیاس زمانی، از یک گام زمانی، تا میانگین داده‌های سالیانه استفاده شود.



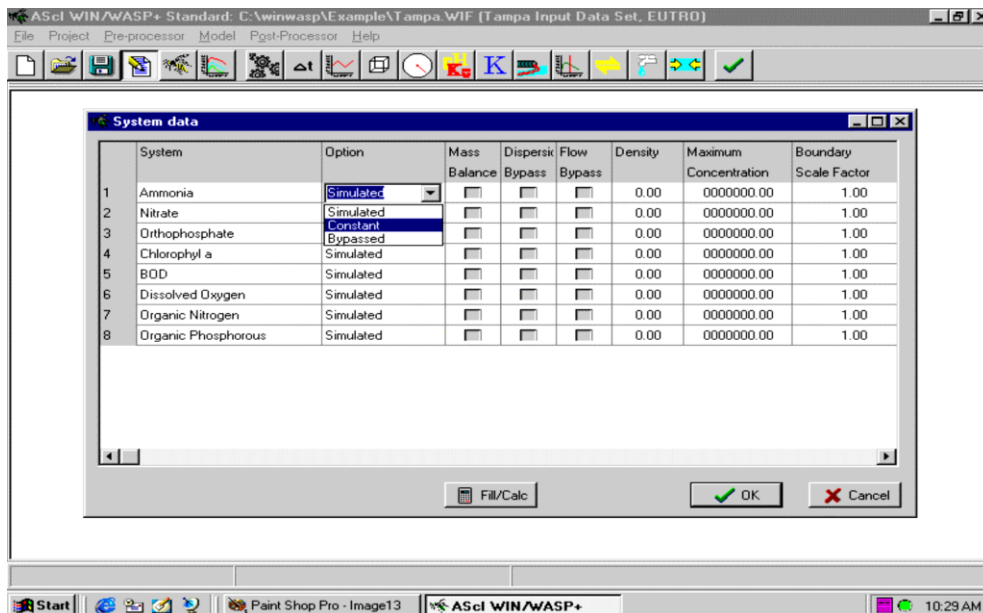
## ۲-۷-۷- هیدرودینامیک

در حال حاضر، سه گزینه‌ی جریان سطحی برای WASP وجود دارد. دو گزینه‌ی اول مربوط به چگونگی محاسبه تبادل جرم بین بخش‌های مجاور با جریان در هر دو جهت در طول یک فصل مشترک است. سه گزینه‌ی جریان موجود برای جریان آب سطحی عبارتند از:

- WASP میزان خالص انتقال را از طریق یک فصل مشترک که دارای جریان مخالف است محاسبه خواهد کرد. WASP میزان جریان خالص را در نظر می‌گیرد و جرم را از قطعه‌ای که دارای خروجی جریان بیش‌تر است، حرکت خواهد داد. اگر جریان‌های مخالف برابر باشند، هیچ جرمی حرکت نمی‌کند.
- این گزینه مربوط به جرم و آب است که بدون توجه به جریان اصلی منتقل می‌شود.
- این گزینه هنگام اتصال WASP به یک مدل هیدرودینامیک استفاده می‌شود. هنگامی که گزینه ۳ انتخاب می‌شود، کاربر نمی‌تواند هیچ اطلاعات جریان سطحی اضافی ارائه دهد. به محض اجرا مجموعه داده ورودی WASP با استفاده از گزینه‌ی ۳، فایل پیوند هیدرودینامیک که از قبل ایجاد شده و در فهرست راهنما که مجموعه داده ورودی در آن ایجاد شده است باید وجود داشته باشد. پرونده باید پسوند \* HYD داشته باشد. فهرست انتخاب پیوند هیدرودینامیکی به کاربر این امکان را می‌دهد تا فایل پیوند هیدرودینامیک را انتخاب کند. فایل پیوند هیدرودینامیک؛ جریان، حجم، عمق و سرعت را در طول اجرا به مدل WASP 6 ارائه می‌دهد. چندین مدل هیدرودینامیک وجود دارد که به WASP 6 متصل شده‌اند. این مدل‌ها شامل: 5 DYNHYD، EFDC، RIVMOD و ماژول انتقال SWMM هستند. هنگام اتصال به یک فایل پیوند هیدرودینامیک، کاربر مجاز به وارد کردن اطلاعات اضافی جریان سطحی می‌شود.

## ۲-۸- سیستم

فرم ثبت داده‌های سیستم به کاربر اجازه می‌دهد تا اطلاعات خاص سیستم را تعریف کند. یک سیستم در WASP 6 یک متغیر کیفیت درون مدل است. متغیرهای کیفیت WASP 6 از یک نوع مدل به مدل دیگر تغییر می‌کنند. کنترل‌های کاربر که متغیرهای کیفیت را بیان می‌کنند، در مجموعه داده‌ی ورودی مدل‌شان، براساس این صفحه در نظر گرفته خواهند شد.



شکل ۲-۷ Bypass سیستم 6 WASP و فاکتورهای مقیاس جهانی

## ۲-۸-۱- گزینه‌های سیستم

سه گزینه برای این قسمت وجود دارد: Simulated، Constant و Bypassed. کاربر می‌تواند با انتخاب گزینه‌ای از فهرست انتخاب کشویی برای هر سیستم، جداگانه یکی از گزینه‌ها را انتخاب کند. Simulated: به WASP اعلام می‌کند که کاربر می‌خواهد مدل تمام معادلات مرتبط با متغیر کیفیت را در هر گام زمانی محاسبه کند. این گزینه رایج‌ترین انتخاب است. Constant: به WASP اعلام می‌کند که کاربر می‌خواهد جرم این سیستم را ثابت نگه‌دارد و اجازه نمی‌دهد معادلات مربوط به این سیستم محاسبه شود، اما اجازه می‌دهد که جرم آن بر میزان و تغییرات سیستم دیگری که می‌تواند تحت تأثیر جرم این سیستم قرار گیرد، تأثیر بگذارد؛ به‌عنوان مثال می‌توان به تأثیر جلبک‌ها بر اکسیژن محلول بدون شبیه‌سازی دینامیک جلبک اشاره کرد. کاربر غلظت‌های اولیه جلبک‌ها را ارائه می‌دهد (که هرگز تغییر نمی‌کند) و ثابت‌های نرخ تنفس و تولید اکسیژن، را وارد می‌کند. این نمونه یک حالت پایدار از تأثیرات جلبک را شبیه‌سازی می‌کند. Bypassed: به WASP اعلام می‌کند که محاسبه‌ای برای هیچ یک از سیستم‌ها لازم نیست انجام شود. هنگامی که یک سیستم در WASP به‌صورت میان‌بر است، کاربر مجبور به ارائه‌ی غلظت‌های مرزی

یا شرایط اولیه نیست. در شرایط میان بر در WASP لازم است اطمینان حاصل کنید بخشی از مسئله را که می‌خواهید حل کنید، حذف نکرده باشید.

برای توابع انتقال دوبعدی همرفت و پراکندگی در حالت میان بر WASP، کاربر توانایی نادیده گرفتن تأثیر پدیده‌ی انتقال ویژه بر متغیر کیفیت خاص را دارد. اگر کاربر بخواهد اثر جلبک‌ها را بر سیستم در زمانی که مجاز به انتقال نیست ببیند، کاربر علامت Bypassed از کلروفیل-a را به "Y" در هر دو انتقال جابه‌جایی یا پراکندگی تنظیم می‌کند (احتمالاً هر دو).

### ۲-۸-۲- پراکندگی/جریان فرعی

این گزینه (Dispersion/Flow Bypass) به کاربر اجازه می‌دهد تا مشخص کند که آیا یک متغیر کیفیت توسط یکی از این فرآیندها منتقل خواهد شد یا خیر. اگر کاربر نمی‌خواهد متغیر کیفیت تحت تأثیر پراکندگی یا جریان باشد، باید کادر مناسب را بررسی کند.

### ۲-۸-۳- جرم مخصوص

جرم مخصوص هر ماده تشکیل‌دهنده نیز باید در شرایط اولیه مشخص شود. ( $g/cm^3$ )

### ۲-۸-۴- حداکثر غلظت

ستون حداکثر غلظت به کاربر امکان می‌دهد حداکثر غلظت موردانتظار (میلی‌گرم در لیتر) از هر یک از متغیرهای کیفیت داده‌شده را مشخص کند. اگر WASP 6 غلظت بیش‌تر از مقدار ارائه‌شده را پیش‌بینی کند، شبیه‌سازی مدل در این مرحله پایان می‌یابد.

### ۲-۸-۵- فاکتور مقیاس مرزی/ بار و فاکتور تبدیل

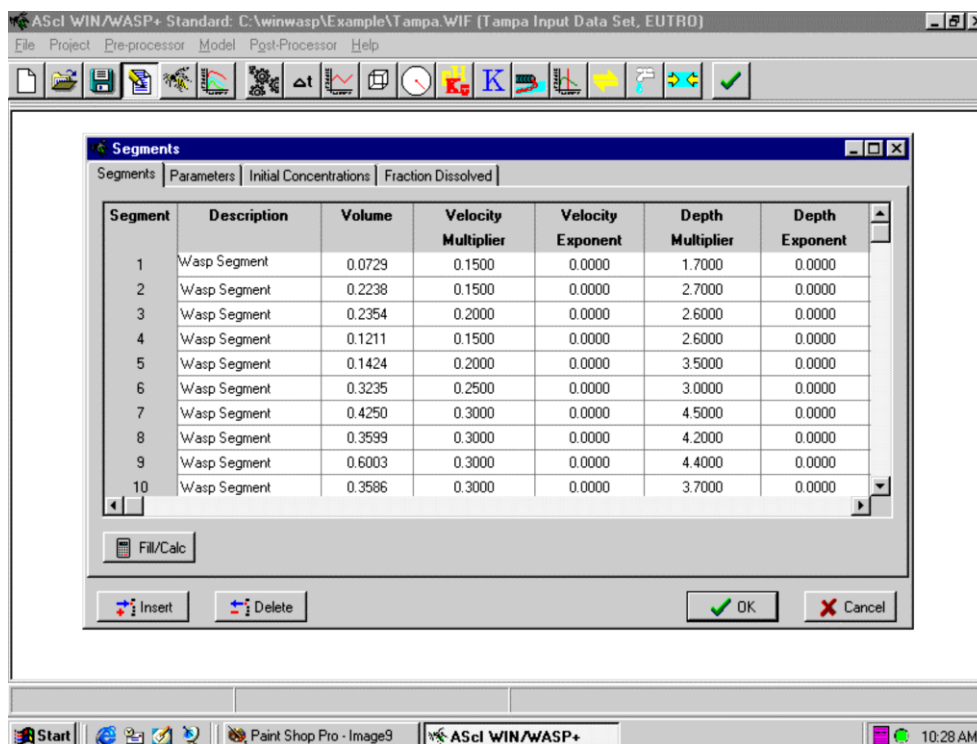
مقیاس مرزی و فاکتور تبدیل برای هر سیستم مجزا مشخص شده‌اند. فاکتور تبدیل می‌تواند برای تبدیل اطلاعات سری‌های زمانی مرزی به واحدهای غلظت مناسب مورد استفاده از طریق WASP 6 استفاده شود. فاکتور مقیاس می‌تواند برای کاهش غلظت‌های مرزی بدون وارد کردن مجدد داده‌های سری زمانی استفاده شود؛ به‌عنوان مثال اگر کاربر بخواهد بداند که ۲ برابر شدن بارها بر کیفیت آب چه تأثیری می‌گذارد؛ به‌جای دوباره وارد کردن داده‌های سری زمانی، با تنظیم فاکتور مقیاس به ۲ باعث می‌شود که WASP 6 چندین سری زمانی را در ۲ ضرب کند.

## ۹-۲- صفحه‌نمایش قطعه‌بندی

این فرم ورود داده‌ها به کاربر این امکان را می‌دهد تا تعداد قطعه‌هایی را که در شبیه‌سازی در نظر گرفته خواهد شد، تعریف کند. بخش‌ها مؤلفه مکانی هستند که WASP 6 در آن مجموعه معادلات را حل می‌کند. قطعه‌ها دارای حجم، غلظت محیطی و اجزای تشکیل‌دهنده مرتبط با آن‌ها هستند. فرم ورود داده‌های قطعه دارای چهار جدول مرتبط با آن‌هاست که با آن همراه است: (۱) تعریف قطعه، (۲) پارامترهای محیطی، (۳) شرایط اولیه، (۴) کسر محلول.

## ۹-۲-۱- تعریف قطعه

صفحه تعریف قطعه جایی است که کاربر اطلاعات هندسی خاصی را برای قطعه فراهم می‌کند. با وارد کردن اطلاعات بر روی این صفحه کاربر درک خوبی از نحوه‌ی قطعه‌بندی بدنه آب، می‌یابد.



شکل ۲-۸ تعریف قطعه

## ثبت / حذف قطعه‌ها

قبل از این که کاربر بتواند یک قطعه را تعریف کند، باید یک قطعه را با کلیک بر روی دکمه insert ایجاد کند. این باعث می‌شود که یک قطعه در سطر فعال جدول قرار داده شود. اگر این اولین قطعه وارد شده باشد، جدول را آغاز کرده و یک ردیف را در بالا قرار می‌دهد. برای حذف یک قطعه، ردیفی را که می‌خواهید حذف کنید را برجسته کرده و بر روی دکمه حذف کلیک کنید.

## نحوه نام گذاری قطعه‌ها

WASP 6 به‌طور خودکار قطعه‌ها را با شماره ۱ از طریق تعداد بخش‌ها نام‌گذاری می‌کند. WASP 6 همچنین به کاربر این امکان را می‌دهد تا یک نام الفبایی به قطعه‌های مجزا اختصاص دهد. این نام الفبایی برای راحتی کاربر وجود دارد و بر روی صفحه‌نمایش‌های دیگر (پراکندگی، جریان) و همچنین در پس‌پردازنده ظاهر خواهد شد به طوری که کاربر نیازی به پیگیری قطعه‌ها از نظر تعداد ندارد. هنگامی که شما در ابتدا یک قطعه را وارد می‌کنید، به‌طور خودکار نام WASP Segment داده می‌شود. برای نام‌بردن قطعه‌ها، سلول را برجسته کنید و نام هر قطعه را تایپ کنید.

## حجم‌ها

این ستون نشان‌گر حجم قطعه‌ای است که تعریف شده است. واحد حجم مترمکعب می‌باشد. توجه داشته باشید که WASP 6 یک شکل مکعبی برای یک قطعه فرض نمی‌کند، شکل قطعه دلخواه است.

## سرعت آب / عمق

گزینه‌های مختلفی برای تعیین سرعت و عمق آب در WASP 6 وجود دارد. عمق و سرعت را می‌توان با وارد کردن مقادیر آن‌ها در قسمت چندبرابر عمق و سرعت و تنظیم مقدار صفر ثابت نگه‌داشت. کاربر همچنین ممکن است اجازه دهد که عمق و سرعت که تابعی از جریان است، تغییر کند. برای انجام این کار، کاربر باید ضریب و توان عمق و سرعت را ارائه کند. سرعت (m/s) از فرمول  $aQ^b$  و عمق از فرمول  $cQ^d$  محاسبه می‌شود؛ که در آن a & d ضرایب و Q دبی جریان ( $m^3/sec$ ) است.

## نوع قطعه

WASP 6 از چهار نوع قطعه مختلف پشتیبانی می‌کند. کاربر باید یک نوع قطعه را برای هر یک از قطعه‌های تعریف شده، ارائه دهد. فهرست انتخاب Segment Type برای تعریف نوع قطعه استفاده می‌شود.

- قطعه آب سطحی - هر قطعه که دارای فصل مشترک با اتمسفر است. فقط قطعه نوع ۱ فعال‌سازی می‌شود.
- قطعه آب زیرسطحی - قطعه آب بدون فصل مشترک با اتمسفر.

- قطعه سطحی بنتیک - قطعه سطحی بنتیک.
- قطعه بنتیک زیرسطحی - تمام قطعه‌های بنتیک در قطعه زیرسطحی بنتیک.

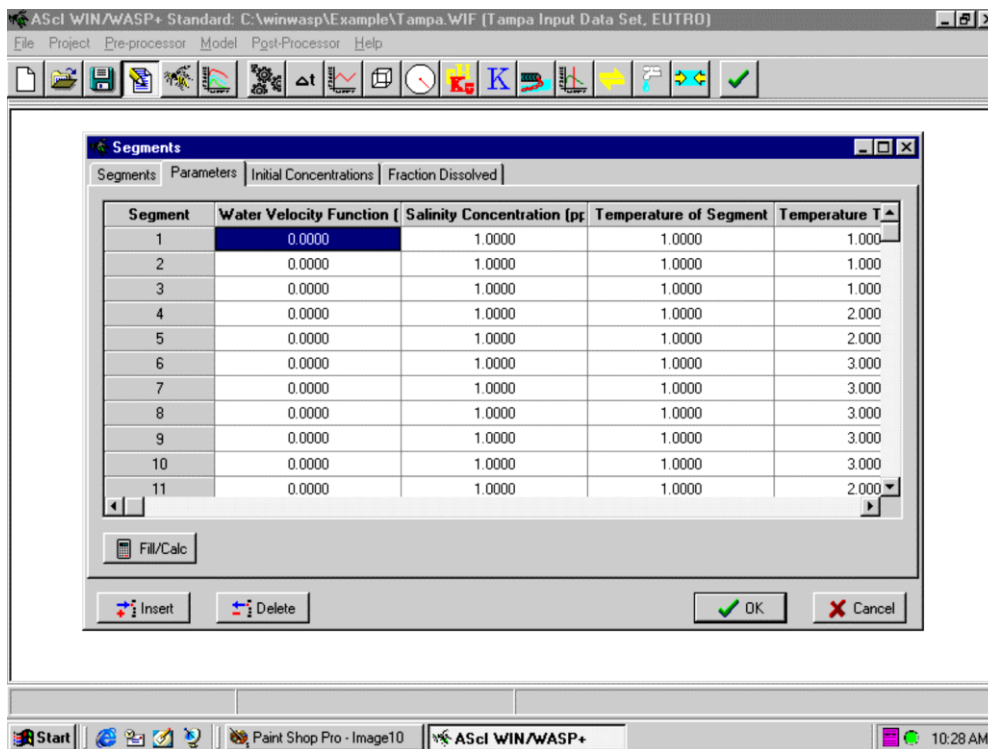
### قطعه پایین

قطعه پایینی برای تعریف این که کدام بخش، زیربخش تعریف شده فعلی است استفاده می‌شود. اگر این بخش، یک بخش پایین‌تر از آن نداشته باشد، بخش پایین باید روی هیچ‌کدام یا صفر تنظیم شود. تعریف قطعه پایینی برای تعریف مسیر نوری استفاده می‌شود. این روش در محاسبات انتقال مورد استفاده قرار نمی‌گیرد.

### ۲-۹-۲- پارامترهای محیطی بخش

این جدول شامل پارامترهای محیطی خاص برای قطعه است. این پارامترها برای انواع مختلف مدل WASP 6 متفاوت هستند. اطلاعات پارامتر بخش به‌طور مستقیم با صفحه فاکتور مقیاس پارامتر تعامل دارد.

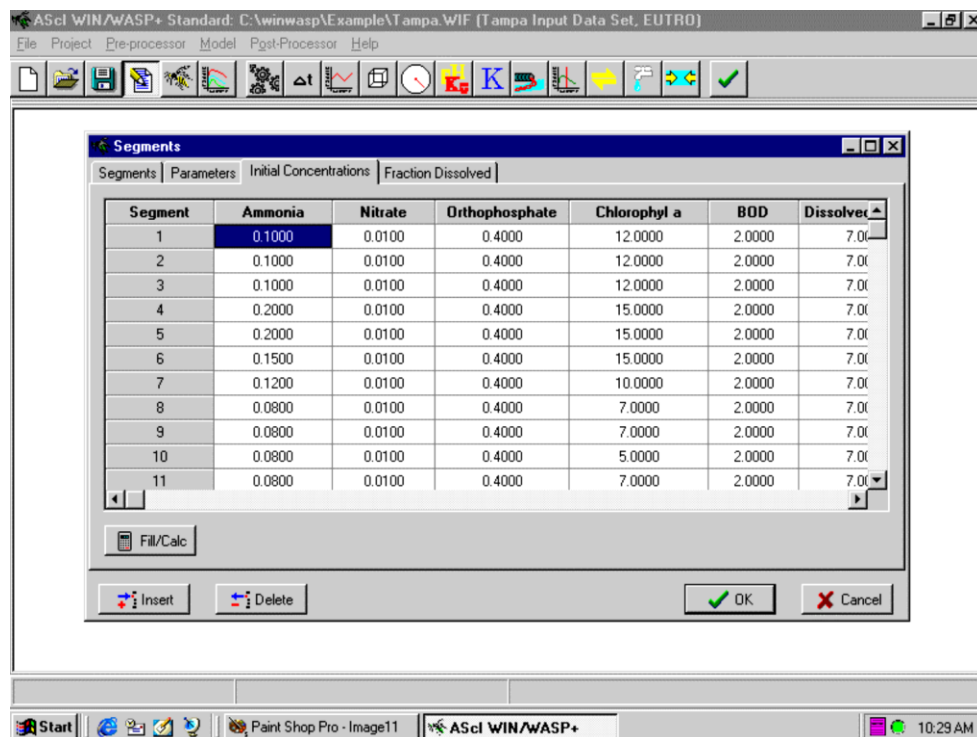
کاربر فقط باید اطلاعاتی را که قرار است برای پارامترهای محیطی در شبیه‌سازی در نظر گرفته شوند، فراهم کند. برخی از پارامترها برای تعریف مستقیم اطلاعات خاص بخش (یعنی SOD) استفاده می‌شوند، برخی دیگر برای اشاره به توابع زمان محیطی (یعنی دما) استفاده می‌شوند. اشاره‌گرها به توابع زمان محیطی به کاربر اجازه می‌دهند تا تغییرات مکانی و زمانی برای پارامترهای بخش مانند: دما، سرعت آب، pH و غلظت باکتری‌ها را تعریف کند.



شکل ۲-۹ پارامترهای محیطی

### ۲-۹-۳- غلظت‌های اولیه

از آن‌جا که WASP 6 یک مدل پویا است، کاربر باید شرایط اولیه برای هر متغیر در هر بخش را مشخص کند. شرایط اولیه شامل غلظت‌های تشکیل‌دهنده در ابتدای شبیه‌سازی است. محصولات غلظت‌های اولیه و حجم‌های اولیه، جرم‌های تشکیل‌دهنده اولیه را در هر بخش ایجاد می‌کنند. برای شبیه‌سازی‌های پایدار، جایی که در آن جریان‌ها و بارگذاری‌ها ثابت نگه‌داشته می‌شوند و پاسخ غلظت حالت پایدار مطلوب است، کاربر ممکن است غلظت‌های اولیه را مشخص کند که غلظت نهایی موردانتظار را تخمین می‌زند. برای شبیه‌سازی‌های دینامیکی که در آن پاسخ غلظت‌گذرا مطلوب است، غلظت‌های اولیه باید مقادیر اندازه‌گیری شده را در ابتدای شبیه‌سازی منعکس کنند.

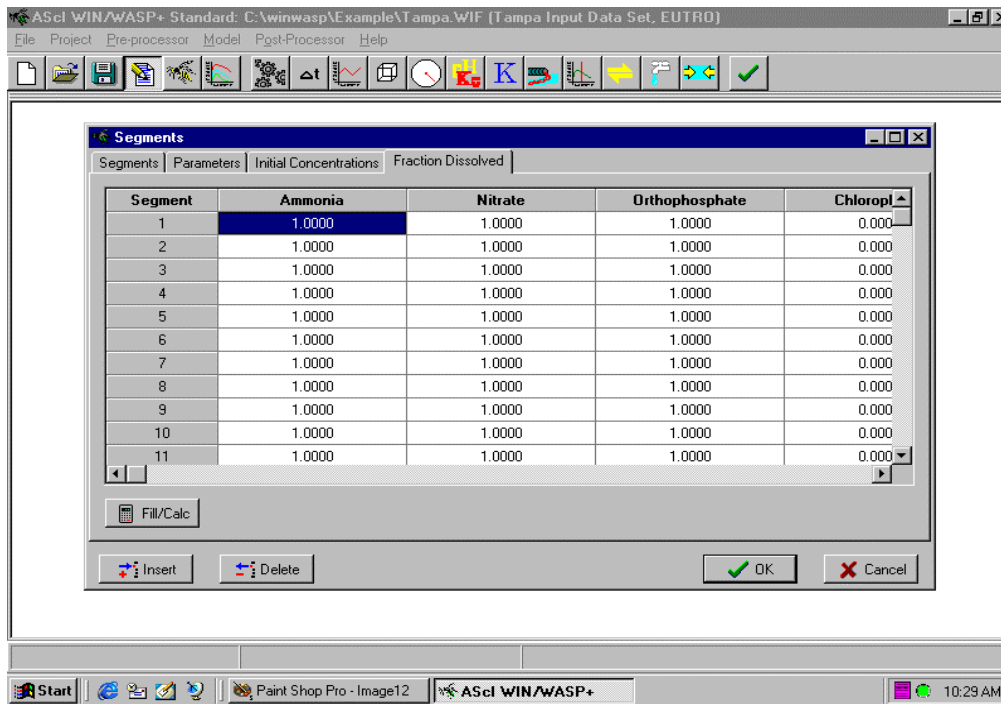


شکل ۲-۱۰ بخش غلظت‌های اولیه

## ۲-۹-۴- کسر محلول

علاوه بر غلظت‌های شیمیایی، بخش‌های محلول در ابتدای شبیه‌سازی باید برای هر قطعه مشخص شود. برای ردیاب‌ها، بخش‌های محلول معمولاً روی ۱/۰ تنظیم می‌شوند. برای ردیاب‌ها و همچنین اکسیژن محلول، تغذیه‌گرایی و انتقال رسوب، کسرهای محلول اولیه در طول شبیه‌سازی ثابت باقی می‌ماند. برای آلاینده‌ها، کسر محلول بر اساس روابط تقسیم‌بندی مشخص شده توسط کاربر مجدداً محاسبه می‌شود.

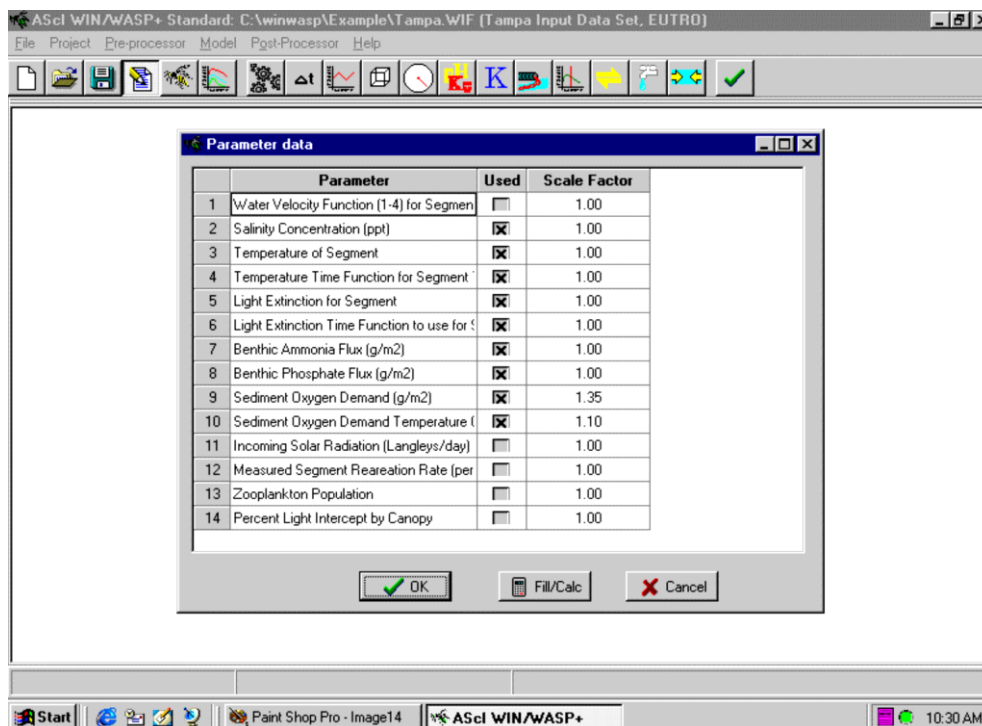




شکل ۲-۱۱ کسر اجزاء محلول

## ۲-۱۰- فاکتورهای مقیاس پارامتر بخش

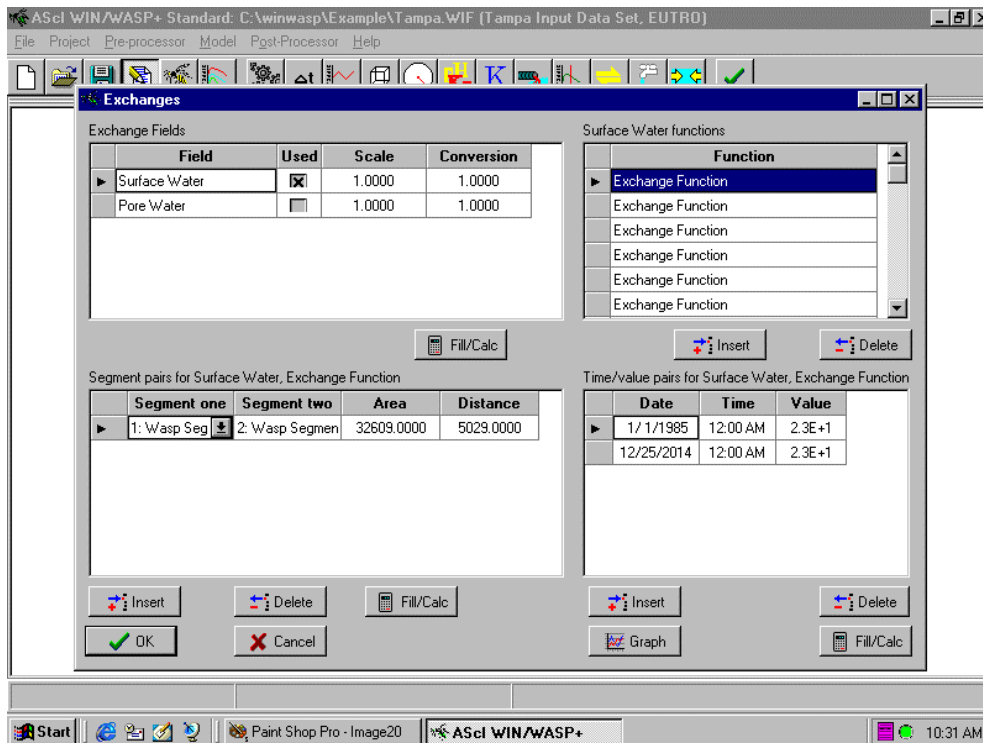
این صفحه تعریف می‌کند که کدام پارامترها در شبیه‌سازی در نظر گرفته می‌شوند و همچنین یک فاکتور مقیاس پارامتر را مشخص می‌کند. به طور پیش فرض فاکتور مقیاس ۱/۰ است. قبل از این که یک پارامتر بخش محیطی توسط WASP 6 در نظر گرفته شود، کادر Use باید بررسی شود. بررسی نکردن این کادر، پارامتر را از شبیه‌سازی حذف خواهد کرد، اما تمام اطلاعات وارد شده از بین نمی‌روند. نمونه‌ای از استفاده از این ویژگی، بررسی تأثیر SOD بر اکسیژن محلول می‌باشد. اولین شبیه‌سازی را با پارامتر SOD بررسی شده انجام دهید و اجرای بعدی را با SOD بررسی نشده انجام دهید. تفاوت بین این دو اجرا تأثیر SOD می‌باشد. همچنین کاربر می‌تواند فاکتور مقیاس را برای هر پارامتر تغییر دهد؛ به عنوان مثال، اگر می‌خواهید SOD را دوبرابر کنید، فاکتور مقیاس را روی ۲/۰ تنظیم کنید.



شکل ۲-۱۲ بخش فاکتور مقیاس پارامترها

## ۲-۱۱- پراکندگی

صفحه‌نمایش ورودی پراکندگی صفحه‌نمایش پیچیده‌ای است که شامل چهار جدول است. تحت فرآیند پراکندگی، کاربر حداکثر تا دو میدان تبادل حق انتخاب دارد. برای شبیه‌سازی پراکندگی مواد سمی و جامد آب‌های سطحی، کاربر پراکندگی ستون آب را در پیش‌پردازنده انتخاب می‌کند یا تعداد میدان‌های تبادل را بر روی یک تنظیم می‌کند. برای شبیه‌سازی تبادل سموم محلول در بستر، کاربر هم‌چنین باید انتشار آب منفذی را در پیش‌پردازنده انتخاب کند یا تعداد میدان‌های تبادل را به دو تنظیم کند.



شکل ۲-۱۳ فرم‌های وارد کردن پراکندگی

### ۲-۱۱-۱- میدان‌های تبادل

- این جدول در قسمت سمت چپ بالای صفحه‌نمایش به کاربر اجازه می‌دهد تا پراکندگی را برای دو نوع تبادل تعریف کند. برای استفاده یکی از این میدان‌های تبادل، باید کادر Use را بررسی کند و مقیاس و ضریب تبدیل را وارد کند. هنگامی که کادر Use بررسی نشود، اطلاعات برای بخش تبادل ویژه در طول اجرا به مدل داده نمی‌شود.
- تبادل آب سطحی- تبادل هر دو بخش محلول و ذرات معلق.
- تبادل آب منفذی- این میدان تبادل تنها بخش محلول از یک جز تشکیل‌دهنده را به حرکت در می‌آورد.

### ۲-۱۱-۲- تابع پراکندگی

برای هر یک از میدان‌های تبادل، کاربر می‌تواند حداکثر ۱۰ تابع تبادل را تعریف کند. هر تابع تبادل می‌تواند مجموعه‌ای از جفت‌های بخش تبادل و یک تابع زمان پراکندگی مربوط به خود را داشته باشد.

WASP 6 به کاربر اجازه می‌دهد تا نام هر یک از تابع‌های تبادل را ارائه دهد. برای اضافه کردن یک تابع تبادل، روی دکمه insert کلیک کنید و همچنین برای حذف یک تابع، با برجسته کردن ردیف، تابع را انتخاب کرده و روی دکمه حذف کلیک کنید. با این کار، زوج بخش‌های مربوطه (جدول سمت چپ پایین) و تابع زمان پراکندگی (جدول سمت راست پایین) حذف می‌شود. برای وارد کردن توابع تبادل برای پراکندگی سطح، بخش تبادل پراکندگی سطح (جدول سمت چپ بالا) که به سمت جدول تابع تبادل (جدول سمت راست) می‌رود را برجسته کرده و insert را فشار دهید. جدول زیر تابعی از انتخاب در جدول بالا است.

### زوج قطعه‌ها

زوج قطعه‌ها تعریف می‌کنند که تبادل بین آن‌ها رخ خواهد داد. مهم نیست که آن‌ها در چه ترتیبی تعریف می‌شوند. نه پیش‌پردازنده و نه مدل هیچ‌گونه کنترلی را انجام نمی‌دهند تا مطمئن شوند که قطعه‌ها به چه روشی متصل شده‌اند. اتصال به عهده کاربر است.

### مناطق مقطعی متقاطع

مناطق مقطعی برای هر فاکتور پراکندگی مشخص شده‌اند، و بیان‌گر ناحیه‌ای هستند که اختلاط در آن رخ می‌دهد. این مناطق می‌توانند مناطق سطحی برای تبادل عمودی باشند؛ مانند دریاچه‌ها یا ته دریا. مناطق در طول شبیه‌سازی برای منعکس کردن تغییرات جریان اصلاح نشده‌اند.

### طول مشخصه اختلاط

طول یا فاصله اختلاط برای هر ضریب پراکندگی به‌گونه‌ای مشخص می‌شود که طول مشخصه‌ای را که اختلاط روی آن رخ می‌دهد، را منعکس می‌کند. این فواصل معمولاً طول‌هایی بین نقاط مرکزی بخش‌های مجاور هستند. یک قطعه واحد ممکن است دارای سه یا چند طول اختلاط برای بخش‌های مجاور به‌صورت طولی، عرضی و عمودی داشته باشد. برای قطعه‌های سطحی بنتیک که قطعه‌های ستون آب را به هم متصل می‌کنند، عمق لایه بنتیک یک طول اختلاط واقع بینانه‌تری نسبت به نصف عمق آب است.

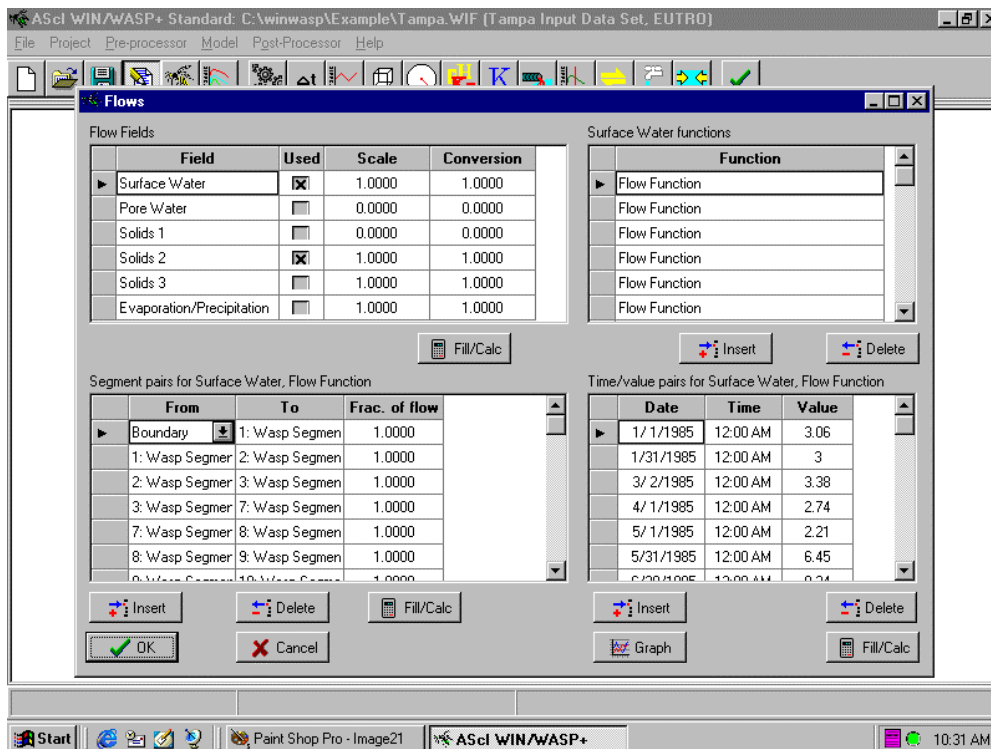
### ۲-۱۱-۳- تابع زمان پراکندگی

ضرایب اختلاط پراکندگی را می‌توان بین قطعه‌های مجاور یا در سراسر مرزهای آب آزاد مشخص کرد. این ضرایب ممکن است نمایان‌گر نفوذ آب منفذی در بخش‌های اعماق دریا، نفوذ عمودی در دریاچه‌ها و پراکندگی عرضی و طولی در پیکره‌های بزرگ آب باشند. مقادیر می‌توانند از  $1 \times 10^{-10} \text{m}^2/\text{sec}$  برای انتشار

مولکولی به  $5 \times 10^{-10} \text{m}^2/\text{sec}$  برای اختلاط طولی در برخی از مصبها متفاوت باشند. مقادیر به صورت یک سری تابع پراکندگی و زمان، در روز وارد می‌شوند.

## ۲-۱۲- جریان‌ها

- گروه‌های جریان دقیقاً مشابه گروه تبادل عمل می‌کنند. تنها تفاوت این است که گروه پراکندگی دارای ۶ فرآیند انتقال است که می‌تواند توسط کاربر تعریف شود.
- جریان آب سطحی- این گروه، هر دو بخش ذرات معلق و محلول یک ماده تشکیل‌دهنده را انتقال می‌دهد. اگر کاربر گزینه‌ی پیوند هیدرودینامیک را انتخاب کرده‌باشد، قادر به واردکردن اطلاعات در این‌جا نخواهد بود.
- آب منفذی- این گروه فقط بخش محلول یک ماده تشکیل‌دهنده را انتقال می‌دهد.
- انتقال جامد ۱- این گروه میدان جامد ۱ را انتقال می‌دهد.
- انتقال جامد ۲- این گروه میدان جامد ۲ را انتقال می‌دهد.
- انتقال جامد ۳- این گروه زمینه جامد ۳ را انتقال می‌دهد.
- (تبخیر/بارش)- این قسمت تنها از شبکه مدل اضافه/کم می‌کند. هیچ جرم تشکیل‌دهنده‌ای تغییر نمی‌کند.



شکل ۲-۱۴ فرم ورود جریان

### ۲-۱۲-۱- تابع جریان

کاربر توانایی تعریف ۱۰ تابع جریان برای هریک از شش میدان جریان را دارد. هر تابع جریان ورودی جریان دائم خاص خود (جدول سمت چپ پایین) و ورودی جریان متغیر زمان (جدول سمت راست پایین) را دارد. کاربر باید بخش جریان و تابع جریان را برای ورود اطلاعات برجسته کند. WASP 6 به کاربر اجازه می‌دهد تا نام‌های مربوط به هریک از تابع‌های جریان را ایجاد کند. برای وارد کردن تابع تبادلی، روی دکمه insert کلیک کنید و همچنین برای حذف یک تابع، با برجسته کردن سطر، تابع را انتخاب کرده و روی دکمه حذف کلیک کنید.

توجه: با این کار جفت‌های مربوطه (جدول سمت چپ پایین) و تابع زمان جریان (جدول سمت راست پایین) حذف می‌شوند.

برای وارد کردن توابع جریان برای جریان سطحی، قسمت Surface Flow (جدول سمت چپ بالا) را به سمت جدول تابع جریان (جدول سمت راست بالا) ببرید و insert را فشار دهید. جداول زیر تابعی از انتخاب در جداول فوق هستند.

### بخش جفت

بخش جفت را که از/ به، جریان رخ می‌دهد، تعریف می‌کند. ترتیبی که در آن بخش تعریف می‌شود باید مسیر جریان مثبت باشد. به عبارت دیگر، اگر بخش ۱ به بخش ۲ جریان یابد، هنگامی که یک جریان منفی در تابع زمان وارد می‌شود، جریان از ۲ به ۱ خواهد بود. توجه: نه پیش‌پردازنده و نه مدل هیچ‌گونه بررسی را انجام نمی‌دهند تا اطمینان حاصل شود که قطعه‌ها به چه روشی متصل شده‌اند. اتصال به عهده کاربر است.

### کسر جریان

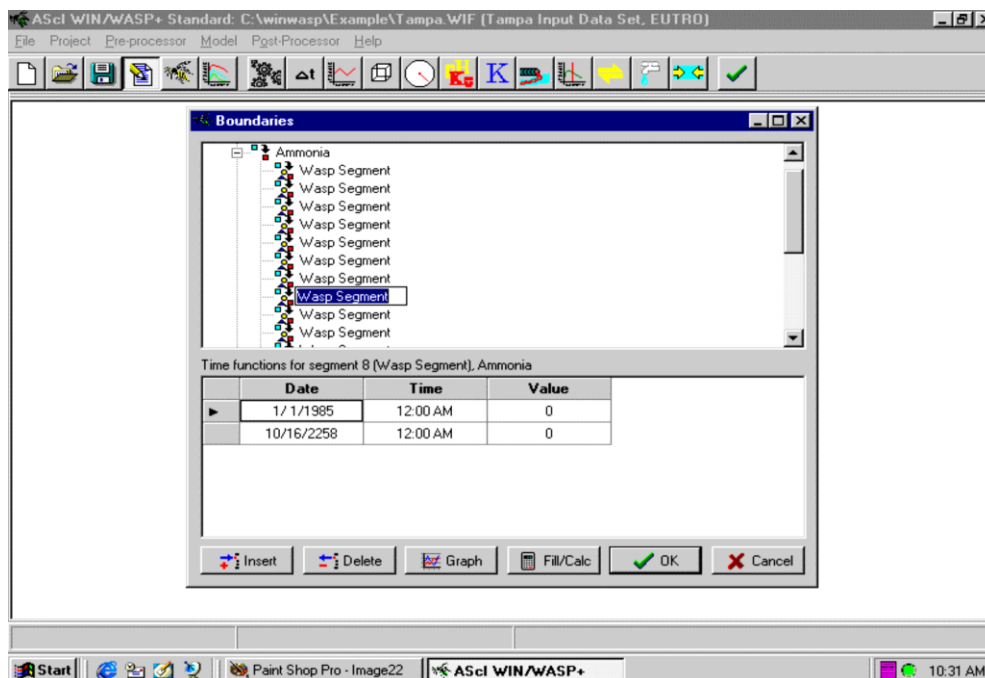
ستون کسر جریان به کاربر اجازه می‌دهد کسری از جریان را که از یک بخش به بخش دیگر منتقل می‌شود، مشخص کند. این میدان به دلایل مختلف برای تقسیم جریان‌ها (واگرایی) استفاده می‌شود.

### ۲-۱۲-۲- تابع زمان جریان

جدول تابع زمان به کاربر اجازه می‌دهد تا اطلاعات جریان متغیر زمانی را وارد کند. کاربر باید تاریخ، زمان و جریان (cms) را ارائه کند.

### ۲-۱۳-۲- مرزی

غلظت مرزی باید برای هر بخشی که ورودی، خروجی‌ها و یا مبادلات را از خارج از شبکه مدل دریافت می‌کند، مشخص شود. بخش‌های مرزی به‌طور خودکار توسط WASP 6 زمانی که کاربر الگوهای انتقال را تعریف می‌کند تعیین می‌شوند. بنابراین، تا زمانی که اطلاعات انتقال وارد نشده‌اند کاربر نمی‌تواند اطلاعات مرزی را وارد کند. WASP 6 نیاز دارد که غلظت مرزی برای هر سیستمی که برای هر بخش مرزی شبیه‌سازی می‌شود مشخص شود. برای مشخص کردن مرز برای یک سیستم، مکان‌نما را به سیستمی که باید مرز برای آن مشخص شود منتقل کرده یا روی سیستم کلیک‌راست کنید.



شکل ۲-۱۵ تعریف غلظت مرزی

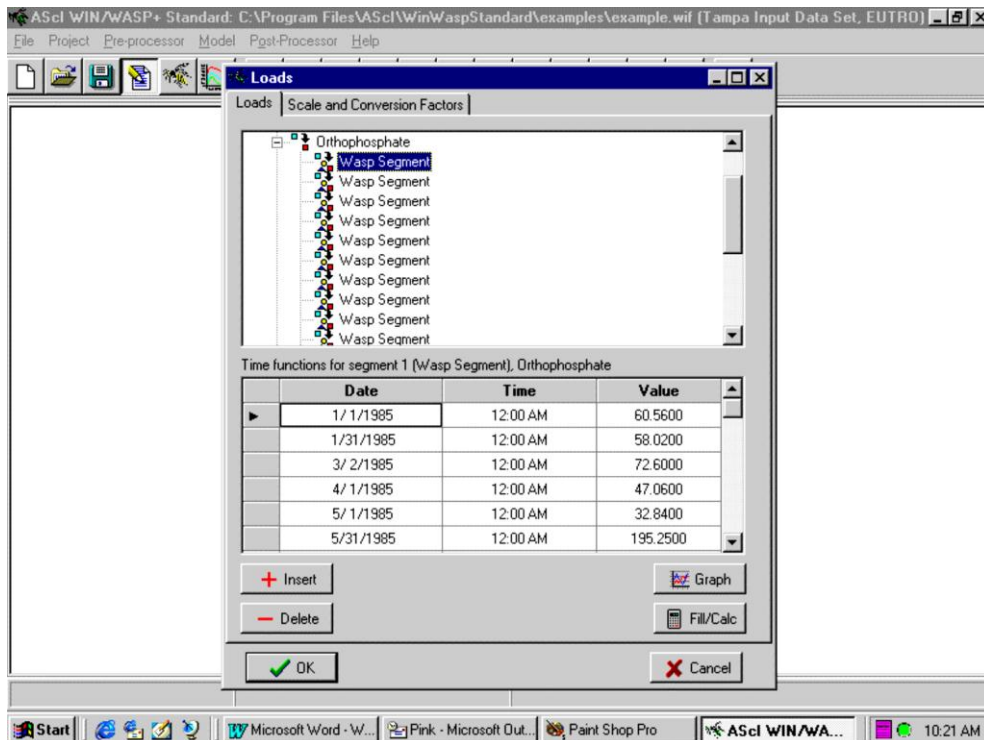
### ۲-۱۳-۱- تابع زمان مرزی

جدول تابع زمان به کاربر اجازه می‌دهد تا غلظت مرزی متغیر زمانی (میلی‌گرم در لیتر) را وارد کند. کاربر باید تاریخ، زمان و غلظت را ارائه دهد. توجه: در شرایط مرزی کلروفیل-a شرایط مرزی واحدها  $\text{ög/l}$  است.

### ۲-۱۴- بارها

بارهای فاضلاب برای هر یک از سیستم‌ها ممکن است در یک بخش معین وارد WASP 6 شوند. برای افزودن بار با کلیک راست بر روی سیستم، گزینه‌ی اضافه کردن بار را انتخاب کرده و بخش‌هایی را که برای بارگذاری سیستم انتخاب شده‌اند، را بررسی کنید. پس از انجام این کار، کاربر قادر به انتخاب بخش برای تعریف بار خواهد بود. برای هر بخش که کاربر می‌خواهد بار را تعریف کند، یک ورودی وجود خواهد داشت. کاربر می‌تواند، با کلیک راست روی سیستم، بار را انتخاب و حذف کند.





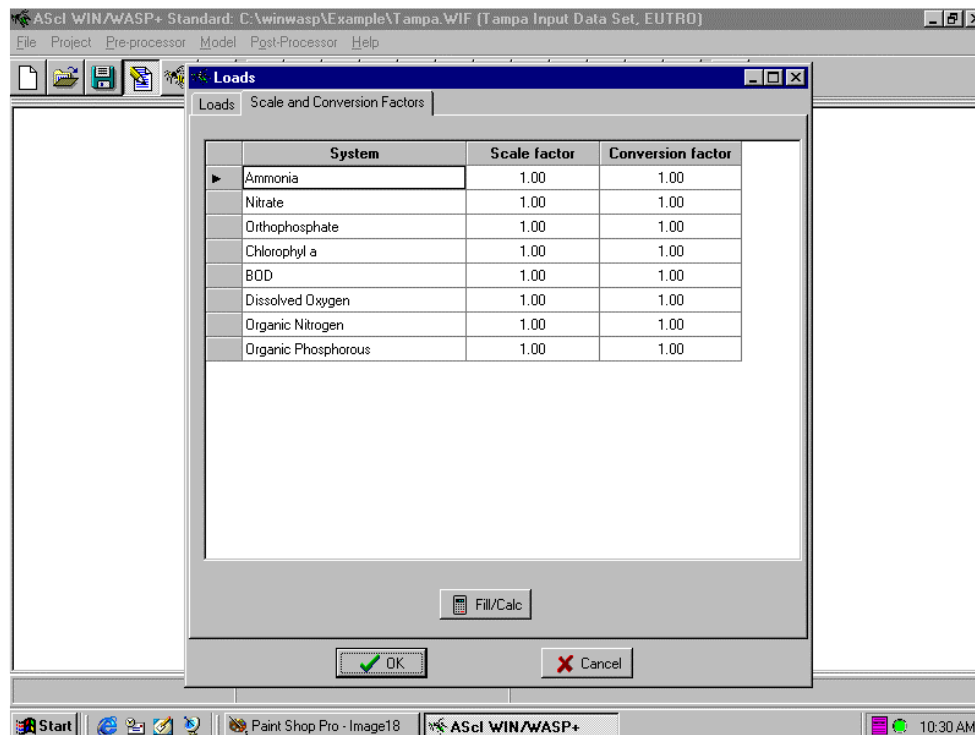
شکل ۲-۱۶ صفحه تعریف بار فاضلاب

## ۲-۱۴-۱- تابع زمان بار

جدول تابع زمان به کاربر اجازه می‌دهد تا بارهای متغیر زمانی (kg/day) را وارد کند. کاربر باید تاریخ، زمان و غلظت را ارائه دهد.

## ۲-۱۵-۱- مقیاس و تبدیل بارها

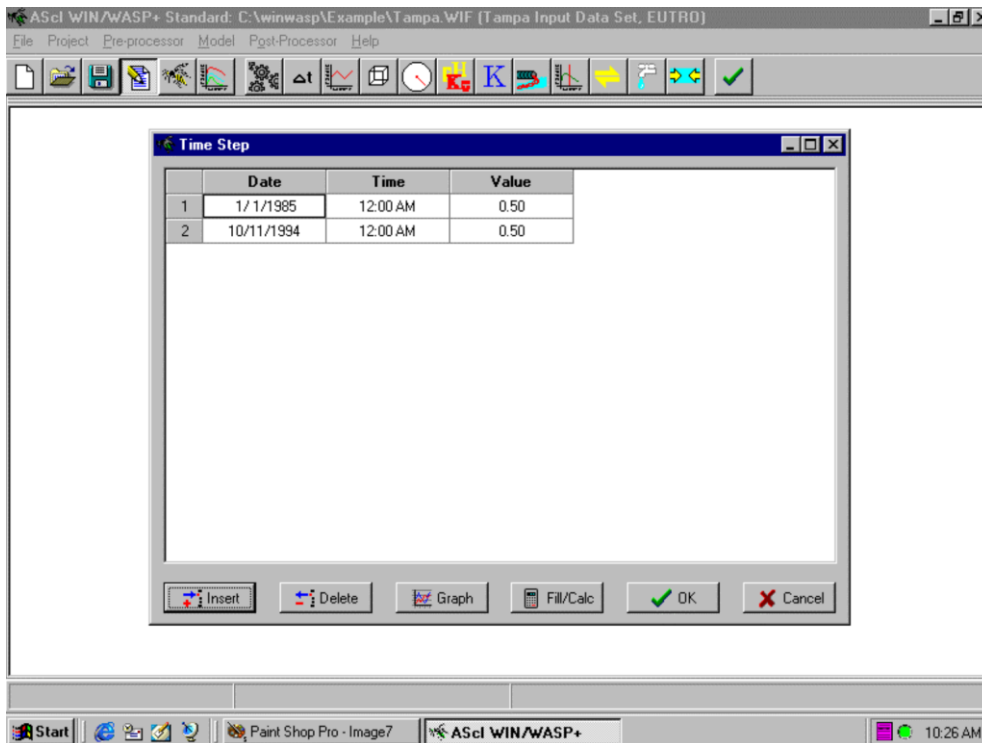
کاربر توانایی ارائه فاکتور مقیاس و تبدیل را دارد که می‌تواند برای کاهش یا تبدیل جرم بارگذاری شده استفاده شود. ضریب تبدیل برای یک سیستم معین می‌تواند برای بارهای اندازه‌گیری و گزارش شده در یک واحد برای تبدیل به واحدهای موردنیاز (kg/day) به WASP 6 استفاده شود. ستون فاکتور مقیاس می‌تواند بدون وارد کردن مجدد اطلاعات تابع زمان برای کاهش بارها استفاده شود. اگر کاربر بخواهد تأثیر دوبرابر شدن بارها را ببیند، یک فاکتور مقیاس ۲ برای سیستم موردنظر وارد می‌کند.



شکل ۲-۱۷ مقیاس بار فاضلاب و فاکتورهای تبدیل

## ۲-۱۵-۱- گام زمانی

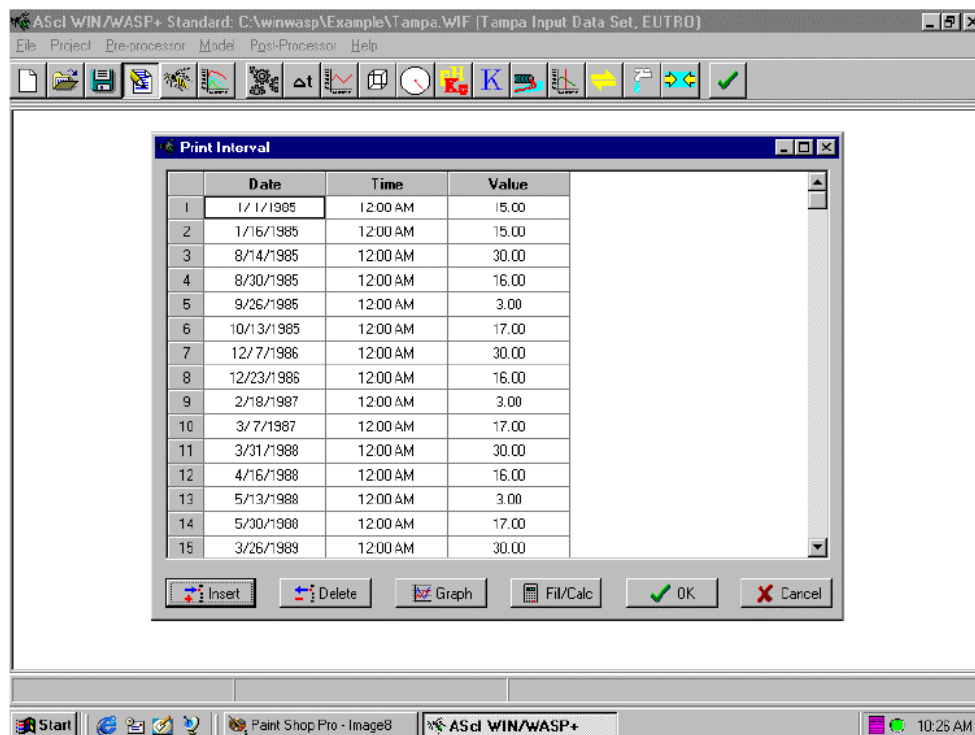
برای تنظیم گام زمانی مدل، دو گزینه در اختیار کاربر قرار می‌گیرد. WASP 6 توانایی محاسبه گام زمانی خاص خود را دارد. در صورت تمایل به این گزینه، کاربر باید نمایه مناسب را تنظیم کند. صرف نظر از گزینه‌ی گام زمانی که استفاده می‌شود، کاربر باید سری زمانی را در این جا ارائه دهد. تاریخ آخرین سری زمان پایان شبیه‌سازی را تعیین می‌کند. اگر کاربر انتخاب کند که خود، زمان مورد نظر را برای مدل ارائه دهد، کاربر جفت مرحله گام زمانی و زمان را مشخص می‌کند. هنگامی که WASP در حال شبیه‌سازی است، اطلاعات را به صورت داخلی ترسیم می‌کند و گام زمانی را بر اساس تابع زمانی که کاربر وارد کرده است، تغییر خواهد داد.



شکل ۲-۱۸ صفحه نمایش تعریف گام زمانی مدل

## ۲-۱۶- فواصل چاپ

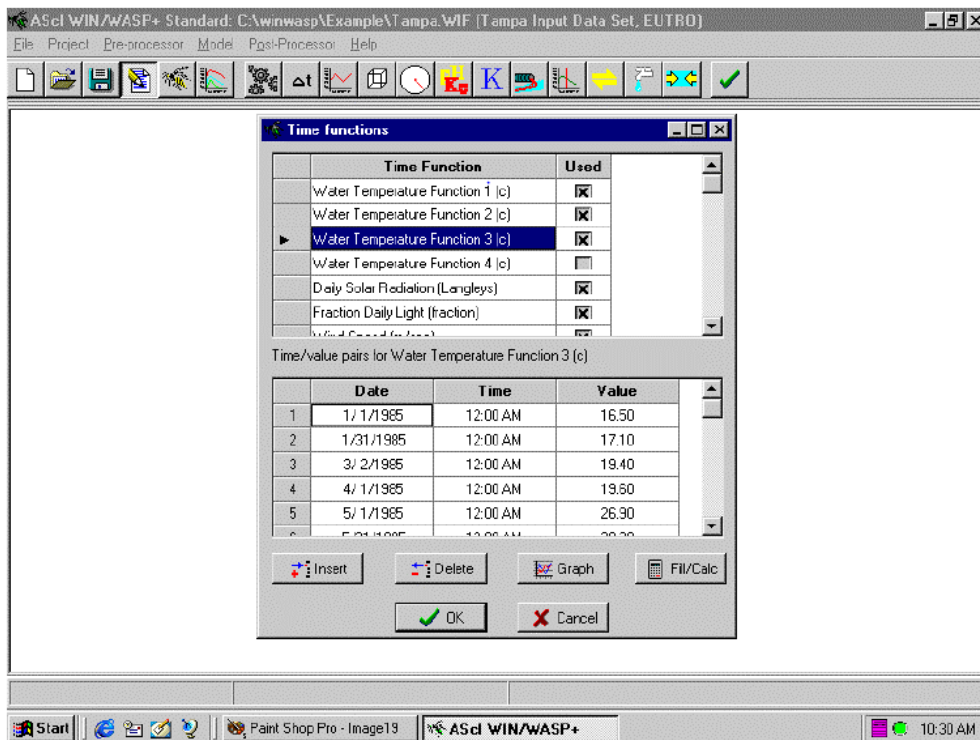
فاصله چاپ، زمان مشخص شده توسط کاربر است که در آن نتایج شبیه‌سازی در فایل نتیجه، ذخیره خواهد شد. مدل WASP نیازی به نوشتن اطلاعات در هر گام زمانی ندارد، اما می‌تواند توسط کاربر کنترل شود. بسته به اندازه شبکه و چارچوب زمانی که توسط WASP شبیه‌سازی می‌شود، فایل‌های نتایج شبیه‌سازی ممکن است بسیار بزرگ باشند. کاربر کنترل کاملی بر چارچوب زمانی دارد که در آن اطلاعات به فایل نتایج شبیه‌سازی نوشته می‌شود. این تابع مانند تمام توابع زمانی دیگر در WASP عمل می‌کند. کاربر باید گام زمانی موردنظر و زمان شبیه‌سازی را که در این فاصله استفاده می‌شود ارائه دهد. کاربر باید حداقل دو جفت داده را ارائه دهد.



شکل ۲-۱۹ تعریف فاصله زمانی چاپ 6 WASP

## ۲-۱۷- تابع زمان

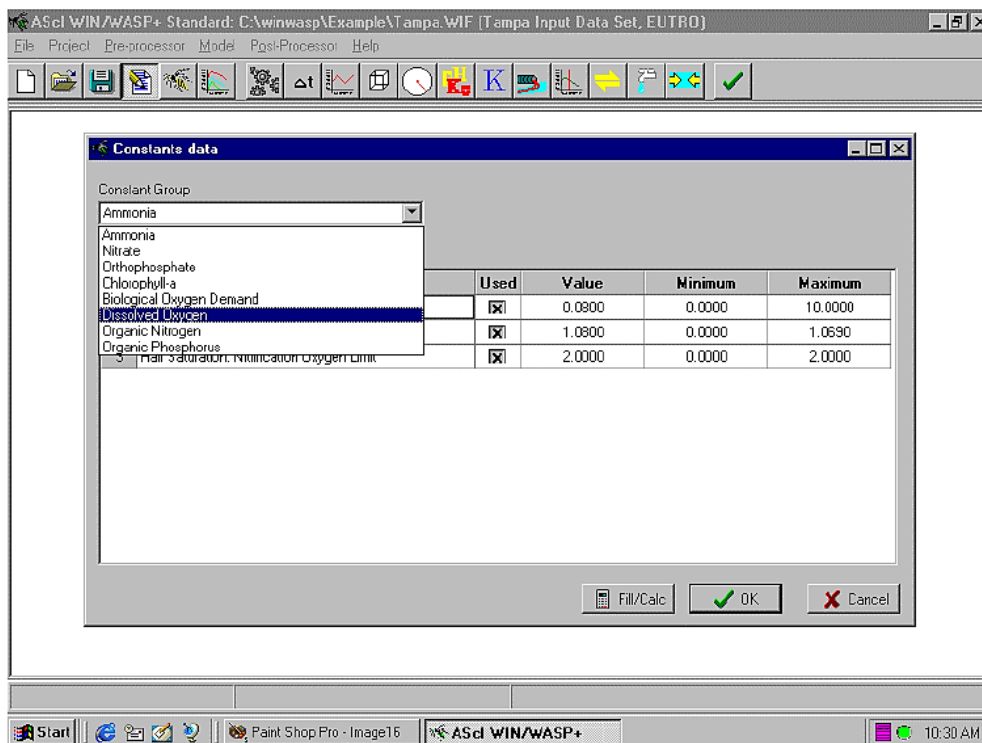
فرم‌های ورود داده تابع زمانی به کاربر اجازه می‌دهند تا اطلاعات محیطی متغیر زمانی را وارد کند. WASP 6 یک انتخاب از تمام توابع زمان محیطی برای یک نوع مدل معین ارائه می‌دهد. کاربر ممکن است با کلیک بر روی کادر گفت‌گویی Use، اطلاعاتی را برای تمام توابع زمانی ارائه دهد یا با خاموش/روشن کردن هر یک از توابع آن‌ها را تغییر دهد. برای وارد کردن اطلاعات برای یک تابع زمانی، مکان‌نما را روی تابع موردنظر قرار دهید. فرم داده‌های سری زمانی برای تابع زمان داده‌شده در جدول پایین نمایش داده می‌شود. کاربر باید زمان/تاریخ و مقدار مربوط به تابع زمان را وارد کند.



شکل ۲-۲۰ تعریف تابع زمان محیطی WASP 6

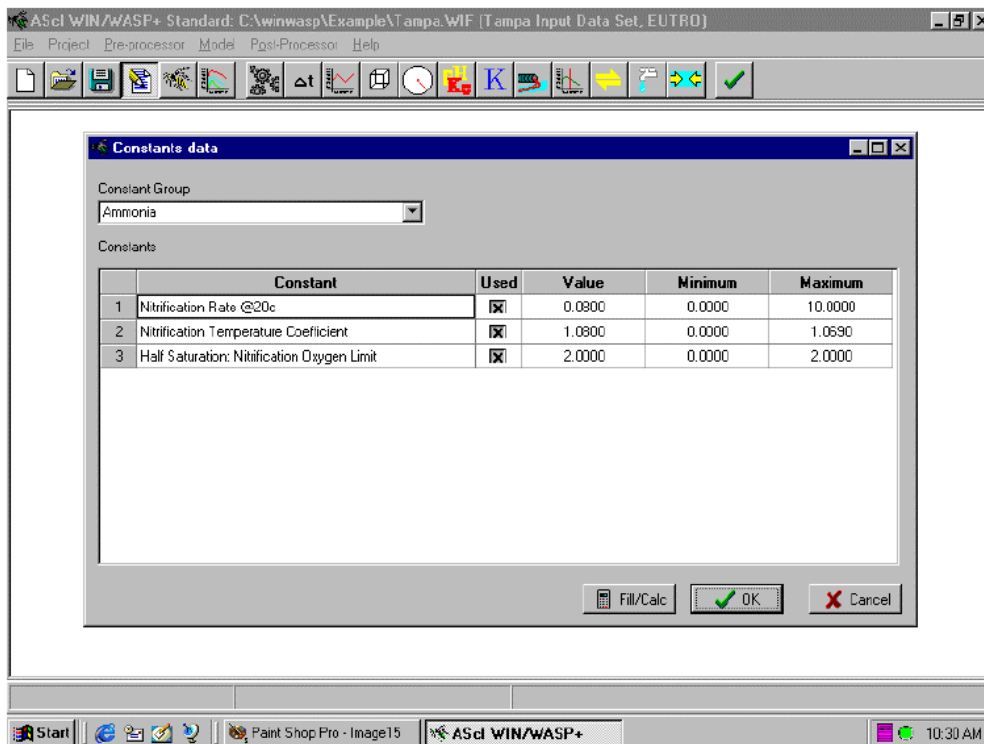
## ۲-۱۸- ثابت‌ها

این گروه ورود داده‌ها شامل ثابت‌ها و فرآیند ترکیبات کیفیت آب است که توسط مدل خاص WASP شبیه‌سازی شده‌اند. مقادیر مشخص شده برای ثابت‌ها، روی کل شبکه برای کل شبیه‌سازی اعمال می‌شوند. کاربر انتخاب می‌کند که کدام گروه ثابت، می‌خواهند ثابت‌های جنبشی را تعریف کنند. برای انتخاب یک گروه ثابت، کاربر باید برای فهرست کامل، روی منوی کشویی کلیک کند.



شکل ۲-۲۱ انتخاب گروه ثابت جنبشی

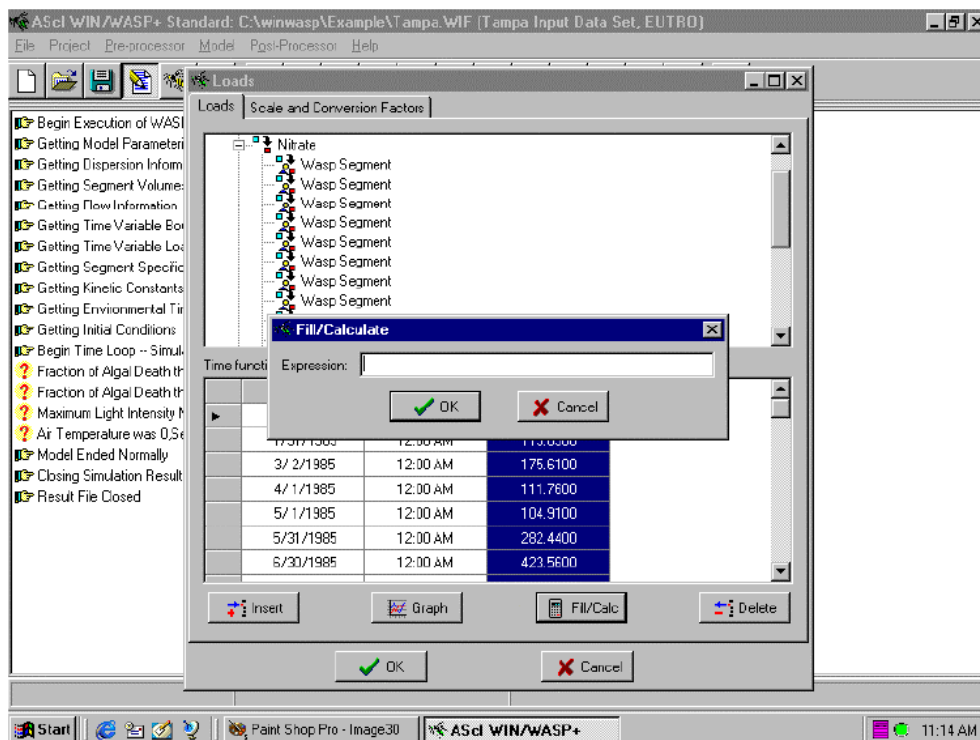
زمانی که یک گروه ثابت انتخاب می‌شود، به کاربر فرصت داده می‌شود تا داده‌های ثابت را وارد کند. WASP 6 به کاربر اجازه می‌دهد تا ثابت‌ها را با چک کردن فهرست انتخاب Use و سپس وارد کردن یک مقدار ثابت جنبشی فعال کند. وقتی یک ثابت کنترل نشده باشد، اطلاعات به مدل منتقل نمی‌شود، اما مقدار ثابت کاربر حفظ می‌شود.



شکل ۲-۲۲ تعاریف ثابت جنبشی

### ۱۹-۲- پر کردن/محاسبه و نمودار

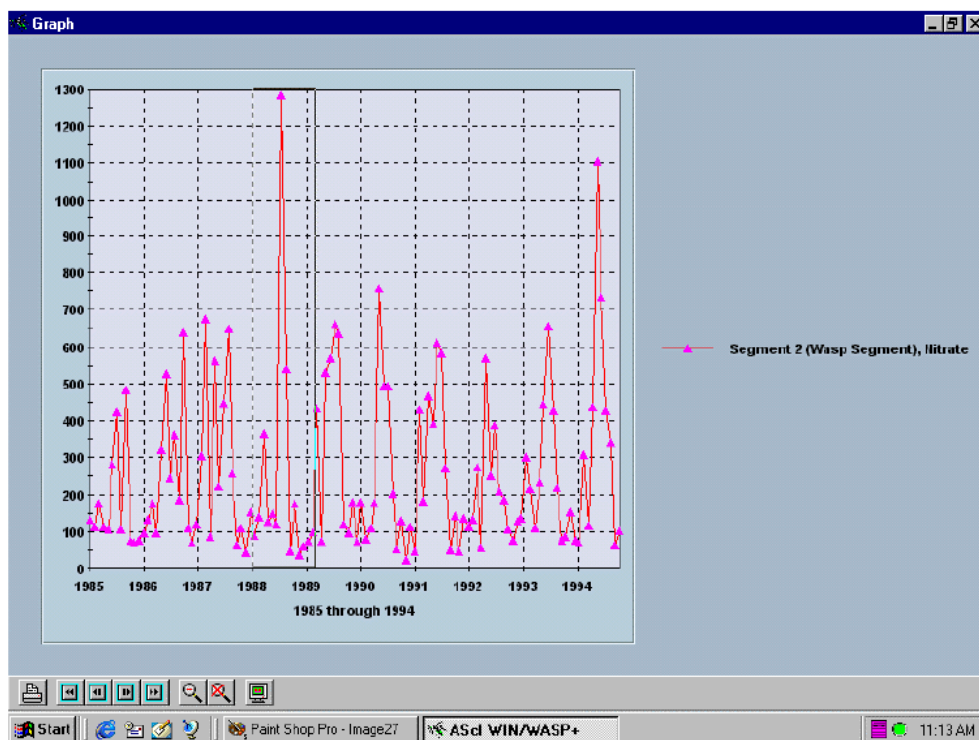
بیشتر صفحه‌های ورود داده‌ها این توانایی را دارند که به‌طور خودکار پر شوند و محاسباتی را در زمینه‌های جدول انجام دهند. برای دستیابی به این کار زمینه‌ها را با استفاده از توابع استاندارد ویندوز علامت‌گذاری کرده و سپس دکمه fill / calculate را فشار دهید.



شکل ۲-۲۳ گزینه‌ی Fill/Calculate برای محاسبه

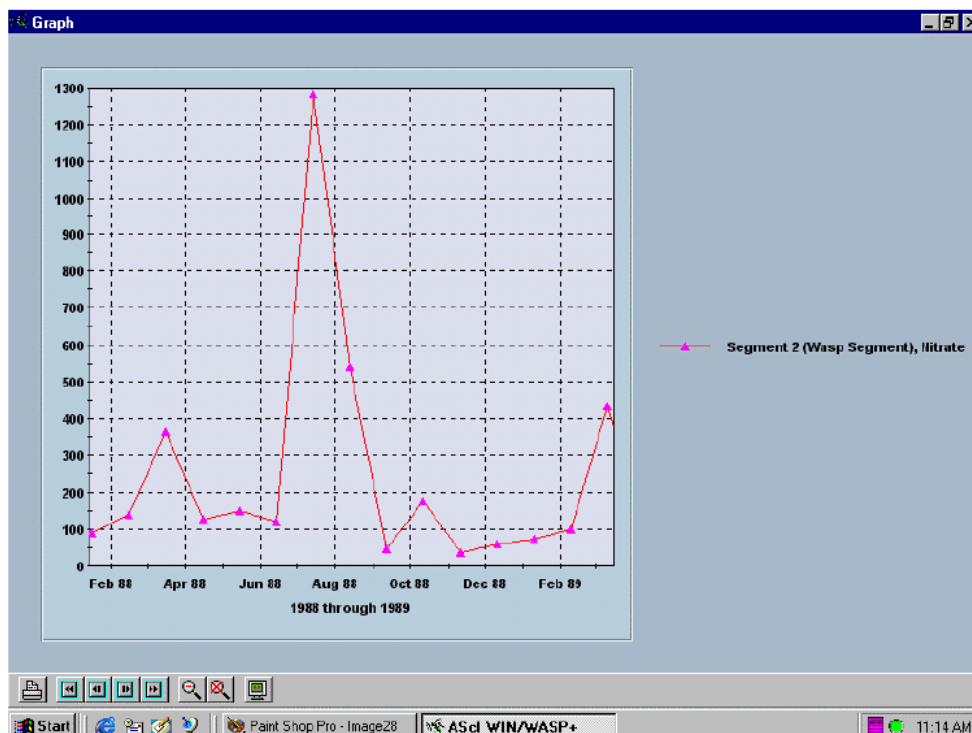
WASP 6 هم‌چنین به کاربر اجازه ترسیم داده‌های سری زمانی از هر جدول مناسب را می‌دهد. برای ترسیم یک سری زمان، دکمه Graph را فشار دهید.





شکل ۲-۲۴ گزینه‌ی نمودار سری زمانی

کاربر می‌تواند محور  $X$  و  $Y$  را زوم کند. برای بزرگ‌نمایی محور  $X$  کاربر باید مکان‌نما را در نقطه شروع زوم قرار دهد، دکمه سمت چپ ماوس را پایین نگاه‌دارد و کادر را به سمت راست بکشد تا منطقه کامل را برای بزرگ‌نمایی انتخاب کند. بزرگ‌نمایی محور  $Y$  به همان روش انجام می‌شود با این تفاوت که ماوس به سمت راست و کادر به سمت پایین کشیده می‌شود.



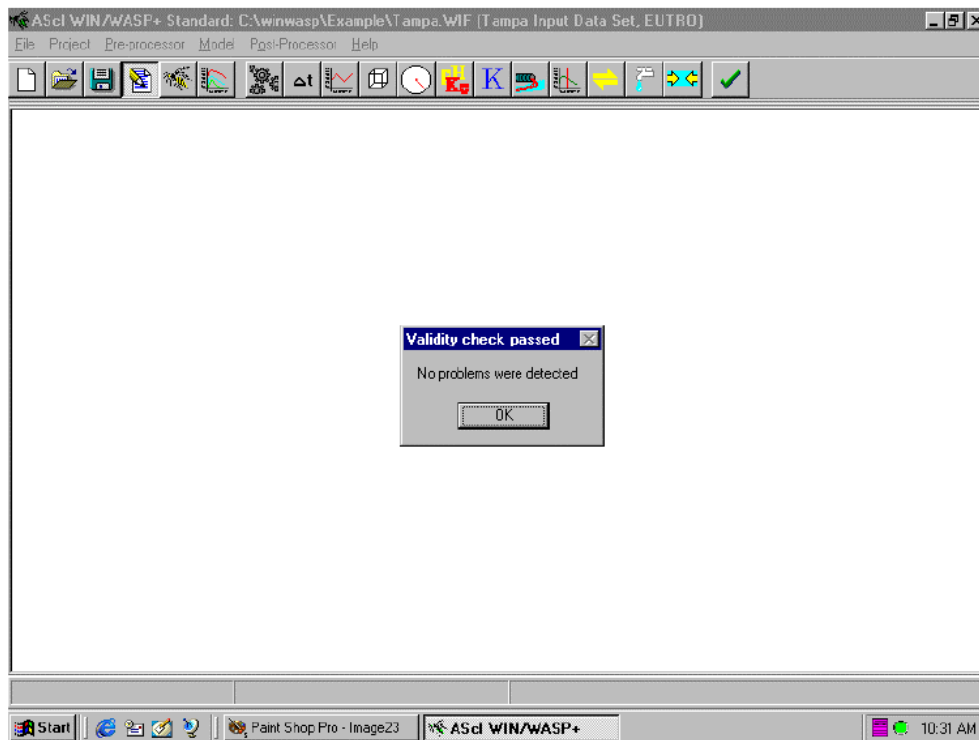
شکل ۲-۲۵ گزینه‌ی بزرگ‌نمایی نمودار

### ۲-۱۹-۱- تعریف نوار ابزار

کاربر یک نوار ابزار در گوشه سمت چپ پایین پنجره گراف ارائه می‌کند. این نوار ابزار کنترل‌های لازم را بر روی نمودار نشان می‌دهد.

### ۲-۲۰-۲- صحت‌سنجی

صحت‌سنجی، اطلاعات ورودی داده‌شده توسط کاربر را بررسی می‌کند تا اطمینان حاصل شود که مشکلی وجود ندارد. این روش، روشی سریع برای اطمینان از این است که تمام داده‌های شما درست بوده و در درون قابلیت‌های ابعادی مدل انتخابی قرار دارند.

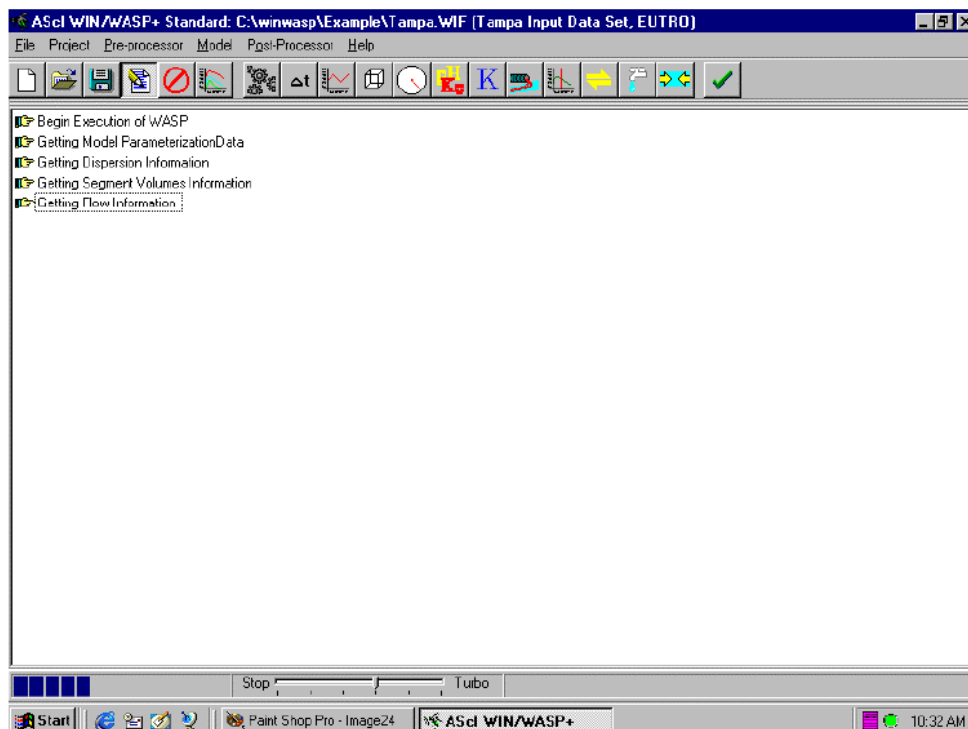


شکل ۲-۲۶ بررسی صحت مجموعه داده‌ها

اگر مشکلی در طول بررسی صحت رخ دهد، اطلاعات به کاربر منتقل می‌شود. اگر هیچ مشکلی به وجود نیامد، کاربر باید دکمه OK را فشار دهد.

## ۲-۲۱- اجرای مدل

برای اجرای مجموعه داده ورودی بارگذاری شده، کاربر باید آیکون Model Exception را در نوار ابزار اصلی فشار دهد. WASP6 بر اساس نوع مدلی که توسط کاربر در فرم ورودی مدل پارامتره تنظیم شده است، مدل مناسب (TOXI/EUTRO) DLL را بارگذاری می‌کند. توجه: قبل از اجرای مدل باید یک مجموعه داده ورودی در WASP 6 باز کنید.



شکل ۲-۲۷ باز یابی داده‌های مدل

پس از اجرای مدل، WASP 6 اطلاعاتی را در مورد این که در چه مرحله‌ای از شبیه‌سازی قرار دارد به کاربر ارائه می‌دهد. اولین مجموعه اطلاعات وضعیت باز یابی داده‌ها از پیش پردازنده است. WASP 6 فایل‌های ورودی معمولی را از نسخه‌های قبلی WASP 6 و WASP نمی‌خواند، بلکه در صورت نیاز، درخواست اطلاعات مربوط را به پردازنده می‌دهد. بسته به اندازه شبکه مدل شما و مقدار داده متغیر زمانی، این فرآیند می‌تواند مدتی طول بکشد. پس از باز یابی داده‌های مدل، شبیه‌سازی آغاز می‌شود و پس از شروع شبیه‌سازی، شبکه روی صفحه ظاهر می‌شود. این شبکه شامل نتایج میانگین برای هر یک از متغیرهای حالت هر کدام از بخش‌ها می‌باشد. کاربر می‌تواند برای بررسی نتایج از این شبکه استفاده کند و همچنین با کشیدن مرز ستون به داخل / خارج، یک ستون را کوچک یا کشیده کند.

ASci WIN/WASP+ Standard: C:\winwasp\Example\Tampa.WIF (Tampa Input Data Set, EUTRO)

File Project Pre-processor Model Post-Processor Help

	Ammonia	Nitrate	Ortho-P	Chl-a	BOD	DO	Org-N	Org-P	Flow
1	0.0474	0.0030	0.5205	5.4248	7.0202	7.5948	2.0964	0.1395	9.8782
2	0.0926	0.0016	0.5260	4.9722	6.8531	7.3467	1.9565	0.1222	15.1518
3	0.0662	0.0021	0.4900	4.1331	5.5901	7.5992	1.5637	0.1000	20.2232
4	0.1131	0.0066	0.5393	3.8190	4.7176	7.8618	1.3920	0.1184	27.2078
5	0.1305	0.0079	0.5173	3.5489	4.5672	7.3682	1.3444	0.1157	44.8398
6	0.1277	0.0059	0.4855	3.3296	4.4107	7.3832	1.2805	0.0860	53.7812
7	0.1430	0.0074	0.4446	3.0835	4.2452	7.0073	1.2498	0.0804	78.7893
8	0.1560	0.0124	0.3631	2.4360	3.5395	7.0654	0.9991	0.0603	83.0105
9	0.1742	0.0257	0.2207	1.2676	1.9239	6.9934	0.6149	0.0322	61.4672
10	0.1114	0.0158	0.1115	0.5642	1.0630	7.2981	0.4009	0.0153	66.2420
11	0.0898	0.0102	0.1069	0.9035	1.1026	7.5761	0.3943	0.0178	1.9053
12	0.0344	0.0016	0.2029	4.1427	7.6567	7.1997	1.6258	0.0974	0.4670

Begin Execution of WASP  
 Getting Model Parameterization Data  
 Getting Dispersion Information  
 Getting Segment Volumes Information  
 Getting Flow Information  
 Getting Time Variable Boundary Information  
 Getting Time Variable Loadings  
 Getting Segment Specific Environmental Conditions  
 Getting Kinetic Constants  
 Getting Environmental Time Functions  
 Getting Initial Conditions  
 Begin Time Loop - Simulation Started

Stop Turbo Simulation Time: 10/27/88

Start | Paint Shop Pro - Image25 | ASci WIN/WASP+ | 10:34 AM

شکل ۲-۲۸ شبکه زمان اجرا 6 WASP



## فصل سوم

### پس پردازنده ویژوال گرافیک

پس‌پردازنده که یک وسیله کارآمد برای پردازش مقدار گسترده‌ای از داده‌های تولیدشده می‌باشد، توسط اجرای مدل‌های WASP 6 توسعه داده‌شد. این قابلیت توانایی نمایش نتایج همه مدل‌های (EUTRO و TOXIC) موجود در بسته مدل‌سازی WASP 6 را دارد. پس‌پردازنده، فایل‌های خروجی ایجادشده توسط مدل‌ها را می‌خواند و نتایج را در دو قالب گرافیکی نمایش می‌دهد:

**شبکه فضایی:** یک نمایش دوبعدی از شبکه مدل در پنجره‌ای نمایش داده‌می‌شود که شبکه مدل بر اساس غلظت پیش‌بینی شده سایه‌دار می‌شود.

**نمودار x / y:** یک طرح خط x / y از نتایج مدل پیش‌بینی شده و / یا مشاهده‌شده، در یک پنجره ایجاد می‌کند. محدودیتی برای تعداد نمودارهای x / y، شبکه‌های فضایی و یا حتی فایل‌های نتیجه مدل که کاربر می‌تواند در یک دوره استفاده کند، وجود ندارد. پنجره‌های جداگانه برای هر شبکه فضایی یا نمودار x / y ایجاد شده، توسط کاربر ایجاد می‌شوند.

پس‌پردازنده گرافیکی به‌طور معمول از WASP 6 اجرا می‌شود. هم‌چنین کاربر می‌تواند برای اجرای برنامه از دکمه Windows Explorer یا Run استفاده کند. اگر WASP به‌طور داخلی و با انتخاب یک فایل ورودی اجرا شود، فایل‌های خروجی مدل مربوطه بارگذاری خواهند شد. اگر WASP 6 به‌طور داخلی بدون انتخاب یک فایل ورودی و یا توسط ابزارهای دیگر اجرا شود، کاربر باید از گزینه‌های فایل برای بازکردن فایل‌هایی که می‌خواهد نمایش دهند، استفاده کند.

### ۳-۱- تعریف ابزار

چندین حالت از نوار ابزارها و منوها در دسترس هستند. نوار ابزار اصلی در پایین منوی کشویی موجود است و عملکردهای زیر را برای کاربر فراهم می‌کند. بسته به وضعیت فعلی، برخی آیکون‌ها ممکن است برای انجام یک کار در دسترس نباشند، بنابراین فعال نیستند.



آیکون Open File. این آیکون کادر گفت‌گویی پرونده را شروع می‌کند که به کاربر اجازه می‌دهد تا یک فایل از نتایج مدل، مانند فایل‌های (BMD)، فایل پس‌زمینه هندسی (BMG) یا پایگاه‌داده داده‌های مشاهده‌شده (DB) را باز کند.



آیکون Open File. این آیکون کادر محاوره‌ای فایل را شروع می‌کند که به کاربر اجازه می‌دهد تا یک فایل از نتایج مدل، مانند فایل‌های (\*BMD)، فایل پس‌زمینه هندسی (\*BMG) یا پایگاه‌داده داده‌های مشاهده‌شده (\*DB) را باز کند.





با استفاده از پوشش GIS، یک پنجره انیمیشن مکانی ایجاد می‌کند. این گزینه فقط در صورت باز شدن پوشش GIS در دسترس است. یکی از نیازهای پوشش GIS، پوشش شبکه مدل است.



پنجره نمودار  $x / y$  ایجاد می‌کند. این آیکون تنها پس از بارگذاری داده‌های مدل (\*BMD) یا داده‌های پایگاه داده مشاهده شده (\*DB)، پنجره نقشه  $x / y$  را باز می‌کند.



پایگاه بارگیری داده‌های مشاهده شده را ویرایش می‌کند.

### ۲-۳- انتخاب خروجی مدل

پس‌پردازنده گرافیکی، طراحی شده است تا به کاربر اجازه دهد نتایج شبیه‌سازی‌های مدل WASP و برنامه‌های پشتیبانی آن را به سرعت ارزیابی کند. داده‌های مشاهده شده هم‌چنین می‌توانند در چارچوب پایگاه داده ذخیره شوند.

چهار نوع داده شناسایی شده‌اند:

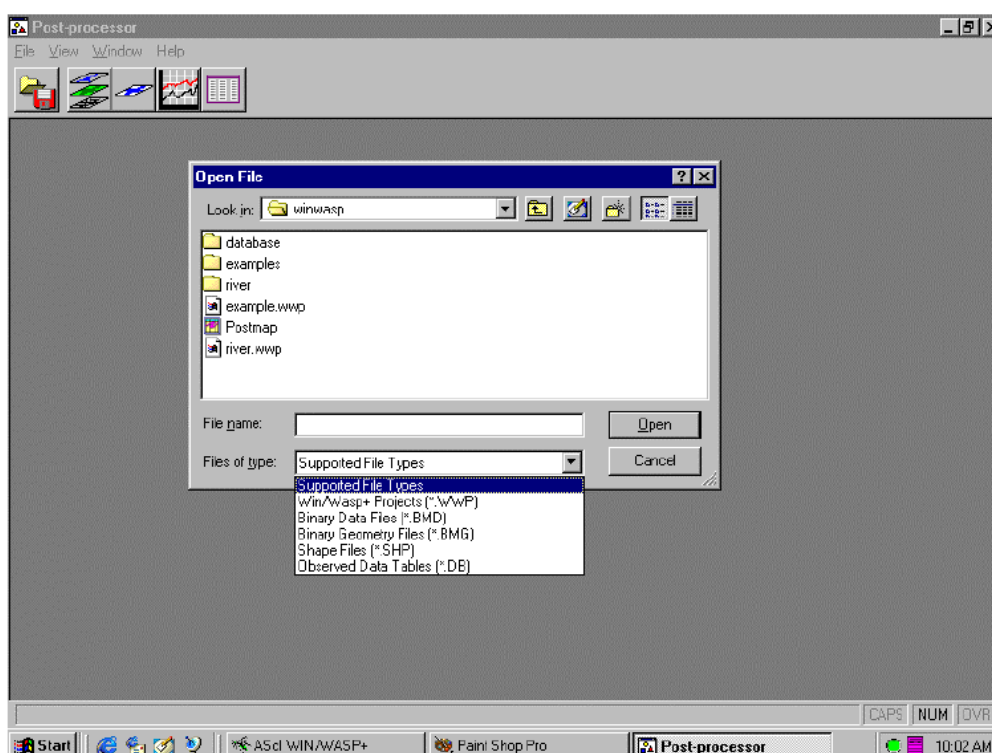
اولین نوع داده، از اجرای مدل‌های WASP ایجاد می‌شود (BMD). خروجی WASP با فرمت فایل باینری (دودویی) نوشته شده است و نتایج مدل مستقیماً توسط برنامه دیگری قابل خواندن نیست. دومین نوع فایل قابل خواندن، یک فایل جدول (\*DB) Paradox است. فایل جدول Paradox برای ارائه داده‌های مشاهده شده/ میدانی که در مقابل پیش‌بینی‌های مدل ترسیم می‌شوند، استفاده می‌شود. نوع سوم فایل یک فایل با فرمت ArcView است که با توجه به موقعیت جغرافیایی و ویژگی‌های اطراف آن، می‌توان از این فایل‌ها در حالت آنالیز فضایی برای کمک به کاربر در نمایش شبکه مدل استفاده نمود.

آخرین نوع فایلی که استفاده می‌شود فایل هندسه مدل باینری (دودویی) است. این فایل برای تهیه اطلاعات هندسه شبکه فضایی به کار می‌رود تا بتوان نتایج مدل را در شبکه مدل ترسیم کرد.

### ۳-۲-۱- باز کردن خروجی مدل

قبل از کار با داده‌های مدل یا داده‌های مشاهده شده، فایل‌ها باید توسط کاربر انتخاب شوند. محدودیتی در تعداد فایل‌هایی که می‌توانند باز شوند، وجود ندارد. اگر کاربر مایل به باز کردن فایل‌های اضافی باشد، روال ذکر شده در زیر نحوه بارگذاری انواع مختلف فایل را نشان می‌دهد.

برای بازکردن یک فایل، کاربر می‌تواند از سیستم منو استفاده کرده و open file را انتخاب کند و یا آیکن open file را فشاردهد. همان‌طور که مشاهده می‌کنید در شکل (۱-۳) یک کادر محاوره‌ای نشان داده شده‌است. با استفاده از این کادر محاوره‌ای فایل، کاربر می‌تواند به هر درایو و فهرست راهنمایی که کامپیوتر به آن‌ها متصل است، دسترسی پیدا کند. با فشاردادن پیکان پایین روی محاوره نوع فایل، لیستی از پسوند‌های معتبر فایل برای کاربر نمایش داده می‌شود. انتخاب یک پسوند منجر به نمایش مجموعه‌ای از فایل‌های موجود در درایور و فهرست راهنمای فعلی خواهد شد.



شکل ۱-۳ کادر گفت‌گویی فایل

## فرمت BMD

برای بازکردن فایل نتیجه شبیه‌سازی WASP، داده‌های مدل باینری را از کادر نوع فایل انتخاب کنید. این کار باعث می‌شود کادر محاوره‌ای فایل فقط آن دسته از فایل‌هایی که دارای پسوند BMD هستند، را نمایش دهد. کاربر می‌تواند بین درایورها و دایرکتوری‌ها حرکت کند تا فایلی برای بررسی انتخاب

کند. کاربر می‌تواند روی فایل موردنظر دوبار کلیک کرده و یا فایل را برجسته نموده و دکمه open را فشار دهد. پس از باز شدن فایل، نماد نقشه  $x/y$  در دسترس خواهد بود. توجه: قبل از دسترسی به آیکون تجزیه و تحلیل شبکه فضایی، کاربر باید فایل هندسی مدل باینری (BMG) را بارگذاری کند.

### فایل BMG

از فایل‌های BMG برای ارائه اطلاعات هندسه شبکه تحلیل فضایی استفاده می‌شوند. این فایل‌ها مختص مدل کردن داده‌های ورودی خاص هستند (یعنی فایل‌های BMG باید با اطلاعات موجود در فایل‌های BMD مطابقت داشته باشند). فایل‌های BMG با استفاده از یک برنامه کاربردی به نام Digitize ایجاد می‌شوند. همچنین این فایل‌ها باید قبل از اجرا ایجاد شوند. فایل BMG نیز به همان روش سایر فایل‌ها با تنظیم نوع فایل به BMG و انتخاب فایل، انتخاب می‌شود. توجه: قبل از دسترسی به آیکون تجزیه و تحلیل شبکه فضایی، کاربر باید فایل هندسی مدل باینری (BMG) را بارگذاری کند.

### داده‌های مشاهده شده

داده‌های مشاهده شده، در قالب Paradox 4/5 یا بالاتر (\*DB) هستند. به منظور نمایش داده‌های مشاهده شده در مقابل نتایج مدل پیش‌بینی شده، پایگاه داده باید دارای فرمت خاصی باشد. برای بارگذاری یک پایگاه داده مشاهده شده، مراحل ذکر شده در بالا را دنبال کرده و نوع فایل را به DB تغییر دهید. پایگاه داده را انتخاب کنید و open را فشار دهید. انتظار می‌رود که پایگاه داده "داده‌های مشاهده شده" در یک فرمت فایل مشخص همراه با نام فیلدهای از پیش تعریف شده باشد.

### ۳-۳- تجزیه و تحلیل گرافیکی فضایی

تجزیه و تحلیل گرافیکی فضایی به کاربر اجازه می‌دهد تا نتایج مدل را برای کل شبکه، برای یک مؤلفه و زمان معین مرور کند. این شیوه‌ی نمایش گرافیکی از نتایج مدل، در نشان دادن پیش‌بینی مدل به مخاطبان غیرفنی بسیار مؤثر است.

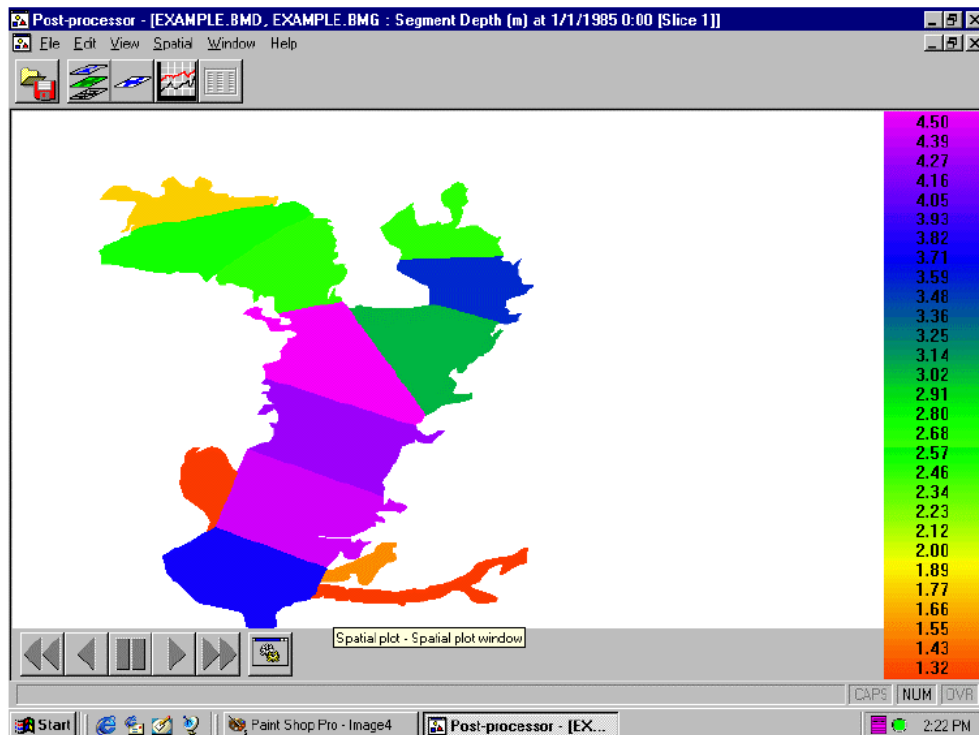
### ۳-۳-۱- بررسی اجمالی

تابع تجزیه و تحلیل گرافیکی فضایی به کاربر اجازه می‌دهد تا نتایج مدل را در یک شبکه فضایی با استفاده از سایه‌زدن مقادیر پیش‌بینی شده، نمایش دهد. برای ایجاد شبکه‌های تحلیل فضایی دو گزینه

وجود دارد. گزینه‌ی اول به کاربر اجازه می‌دهد تا یک فایل هندسی مدل باینری (\*BMG) تهیه کند تا بخشی از شبکه مدل‌سازی یا شبکه کامل را نشان دهد. BMG به‌طور خاص، برای مجموعه داده‌های یک مدل خاص توسعه داده شده است که قرار است با مستندات مربوطه برای هر یک از عناصر محاسباتی مدل نمایش داده شود. به عبارت دیگر، BMG چندضلعی‌هایی دارد که باید براساس غلظت پیش‌بینی شده عناصر محاسباتی مدل که در زمان ایجاد فایل BMG توسط کاربر تعیین می‌شوند، سایه زده شوند.

تجزیه و تحلیل شبکه فضایی سه حالت برای جستجو در نتایج مدل فراهم می‌کند: shaded (سایه‌دار)، wired frame (قاب سیمی) و violation/criteria shading (سایه نقض/شاخص). این حالت‌های مختلف به تجزیه و تحلیل گرافیکی فضایی اجازه می‌دهد تا اطلاعات شبیه‌سازی مدل را به گونه‌ای نشان دهد تا درک نتایج برای اشخاص غیرفنی آسان‌تر شود. در بخش زیر اطلاعاتی در مورد نحوه استفاده و پیکربندی گزینه‌ی گرافیکی فضایی ارائه شده است.

برای شروع یک شبکه فضایی، کاربر باید آیکون تجزیه و تحلیل شبکه فضایی را فشار دهد. همان‌گونه که در شکل (۳-۲) نشان داده شده است، با این کار یک پنجره شبکه فضایی ایجاد می‌شود. کاربر می‌تواند بسیاری از این پنجره‌ها را به دلخواه ایجاد کند. هر پنجره را می‌توان تنظیم کرد تا نتایج مدل‌های مختلف و همچنین حالت‌های مختلف را نشان دهد.



شکل ۳-۲ شماتیک آنالیز فضایی

### ۳-۳-۲- نوار ابزار شبکه فضایی

گزینه‌ی دوم برای ابزار تجزیه و تحلیل فضایی این است که به کاربر اجازه می‌دهد تا شبکه مدل را با استفاده از ArcView توسعه دهد و با سایر پوشش‌های GIS ترکیب کند. برای استفاده از این روش، کاربر باید یک کپی از ArcView همراه با اطلاعات و دانش مناسب در مورد نحوه استفاده از آن داشته باشد. هر شبکه فضایی که توسط کاربر ایجاد می‌شود، مجموعه کنترل‌های خاص خود را دارد که به کاربر اجازه می‌دهد تا محتویات را تغییر دهد. توضیحاتی در مورد هر یک از آیکون‌های موجود در نوار ابزار فضایی در زیر آورده شده است:



پیکربندی شبکه انیمیشن. این دکمه به کاربر اجازه می‌دهد تا به صفحه پیکربندی شبکه فضایی دسترسی پیدا کند که در آن کاربر می‌تواند انتخاب کند که چه تصویری از پس زمینه و داده‌های مدل نمایش داده شود.



که پس پردازنده برای تراز کردن نتایج پیش بینی شده مدل با بخش صحیح از آن استفاده می کند. هنگام ایجاد این جدول، کاربر باید حداقل یک فیلد SEGID داشته باشد. این فیلد باید یک فیلد رشته ای باشد و SEGID نامیده شود. LABEL نیز یک فیلد رشته ای است که می تواند به صورت اختیاری اضافه شود. از قسمت LABEL می توان برای قراردادن توضیحاتی در کنار نقشه فضایی استفاده کرد. کاربر در مورد نحوه ایجاد، ویرایش و تغییر جداول به اسناد ArcView ارجاع داده می شود.

Shape	Id	SEGID	LABEL
Polygon	0	1	
Polygon	0	2	
Polygon	0	3	
Polygon	0	4	Lover's Lane
Polygon	0	5	
Polygon	0	6	
Polygon	0	7	
Polygon	0	8	Jackson
Polygon	0	9	Central
Polygon	0	10	
Polygon	0	11	
Polygon	0	12	Baxter
Polygon	0	13	
Polygon	0	14	
Polygon	0	15	

شکل ۳-۳ تعاریف بانک اطلاعاتی مدل

### ۳-۳-۴- ایجاد فایل BMG با Digitize

قبل از نمایش یک شبکه تجزیه و تحلیل فضایی، باید یک فایل BMG ایجاد شود. این فایل با استفاده از یک برنامه کاربردی به نام Digitize ایجاد می‌شود. Digitize به کاربر اجازه می‌دهد تا شبکه مدل یا بخشی از شبکه مدل را روی صفحه ترسیم کند و شماره‌های مقاطع را به چندضلعی‌هایی که ارائه می‌دهند، اختصاص دهد. مطابقت یک به یک بین چندضلعی‌هایی وجود دارد که با یک مقطع عرضی در فایل مدل BMD ترسیم شده‌اند.

#### اجرای معمول Digitize

برنامه Digitize یک برنامه مبتنی بر DOS است. از آنجا که Digitize به درگاه‌های ارتباطی رایانه نیاز دارد و از درایور ارتباطی خود استفاده می‌کند، این برنامه در محیط ویندوز قابل اجرا نیست. Digitize از گزینه‌ی Windows Command Prompt باید اجرا شود. برای راه‌اندازی ویندوز در حالت خط فرمان (Command Prompt)، سیستم ویندوز خود را مجدداً راه‌اندازی کنید. هنگامی که رشته شروع ویندوز روی صفحه ظاهر می‌شود، کلید F8 را فشار داده و گزینه‌ی خط فرمان (Command Prompt) را انتخاب کنید. برای اجرای Digitize دایرکتوری را به مکان نصب محیط WASP 6 تغییر دهید.

#### رقمی کردن پارامترها

آخرین مرحله برای ایجاد فایل BMG، پیوند دادن همه‌ی برش‌های مختلف به یک فایل BMG است. فایل BMG با استفاده از برنامه‌ای به نام Digilink ساخته می‌شود.

#### توسعه یک شبکه فضایی

فایل شبکه فضایی (BMG) یک فایل خاص است که اطلاعات هندسی را در اختیار شما قرار می‌دهد. این اطلاعات هندسی با استفاده از برنامه Digitize تولید می‌شود. برنامه Digitize دارای دو نوع رابط است که در آن کاربر می‌تواند اطلاعات را وارد کند: اگر کاربر به ماوس و digitizer (تبلت) دسترسی داشته باشد، احتمالاً این حالت، مناسب‌ترین حالت برای تولید فایل‌های BMG است.

#### با ماوس

رابط ماوس به کاربر اجازه می‌دهد تا با ترسیم شبکه مدل با استفاده از ماوس، شبکه مدل را توسعه دهد. هر عنصر محاسباتی که در شبکه مدل تعریف می‌شود، باید توسط چندضلعی مجزا ارائه شود. برای استفاده از Digitize با رابط ماوس، برنامه باید با پارامتر خط فرمان m- بارگذاری شود. این دستور، Digitize را برای گرفتن اطلاعات نقشه از ماوس آماده می‌کند.



### با Digitizer

رابط digitizer این امکان را به کاربر می‌دهد تا با استفاده از یک تابلت دیجیتالیزر، شبکه مدل را توسعه دهد. این روش، روشی دقیق‌تر برای توسعه شبکه فضایی مدل است، به‌صورتی که به کاربر این امکان را می‌دهد تا نقشه‌های مهندسی پیکره آبی را دریافت کند و شبکه مدل را درست در بالای صفحه قرار دهد. در هنگام استفاده از رابط دیجیتالیزر، کاربر باید Digitize را به پورت ارتباطی که برای خواندن اطلاعات از آن استفاده می‌کند، هدایت کند. این کار با استفاده از یک پارامتر خط فرمان - COM2 انجام می‌شود، که به Digitize دستور می‌دهد تا اطلاعات را از تابلت دیجیتالیزر با استفاده از پورت ارتباطات ۲ دریافت کند.

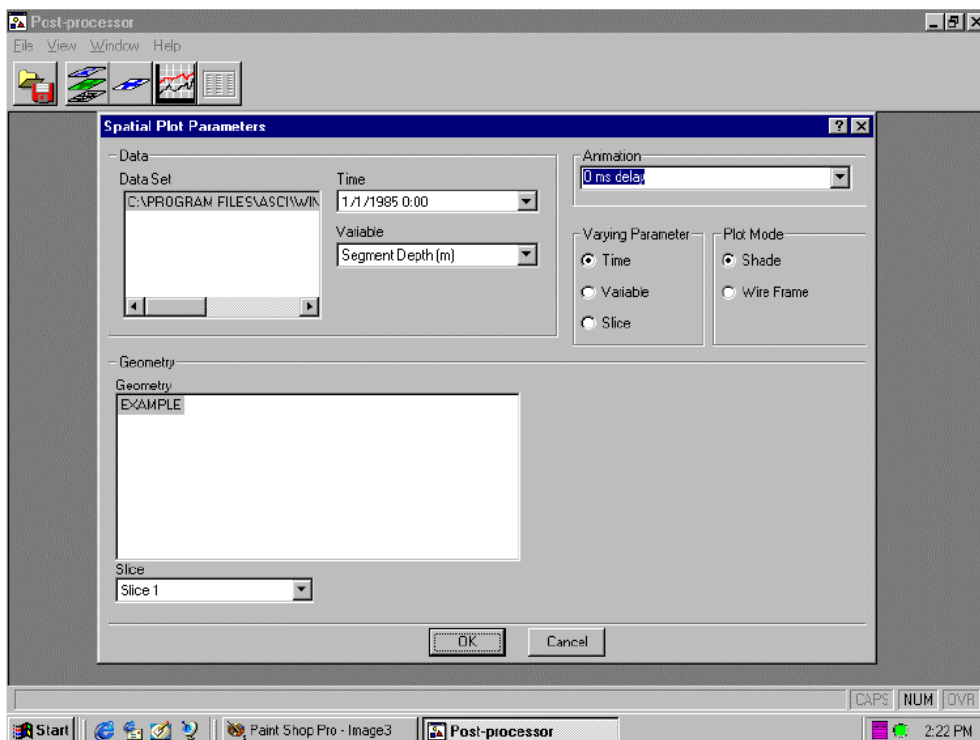
### ۳-۳-۵- کنترل تجزیه و تحلیل مکانی

هر یک از پنجره‌های تجزیه و تحلیل شبکه فضایی را می‌توان با چندین روش مختلف برای نمایش نتایج مدل پیکربندی کرد. کاربر می‌تواند برای نمایش نتایج یکی از سه حالت انیمیشن زیر را انتخاب کند: **زمان** - این حالت نتایج را برای یک متغیر واحد در زمان به جلو/ عقب متحرک می‌کند. این حالت ترجیحی از شبکه تجزیه و تحلیل فضایی است.

**متغیر** - این حالت نتایج مدل را برای هر یک از متغیرهای موجود در پرونده خروجی به‌صورت سایه‌دار را نشان می‌دهد. فشردن نماد رو به جلو/ عقب باعث خواهد شد که شبکه انیمیشن فضایی، نتایج هر یک از متغیرها را نشان دهد.

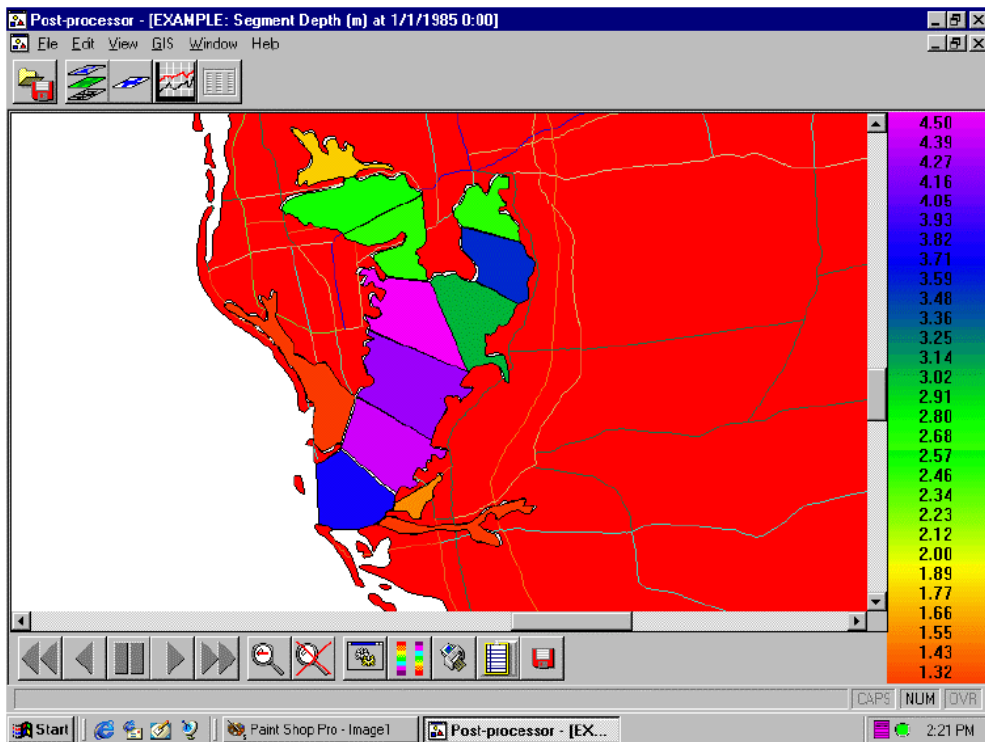
**برش** - این گزینه نتایج مربوط به یک متغیر معین را در طیف وسیعی از بخش‌های موجود در پرونده BMG پیدا و نمایش می‌دهد.

شکل (۳-۴) صفحه پیکربندی شبکه تجزیه و تحلیل فضایی غیر GIS را نشان می‌دهد.



شکل ۳-۴ پیکربندی تجزیه و تحلیل فضایی (غیر GIS)

گزینه‌ی GIS به استثنای قابلیت نمایش لایه‌های منحصربه‌فرد، مانند سایر موارد عمل می‌کند.



شکل ۳-۵ نمایش تجزیه و تحلیل فضایی GIS

### ۳-۳-۶- انتخاب مجموعه داده‌ها

از آن‌جا که بیش از یک فایل نتیجه شبیه‌سازی مدل می‌تواند بارگذاری شود، کاربر توانایی انتخاب هر کدام از فایل‌های نتایج مدل را برای نمایش دارد. هر شبکه تجزیه و تحلیل فضایی می‌تواند تنها یک فایل نتیجه مدل را نشان دهد.

برای انتخاب مجموعه داده بارگذاری شده کنونی جهت نمایش در شبکه تجزیه و تحلیل فضایی فعلی، دکمه تنظیمات را فشار داده و لیست کشویی را برای مجموعه داده‌ها انتخاب کنید.

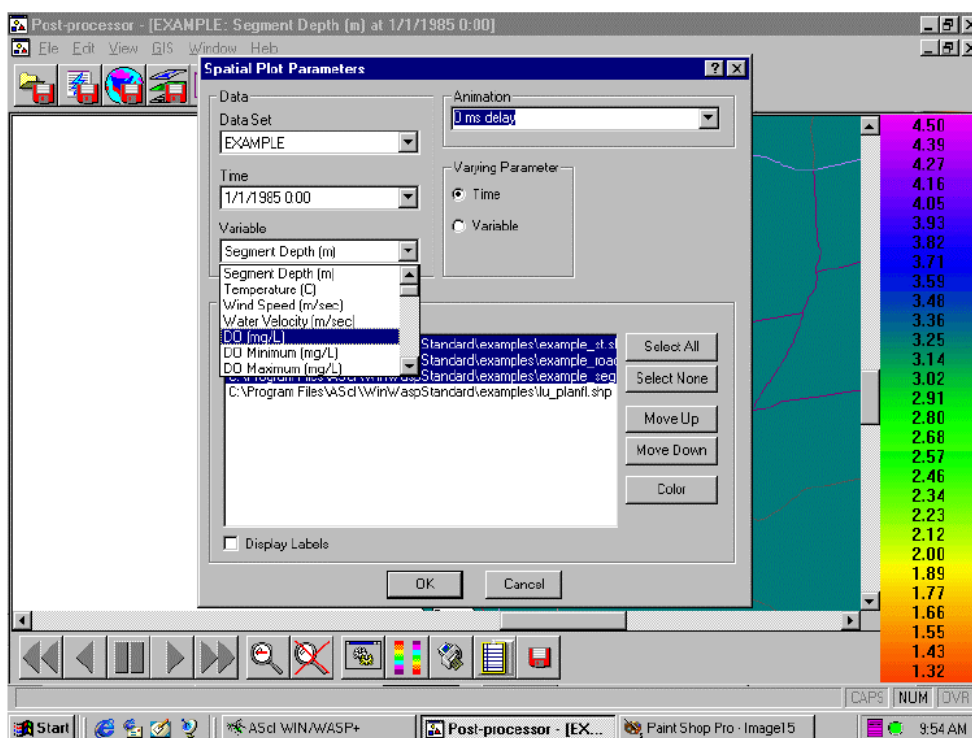
توجه: تجزیه و تحلیل شبکه فضایی فقط می‌تواند اطلاعات را از یک فایل نتیجه مدل به‌طور هم‌زمان نمایش دهد. کاربر این امکان را دارد که در صورت نیاز تعداد بیش‌تری از پنجره‌های شبکه تحلیل فضایی را ایجاد کند.

### ۳-۳-۷- انتخاب برش/هندسه

فایل هندسه مدل باینری (BMG) از فهرست کشویی انتخاب شده‌است. یک فایل BMG می‌تواند شامل بیش از یک نمای (slice) شبکه مدل باشد. یک slice به سادگی مجموعه‌ای از چندضلعی‌ها است که به مجموعه‌ای از مقاطع اختصاص داده می‌شوند. یک فایل BMG می‌تواند بیش از یک slice (بخش) داشته‌باشد و در طول توسعه Digitize ایجاد می‌شود. برای انتخاب slice که در پرونده BMG موجود است، نام slice را از فهرست کشویی از صفحه تنظیمات انتخاب کنید.

### ۳-۳-۸- انتخاب متغیر

کاربر توانایی انتخاب هریک از متغیرهای نتایج شبیه‌سازی است که با اجرای مدل‌های WASP روی فایل خروجی نوشته شده‌اند را دارد. فایل نتایج مدل (EUTRO یا TOXI)، متغیرهایی را که برای نمایش در دسترس هستند، تعیین می‌کند. برای انتخاب یک متغیر برای یک فایل خروجی انتخابی، از فهرست کشویی متغیر استفاده کنید و متغیری را انتخاب کنید که می‌خواهید در شبکه تحلیل فضایی نمایش داده شود.



شکل ۳-۶ انتخاب متغیر برای نمایش

توجه: شبکه تجزیه و تحلیل فضایی تنها می‌تواند یک متغیر نتیجه را در زمان نشان دهد.

### ۳-۳-۹- انتخاب زمان

شبکه تجزیه و تحلیل فضایی، نتایج را برای متغیر معین در یک زمان معین نشان می‌دهد. کاربر نه‌تنها توانایی کنترل نمایشگر متغیرها را دارد، بلکه می‌تواند زمان نمایش را نیز کنترل کند. کاربر می‌تواند زمان شبیه‌سازی را برای نمایش نتایج برای یک متغیر مشخص انتخاب کند. لیست کشویی این امکان را به کاربر می‌دهد که شبکه تجزیه و تحلیل فضایی را به زمان‌های خاص و بدون پیمایش از هر فاصله زمانی منتقل کند.

### ۳-۳-۱۰- نوار رنگی

کاربر توانایی تغییر نوار رنگی که برای سایه‌زدن نقشه استفاده می‌شود را دارد، رایج‌ترین تغییر در نوار رنگ، وارونه کردن نواری می‌باشد که در حال بارگذاری شدن است. کلیک بر روی دکمه رادیویی Invert

باعث می‌شود که نوار رنگی معکوس شود (یعنی رنگ‌ها برای مقادیر پایین به رنگ‌هایی برای مقادیر بالاتر تبدیل می‌شوند). کاربر هم‌چنین با انتخاب یک نوار رنگی جدید توانایی انتخاب طرح رنگی متفاوتی را دارد. برای انتخاب نوار رنگی جدید، کاربر باید دکمه browse را فشار داده و یک نوار را انتخاب کند.

### ۳-۳-۱۱- انیمیشن

متداول‌ترین کاربرد شبکه تجزیه و تحلیل فضایی، نمایش متحرک پیش‌بینی مدل است. وقتی دکمه‌های جلو/ عقب در نوار ابزار فشار داده می‌شوند، شبکه تحلیل فضایی بسته به پارامتر متغیر با زمان یا متغیر بعدی به‌روز می‌شود. به‌طور مداوم با فشار دادن دکمه رو به جلو، کاربر می‌تواند "فیلمی" از نتایج پیش‌بینی شده مدل ایجاد کند. از طرف دیگر، کاربر می‌تواند نماد فیلم را نیز فشار دهد. سرعت انیمیشن توسط گزینه‌های تحت پارامترهای نقشه فضایی کنترل می‌شود.

### ۳-۳-۱۲- حالت طرح

سه حالت ارائه شده‌است که با استفاده از آن‌ها، داده‌ها می‌توانند در پنجره‌ی تحلیل شبکه فضایی نمایش داده شوند:

#### سایه زدن

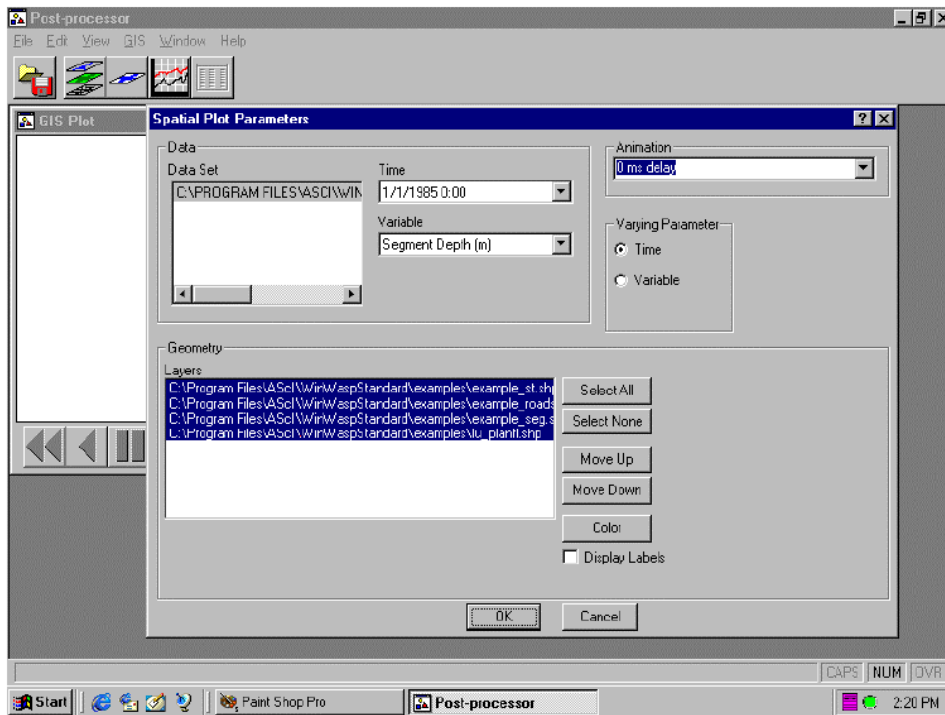
این حالت نتایج شبیه‌سازی را با سایه‌زدن به عنصر محاسباتی مدل بر اساس غلظت پیش‌بینی شده، نشان می‌دهد. یک راهنمای رنگی در سمت راست پنجره تحلیل فضایی نمایش داده می‌شود و عناصر محاسباتی بر اساس راهنما و بر اساس غلظت‌های پیش‌بینی شده توسط مدل، سایه‌زده می‌شوند.

#### قاب سیمی

این حالت نتایج شبیه‌سازی را در یک قاب سیمی نمایش می‌دهد. این حالت با حالت سایه تفاوت دارد، زیرا عناصر محاسبه‌شده مدل بر اساس غلظت‌های پیش‌بینی شده با رنگ پر نمی‌شوند. حالت قاب سیمی محیط بیرونی عنصر محاسباتی را با رنگی متناسب با غلظت پیش‌بینی شده تشریح می‌کند.

### ۳-۳-۱۳- پیکربندی GIS

اگر کاربر یک نمای فضایی GIS ایجاد کند، کنترل‌ها و پیکربندی ویندوز کمی متفاوت است. شکل (۳-۷) صفحه تنظیمات را برای گزینه‌ی GIS نشان می‌دهد.



شکل ۳-۷ پیکربندی طرح فضایی GIS

توجه: قبل از در دسترس بودن این گزینه باید فایل‌های لایه GIS بارگیری شود.

### ۳-۱۴- لایه‌ها

کاربر می‌تواند انتخاب کند و دستور دهد که لایه‌های GIS نمایش داده شوند. یک فهرست انتخاب به کاربر داده می‌شود که شامل فهرستی از تمام لایه‌های بارگذاری شده است و کاربر می‌تواند انتخاب کند که کدام یک را با استفاده از روش‌های استاندارد انتخاب پنجره به نمایش بگذارد. هنگامی که یک لایه به پنجره گفتگو انتخاب شده افزوده می‌شود، کاربر می‌تواند ترتیب کشیدن لایه را با بالا و پایین بردن آن در پنجره کنترل کند. شبکه مدل باید جزء آخرین لایه‌هایی باشد که کشیده می‌شوند تا اطمینان حاصل شود که لایه دیگری بر روی آن نوشته نشده است.

### انتخاب همه

این کار تمام لایه‌های بارگذاری شده را انتخاب خواهد کرد. پس از انتخاب، کاربر باید دکمه Add را فشار دهد.

### انتخاب هیچ کدام

لایه‌های انتخاب شده را از حذف می‌کند.

### دکمه بالا/پایین

دکمه پایین / بالا، لایه انتخاب شده (برجسته) در پایین در این فهرست را جابجا خواهد کرد. لایه‌ها بالای لیست اول ترسیم می‌شوند.

### رنگ لایه

کاربر توانایی انتخاب یک رنگ خاص برای یک لایه خاص را دارد. از آن جا که لایه‌های GIS دارای رنگ مرتبط نیستند، پس پردازنده یک رنگ را اختصاص می‌دهد. ممکن است این انتساب مطلوب نباشد، لذا برای تغییر رنگ لایه، لایه را انتخاب کرده و دکمه رنگ لایه را فشار دهید. کادر گفت‌گوی انتخاب رنگ به کاربر ارائه خواهد شد. رنگ را انتخاب کرده و Ok را فشار دهید.

### GIS - ۱۵-۳-۳

نوار ابزار GIS دارای دو دکمه اضافی است که در نمای آنالیز مکانی غیر GIS یافت نمی‌شود.



این دکمه نمای GIS را در یک فایل bitmap ذخیره می‌کند. کادر گفت‌گوی فایل معمولی به کاربر ارائه می‌شود.



این دکمه نمای GIS را در کلیپ‌بورد ویندوز کپی می‌کند. به گونه‌ای که در کلیپ‌بورد می‌توان آن را تقریباً در یک برنامه Windows دیگر قرار داد.



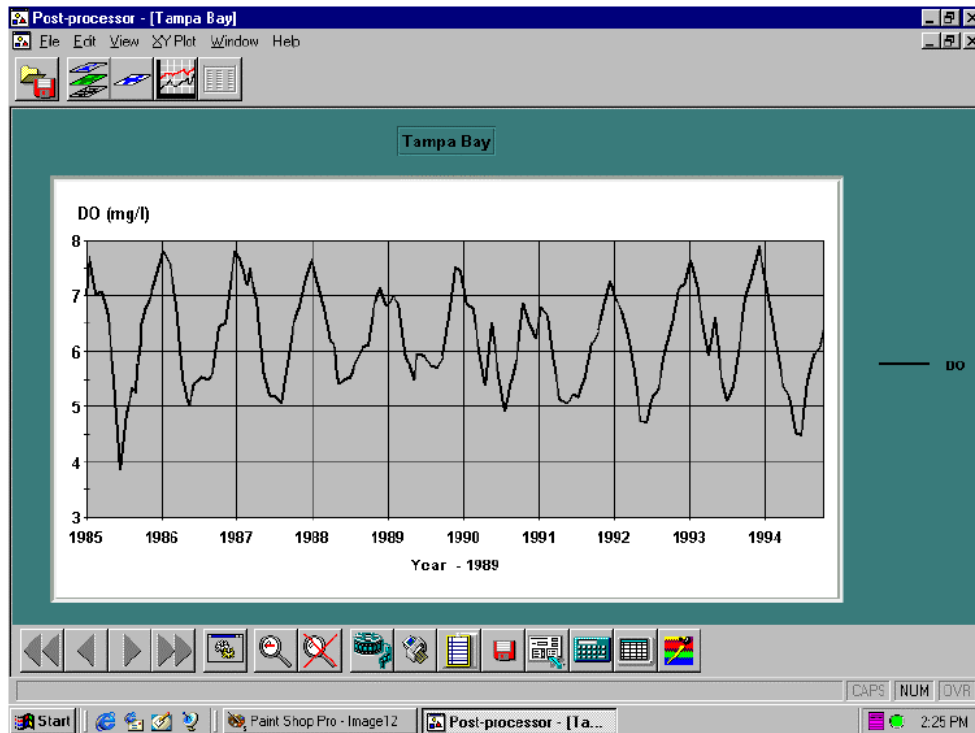
این دکمه نمای GIS را در چاپ‌گرهای متصل به سیستم چاپ می‌کند.

### ۳-۴ - نمودار x / y

#### ۳-۴-۱ - بررسی اجمالی

حالت نمودار x / y روش متداول است که داده‌های علمی نمایش داده می‌شوند. در زمانی که نمودارهای x / y در حال توسعه است تا حد امکان انعطاف بیش‌تری فراهم می‌کند. کاربر می‌تواند فایل‌های نتایج مدل‌های مختلف را که به‌طور هم‌زمان مشاهده شده‌اند را در مقابل پیش‌بینی‌های مدل ترسیم کند.





شکل ۳-۸ مثال نمودار

### ۳-۴-۲- نوار ابزار

پنجره نمودارهای  $x / y$  مجموعه‌ای از کنترل‌های خاص خود را دارد که به کاربر اجازه می‌دهد تا گزینه‌های مختلف موجود را انجام دهد. کاربر می‌تواند از طریق نوار ابزار یا منوی سرعت به این گزینه‌ها دسترسی پیدا کند. در زیر توضیحی از نوار ابزار نمودار  $x / y$  آمده است:



نمودار متحرک  $x / y$ . این گزینه زمانی وجود دارد که بیش از یک خط روی نمودار وجود داشته باشد. برای بازرسی بصری، یک صفحه را روی نمودار ضبط می‌کند و برای دیدن اختلاف "declutter" در نمودار استفاده می‌شود.



نمودار  $x / y$  را پیکربندی می‌کند. این نماد برای پیکربندی داده‌ی واردشده و همچنین برای چگونگی نمایش در طرح  $x / y$  به کار می‌رود.



Un-Zoom کردن یک سطح. این گزینه نموداری که کاربر، سطح بزرگ‌نمایی را در یک زمان اجرا می‌کند، لغو خواهد کرد. لغو بزرگ‌نمایی در یک واحد زمانی انجام می‌گیرد.



Un-Zoom نمودار  $x / y$ . این گزینه بزرگ‌نمایی نمودار را به ابعاد اصلی محورهای آن در زمان ایجاد نمودار بر می‌گرداند.



چاپ نمودارهای  $x / y$  در چاپ‌گر. این گزینه به کاربر امکان چاپ نمودار  $x / y$  را در چاپ‌گر می‌دهد. یک پنجره معمولی کادر گفت‌گویی پرینتر ظاهر می‌شود که به کاربر اجازه می‌دهد ظاهر نمودار را کنترل کند.



کپی کردن تصویر گرافیکی در کلیپ‌بورد. این گزینه یک نسخه از  $x / y$  را بر روی کلیپ‌بورد ویندوز ایجاد می‌کند. این تصویر کلیپ‌بورد می‌تواند در برنامه‌هایی مانند یک پردازنده کلمه برای انتشار جای‌گذاری شود.



ذخیره نمودار در دیسک. این گزینه یک فایل bitmap (BMP) از پنجره نمودار  $x / y$  ایجاد می‌کند. BMP ذخیره‌شده را می‌توان در برنامه‌هایی مانند پردازنده‌ی کلمه برای انتشار وارد کرد.



نمودار خروجی به جدول ASCII. این گزینه یک پرونده ASCII ایجاد می‌کند که حاوی مقادیر مربوط به هریک از خطوط از پنجره نمودار است. این جدول را می‌توان در صفحه گسترده یا سایر برنامه‌ها وارد کرد.



محاسبات منحنی. این نماد کادر محاوره‌ای محاسبه منحنی را نشان می‌دهد. کاربر می‌تواند تبدیل داده را روی داده انجام دهد یا از یکی از توابع از پیش تعریف‌شده استفاده کند.



ایجاد جدول داده‌ها از نمودار. این گزینه یک جدول داده ایجاد می‌کند که توسط خطوط در پنجره نمودار نشان داده شده‌است. کاربر می‌تواند داده‌ها را مرور کرده و آن‌ها را از جدول در برنامه‌هایی مانند صفحه گسترده کپی کند.



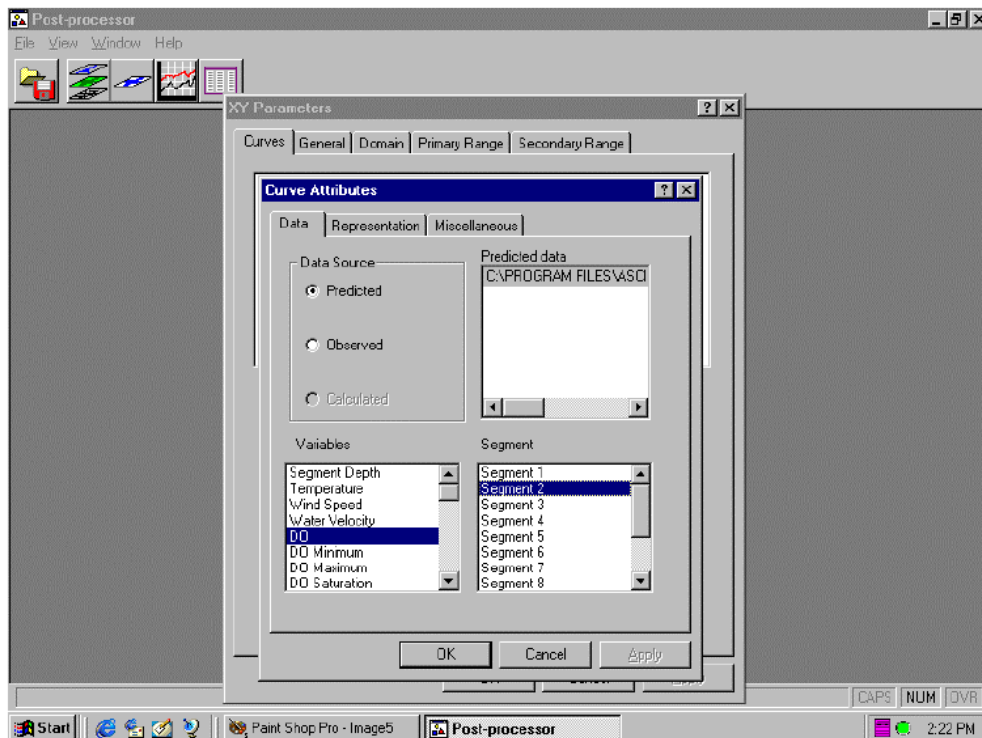
تغییر پنجره نمودار بین رنگی و سیاه و سفید. از آن‌جا که برخی از چاپ‌گرها رنگ سیاه و سفید را به‌طور واضح، منتقل نمی‌کنند، این گزینه به کاربر اجازه می‌دهد تا سیاه و سفید یا رنگی را شدت ببخشد.



رسم کردن مجدد از پنجره نمودار.

### ۳-۴-۳- ایجاد نمودار $x/y$

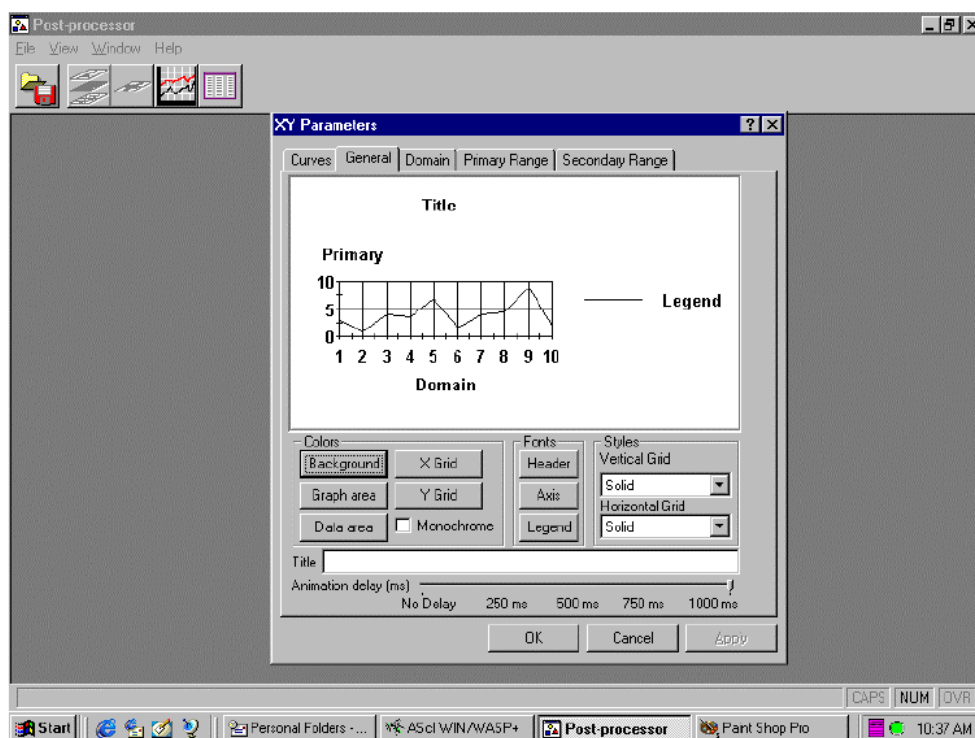
اولین باری که دکمه نماد  $x/y$  به‌منظور درخواست یک نمودار  $x/y$  فشرده می‌شود، فهرست تنظیمات نمودار ظاهر می‌شود. توسط این فهرست، کاربر می‌تواند تمام محتوای پنجره نمودار  $x/y$  را کنترل کند. کاربر می‌تواند داده‌ها را در این پنجره  $x/y$  برای تمام یا هر یک از فایل‌های بارگذاری شده فعلی (فایل‌های نتیجه شبیه‌سازی یا داده‌های مشاهده‌شده) ترسیم کند. کاربر کنترل کاملی بر ظاهر نمودار (محور، عنوان و برچسب‌گذاری راهنما) دارد.



شکل ۳-۹ نمایش ویژگی منحنی نمودار

### مشخصات نمودار

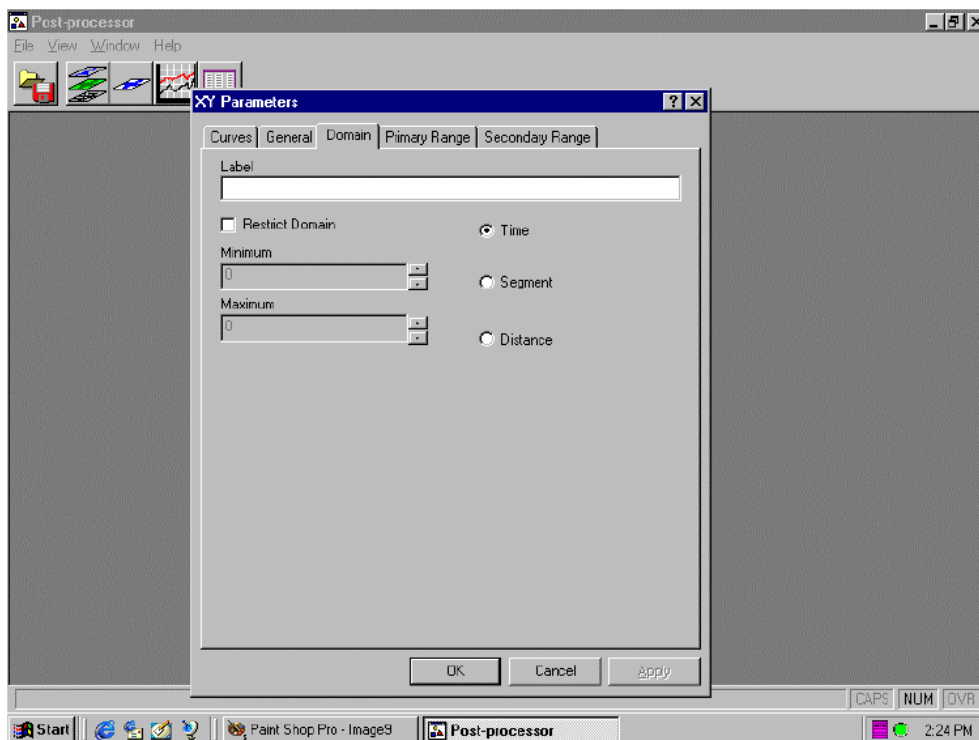
کاربر توانایی تعریف سبک پنجره نمودار  $x/y$  را دارد. کاربر می‌تواند انواع خط را برای شبکه تعریف کند، برای بخش‌های نمودار رنگ‌های مختلف انتخاب کند و فونت‌های مختلف را کنترل کند. زمانی که کاربر سبکی را توسعه می‌دهد، توانایی ذخیره این سبک به دیسک را دارند. هر یک از پنجره‌های نمودار  $x/y$  می‌تواند سبک مورد استفاده را یادآوری کند. کاربر می‌تواند یک سبک پیش‌فرض را تعریف کند که به‌طور خودکار هر بار یک پنجره نمودار  $x/y$  ایجاد می‌شود، فراخوانی شود. کاربر عنوان این نمودار را در این کادر محاوره‌ای مشخص می‌کند و همچنین می‌تواند سرعت انیمیشن را کنترل کند.



شکل ۳-۱۰ مشخصات نمودار X/y

### برچسب محدوده

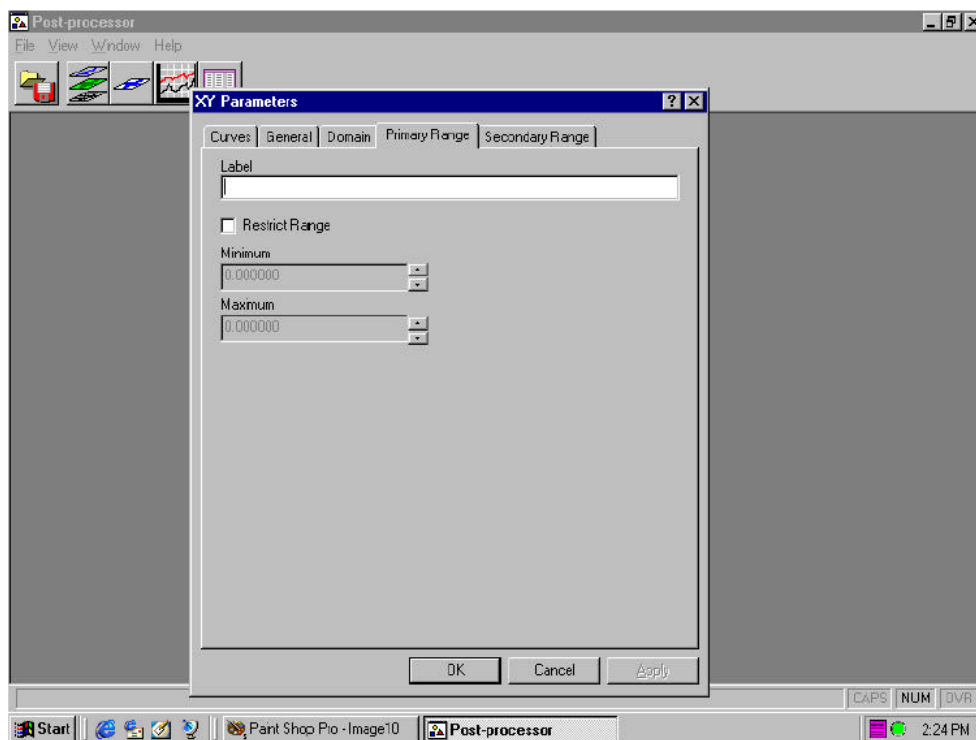
این کادر محاوره‌ای برای توصیف برچسب مورد استفاده در زیر محور X روی نمودار استفاده می‌شود. به‌طور معمول، از محور X برای زمان یا مسافت استفاده می‌شود.



شکل ۳-۱۱ برچسب زدن دامنه نمودار

### برچسب محدوده اولیه

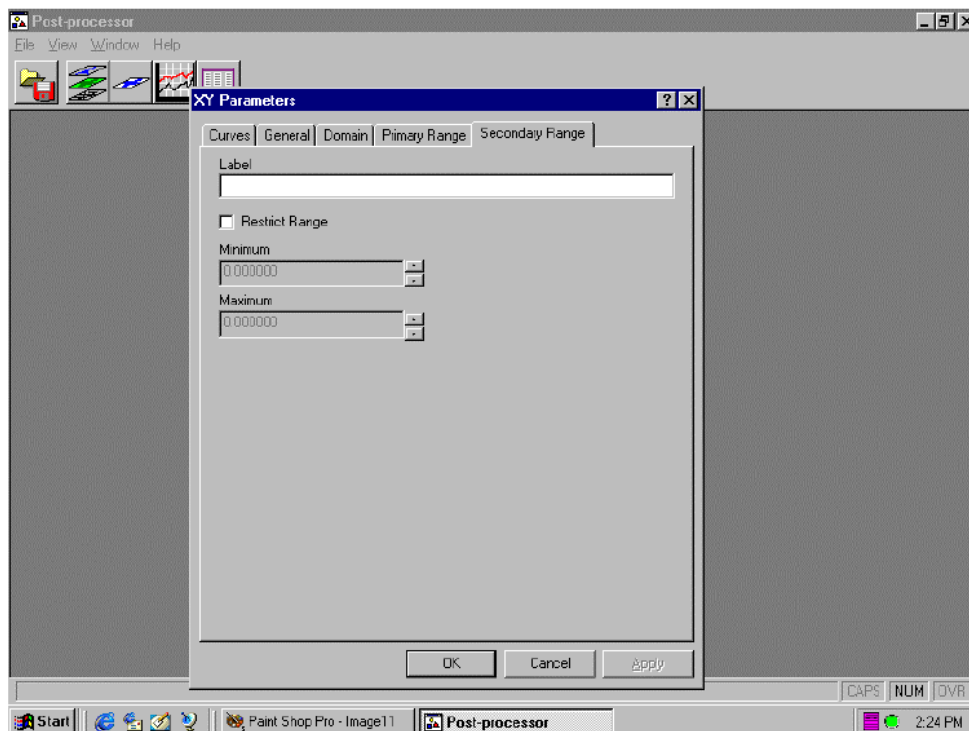
این کادر محاوره‌ای برای توصیف برچسب مورد استفاده در بالای محور  $y^1$  در نمودار استفاده می‌شود. محور  $y^1$  در سمت چپ نمودار است و به‌طور معمول برای غلظت استفاده می‌شود.



شکل ۳-۱۲ برچسب گذاری محور Y

### برچسب محدوده ثانویه

این کادر محاوره‌ای برای توصیف برچسب مورد استفاده در بالای محور  $y^2$  در نمودار استفاده می‌شود. محور  $y^2$  در سمت راست نمودار است و به‌طور معمول برای غلظت استفاده می‌شود.



شکل ۳-۱۳ برچسب‌گذاری محور ثانویه Y

### T زمان/بخش

برای آگاهی از این که دامنه محور X برای زمان یا فاصله استفاده می‌شود، از این گزینه (دکمه رادیویی) استفاده می‌گردد. اگر کاربر فاصله را انتخاب کند، گزینه‌ی دیگری برای تعریف دامنه محور X وجود دارد که در زیر توضیح داده شده‌است.

### فاصله تا نقشه بخش

اگر کاربر دامنه X را از نوع قطعه انتخاب کند، می‌تواند نقشه‌برداری شماره قطعه را از یک مایل رودخانه یا مسافت انتخاب کند. در صورت انتخاب این گزینه، کاربر باید یک فایل پایگاه‌داده ایجاد کند که دارای شماره قطعه با فاصله مربوطه باشد. هنگامی که این گزینه به‌درستی پیکربندی شود فاصله و غلظت مربوط به آن در نمودار X / Y ظاهر می‌شود.



### محدود کردن دامنه

به‌طور پیش‌فرض، محور  $x$  با استفاده از اکتشافات داخلی و بر اساس دامنه داده‌ها، به‌طور خودکار مقیاس‌بندی می‌شود. در اکثر موارد، این اکتشاف‌ها نمودارهای بسیار معناداری را ارائه می‌دهند. با این حال کاربر توانایی تنظیم دامنه محور  $x$  را پس از انتخاب این گزینه دارد، به‌صورتی که ممکن است مقادیر حداقل و حداکثر را برای مقادیر محور  $x$  به‌صورت دستی وارد کند. برای کنترل دستی دامنه محور  $x$ ، کاربر باید از پنجره تنظیمات نمودار "محدوده محور  $x$ " را انتخاب کند.

توجه: روش‌های پیچیده‌تری برای تغییر دامنه محور  $x$  وجود دارد (رجوع کنید به بزرگنمایی محور  $-X$ ).

### محدود کردن محدوده $y^1/y^2$

به‌طور پیش‌فرض، محور  $y$  با استفاده از اکتشاف داخلی ساخته می‌شود. در اکثر موارد، این اکتشاف‌ها نمودارهای بسیار معناداری را ارائه می‌دهند. کاربر توانایی تنظیم مقیاس محور  $y$  را به‌صورت دستی دارد، به‌صورتی که برای وارد کردن یک مقدار برای مقیاس  $y$ ، باید محدوده محور  $y$  را از پنجره تنظیمات نمودار تنظیم کند. پس از انتخاب این گزینه، کاربر می‌تواند مقادیر حداقل و حداکثر را برای مقادیر محور  $y$  تعریف کند.

توجه: کاربر می‌تواند دامنه هر دو محور  $y^1$  و  $y^2$  را کنترل کند.

### عنوان نمودار

این کادر گفت‌گو برای توصیف عنوانی که در بالای نمودار نمایش داده می‌شود، استفاده می‌شود. کاربر محدود به ۲۵ کاراکتر در خط عنوان است.

### تأخیر انیمیشن

کادر گفت‌گوی تأخیر در انیمیشن به کاربر امکان می‌دهد تا با فشار دادن دکمه انیمیشن از نوار ابزار  $x / y$ ، تأخیر را تعریف کند.

### رنگی / سیاه و سفید

انتخاب این دکمه‌های رادیویی به‌گونه‌ای عمل می‌کند که گویا کاربر آیکون Color / Black & White را از نوار ابزار فشار داده‌است. این گزینه طرح  $x / y$  را بین رنگی و سیاه و سفید تغییر می‌دهد.

### تعریف منحنی

پنجره محاوره‌ای منحنی‌ها نشان می‌دهد که چند خط در حال حاضر برای نمودار داده‌شده، تعریف شده‌است. برای افزودن منحنی به نمودار، کاربر باید دکمه Add Curve را فشار دهد. این گزینه پنجره تعریف منحنی را به‌وجود می‌آورد. اگر کاربر بخواهد ویژگی‌های منحنی قبلاً ایجادشده را ویرایش کند، باید

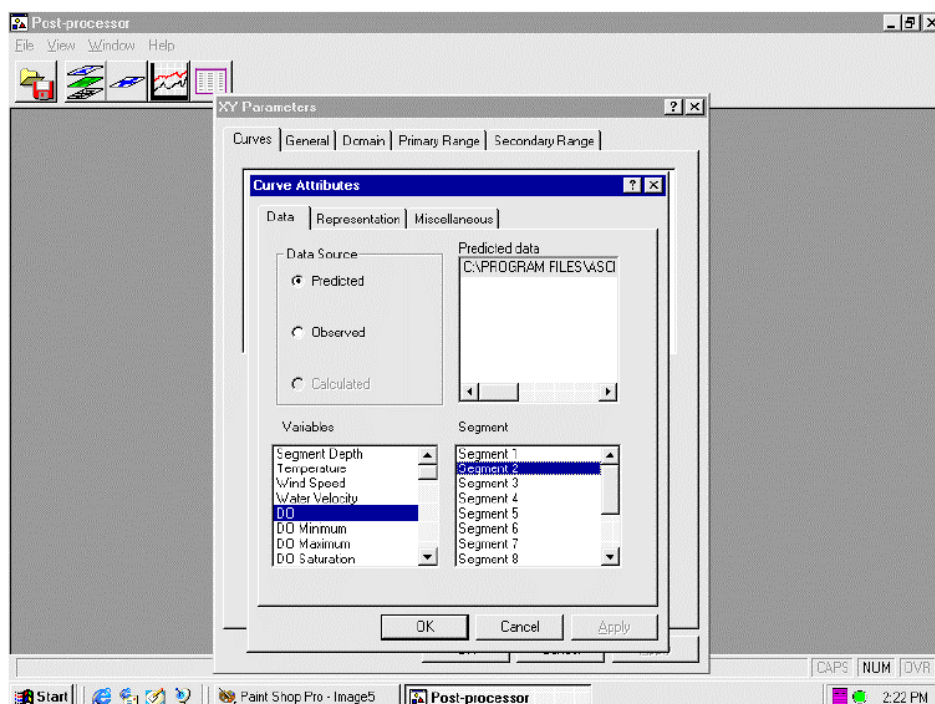
با کلیک نشان‌گر ماوس روی منحنی، منحنی را برای ویرایش در پنجره منحنی انتخاب کند و گزینه‌ی edit را فشار دهد. هیچ محدودیتی در تعداد منحنی‌هایی که می‌توان برای یک طرح  $x / y$  معین تعریف کرد، وجود ندارد.

### اجرا/ لغو

دکمه Okay/Cancel تعیین می‌کند که کاربر می‌خواهد صفحه را ترک کند. اگر هر چیزی در صفحه پارامتر طرح تغییر یافت و کاربر Okay را انتخاب کرد، پنجره نقشه  $x / y$  با اطلاعات تازه وارد/انتخاب شده به‌روز می‌شود. اگر کاربر Cancel را انتخاب کند، هرگونه اطلاعات وارد شده از بین می‌رود و پنجره نقشه  $x / y$  بدون تغییر باقی می‌ماند.

### ویژگی‌های منحنی / اضافه کردن یک منحنی

اگر دکمه Add Curve در منوی تنظیمات نمودار فشار داده‌شود، یک کادر گفت‌گویی دوم ظاهر می‌شود که ویژگی‌های منحنی را مشخص می‌کند. با مشخص کردن این ویژگی‌ها، منحنی واحد در طرح  $x / y$  اضافه می‌شود.



شکل ۳-۱۴ انتخاب فایل ورودی

## منبع داده

داده‌ها از چندین منبع به دست می‌آیند و برای ترسیم در پنجره نمودار  $x/y$  در دسترس هستند. برای در دسترس بودن داده‌ها برای یک پنجره نقشه مشخص، یا باید آن را از حافظه خواند (از دیسک بخوانید: فایل نتیجه شبیه‌سازی یا پایگاه داده مشاهده شده) و یا از یک محاسبه قبلی ایجاد نمود. اگر نوع خاصی برای ترسیم وجود داشته باشد، دکمه‌های رادیویی که در پنجره محاوره‌ای داده منبع قرار دارند، برای انتخاب در دسترس هستند. فایل نتایج شبیه‌سازی مدل و پایگاه داده‌های مشاهده شده با استفاده از محاوره "Open File" از منوی اصلی بارگذاری می‌شود. منابع داده محاسبه شده از پنجره نقشه  $x/y$  ایجاد می‌شوند، به صورتی که در دسترس سایر پنجره‌های نقشه  $x/y$  نیز هستند.

## داده‌ی پیش‌بینی شده

نوع داده‌ی پیش‌بینی شده به پرونده‌هایی که حاوی نتایج شبیه‌سازی مدل هستند، اختصاص می‌یابد.

## داده‌ی مشاهده شده

نوع داده‌ی مشاهده شده به داده‌های موجود در پایگاه داده مشاهده شده اختصاص می‌یابد. پایگاه داده‌های مشاهده شده باید دارای یک فرمت فایل خاص باشند که به طور خاص با نام فیلدهای داده، نام‌گذاری شده است.

## داده‌ی محاسبه شده

کاربر با استفاده از توابع داخلی، فیلد "Calculated" را ایجاد می‌کند. یکی از کارکردهای این گزینه، تابع تقسیم‌بندی مدل است که در آن کاربر می‌تواند تفاوت بین یک منحنی و منحنی دیگر را محاسبه کند. نتایج حاصل از این محاسبه در ساختار داده‌ی محاسبه شده که توسط کاربر تعریف شده است، ذخیره می‌شود.

## انتخاب فایل داده

انتخاب دکمه‌های رادیویی باعث باز شدن محتوای پنجره محاوره‌ای آن فایل می‌شود. اگر یک فایل نتیجه شبیه‌سازی مدل، بارگذاری شود و دکمه رادیویی پیش‌بینی شده انتخاب شود، نام فایل‌ها در پنجره داده‌های پیش‌بینی شده ظاهر می‌شود. کاربر با فشار دادن دکمه سمت چپ ماوس روی نام فایل، فایل را برای به دست آوردن اطلاعات نقشه برداری انتخاب می‌کند. فایل انتخاب شده برجسته می‌شود. پس از انتخاب فایل، کاربر باید متغیر و بخشی را برای بازبازی اطلاعات برای ترسیم انتخاب کند.

## انتخاب متغیر

فهرست متغیری که در پنجره محاوره‌ای متغیرها نمایش داده می‌شود، مستقیماً از فایل انتخاب شده بارگذاری می‌شود. اگر فایل بارگذاری شده یک فایل نتیجه شبیه‌سازی مدل باشد، متغیرهای خروجی مدل هیدرودینامیکی یا کیفیت آب را دربر می‌گیرد. اگر فایل انتخاب شده یک پایگاه داده "observed data"

باشد، متغیرها نام ترکیبات ذخیره‌شده در پایگاه‌داده را تشکیل می‌دهند. اگر فایل انتخاب‌شده یک ساختار داده محاسبه‌شده باشد، نام متغیر نامی خواهد بود که کاربر هنگام ایجاد فیلد محاسبه‌شده اختصاص داده‌بود. برای انتخاب و مشاهده متغیرهای موجود در فهرست، کاربر می‌تواند از نوار پیمایش برای حرکت در فهرست استفاده کند. برای انتخاب متغیر برای ترسیم، کاربر باید با دکمه سمت چپ ماوس روی متغیر موردنظر کلیک کند تا انتخاب شود. متغیر انتخاب‌شده برجسته می‌شود.

### انتخاب بخش

آخرین موردی که باید قبل از ایجاد نمودار  $x / y$  انتخاب شود این است که کدام بخش یا عنصر محاسباتی برای ترسیم است. پس از انتخاب فایل داده‌های پیش‌بینی شده، لیستی از بخش‌های موجود برای ترسیم در پنجره محاوره‌ای بخش نمایش داده می‌شود. برای انتخاب و مشاهده بخش‌های موجود در لیست، کاربر می‌تواند از نوار پیمایش برای جابه‌جایی در لیست استفاده کند. برای انتخاب یک بخش برای ترسیم، کاربر باید بر روی دکمه سمت چپ ماوس در بخش موردنظر کلیک کند، به طوری که متغیر انتخاب‌شده برجسته می‌شود. اگر منبع داده یک پایگاه‌داده مشاهده‌شده باشد، این بخش معمولاً یک شماره شناسایی ایستگاه است.

### نمایه

کادر گفت‌گویی دکمه رادیویی نمایه به کاربر اجازه می‌دهد تا یک ویژگی خاص برای منحنی تعریف‌شده اختصاص دهد. کاربر امکان ترسیم خط، نماد، خط و نماد یا بردار توپر برای منحنی تعریف‌شده را دارد.

توجه: سبک، رنگ و نماد متفاوتی به‌طور خودکار برای هر خط تعریف‌شده در یک پنجره طرح  $x / y$  خاص ایجاد می‌شود.

### Y ثانویه

کاربر می‌تواند هر عدد از منحنی‌های تعریف‌شده را به محور  $y^2$  دوم (مقیاس واقع در سمت راست نمودار) اختصاص دهد. هنگامی که از  $y^2$  دوم درخواست شود، منحنی اختصاص داده‌شده به آن، به‌طور مستقل از هر منحنی که به محور  $y^1$  اختصاص یافته است، ترسیم می‌شود.

### داده‌ی مشاهده‌شده

داده‌های مشاهده‌شده را می‌توان به هر پنجره طرح  $x / y$  اضافه کرد. قبل از دستیابی به داده‌های مشاهده‌شده، برای ترسیم، پایگاه‌داده‌ی مشاهده‌شده باید برای استفاده توسط کاربر باز شده‌باشد. داده‌های مشاهده‌شده با استفاده از کادر محاوره‌ای open file باز می‌شوند. پس از بازشدن پایگاه‌داده‌ی داده‌مشاهده، داده‌ها برای ترسیم در پنجره طرح  $x / y$  دردسترس خواهند بود. برای انتخاب داده‌های

مشاهده شده برای ترسیم، کاربر باید دکمه رادیویی مشاهده شده را فشار دهد. اگر بیش از یک فایل پایگاه داده بارگذاری شود، در پنجره‌ی داده‌ی پیش‌بینی شده، کاربر باید یک فایل را انتخاب کرده و ارائه دهد. پس از انتخاب فایل پایگاه داده، کاربر باید متغیر را از پنجره متغیر انتخاب کرده و سپس از پنجره بخش گزینه‌ی Station ID را انتخاب کند.

توجه: داده‌های مشاهده شده فقط در صورت تمایل کاربر می‌توانند ترسیم شوند.

### شرح راهنما

کاربر می‌تواند اطلاعاتی را که به‌طور خودکار در راهنمای طرح  $x / y$ ، برای نشان دادن مطالب نمودار استفاده می‌شود، کنترل کند. کاربر برای راهنما چهار گزینه دارد:

**مجموعه داده** - تنظیم این دکمه رادیویی باعث خواهد شد تا از نام مجموعه داده انتخاب شده در پنجره محاوره‌ای پیش‌بینی داده برای راهنمای خط تعریف شده، استفاده شود.

**بخش** - تنظیم این دکمه رادیویی باعث می‌شود تا از نام بخش انتخاب شده در پنجره محاوره‌ای بخش، برای راهنمای خط تعریف شده استفاده شود.

**متغیر** - تنظیم این دکمه رادیویی منجر به استفاده از نام متغیر انتخاب شده در پنجره محاوره‌ای متغیر، برای راهنمای خط تعریف شده می‌شود.

**User-Defined** - تنظیم این دکمه رادیویی باعث می‌شود که استفاده از مورد تعریف شده توسط کاربر، در کادر محاوره‌ای تعریف شده توسط کاربر قرار گیرد.

توجه: اگر کاربر راهنما نمی‌خواهد، باید گزینه‌ی "user define" را انتخاب کرده و چیزی را در کادر محاوره‌ای تعریف شده‌ی کاربر ننویسد.

تنظیم این دکمه رادیویی باعث خواهد شد تا از نام مجموعه داده انتخاب شده در پنجره محاوره‌ای پیش‌بینی داده، برای راهنمای خط تعریف شده استفاده شود.

**بخش** - تنظیم این دکمه رادیویی باعث می‌شود تا از نام بخش انتخاب شده در پنجره محاوره‌ای بخش برای راهنمای خط تعریف شده استفاده شود.

**متغیر** - تنظیم این دکمه رادیویی منجر به استفاده از نام متغیر انتخاب شده در پنجره محاوره‌ای متغیر، برای راهنمای خط تعریف شده می‌شود.

**User-Defined** - تنظیم این دکمه رادیویی باعث می‌شود که استفاده از مورد تعریف شده توسط کاربر، در کادر محاوره‌ای تعریف شده توسط کاربر قرار گیرد.

توجه: اگر کاربر راهنما نمی‌خواهد، باید گزینه‌ی "user define" را انتخاب کرده و چیزی را در کادر محاوره‌ای تعریف‌شده کاربر ننویسد.

### ۳-۴-۴- اجرا/ لغو

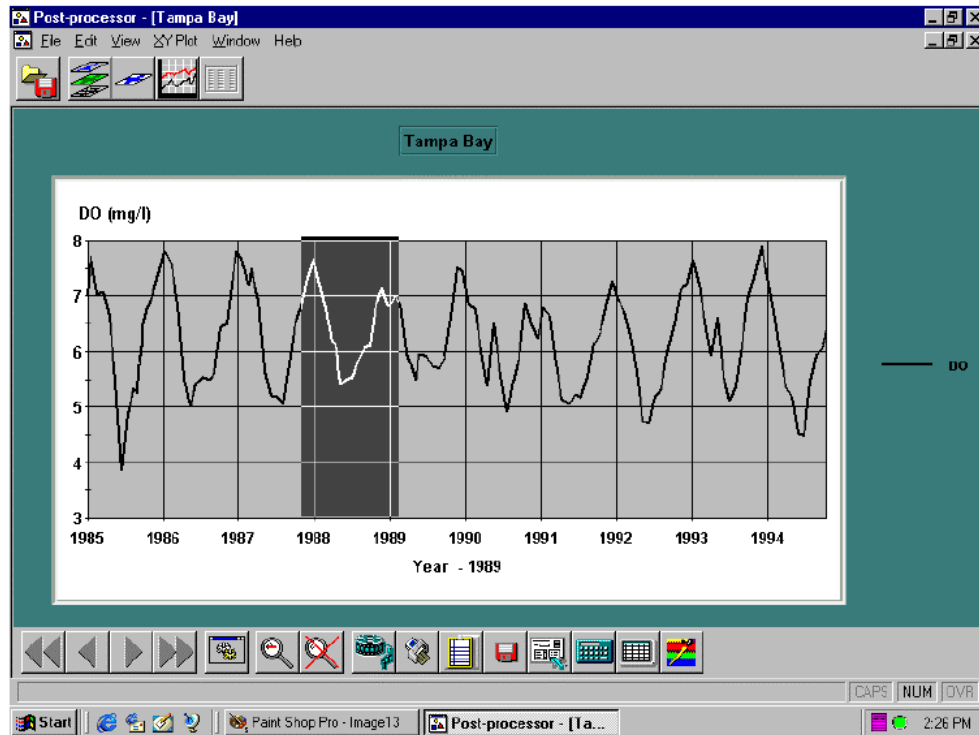
پس از انتخاب اطلاعات به همراه سایر پارامترهای قابل‌تعریف برای کاربر، کاربر باید برای تولید نمودار، Ok را فشاردهد. داده‌های مشاهده‌شده بر روی طرح  $x / y$  به همراه داده‌های پیش‌بینی شده یا انتخاب‌شده توسط کاربر ترسیم می‌شوند. اگر Cancel را فشاردهید، تمام اطلاعات واردشده از بین می‌روند.

### ۳-۴-۵- بزرگ‌نمایی محورها

کاربر می‌تواند هر یک از محورها را در پنجره طرح  $x / y$  بزرگ‌نمایی کند. کاربر می‌تواند محورهای  $y^1$  و  $y^2$  را به صورت جداگانه و یا ترکیبی بزرگ‌نمایی کند. بزرگ‌نمایی محور این امکان را به کاربر می‌دهد تا داده‌ها را در مقیاس‌های زمانی و یا میزان غلظت کم‌تر مشاهده کرده تا بتواند تغییرات ظریف در نتایج مدل را تجسم کند.

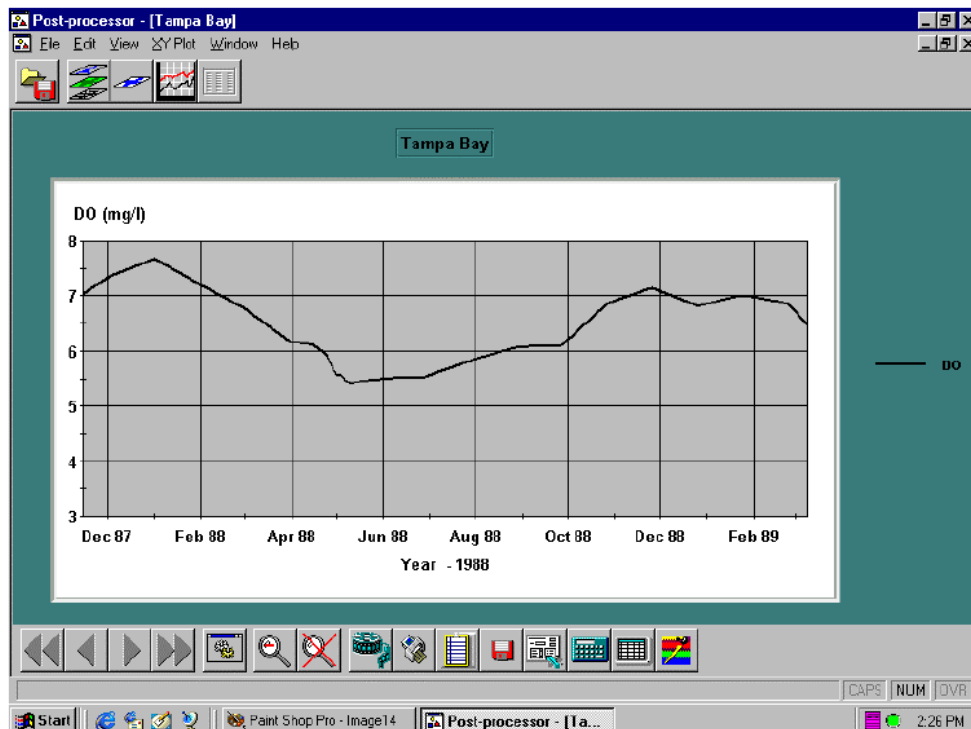
### بزرگ‌نمایی محور X

چندین گزینه برای انجام عملکرد بزرگ‌نمایی در دسترس کاربر است. سریع‌ترین و کارآمدترین روش برای بزرگ‌نمایی محورها، قراردادن مکان نما (ماوس) در نزدیکی خط محور X (در محدوده نقشه) در ابتدای ناحیه زمان می‌باشد. سپس دکمه سمت چپ ماوس را فشار داده و نگاه دارید و با کشیدن یک کادر تا زمان پایان، ناحیه را بزرگ‌نمایی کنید. ناحیه بزرگ‌نمایی شده ترسیم خواهد شد.



شکل ۳-۱۵ بزرگ‌نمایی محور X

پس از رهاکردن دکمه سمت چپ ماوس، بعد از این که کاربر ناحیه را برای بزرگ‌نمایی تعریف کرد، طرح  $x / y$  برای مدت‌زمانی معین که توسط کاربر انتخاب شده‌است، تغییر می‌یابد. شکل (۳-۱۶) یک محور  $x$  بزرگ‌نمایی شده (از نمونه مثال بالا) را نشان می‌دهد.



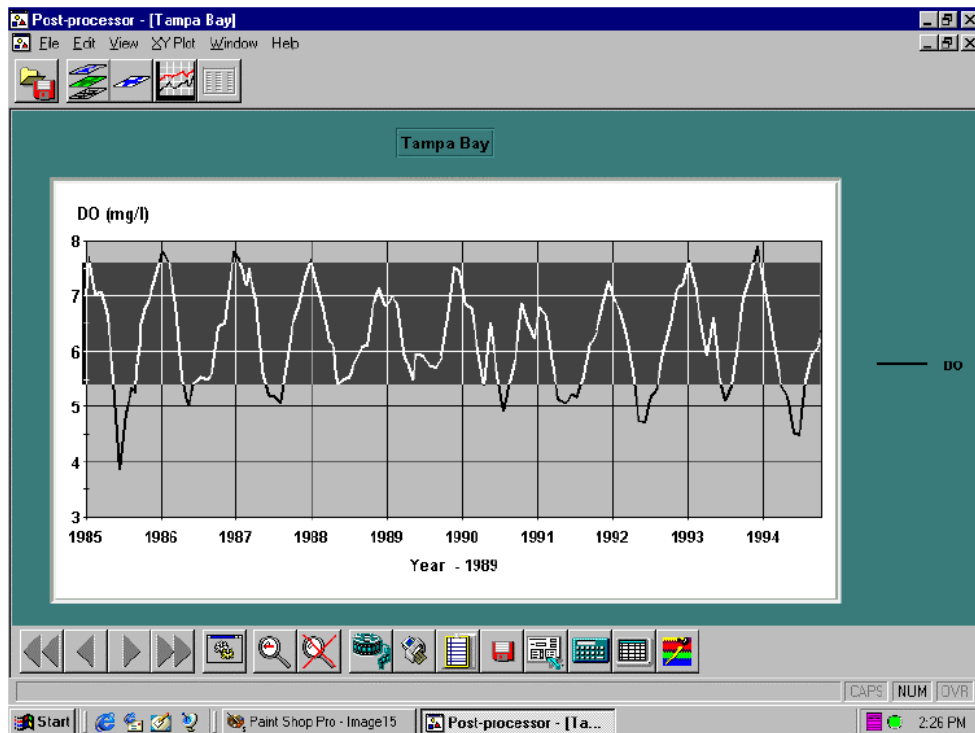
شکل ۳-۱۶ بزرگ‌نمایی محور X

توجه: کاربر می‌تواند محورها را به صورت مرحله‌ای بزرگ‌نمایی کند (به نمودار یعنی به نمودار بزرگ‌نمایی شده نگاه کنید و سپس نمودار بزرگ‌نمایی شده را مجدداً بزرگ‌نمایی کنید).

### بزرگ‌نمایی محور Y

محورهای Y نیز ممکن است بزرگ‌نمایی شوند. کاربر گزینه‌های مختلفی را برای نشان دادن تمایل به انجام یک تابع بزرگ‌نمایی در اختیار دارد. اگر تنها یک محور Y تعریف شده باشد، محور می‌تواند مانند X بزرگ‌نمایی شود. برای بزرگ‌نمایی محور Y، نشان‌گر موس را نزدیک خط محور Y (در محدوده نقشه) در ابتدای ناحیه غلظت قرار دهید و دکمه سمت راست ماوس را فشار داده و نگاه دارید و با کشیدن یک کادر، تا انتهای ناحیه غلظت را بزرگ‌نمایی کنید (شکل ۳-۱۶). ناحیه‌ای که بزرگ‌نمایی شده ترسیم خواهد شد.

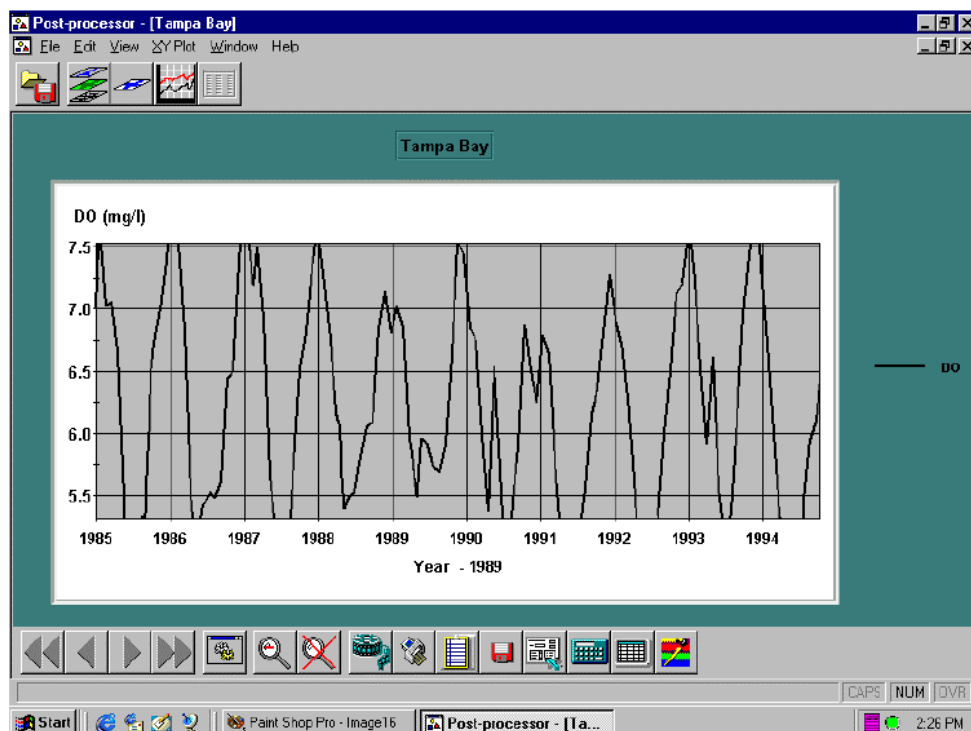




شکل ۳-۱۷ بزرگ‌نمایی محور  $y$

پس از این که کاربر ناحیه را برای بزرگ‌نمایی تعریف کرد، نمودار  $x/y$  برای محدوده غلظت داده شده ترسیم خواهد شد. شکل (۳-۱۷) یک محور  $y$  بزرگ‌نمایی شده از مثالی که در بالا آورده شده است، را نشان می‌دهد.

اگر کاربر بیش از یک محور  $y$  را تعریف کرده باشد، اجرای عملکرد بزرگ‌نمایی برای اجرای آن کمی سخت‌تر می‌شود. اگر تابع بزرگ‌نمایی روی منوی سرعت Auto-Detect تنظیم شود (پیش فرض)، زمانی که دکمه چپ ماوس فشار داده می‌شود، پس پردازنده گرافیکی مشخص می‌کند که کاربر در تلاش است که کدام محورها را ( $x$ ،  $y^1$  یا  $y^2$ ) بزرگ‌نمایی کند. اگر کاربر به محور  $y^2$  نزدیک‌تر باشد و دکمه سمت راست ماوس را فشار داده و یک کادر را به صورت عمودی بکشد، فرض می‌کند که کاربر می‌خواهد محور  $y^1$  را بزرگ‌نمایی کند. عملیات برای محور  $y^2$  نیز به همین صورت است. اگر کاربر به محور  $x$  نزدیک‌تر باشد و یک کادر را به صورت افقی بکشد، فرض می‌شود که کاربر می‌خواهد محور  $x$  را بزرگ‌نمایی کند.



شکل ۳-۱۸ محور بزرگ‌نمایی

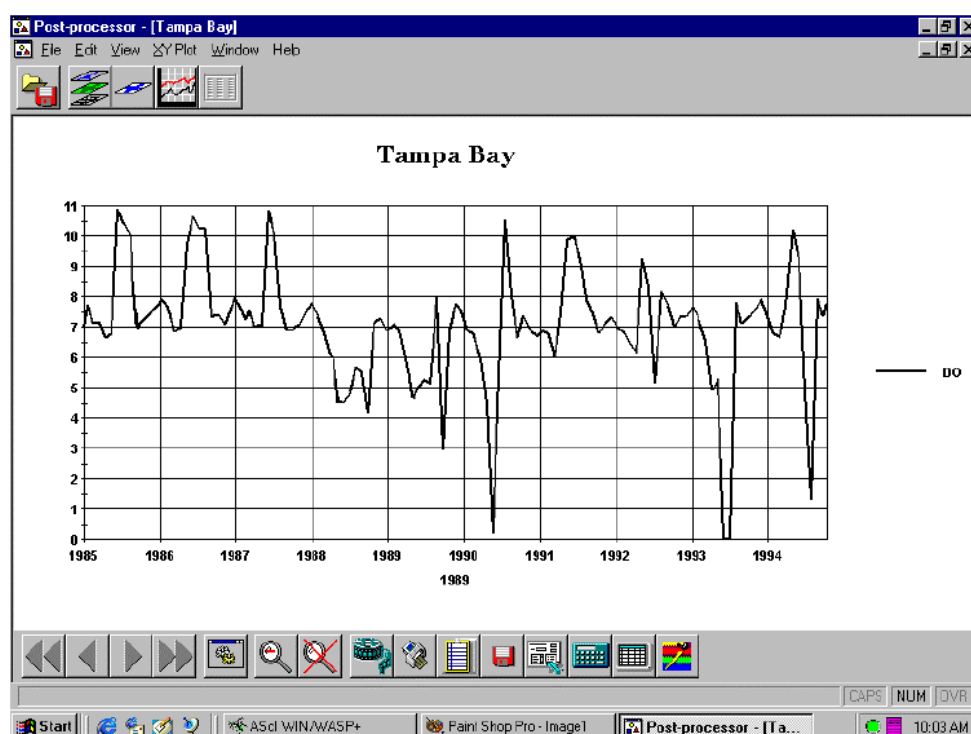
توجه: اگر کاربر در کنترل کردن آن محور برای بزرگ‌نمایی مشکل داشته‌باشد، منوی سرعت به کاربر اجازه می‌دهد تا انتخاب کند کدام محور بزرگ‌نمایی شود.

### ۳-۴-۶- اضافه کردن یک منحنی

گزینه‌ی اضافه کردن تعداد زیادی از منحنی‌ها در پنجره موردنظر  $x/y$ ، برای کاربر وجود دارد، به صورتی که هیچ محدودیتی در تعداد منحنی‌های قابل تعریف وجود ندارد. توصیه می‌شود برای نمودار  $x/y$  مشخص شده بیش از پنج منحنی تعریف نشود، زیرا وضوح و فهم آن کاهش می‌یابد. توجه: کاربر می‌تواند در هر نمودار  $x/y$  و پنجره‌های نمودار  $x/y$  دلخواه هر تعداد منحنی که بخواهد، ایجاد کند.

### ۳-۴-۷- نماد رنگی / سیاه سفید

نمودارهای  $x/y$  بسته به ترجیح و یا مقاصد کاربر، می‌توانند به رنگ سیاه و سفید و یا رنگی نمایش داده شوند. برای جابه‌جایی بین این دو حالت، کاربر می‌تواند آیکون سیاه و سفید را از نوار ابزار فشار داده، جعبه رادیو را در منوی پیکربندی تغییر داده یا از منوی سرعت استفاده کند. نمونه‌ای از نقشه سیاه و سفید در شکل (۳-۱۹) آورده شده‌است. وقتی کاربر درخواست می‌کند که یک نمودار سیاه و سفید در کلیپ‌بورد چاپ و یا کپی شود، یک تصویر سیاه و سفید ایجاد می‌شود.



شکل ۳-۱۹ یک نمونه از نمودار سیاه و سفید

### ۳-۴-۸- داده‌های مشاهده شده / اندازه‌گیری شده بررسی اجمالی

کاربر می‌تواند داده‌های مشاهده شده / اندازه‌گیری شده را در برابر آنچه که مدل پیش‌بینی کرده، ترسیم کند. داده‌های مشاهده شده باید در فرمت فایل ویژه ذخیره شوند تا برای طراحی در دسترس باشند. همچنین، پایگاه داده Paradox باید حاوی حداقل چهار نام برای فیلدهای مورد نیاز باشد. این نام‌های فیلد برای هم‌سطح کردن داده‌ها از پایگاه داده به کادر محاوره پارامترهای منحنی  $x/y$  به کار می‌رود.

## ایجاد یک پایگاه‌داده

چندین گزینه برای ایجاد پایگاه‌داده‌ی داده‌ی مشاهده‌شده در دسترس کاربر است. اگر کاربر Paradox داشته‌باشد می‌تواند از آن برای ایجاد بانک اطلاعاتی مشاهده‌شده استفاده کند. اگر کاربر Paradox نداشته‌باشد، امکان ایجاد پایگاه‌داده مشاهده‌شده برای کاربر فراهم می‌شود. در صورت انتخاب کاربر برای ایجاد پایگاه‌داده‌ی داده‌ی مشاهده‌شده در Paradox، چهار قسمت مهم برای این پایگاه داده وجود دارد که شامل موارد زیر باشد:

**داده زمان** - این فیلد از نوع برچسب زمان است. برای ذخیره تاریخ و زمان نقطه‌ی داده‌ی مشاهده‌شده استفاده می‌شود.

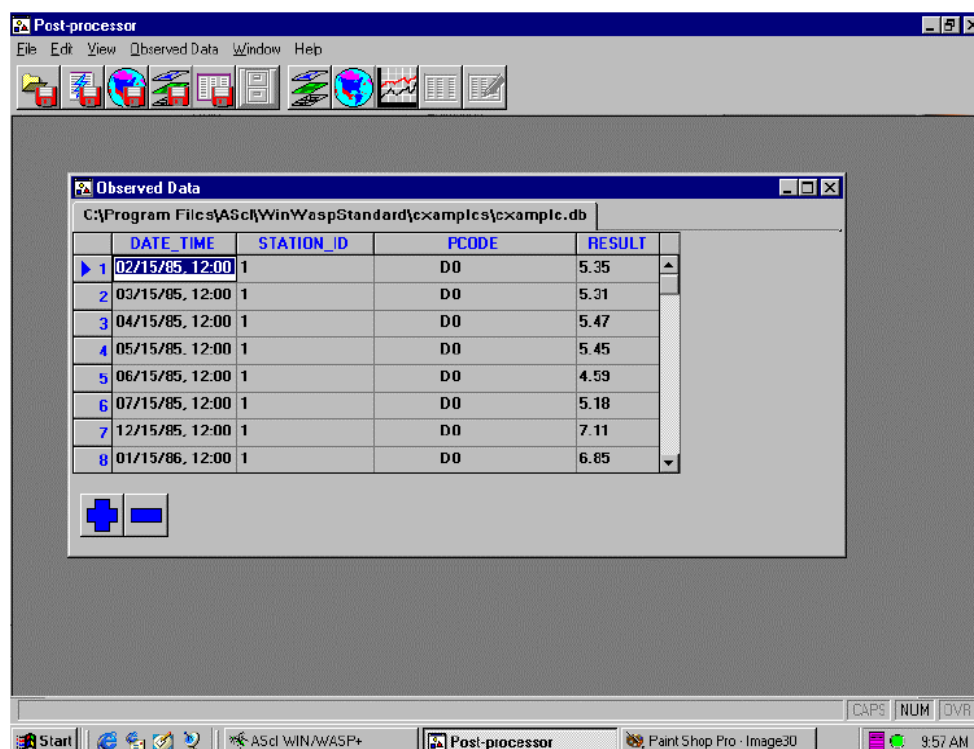
**PCODE** - این فیلد از نوع الفبا و عدد می‌باشد که برای نوع اندازه‌گیری اکسیژن محلول ذخیره‌شده استفاده می‌گردد.

**STATION\_ID** - این فیلد از نوع الفبا و عدد می‌باشد که برای توصیف و شناسایی ایستگاه نمونه استفاده می‌گردد.

**RESULT** - این فیلد از نوع عددی می‌باشد که برای توصیف مقدار اندازه‌گیری PCODE DATETIME در STATION\_ID استفاده می‌شود.

چهار قسمت بالا دقیقاً باید مطابق آن‌چه بیان گردیده، تعریف شوند تا مفید واقع شوند، ولی اختلافی بین آن‌چه در بالا آورده شده است و پرونده تشخیص داده نمی‌تواند باشد. داده‌های مشاهده‌شده می‌توانند بیش از چهار فیلد شرح داده‌شده باشند، اما حداقل باید شامل این ۴ قسمت باشند.

برای ایجاد یک پایگاه‌داده جدید، کاربر باید روی نوار ابزار اصلی، گزینه‌ی New Database را فشار دهد. این کار باعث ایجاد جدول جدیدی از داده‌های مشاهده‌شده می‌شود تا کاربر بتواند با داده‌های خود جمع نماید. شکل (۳-۲۰) جدول جدیدی از پایگاه‌داده‌ی داده‌های مشاهده‌شده را نشان می‌دهد. کاربر باید با استفاده از عملکرد (pressing the + sign) داده‌های خود را با داده‌های اصلی جمع نماید. همچنین می‌تواند داده‌های دیگری را نیز در این جدول قرار دهد. برای انجام این کار، کاربر باید رکوردهای زیادی را که در جدول قرار می‌گیرد، وارد نماید.



شکل ۳-۲۰ ایجاد بانک اطلاعات داده مشاهده شده

### بارگیری پایگاه داده

پس از ایجاد یک پایگاه اصلی، پیش از آن که داده‌ی مشاهده برای ترسیم در دسترس باشد، باید مانند هر فایل دیگری بارگذاری گردد. کاربر آیکون `open file` را انتخاب می‌نماید و یا آن را از فهرست فایل انتخاب می‌کند. پس از انجام این کار، کادر محاوره‌ای فایل ظاهر می‌گردد که کاربر باید نوع فایل را بر روی DB تنظیم کند. همچنین می‌تواند در درایو و دایرکتوری‌هایی که پایگاه داده مشاهده شده در آن ذخیره می‌شود، حرکت کند و فایل را انتخاب کرده و `Open` را فشار دهد. پس از خواندن مطالب پایگاه داده، داده مشاهده شده در حافظه آن‌ها برای ترسیم در دسترس هستند.

### انتخاب داده

انتخاب داده‌ها از پرونده‌ی پایگاه داده‌ی داده‌ی مشاهده شده به همان شیوه و با انتخاب داده‌ها از پرونده‌های نتایج شبیه‌سازی مدل انجام می‌شود. کاربر باید از منوی پیکربندی نقشه `x/y` گزینه‌ی `Add Curve` را انتخاب کند، هنگامی که منوی ویژگی منحنی ظاهر می‌شود کاربر باید دکمه رادیویی داده

مشاهده‌شده را انتخاب کند. پس از فعال‌شدن دکمه رادیویی، نام فایل DB که قبلاً در کادر محاوره‌ای فایل‌داده بارگذاری شده، باید ظاهر شود. کاربر باید نام DB را با ماوس برجسته کند سپس پایگاه‌داده PCODE و Station\_ID را برای ترسیم انتخاب نماید و در ادامه، کاربر باید دکمه Okay را فشار داده و نمودار با داده‌های مشاهده‌شده دوباره ترسیم شود.

توجه: کاربر می‌تواند بر داده‌های مشاهده‌شده با نتایج شبیه‌سازی، کنترل ظاهریداشته‌باشد.

### ۳-۴-۹- چاپ نتایج

کاربر گزینه‌ی چاپ نمودار  $x / y$  را برای دستگاه پرینتر که به ویندوز نصب شده‌است (این دستگاه می‌تواند یک چاپ‌گر لیزری، چاپ‌گر رنگی، فکس یا حتی ایمیل باشد)، فعال می‌کند. این امکان برای کاربر وجود دارد که نمودارهای  $x / y$  را رنگی چاپ کند و یا قبل از چاپ آن‌ها را به رنگ سیاه و سفید تغییر دهد. بسته به چاپ‌گر و تنظیمات Windows 95 کاربر، چاپ‌گر ممکن است قبل از چاپ، به‌طور خودکار رنگ‌ها را به خاکستری تبدیل کند که این امر در صورت بی‌نتیجه بودن نیز ممکن است رخ دهد. اگر نمودارها "ناواضح یا تیره" به نظر می‌رسند، کاربر می‌بایست نمودارها را قبل از چاپ به سیاه و سفید تبدیل کند و در یک فایل ذخیره نماید یا در یک کلیپ‌بورد کپی کند.

برای تغییر نمودار به سیاه و سفید، کاربر باید دکمه رادیویی سیاه و سفید را از فهرست تنظیمات انتخاب نموده یا آیکون تغییر رنگ سیاه و سفید را از نوار ابزار فشاردهد.

برای چاپ طرح  $x / y$  حاضر، کاربر باید نماد چاپ را از نوار ابزار فشاردهد که در این صورت پنجره استاندارد کادر گفت‌گویی چاپ ظاهر می‌شود. کاربر می‌تواند دستگاه خروجی مناسب را برای چاپ شکل انتخاب کند.

### به فایل

کاربر این امکان را دارد که یک فایل bitmap از طرح  $x / y$  فعال را در یک فایل ذخیره کند. که این کار برای صرفه‌جویی در نتایج شبیه‌سازی برای مقایسه و یا گنجاندن در یک ارائه یا انتشار مفید است. کاربر برای ذخیره‌کردن طرح  $x / y$  فعال حاضر در فایل که نقشه bitmap محسوب می‌شود، باید آیکون bitmap را از نوار ابزار فشار داده تا نمودار ذخیره‌ی کاربر فعال شود، گزینه‌ی چاپ نمودار  $x / y$  را برای دستگاه چاپ‌گر که به ویندوز نصب شده (این دستگاه می‌تواند یک چاپ‌گر لیزری، چاپ‌گر رنگی، فکس یا حتی ایمیل باشد) است، فعال کند. این امکان برای کاربر وجود دارد، که نمودارهای  $x / y$  را رنگی چاپ کند و یا قبل از چاپ آن‌ها را به رنگ سیاه و سفید تغییر دهد. بسته به چاپ‌گر و تنظیمات Windows 95 کاربر، چاپ‌گر ممکن است قبل از چاپ، به‌طور خودکار رنگ‌ها را به خاکستری تبدیل

کند. اگر نمودارها "ناواضح یا تیره" به نظر می‌رسند، کاربر باید نمودارها را قبل از چاپ به سیاه و سفید تبدیل کند، در یک فایل ذخیره- نماید و یا در یک کلیپ‌بورد کپی کند.

برای تغییر نمودار به سیاه و سفید، کاربر باید دکمه رادیویی سیاه و سفید را از فهرست تنظیمات انتخاب نموده یا آیکون تغییر رنگ سیاه و سفید را از نوار ابزار فشار دهد. برای چاپ طرح  $x / y$  حاضر، کاربر باید نماد چاپ را از نوار ابزار فشار دهد. با این کار پنجره استاندارد کادر محاوره‌ای چاپ ظاهر- می‌شود و کاربر می‌تواند دستگاه خروجی مناسب را برای چاپ شکل انتخاب کند.

### به فایل

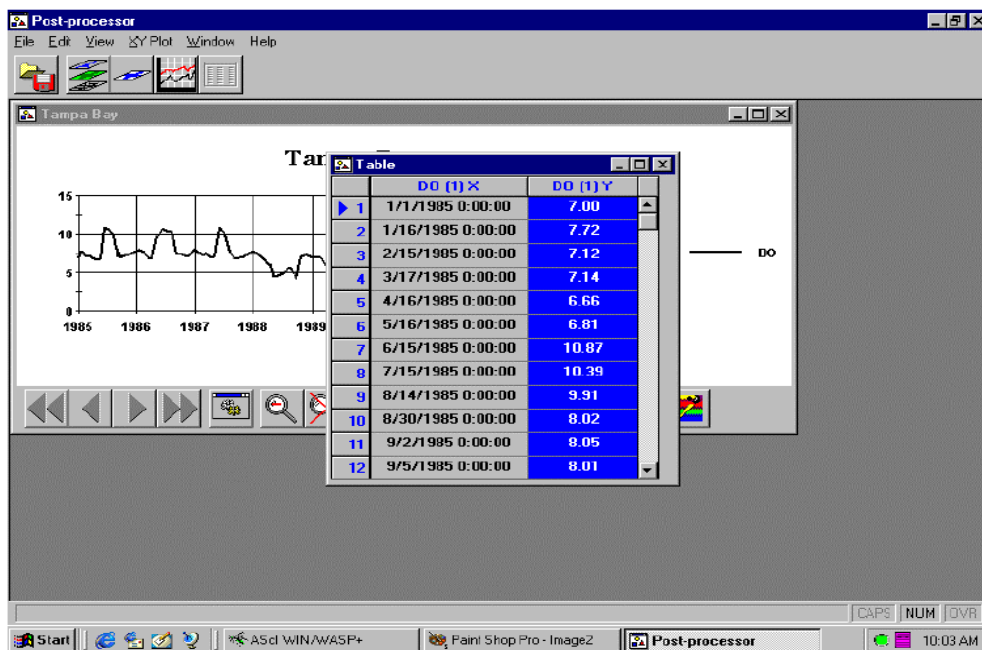
کاربر این امکان را دارد که یک فایل bitmap از طرح  $x / y$  فعلی فعال را در یک فایل ذخیره کند. که این برای صرفه‌جویی در نتایج شبیه‌سازی برای مقایسه یا گنجاندن در یک ارائه یا انتشار مفید است. کاربر برای ذخیره طرح  $x / y$  فعال حاضر در فایل که نقشه bitmap است، باید آیکون bitmap را از نوار ابزار فشار داده تا نمودار ذخیره شود. پنجره استاندارد کادر محاوره‌ای فایل، این امکان را به کاربر می‌دهد تا درایو، دایرکتوری و نام فایل را تعیین نماید.

### به کلیپ‌بورد

کاربر هم‌چنین توانایی کپی کردن تصویر گرافیکی از طرح  $x / y$  فعال حاضر، در کلیپ‌بورد ویندوز را دارد. پس از کپی کردن یک تصویر در کلیپ‌بورد ویندوز، می‌توان آن را تقریباً در هر برنامه ویندوزی که دارای پشتیبانی گرافیکی است، جایگذاری نمود. برای کپی کردن تصویر گرافیکی در کلیپ‌بورد، کاربر باید نماد کپی از نوار ابزار و یا نماد کلیپ‌بورد را فشار دهد. پس از کپی کردن، تصویر می‌تواند برای جای‌گذاری در دسترس باشد.

### ۳-۴-۱۰- ایجاد جدول داده‌ها

از ساختارهای داخلی داده، برای ذخیره کردن اعداد حقیقی برای تولید نمودارهای  $x / y$  استفاده می‌شود. یک شیوه برای کاربر فراهم می‌شود تا جدولی از داده‌ها که در نمودار فعلی  $x / y$  نمایش داده می‌شود، ایجاد کند. با فشار دادن آیکون جدول داده روی نوار ابزار  $x / y$  این جدول را ایجاد می‌کند. این کار باعث ایجاد جدولی از داده‌ها می‌شود که در شکل (۳-۲۱) نشان داده شده است. داده‌ها در این جدول "read-only" فقط خواندنی هستند. این در اصل به این معناست که کاربر می‌تواند با علامت‌گذاری ستون‌ها، ردیف داده‌ها و کپی کردن آن در کلیپ‌بورد ویندوز به داده‌ها دسترسی داشته‌باشد تا بتواند در برنامه دیگری (یعنی صفحه گسترده) جای‌گذاری نماید.



شکل ۳-۲۱ نمونه داده‌های جدولی از نمودار

کاربر توانایی اصلاح داده‌ها را ندارد و نتایج را در نمودار x / y نشان می‌دهد.

### خروجی گرفتن از داده‌ها

کاربر ممکن است داده‌هایی را که برای تولید طرح x / y فعال به فایل خارجی استفاده می‌کند را به دو حالت: (۱) فایل‌های ASCII با محدودیت کاما و (۲) فایل‌های پایگاه‌داده خطا ارسال کند. نوع فایل ASCII با محدودیت کاما، داده‌ها را از نمودار با فرمت ستون می‌نویسد، هر منحنی از دو ستون (مقادیر X و Y) تشکیل شده‌است. داده‌ها با کاما از هم جدا شده و می‌توانند مستقیماً در بیش‌تر برنامه‌های صفحه گسترده وارد شوند.

فرمت فایل Paradox، یک فایل پایگاه‌داده سازگار با Paradox از کلیه داده‌های موجود در طرح x / y ایجاد می‌کند. این جدول پایگاه‌داده که ایجاد شده‌است می‌تواند توسط Paradox یا برنامه Deliberator (مؤلفه‌ای از WASP) به‌طور مستقیم خوانده شود. هر جفت x / y از نمودار در پایگاه‌داده بایگانی می‌شود. برای شروع ارسال داده‌ها، کاربر باید گزینه‌ی نماد صادرات داده از نوار ابزار را در نمودار x / y فشار دهد. این کار یک فهرست انتخاب فایل ایجاد می‌کند که به کاربر اجازه تعریف مسیر و نام فایل را برای ذخیره داده‌های خروجی داده می‌شود.



به منظور انتخاب نوع فایل برای ذخیره داده‌ها، کاربر باید از گزینه‌ی Save As فهرست کشویی در کادر محاوره استفاده کند. گزینه‌ی مناسب را انتخاب کنید سپس نام فایل را وارد کرده و ذخیره را فشار دهید.

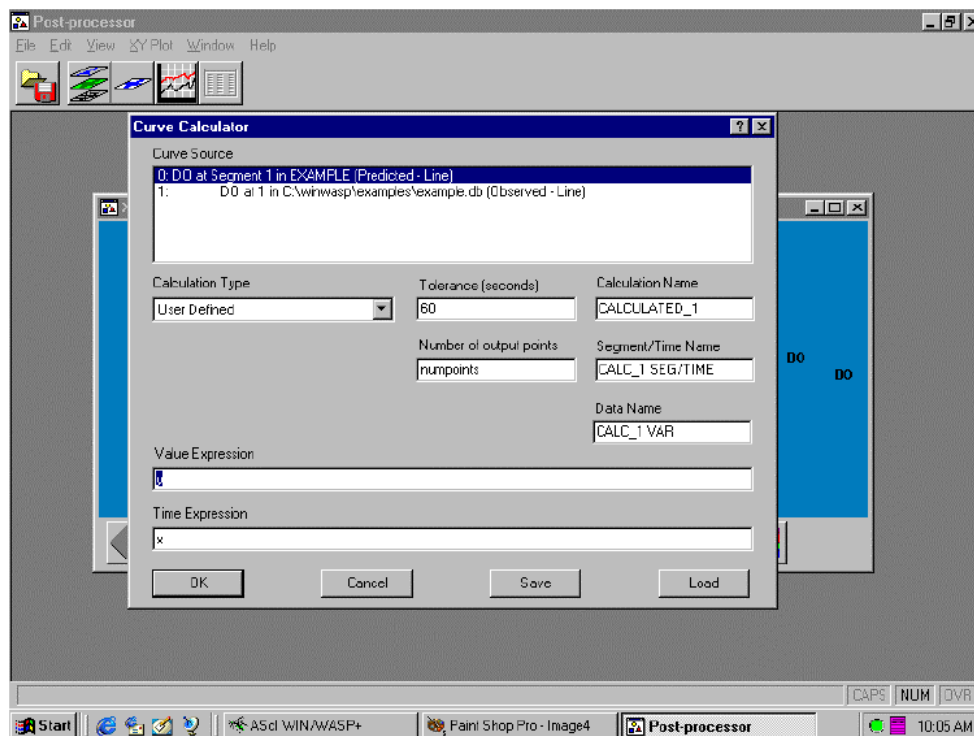
### ۳-۴-۱۱- محاسبات منحنی

طیف گسترده‌ای از محاسبات را می‌توان در منحنی‌های مشخص شده در طرح  $x/y$  انجام داد. صفحه‌نمایش محاسبه منحنی با فشار دادن دکمه محاسبه منحنی در نوار ابزار  $x/y$  ایجاد می‌شود. محاسبات منحنی فقط در منحنی‌های تعریف شده در پنجره طرح  $x/y$  قابل انجام است. چندین نوع محاسبه منحنی وجود دارد که می‌توانند انجام شوند:

**مشخص شده توسط کاربر** - کارکردهایی که کاربر می‌تواند برای محاسبه به دست آورد.

**میانگین متحرک** - کاربر فاصله زمانی برای میانگین متحرک را مشخص نموده و منحنی جدیدی ایجاد می‌شود که نتایج را نشان می‌دهد.

**توزیع فراوانی** - کاربر تعداد فواصل غلظت مورد استفاده در توزیع فراوانی و محاسبه منحنی‌های جدید را مشخص می‌کند.



شکل ۳-۲۲ نمونه محاسبه منحنی

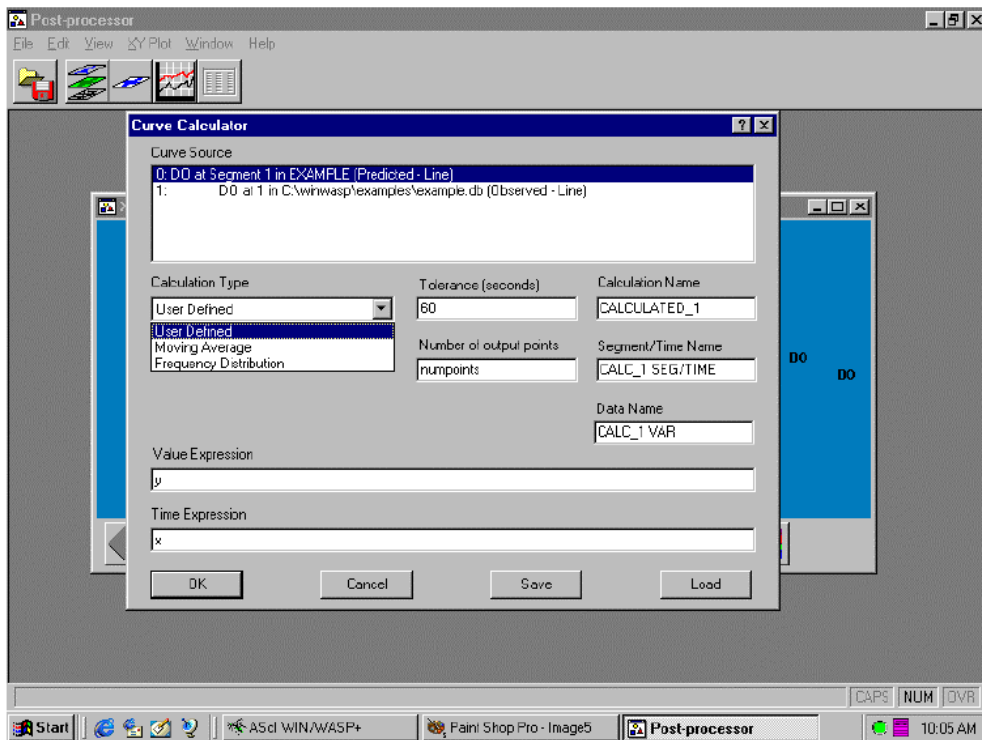
صفحه محاسبه منحنی دارای چندین کادر گفت‌گو است که اطلاعاتی را در اختیار کاربر قرار می‌دهد و همچنین به کاربر امکان می‌دهد اطلاعات و عملیات را مشخص نماید.

### منبع منحنی

کادر گفت‌گوی منبع منحنی به کاربر اجازه می‌دهد تا از منبع بارگذاری برای تعریف منحنی استفاده کند.

### نوع محاسبه

کاربر اجازه دارد تا گزینه‌ی نوع محاسبه را انتخاب کند. نوع محاسبه از فهرست کشویی که در شکل (۳-۲۳) نشان داده شده است، انتخاب می‌شود. کاربر سه گزینه‌ی تعریف‌شده توسط کاربر، میانگین متحرک و یا توزیع فراوانی را دارد.



شکل ۳-۲۳ ساخته شده در توابع محاسبه منحنی

## سازگاری

فاکتور سازگاری برای تعیین دامنه موردنظر در همان زمان استفاده می‌شود.

## تعداد نقاط خروجی

این گزینه تعداد نقاط خروجی را که برای محاسبات منحنی تولید می‌شود، تعریف می‌کند.

## نام محاسبه

کادر محاوره‌ای محاسبه ابزاری را برای کاربر فراهم می‌نماید تا بتواند یک نام مناسب برای محاسبه انتخاب کند. این گام یک گام مهم است، زیرا وقتی محاسبه صورت می‌گیرد، برای نمایش محاسبه در طرح  $x/y$ ، کاربر نیاز به افزودن یک منحنی به پنجره طرح  $x/y$  جدید دارد. برای انجام این کار، کاربر نوع محاسبه را از پنجره پارامتر منحنی انتخاب می‌کند. پس از انتخاب این لیست، محاسبات موجود لیست انتخابی ارائه می‌شود. این لیست انتخاب شامل نام محاسبه که توسط کاربر تعریف شده می‌باشد.

**زمان / شماره قطعه**

این کادر محاوره‌ای برچسب نمایش داده شده در نمودار را برای محور قطعه / زمان تنظیم می‌کند.

**نام داده**

این کادر محاوره‌ای برچسب مقدار را در راهنما طرح  $x / y$  تعیین می‌کند.

**بیان مقدار**

این کادر محاوره‌ای برای تعریف عملکرد مقادیر استفاده می‌گردد.

**بیان زمان**

این کادر محاوره‌ای برای تعریف عملکرد مقادیر زمان استفاده می‌گردد.

در جدول زیر اطلاعات مربوط به متغیرها و کاربردهای از پیش تعریف شده موجود است.

جدول ۱-۳ اطلاعات مربوط به متغیرها و کاربردهای از پیش تعریف شده

متغیر	متغیرهای از پیش تعریف شده
X	مقدار سلول در حال محاسبه یا مقدار X نقطه منحنی محاسبه می‌شود.
Y	مقدار Y از نقطه منحنی محاسبه می‌شود.
R	تعداد ردیف (۱ - تعداد ردیف) سلول در حال محاسبه است.
C	تعداد ستون (۱ - تعداد ستون‌ها) سلول که محاسبه می‌شود.
NUMPOINTS	تعداد نقاط موجود را در منحنی مرجع برمی‌گرداند.
I	شماره نقطه فعلی در حال محاسبه است.
REFCURVE	منحنی انتخاب شده در جعبه لیست ماشین حساب منحنی
PI	PI (نیمی از یک دایره واحد: $3/141592$ )
SECSPERDAY	تعداد ثانیه در روز (۸۶۴۰۰)
NUMCURVES	تعداد منحنی‌های نمودار
E	لوگ پایه طبیعی
CELL(row, column)	مقدار سلول واقع در (سطر، ستون)

ABS(x)	مقدار مطلق عبارت x
FLOOR(x)	بزرگ‌ترین عدد صحیح بزرگ‌تر از عبارت x نیست.
CEIL(x)	کوچک‌ترین عدد صحیح کم‌تر از عبارت x نیست.
POW(x, y)	x به توان y افزایش یافته‌است.
SQRT(x)	ریشه مربع عبارت x
FT3M3(x)	تبدیل عبارت x از فوت مکعب به متر مکعب
M3FT3(x)	تبدیل عبارت x از متر مکعب به فوت مکعب
FTM(x)	تبدیل عبارت x از فوت به متر
MFT(x)	تبدیل عبارت x از متر به فوت
FT2M2(x)	تبدیل عبارت x از فوت مربع به متر مربع
M2FT2(x)	تبدیل عبارت x از متر مربع به فوت مربع
MGDCFS(x)	تبدیل عبارت x از میلیون گالس در روز (million-) (gals/day) به فوت مکعب در ثانیه (feet/sec)
SIN(x)	Sin x (که در آن x در رادیان وجود دارد)
COS(x)	Cos x (در جایی که x به رادیان اختلاف دارد)
LOG(x)	لگاریتم x
LN(x)	لگاریتم طبیعی x
CFSGM3LBSDAY(x)	غلظت جریان (cfs) * غلظت ( $g/m^3$ ) را به پوند در روز تبدیل می‌کند (Lbs/day)
CFSGM3KGDAY(x)	غلظت جریان (cfs) * ( $g/m^3$ ) را به کیلوگرم در روز تبدیل می‌کند (kg/day)
CMSGM3KGDAY(x)	غلظت جریان (* cms) ( $g/m^3$ ) را به کیلوگرم در روز تبدیل می‌کند (kg/day)
MAX(c)	حداکثر تعداد در منحنی
MIN(c)	حداقل تعداد در منحنی
STDDEV(c)	انحراف استاندارد از منحنی
AVG(c)	مقدار متوسط برای منحنی
MEDIAN(c)	مقدار میانه برای منحنی

MEAN(c)	مقدار میانگین برای منحنی
VARIANCE(c)	مقدار واریانس برای منحنی
MODE(c)	مقدار مد برای منحنی
X(c)	مقدار X هر منحنی در نقطه فعلی
Y(c)	مقدار Y هر منحنی در نقطه فعلی
NUMPOINTS(c)	تعداد نقاط منحنی
X(c, p)	مقدار X هر منحنی در هر نقطه
Y(c, p)	مقدار Y هر منحنی در هر نقطه
INTERPOLATE(c, x)	مقدار منحنی c را در مقدار دامنه x تداخل می‌کند.
DATE(m, d, y, h, m, s)	مقدار x را برای یک تاریخ معین بازمی‌گرداند.
SUM(c)	مجموع مقادیر در منحنی

### فراوانی / میانگین در حال اجرا

این گزینه‌ها محاسبات داخلی هستند که تقریباً همانند محاسباتی که کاربر تعریف می‌کند، انجام می‌شوند البته با این استثنا که کاربر اجباری برای هیچ تابعی ندارد. در واقع، این محاسبات به صورت خودکار انجام می‌شوند.

کاربر می‌تواند پس از اتمام این کادر محاوره‌ای، دکمه Okay را فشار دهد و طرح این محاسبه تقسیم‌بندی را ترسیم نماید. برای ترسیم محاسبه تقسیم‌بندی، کاربر باید دکمه Add Curve را فشار داده و کادر محاوره‌ای پارامتر منحنی ظاهر می‌شود. همچنین باید دکمه رادیویی محاسبه را انتخاب نموده و پس از انتخاب دکمه محاسبه، نام محاسبه‌ای که اخیراً انجام شده است را در کادر محاوره‌ای پرونده مشاهده کند. سپس می‌تواند متغیر و مکان را برای ترسیم انتخاب کند. پس از انتخاب این موارد، کاربر "Ok" را فشار می‌دهد، پنجره طرح x / y با داده‌های محاسبه شده ترسیم شده و دوباره ظاهر می‌شود.







فصل چهارم  
مدل پایه کیفیت آب

WASP 6 جزو مدل‌های پویا می‌باشد که می‌تواند برای تحلیل مسائل کیفیت آب در انواع مختلف منابع آبی از جمله حوضچه‌ها، جریان‌ها، دریاچه‌ها، مخازن، محل ورود رودخانه‌ها به دریا، رودخانه‌ها و آب‌های ساحلی مورد استفاده قرار گیرد. در این بخش مروری بر مدل اصلی کیفیت آب صورت می‌گیرد. در فصل‌های بعدی جزئیات فرآیندهای انتقال و تبدیل در مدل WASP 6 برای اجزای مختلف کیفیت آب ارائه می‌شود.

معادلات حل شده توسط WASP 6 بر اساس اصل اساسی پایداری جرم است. این اصل مستلزم آن می‌باشد که جرم هر یک از اجزای مختلف کیفیت آب که مورد بررسی قرار گرفته از یک روش دیگر نیز محاسبه شود. WASP 6 هر یک از مؤلفه‌های کیفیت آب را از نقطه ورودی مکانی و زمانی تا نقطه پایانی خروج خود ردیابی می‌کند و باعث پایداری جرم در مکان و زمان می‌شود. برای انجام این محاسبات (تعادل جرم)، کاربر باید داده‌های ورودی را برای WASP 6 ارائه دهد که هفت ویژگی مهم را تعریف می‌کند:

- شبیه‌سازی و کنترل خروجی،
- بخش‌بندی مدل،
- انتقال همرفت (جاب‌جایی افقی) و پراکنده،
- غلظت‌های مرزی،
- بارهای فاضلاب با منبع نقطه‌ای و پراکنده،
- پارامترهای جنبشی، ثابت‌ها و توابع زمان،
- غلظت‌های اولیه،

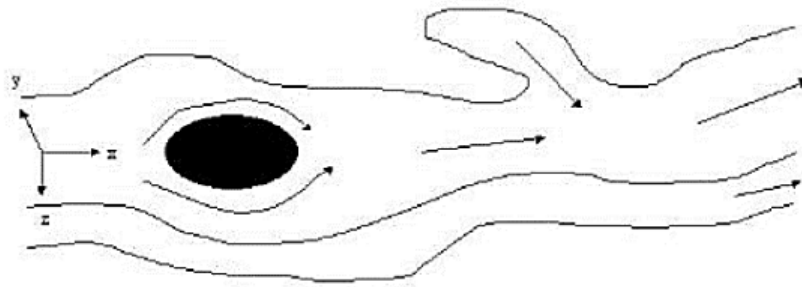
این داده‌های ورودی، به همراه معادلات کلی تعادل جرم WASP 6 و معادلات خاص فرآیند جنبشی شیمیایی، به‌طور منحصربه‌فرد مجموعه‌ی خاصی از معادلات کیفیت آب را تعریف می‌نمایند. که به‌صورت عددی توسط WASP 6 ادغام و فرآیند شبیه‌سازی آن نسبت به زمان روی می‌دهد. در مراحل مختلف نمایش اعمال تغییرات توسط کاربر، WASP 6 مقادیر تمام متغیرهای ظاهری را برای بازیابی بعدی توسط برنامه پس‌پردازنده ذخیره می‌کند. این برنامه‌ها به کاربر اجازه می‌دهد تا به‌طور متقابل نمودارها و جداول متغیرها را از تمام متغیرهای ارائه شده تولید کند.

#### ۴-۱- معادله عمومی تعادل جرم

یک معادله تعادل جرم برای اجزای محلول در یک توده‌ی آب باید برای تمام مواد وارد شده و خارج شده از طریق بارگذاری مستقیم و پراکنده، انتقال همرفتی و پراکنده و تحولات فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی

در نظر گرفته شود. سیستم مختصات نشان داده شده در معادله (۱-۴) را در نظر بگیرید، جایی که مختصات  $x$  و  $y$  در صفحه افقی هستند و مختصات  $z$  در صفحه عمودی است.

معادله کیفیت آب



شکل ۱-۴ سیستم مختصات برای معادله تعادل جرم

معادله تعادل جرم در اطراف یک حجم سیال بسیار کوچک است:

معادله (۱-۴) معادله تعادل عمومی جرم؛

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(U_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(U_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(U_z C) + \frac{\partial}{\partial x}\left(E_x \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(E_y \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(E_z \frac{\partial C}{\partial z}\right)$$

$$+S_L + S_B + S_K$$

$C$  = غلظت اجزای سازنده کیفیت آب،  $mg/l$  یا  $g/m^3$ ،

$t$  = زمان، روزها،

$U_x, U_y, U_z$  = سرعت‌های طولی، عرضی، عمودی،  $m/day$ ،

$E_x, E_y, E_z$  = ضرایب انتشار طولی، عرضی، عمودی،  $m^2/day$ ،

$S_L$  = نرخ بارگذاری مستقیم و پراکنده،  $g/m^3$ -day

$S_B$  = نرخ بارگذاری مرزی (شامل بالادست، پایین دست، اعماق، جوی)،  $g/m^3$ -day

$S_K$  = نرخ تبدیل جنبشی کل اگر مثبت باشد منبع است، اگر منفی باشد مخزن است  $g/m^3$ -day

با گسترش حجم کنترل کوچک و ناچیز به بخش‌های "مجاور" و با مشخص کردن پارامترهای انتقال، بارگذاری و تبدیل مناسب WASP، صورتی از معادله (۴-۵) را به روش تفاضل محدود اجرا می‌کند. با این حال، برای کوتاهی عبارت و وضوح، مشتق شکل تفاضل محدود معادله تعادل جرم برای رسیدن به یک دامنه یک‌بعدی خواهد بود. با فرض همگنی عرضی و عمودی، ما می‌توانیم  $y$  و  $z$  را برای به دست آوردن معادله (۴-۱) ادغام کنیم.

معادله (۴-۲) WASP فرم نهایی تفاضل محدود معادله تعادل جرم؛

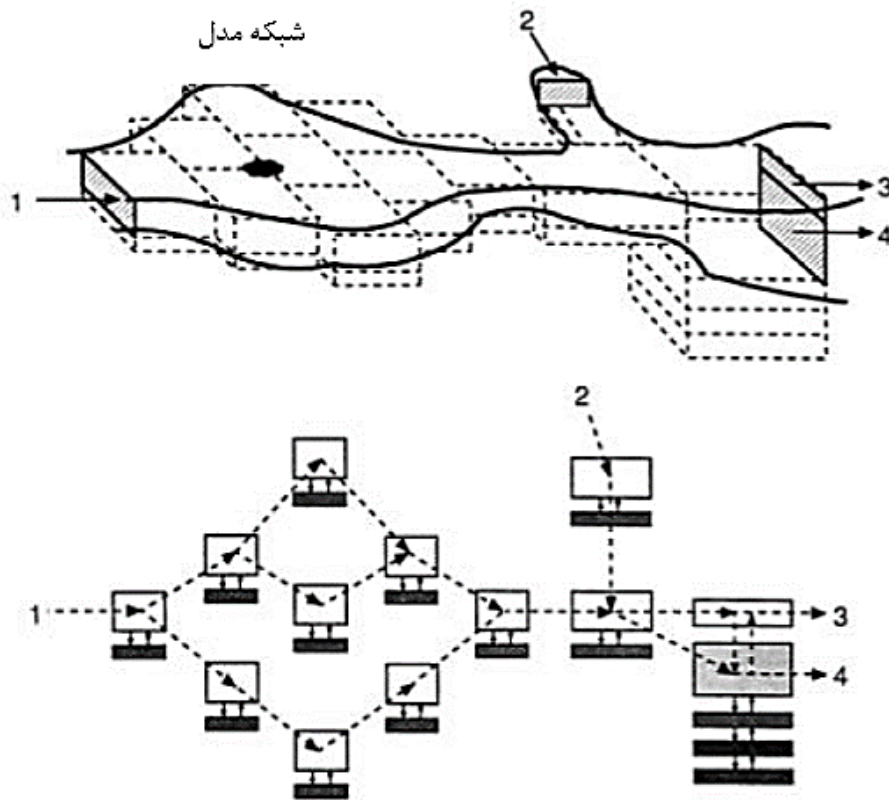
$$\frac{\partial}{\partial t}(AC) = \frac{\partial}{\partial x} \left( -U_x AC + E_x A \frac{\partial C}{\partial x} \right) + A(S_L + S_B) + AS_K$$

$A$  = سطح مقطع،  $m^2$

این معادله سه کلاس اصلی فرآیندهای کیفیت آب را نشان می‌دهد؛ انتقال (عبارت ۱)، بارگیری (عبارت ۲) و تبدیل (عبارت ۳). شکل تفاضل محدود در ضمیمه E مشتق شده است. شبکه مدل و فرآیندهای اصلی در بخش‌های بعدی مورد بحث قرار گرفته است.

#### ۴-۲- شبکه مدل

شبکه مدل مجموعه‌ای از حجم کنترل گسترده یا "بخش" است که در کنار هم نمایان‌گر پیکربندی محدوده آبی هستند. همان‌طور که در شکل (۴-۲) نشان داده شده است، شبکه ممکن است محدوده آبی را به صورت عرضی و عمودی و همچنین به صورت طولی تقسیم کند. بخش‌های لایه بنتیک می‌تواند به همراه بخش‌های ستون آب درج شود. اگر مدل کیفیت آب به مدل هیدرودینامیکی مرتبط باشد، بنابراین قسمت‌های ستون آب باید با اتصالات هیدرودینامیکی مطابقت داشته باشند. غلظت ترکیبات تشکیل دهنده کیفیت آب در هر بخش محاسبه می‌شود. سرعت انتقال اجزای کیفیت آب در طول فصل مشترک بخش‌های مجاور محاسبه می‌شود.

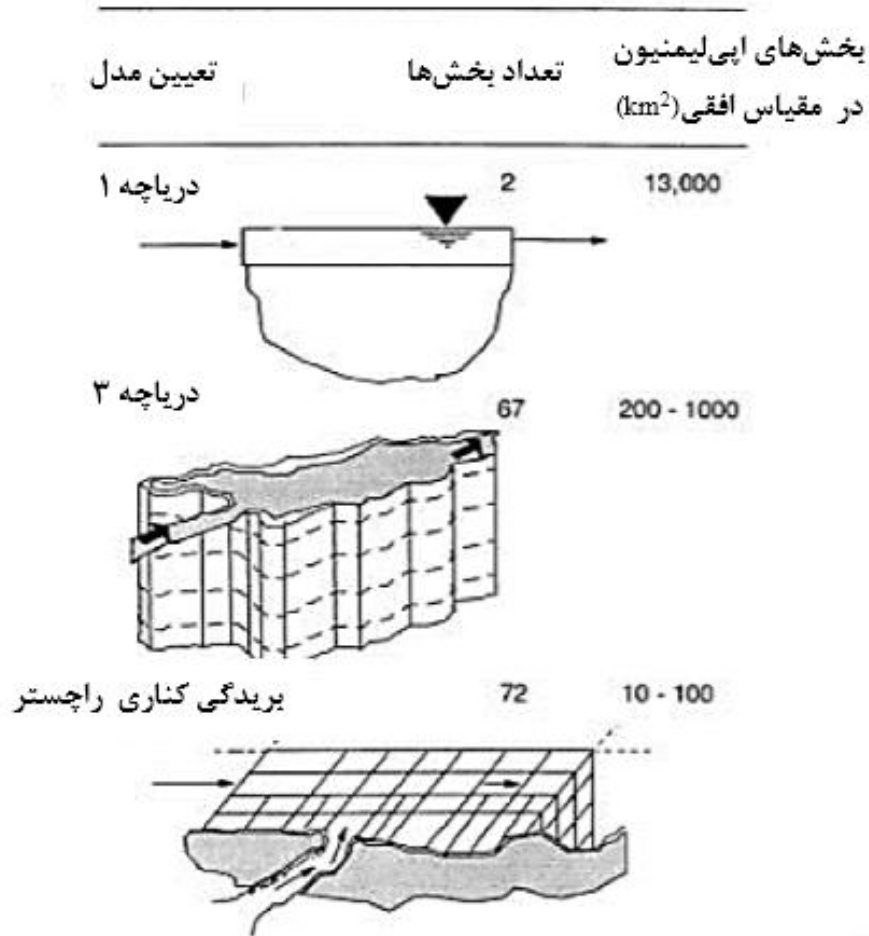


شکل ۲-۴ طرح تقسیم بندی مدل

همان طور که توسط متغیر ورودی ITYPE مشخص شده، بخش‌ها در WASP ممکن است یکی از چهار نوع آن باشند. بخش ۱ نشان دهنده epilimnion (آب سطحی)، بخش ۲ نشان دهنده لایه‌های hypolimnion (زیر سطحی) است، بخش ۳ نشان گر یک لایه فوقانی بنتیک است و بخش ۴ نشان گر لایه‌های عمیق است. نوع بخش در رسوب گذاری بستر و فرآیندهای خاص تبدیل، نقش مهمی را ایفا می‌کند. کاربر باید مراقب باشد بخش‌ها را به درستی تنظیم کند. قطعه‌ی زیر هر قطعه با متغیر ورودی IBOTSG مشخص شده است. این تنظیم زمانی اهمیت دارد که نور از یک بخش به بخش دیگر ستون آب انتقال یابد و یا وقتی مواد در بستر دفن شده یا فرسوده باشد.

حجم بخش و گام‌زمانی شبیه‌سازی، به‌طور مستقیم به یک‌دیگر مرتبط هستند. با افزایش یا کاهش یکی از آن‌ها، دیگری نیز برای تضمین ثبات و دقت عددی همین کار را انجام می‌دهد. همان‌طور که در شکل (۳-۴) نشان داده شده‌است، اندازه بخش می‌تواند به‌طور چشم‌گیری متفاوت باشد. اندازه‌ی مشخصه بیش‌تر توسط مقیاس مکانی و زمانی از مشکل مورد تجزیه و تحلیل، نسبت به ویژگی‌های جریان آب یا آلاینده به خودی‌خود دیکته می‌شود؛ برای مثال، تجزیه و تحلیل یک مشکل شامل حرکت جذر و مد در بالادست یک آلاینده به یک منبع آب، ممکن‌است نیاز به تغییر گام‌زمانی از دقیقه به ساعت داشته‌باشد. درمقابل، تجزیه و تحلیل مسئله‌ای که مربوط به کل زمان ماندگاری آن آلاینده در همان محدوده آبی است، می‌تواند یک مرحله زمانی ساعت به‌روز را امکان‌پذیر کند. شبکه اول برای بررسی وضعیت اوتروفیک عمومی دریاچه‌ی انتاریو استفاده شد. از شبکه دوم برای بررسی تغییرات مکانی و فصلی خوراک‌وری در وسعت دریاچه استفاده شد. از شبکه سوم برای پیش‌بینی تغییرات ناشی از برنامه‌های خاص کنترل آلودگی در سیر نزولی نزدیک ساحل بریدگی کناری راجستر، استفاده گردید.

مقیاس مکانی مورد استفاده در تجزیه و  
تحلیل دریاچه آنتاریو

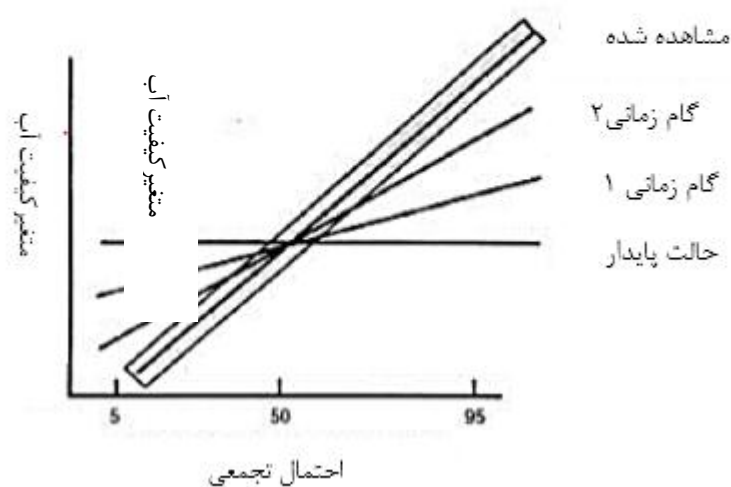


شکل ۳-۴ مقیاس‌های مکانی مورد استفاده در تجزیه و تحلیل دریاچه آنتاریو

به‌عنوان بخشی از تعریف مسئله، کاربر لازم است مشخص نماید که چه مقدار از توزیع فراوانی کیفیت آب باید پیش‌بینی شود. به‌طور مثال، غلظت اکسیژن محلول به‌طور متوسط روزانه ۵ میلی‌گرم در لیتر می‌باشد، اگر نوسانات منجر به کاهش غلظت به کم‌تر از ۲ میلی‌گرم در لیتر برای ۱۰٪ از زمان شود، این غلظت برای محافظت از ماهی‌ها کافی نمی‌باشد. پیش‌بینی مقادیر زیاد غلظت، معمولاً دشوارتر از پیش‌بینی

مقادیر متوسط است. شکل (۴-۴) توزیع فراوانی پیش‌بینی شده توسط سه مقیاس زمانی مدل و توزیع فراوانی مشاهده‌شده توسط نمونه‌برداری کاملاً دقیق را نشان می‌دهد، به دلیل این که آن‌ها احتمالاً بر روی کاغذ ترسیم می‌گردند، خطوط مستقیم حاکی از توزیع عادی می‌باشد. کاهش مرحله زمانی مدل (و در نتیجه اندازه قطعه) امکان شبیه‌سازی بهتر توزیع فراوانی را فراهم می‌کند. با این وجود، این افزایش توانایی پیش‌بینی، مستلزم افزایش دقت داده‌های ورودی است.

#### توزیع فراوانی مقادیر مشاهده شده و محاسبه شده از یک متغیر کیفی



شکل ۴-۴ توزیع فراوانی مقادیر مشاهده شده و محاسبه شده از یک متغیر کیفی

پس از مشخص شدن ماهیت مشکل، باید متغیر زمانی محدوده آبی و بارهای ورودی در نظر گرفته شوند. به طور کلی، گام زمانی مدل باید تا حدی کم‌تر از دوره تغییر متغیرهای جابه‌جایی قابل توجه باشد. در برخی موارد، این محدودیت می‌تواند با میانگین‌گیری ورودی، در طول دوره تغییر یابد؛ به عنوان مثال، رشد



فیتوپلانکتون که توسط نور خورشید تحریک می‌شود، روزانه متفاوت می‌باشد. با این حال، اکثر مدل‌های تغذیه‌گرایی، به‌طور متوسط میانگین ورودی نور را در طول روز محاسبه می‌کنند و این امکان را ایجاد می‌نمایند که مراحل زمانی به‌ترتیب روز انجام شود.

باید توجه داشت که تعاملات غیرخطی مهم، به‌طور متوسط از بین نمی‌روند. هنگامی که دو یا چند متغیر مهم جابه‌جایی دارای یک دوره‌ی تغییر مشابه هستند، ممکن است میانگین اندازه‌گیری امکان‌پذیر نباشد؛ به‌عنوان نمونه، تغییر فصلی از نور، دما، ورودی مواد مغذی و انتقال در دریاچه‌هایی است که تحت تأثیر خوراک‌وری قرار دارد. مثال دیگر شامل تخلیه‌ی دسته‌ای ناپیوسته است. این امکان وجود دارد که چنین ورودی در یک دریاچه بزرگ در طول یک روز یا هفته ایمن باشد، چون تنوع انتقال در مقیاس بزرگ نسبتاً نادر هستند. با این وجود، به دلیل تغییرات جزر و مدی نیم‌روزه و یا روزانه، ورودی مشابه دسته‌ای به درون یک رودخانه جزر و مدی نمی‌تواند به‌طور متوسط انجام شود. مثال سوم، نفوذ شوری در مصب‌ها است. تغییرات جزر و مد می‌تواند در جریان، حجم و پراکندگی با هم تعامل داشته‌باشند به‌طوری که پیش‌بینی‌های بلندمدت نیازمند شبیه‌سازی صریح در چندساعت در مراحل زمانی هستند.

هنگامی که تغییرپذیری موقتی تعیین شد، تغییرپذیری مکانی جریان آب نیز باید در نظر گرفته شود. به‌طور کلی، ویژگی‌های مهم مکانی باید در یک بخش همگن باشند. در برخی موارد، این محدودیت با متوسط اندازه‌گیری عرض، عمق و یا طول قابل کاهش است؛ به‌عنوان مثال عمق، تأثیر تجدیدحیات و تقاضای اکسیژن رسوب در یک ستون آب را کنترل می‌کند. معمولاً تعیین میانگین عمق در طول رودخانه در تخصیص بار زباله‌ی متعارف قابل قبول است، اما به‌طور کلی میانگین این پارامترها در طول یک دریاچه قابل قبول نخواهد بود. ویژگی‌های مکانی مهم دیگر با توجه به مسئله آنالیز شده شامل دما، نفوذ نور، سرعت، pH، ویژگی اعماق دریا یا شار و غلظت رسوب است.

تغییرات مکانی قابل پیش‌بینی غلظت کیفیت آب نیز در اندازه قطعه تأثیر می‌گذارد. کاربر باید میزان اثرگذاری میانگین شیب غلظت قابل قبول را تعیین نماید. از آن‌جا که شرایط کیفیت آب به سرعت در نزدیکی یک نقطه بارگذاری تغییر می‌کند و در پایین دست تثبیت می‌شود، مطالعه تأثیرات روی یک ساحل در فاصله یک چهارم مایل پایین‌تر از نقطه‌ی تخلیه نیاز به بخش‌های کوچک‌تر از مطالعه اثرات موجود در یک ساحل چند مایل دورتر دارد. یک دستورالعمل نهایی و کلی ممکن است در به‌دست آوردن شبیه‌سازی دقیق، مفید باشد. حجم ستون آب تقریباً باید یکسان باشد، در صورتی که اگر جریان‌ها به‌طور قابل توجهی در پایین دست متغیر باشند، باید حجم قطعه به نسبت افزایش یابد. کاربر ابتدا باید حجم و مرحله‌ی قطعه‌ی مناسب را در قسمت بحرانی جریان آب ( $At_c, V_c$ ) انتخاب کند، و سپس بخش‌های بالادست و پایین دست را بر این اساس مقیاس نماید:

$$V_i = \frac{V_c Q_i}{Q_c}$$

البته، حجم واقعی مشخص شده باید برای بهترین حالت واقعی تغییرپذیری فضایی، همان‌طور که در بالا توضیح داده‌شد، تنظیم شود. این رهنمود در زمان‌های طولانی‌تر منجر به دقت عددی بیش‌تر در کل شبکه مدل می‌شود، همان‌طور که در بخش "پارامترهای شبیه‌سازی" در فصل ۲ توضیح داده‌شد.

### ۳-۴- برنامه انتقال مدل

انتقال شامل جابه‌جایی و پراکندگی ترکیبات باکیفیت آب است. انتقال و پراکندگی در WASP به شش نوع مجزا یا "بخش" تقسیم می‌گردد. اولین بخش انتقال شامل جریان چسبیده و اختلاط پراکندگی در ستون آب است. جریان جابه‌جایی حاوی مواد تشکیل‌دهنده، کیفیت آب "پایین‌دست" و میزان رقیق‌شدن آن را بیان می‌کند. پراکندگی باعث اختلاط و رقیق‌سازی بیش‌تر بین مناطق با غلظت‌های کم و زیاد می‌شود.

بخش دوم انتقال، حرکت آب در منافذ بستر رسوب را مشخص می‌کند. مواد تشکیل‌دهنده‌ی کیفیت آب محلول در بستر با جریان آب از منافذ گذشته و با انتشار آب بین بستر و ستون آب رد و بدل می‌شوند. بخش‌های انتقال سوم، چهارم و پنجم، انتقال آلاینده‌های هوا به وسیله ته‌نشینی، تعلیق و رسوب مواد جامد را مشخص می‌کنند. مواد تشکیل‌دهنده کیفیت آب که روی ذرات جامد جذب می‌شوند، بین ستون آب و بستر رسوب منتقل می‌شوند. کاربر می‌تواند سه قسمت جامد را که کسری از اندازه است، مانند شن، سیلت و خاک‌رس یا به‌عنوان موادمعدنی غیرآلی، فیتوپلانکتون و موادآلی تعریف کند.

بخش انتقال ششم نشان‌دهنده‌ی تبخیر یا بارندگی به بخش‌های آب‌سطحی است. اکثر داده‌های انتقال، مانند جریان یا سرعت ته‌نشینی، باید توسط کاربر در مجموعه‌داده ورودی WASP مشخص شوند. برای جریان ستونی آب، ممکن است کاربر "WASP" را با یک مدل هیدرودینامیک متصل کند. اگر این گزینه مشخص شده‌باشد، در طی شبیه‌سازی، WASP محتوای یک فایل هیدرودینامیک برای جریان‌های ناپایدار، حجم، عمق و سرعت را مشخص می‌نماید.

### ۴-۴- کاربرد مدل

اولین گام در استفاده از این مدل، تجزیه و تحلیل مسئله می‌باشد. نخست باید توجه نمود که چه سؤالاتی مطرح می‌شود؟ چگونه می‌توان از یک مدل شبیه‌سازی برای پرداختن به این سؤالات استفاده کرد؟ یک مدل کیفیت آب می‌تواند سه کار اساسی که در ادامه بیان می‌شود، را انجام دهد: شرایط فعلی کیفیت آب را توصیف می‌کند، پیش‌بینی‌های کلی را ارائه می‌دهد و پیش‌بینی‌های خاص مکان را نشان

می‌دهد. اولین وظیفه توصیف شرایط، گسترش برخی از پایگاه‌های داده‌ای مختص مکان است. از آنجا که نظارت هزینه‌بر است، داده‌ها را به‌ندرت به وضوح مکانی و زمانی موردنیاز برای توصیف کامل بدنه آب ارائه می‌دهند. یک مدل شبیه‌سازی می‌تواند برای درون‌یابی بین داده‌های مشاهده‌شده و مکان‌یابی؛ به‌عنوان مثال، نقطه گسیخته اکسیژن محلول در یک رودخانه یا حداکثر نفوذ شوری در یک رودخانه مورد استفاده قرار گیرد. مطمئناً از چنین مدلی برای هدایت تلاش‌های نظارت در آینده استفاده می‌شود. از مدل‌های توصیفی نیز می‌توان برای استنباط فرآیندهای مهم کنترل کیفیت آب موجود استفاده نمود. این اطلاعات می‌تواند علاوه بر هدایت اقدامات نظارتی، در راستای تلاش‌های توسعه‌ای نیز استفاده گردد.

گام دوم مدل‌سازی ارائه پیش‌بینی‌های عمومی می‌باشد. اگر هدف پیش‌بینی انواع آب‌های در معرض خطر از یک ماده شیمیایی جدید باشد، ممکن است داده‌های خاص مکان موردنیاز نباشد. امکان دارد یک مجموعه خام از داده‌ها برای صفحه‌نمایش یک سری از مواد شیمیایی موجود در معرض خطر بالقوه شدن، برای یک پیکره آبی محدود کافی باشد. پیش‌بینی‌های عمومی ممکن است به اندازه کافی مشکلات مدیریتی را حل و فصل کنند یا این که یک گام اولیه در تجزیه و تحلیل دقیق سایت باشند.

ارائه پیش‌بینی‌های خاص سایت دشوارترین کار مدل‌سازی است. واسنجی یک مجموعه‌ی خوب از داده‌ها قطعاً برای ارائه‌ی پیش‌بینی‌های معتبر موردنیاز است. از آنجا که پیش‌بینی‌ها اغلب برای برون‌یابی فراتر از پایگاه‌داده فعلی تلاش می‌کنند، مدل باید دارای یکپارچگی کافی فرآیند باشد. نمونه‌هایی از این نوع کاربردها شامل تخصیص بار زباله برای محافظت از استانداردهای کیفیت آب و آنالیز امکان‌سنجی برای اقدامات درمانی، ممنوعیت فسفات یا روش‌های مدیریتی کشاورزی به بهترین شکل است.

تجزیه و تحلیل مسئله باید مقیاس‌های مکانی و زمانی را برای تجزیه و تحلیل مدل‌سازی دیکته کند. به‌منظور این که جریان آب در بخش "شبکه مدل" به بخش‌هایی با اندازه مناسب تقسیم گردد، کاربر باید سعی نماید شبکه را در بالادست و پایین‌دست فراتر از تأثیر بارهای زباله مورد مطالعه و بحث قرار دهد. اگر این عمل امکان‌پذیر نباشد، کاربر باید شبکه را به اندازه کافی گسترش دهد تا هیچ‌گونه خط‌هایی در تعیین غلظت‌های مرزهای آبی در دامنه مورد مطالعه منتشر نشود.

همچنین کاربر باید شبکه‌ای را در نظر بگیرد تا ایستگاه‌های نمونه‌برداری و نقاط مورد نظر (مانند برداشت‌های آب) در نزدیکی مرکز یک بخش مستقر گردند. بارهای زباله با منبع نقطه‌ای در نهرها و رودخانه‌هایی با جریان یک‌طرفه، باید در نزدیکی انتهای فوقانی یک بخش واقع شوند. در مصب‌ها و دیگر آب‌های با جریان‌های دارای نوسان، بارهای زباله به بهترین وجه در بخش‌ها مستقر می‌شوند. اگر جریان از DYNHYD جریان داشته‌باشد، باید یک بخش WASP با هر اتصال هیدرودینامیکی هم‌زمان شود. با وجود این که بخش‌های بنتیک، در شبکه‌ی هیدرودینامیکی موجود نیستند، اما ممکن است در شبکه

WASP گنجانده- شوند. بخش WASP که شماره‌گذاری شده نباید مشابه با تعداد تقاطع DYNHYD باشد و بخش‌هایی که به صورت عمودی روی هم انباشته شده‌اند، باید به‌طور متوالی از بخش‌های پایین آب‌سطحی شماره‌گذاری شوند.

پس از راه‌اندازی شبکه، مطالعه مدل از طریق چهار مرحله کلی انجام می‌شود که به نوعی هیدرودینامیک، انتقال جرم، تحول کیفیت آب و سم‌شناسی محیط‌زیست را شامل می‌شود. گام اول به این سؤال می‌پردازد که آب به کجا می‌رود. این کار را می‌توان با ترکیبی از اندازه‌گرفتن، مطالعات ویژه و مدل‌سازی هیدرودینامیکی پاسخ داد. داده‌های جریان می‌توانند با استفاده از اصل تداوم، درون‌یابی یا برون‌یابی شوند. می‌توان از مدل‌های مسیریابی بسیار ساده استفاده نمود. مدل‌های هیدرودینامیکی بسیار پیچیده‌ی چندبعدی نیز می‌توانند با متوسط زمان و در فاصله مناسب استفاده شوند. در حال حاضر، سازگارترین مدل هیدرودینامیکی DYNHYD است.

مرحله دوم به این سؤال پاسخ می‌دهد که مواد موجود در آب به کجا منتقل می‌شود. این را می‌توان با ترکیبی از مطالعات ردیاب و واسنجی مدل پاسخ داد. از رنگ و شوری غالباً برای ردیاب استفاده می‌شود. مرحله سوم به این سؤال پاسخ می‌دهد که چگونه مواد موجود در آب و رسوب، دگرگون شده و سرنوشت آن چیست. این تمرکز اصلی بسیاری از مطالعات است. در واقع جواب‌ها به ترکیبی از مطالعات آزمایشگاهی، کنترل داده‌ها، برآورد پارامترها، واسنجی و آزمایش بستگی دارد. نتیجه نهایی گاهی اعتبار یا تأیید مدل نامیده می‌شود. موفقیت این مرحله در واقع به مهارت کاربر بستگی دارد که باید دانش تخصصی را با عقل سلیم و شک‌وتردید در یک فرآیند روش شناختی ترکیب کند.

در گام آخر به این سوال پاسخ داده می‌شود که چگونه این مواد بر تمامی اجزای تشکیل‌دهنده انسان‌ها، ماهیان یا تعادل اکولوژیکی تأثیر می‌گذارند. غالباً غلظت‌های پیش‌بینی شده صرفاً با معیارهای کیفیت آب اتخاذ شده برای محافظت از جامعه عمومی آبیان مقایسه می‌شوند. باید دقت کرد تا مقیاس زمانی و مکانی که در تهیه معیارها در نظر گرفته شده‌اند با مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل، سازگار باشد. بعضی اوقات اصول شیمی‌فیزیکی یا فارماکوکینتیک برای پیش‌بینی بارهای شیمیایی بدن و اثرات بیولوژیکی مورد استفاده قرار می‌گیرند. مدل زیست‌محاسبه FGETS (باربر و همکاران، ۱۹۹۱) و مدل زنجیره‌غذایی WASTOX (کانولی و تومن، ۱۹۸۵) نمونه‌های خوبی از این نوع می‌باشند.

فصل پنجم  
انتقال ردیاب شیمیایی

ردیاب شیمیایی، یک ماده شیمیایی غیرواکنشی است که به‌طور انفعالی در تمام محدوده آبی منتقل می‌شود. نمونه‌های این ردیاب شیمیایی شامل شوری و یا کلریدها هستند. از رنگ‌های ویژه برای ردیاب استفاده می‌شود، البته رنگ‌ها اغلب با سرعت آهسته تجزیه می‌شوند. تنظیم و واسنجی یک ردیاب اولین گام در شبیه‌سازی متغیرهای پیچیده‌تر کیفیت آب است.

### ۱-۵- بررسی اجمالی انتقال ردیاب 6 WASP

با استفاده از برنامه TOXI، به‌طور کلی یک ردیابی محافظه‌کارانه شبیه‌سازی می‌شود. TOXI انتقال و تبدیل یک تا سه ماده شیمیایی و یک تا سه نوع ماده‌ی جامد را شبیه‌سازی می‌کند (جدول ۵-۱). برای شبیه‌سازی یک ردیاب، کاربر باید جامدات را کنار گذاشته و یک ماده شیمیایی را بدون هیچ تجزیه و تحلیلی شبیه‌سازی کند. همان‌طور که در زیر شرح داده می‌شود، ردیاب تحت تأثیر فرآیندهای انتقال، مرز و بارگذاری عملیات می‌باشد.

جدول ۵-۱ متغیرهای حالت در مدل شیمیایی آلی (TOXI)

سیستم	متغیر
۱	شیمیایی ۱
۲	جامدات ۱
۳	جامدات ۲
۴	جامدات ۳
۵	شیمیایی ۲
۶	شیمیایی ۳

WASP 6 از یک معادله تعادل جرم برای محاسبه جرم شیمیایی و غلظت هر بخش در یک شبکه خاص استفاده می‌کند که ممکن است شامل آب‌های سطحی، آب زیرزمینی، بستر سطحی و بستر زیرین باشد. مواد شیمیایی شبیه‌سازی شده، طبق دستور کاربر چندین فرآیند انتقال را در مجموعه داده‌ی ورودی انجام می‌دهند. مواد شیمیایی در بین بخش‌های آب پراکنده و جذب می‌شوند و با اختلاط و پراکندگی به بخش‌های عمیق زیرسطحی منتقل می‌شوند. مواد شیمیایی محلول از طریق نفوذ و انتشار آب منفذی به سمت پایین و یا رو به بالا حرکت می‌کنند.

انتقال مرز و بارگذاری برای مواد شیمیایی ردیاب، در زیر شرح داده شده است. همین فرآیندها در مورد متغیرهای کیفیت آب نیز بررسی گردیده و در فصول بعدی اعمال می شوند.

### ۵-۲- فرآیندهای انتقال

جریان در ستون‌های آب به‌طور مستقیم آلاینده‌های محلول را منتقل کرده و ذرات معلق را در بسیاری از بدنه‌های آب کنترل می‌کند. علاوه بر این، تغییر در سرعت و عمق ناشی از جریان‌های متغیر، می‌تواند بر فرآیندهای جنبشی مانند هوادهی مجدد، فرارشدن و فوتولیز تأثیر بگذارد. به‌کارگیری توصیف یا شبیه‌سازی مناسب ستون آب، یک قدم مهم در هر مطالعه‌ی مدل‌سازی می‌باشد. در WASP 6، جریان ستون آب از طریق یک میدان انتقال وارد می‌شود. ممکن است الگوهای جریان (جریان ۱ و ۲) توصیف شوند یا توسط یک مدل هیدرودینامیک مانند DYNHYD شبیه‌سازی شوند. گزینه‌های جریان در بخش (۳-۱۳) مشخص شده‌اند.

WASP 6، هر جریان جداگانه‌ای که توسط کاربر از نقطه مبدأ آن و از طریق شبکه مدل مشخص شده است را برای جریان‌های توصیفی ردیابی می‌نماید. کاربر باید یک تابع واکنش جریان واحد و یک تابع زمان را برای هر یک از ورودی‌ها ارائه کند. تابع زمان، جریان را با توجه به زمان متفاوت توصیف می‌نماید. تابع پیوستگی، واکنش جریان واحد را به‌صورت تغییر در شبکه توصیف می‌کند. جریان واقعی، حاصل ضرب تابع زمان و تابع پیوستگی می‌باشد که از جریان ورودی بین بخش‌ها حاصل می‌شود.

اگر چندین تابع جریان ورودی مشخص شوند، در این صورت جریان کلی بین قسمت‌ها، حاصل مجموع توابعی است که به صورت تکی جریان دارند. حجم بخش‌ها برای حفظ تداوم تنظیم می‌شوند. به این ترتیب، می‌توان تأثیر چندین شاخه جریان جرم‌مخصوص و گردش‌های ناشی از باد را توصیف کرد. در جریان (شکل ۳-۶) گزینه‌ی جریان خالص WASP 6، تمام جریانات موجود در فصل مشترک یک بخش را برای تعیین جهت جریان خالص جمع نموده و سپس جرم را در یک جهت جابه‌جا می‌کند. در گزینه‌ی جریان ناخالص، WASP 6 جرم را به‌طور مستقل، از جریان خالص حرکت می‌دهد؛ به‌عنوان مثال اگر جریان‌های مخالف در یک فصل مشترک مشخص شوند، WASP 6 جرم را در هر دو جهت جابه‌جا می‌نماید. این گزینه به کاربر اجازه می‌دهد تا الگوهای گردش جریان‌های بزرگ پراکنندگی را توصیف کند.

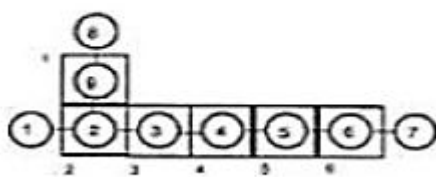
### ۵-۲-۱- پیوند هیدرودینامیکی

ممکن است زمان تأخیر برای جریان ناپایدار در شبکه‌های طولانی، قابل توجه بوده و شبیه‌سازی‌های هیدرودینامیک برای به‌دست آوردن دقت کافی ضروری باشد. با پیوند دادن WASP 6 به یک شبیه‌ساز هیدرودینامیک سازگار، می‌توان شبیه‌سازی‌های واقع‌گرایانه‌ای از انتقال ناپایدار انجام داد. این پیوند از

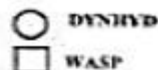
طریق یک فایل خارجی انتخاب شده توسط کاربر، در زمان شبیه‌سازی انجام می‌شود. پرونده هیدرودینامیکی شامل مقادیر هر بخش در ابتدای هر گام زمانی و جریان‌های بین بخشی در طول هر گام زمانی است. WASP 6 برای محاسبه انتقال جرم و حجم، از جریان‌های بین‌سطحی و محاسبه غلظت‌های تشکیل-دهنده استفاده می‌کند. به‌منظور محاسبه میزان هوادهی مجدد و فراریت، ممکن است عمق و سرعت بخش در پرونده هیدرودینامیک موجود باشد.

اولین قدم در پیوند هیدرودینامیکی، ایجاد یک شبکه محاسبه هیدرودینامیکی است که با شبکه WASP 6 سازگار باشد. که ساده‌ترین اقدام ارتباط با مدل‌های هیدرودینامیکی linknode که در شبکه‌های معادل مکانی اجرا می‌شوند، می‌باشد. مثالی در شکل (۵-۱) آورده شده‌است. توجه داشته‌باشید که هر بخش WASP 6، دقیقاً به یک عنصر حجم هیدرودینامیکی یا گره مربوط می‌گردد. هر فصل مشترک بخش WASP 6 دقیقاً به یک پیوند هیدرودینامیکی متصل می‌شود که در شکل با یک خط اتصال مشخص شده‌است.

### شبکه پیوند



طرح DYNHYD-WASP



قطعه‌ها      نقطه اتصال

1	0
2	2
3	3
4	4
5	5
6	0
7	0
8	0
9	1

شکل ۵-۱ پیوند هیدرودینامیکی لینک-گره با WASP



مدل هیدرودینامیکی، جریان را از طریق پیوندها و حجم درون گره‌ها محاسبه می‌کند. در مدل هیدرودینامیک، کاربر باید گام زمانی کیفیت آب یا تعداد مراحل زمانی هیدرودینامیک مطابق با هر گام زمانی کیفیت آب را مشخص نماید. پس از این مرحله، مدل هیدرودینامیک باید حجم گره در ابتدای هر گام زمانی کیفیت آب و متوسط جریان وصل شده در طول هر گام زمانی کیفیت آب را تألیف کند. در مدل هیدرودینامیکی یا در یک برنامه رابط خارجی، کاربر باید یک نقشه شبکه‌مانند (که به صورت نمونه در شکل (۵-۱) قابل مشاهده است) تهیه نموده و از این نقشه برای ایجاد یک پرونده هیدرودینامیکی استفاده نماید؛ WASP 6 قادر به خواندن و تفسیر این پرونده‌ی هیدرودینامیکی می‌باشد. مدل هیدرودینامیکی DYNHYD 5 تهیه شده با WASP 6، حاوی زیرروال‌ها برای تهیه یک فایل مناسب هیدرودینامیکی WASP 6 می‌باشد.

ذکر این نکته حائز اهمیت بوده که مدل هیدرودینامیکی دارای گره‌های اضافی خارج از شبکه WASP 6 می‌باشد که این گره‌های اضافی با مرزهای WASP 6 مطابقت دارند و با شماره‌ی "صفر" از بخش اسمی مشخص شده‌اند. از آنجایی که جریان‌ها فقط در شبکه‌ی هیدرودینامیکی محاسبه می‌شوند و WASP 6 به جریان‌های مرزی خارج از شبکه خود احتیاج دارد، این گره‌های هیدرودینامیکی اضافی لازم می‌باشند.

مدل‌های هیدرودینامیکی چندبعدی نیز می‌توانند به WASP 6 متصل شود. یک شبکه دوبعدی سازگار در شکل (۵-۱) نشان داده شده‌است. برای شروع هر گام زمانی کیفیت آب، حجم داخل یک بخش WASP 6 باید در یک پرونده هیدرودینامیکی خلاصه و نوشته شود. برای مدت زمان هر گام زمانی کیفیت آب، جریان‌ها در مرزهای بخش WASP 6 باید به‌طور متوسط اندازه‌گیری گردند. سپس تمام جریان‌های متوسط در یک مرز باید در پرونده هیدرودینامیکی جمع و نوشته شوند. در این‌جا توجه به وجود عناصر هیدرودینامیکی در خارج از شبکه‌های تولیدکننده‌ی مرزهای WASP 6 باز هم حائز اهمیت خواهد بود. پیش‌پردازنده، بخش‌های مرزی را با استفاده از خواندن پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی مشخص می‌کند. کاربر می‌تواند غلظت‌های مربوط به هر یک از این مرزها را وارد کند شکل (۳-۱۵).

برای اجرای پیوند هیدرودینامیکی، کاربر باید پیوند هیدرودینامیکی را مشخص نموده و پرونده‌ای از پیوند هیدرودینامیکی که قبلاً ایجاد شده، را انتخاب کند. پس از انتخاب پرونده مناسب، پرونده‌ی هیدرودینامیکی گام زمانی شبیه‌سازی را مجدداً تنظیم می‌نماید. مرحله زمانی خوانده شده در شکل (۳-۱۸) باید وارد شود، زیرا در این مرحله، کاربر پایان زمان شبیه‌سازی را مشخص می‌کند. به‌طور مشابه، حجم بخش ستون آب از پرونده هیدرودینامیکی خوانده می‌شود. با این وجود، کاربر باید حجم مربوط به هر بخش را در مکان معمول وارد کند. در حین شبیه‌سازی، جریان‌ها و حجم بارها در هر مرحله خوانده می‌شوند.

### ۵-۲-۲- هندسه هیدرولیک

توصیف مناسب از هندسه‌ی بخش به‌عنوان تابعی از شرایط جریان می‌تواند در استفاده صحیح از WASP 6 برای شبیه‌سازی رودخانه‌ها مهم باشد. برای گزینه‌ی جریان ۳، سرعت و عمق در مدل هیدرودینامیکی محاسبه گردیده و توسط WASP 6 خوانده می‌شود. برای گزینه‌های جریان ۱ و ۲، مجموعه‌ای از ضرایب تخلیه هیدرولیکی مشخص شده توسط کاربر را می‌توان در شکل (۳-۹) وارد نمود که رابطه بین سرعت، عمق و جریان را در بخش‌های مختلف تعریف می‌نماید. این روش، که در زیر شرح داده شده‌است، زیر اجرای QUAL2E (براون و بارنول، ۱۹۸۷) می‌باشد. در WASP 6، از سرعت و عمق بخش فقط برای محاسبه نرخ‌های هوادهی مجدد و فرار شدن، استفاده گردیده و آن‌ها در روند انتقال استفاده نمی‌شوند.

ضرایب تخلیه اعم از عمق و سرعت جریان، بر اساس مشاهدات تجربی از رابطه‌ی جریان با سرعت و عمق استوار است (لئوپولد و مادوکس، ۱۹۵۳). توجه به این نکته ضروری است که این ضرایب تنها در محاسبه هوادهی مجدد یا فرار شدن حائز اهمیت می‌باشند. محاسبات سرعت در هنگام حرکت مورد استفاده قرار نمی‌گیرد و در شبیه‌سازی ردیاب‌ها تأثیری نخواهد داشت. معادلاتی که در ادامه بیان می‌شود؛ سرعت، عرض کانال و عمق مربوط به جریان را از طریق توابع توان مرتبط می‌کنند:

$$V = aQ^b \quad \text{ضرایب} \quad (۱-۵)$$

هیدرولیک؛

$$D = cQ^d \quad (۲-۵)$$

$$B = eQ^f \quad (۳-۵)$$

D = عمق متوسط، متر؛

B = عرض متوسط، متر؛

a, b, c, d, e, f = ضرایب تجربی یا توان‌ها هستند.

با توجه به این که این مساحت تابعی از عرض متوسط (B) و عمق متوسط (D) است،

$$A = DB \quad (۴-۵)$$

از پیوستگی مشخص است:

$$Q = U \cdot A = U \cdot D \cdot B = (aQ^b) \cdot (cQ^d) \cdot (eQ^f) = Q^{b+d+f} \quad (5-5)$$

و بنابراین، روابط زیر را به دست می‌آید:

$$a c e = 1 \quad (6-5)$$

$$b + d + f = 1 \quad (7-5)$$

6 WASP برای تعیین سرعت تنها به معادله (۱-۵) و برای تعیین عمق تنها به معادله (۲-۵) نیاز دارد. ضرایب معادله (۳-۵) به طور ضمنی توسط معادله (۶-۵) و معادله (۷-۵) مشخص شده‌اند. با توجه به مقاطع عرضی خاص، می‌توان ضرایب (e, c, a) و نماهای (f, d, b) را از معادله مانینگ استخراج کرد؛ برای مثال، اگر مقطع یک کانال مستطیلی فرض شود، بنابراین (B) عرض، (Q) تابعی از جریان، (f) توان، (e) ضریب و (B) عرض کانال مستطیلی است. با توجه به این که شعاع هیدرولیکی (R) تقریباً برابر با عمق (D) برای جریان‌های بزرگ است و  $A = D B$ ، ضرایب تخلیه برای بخش‌های متقاطع مستطیلی می‌تواند ۰/۴ برای سرعت و ۰/۶ برای عرض نشان داده شود. لئوپولد و همکاران (۱۹۶۴) خاطرنشان کردند به دلیل ترویج خاک‌های منسجم دامنه‌های شیب‌دار، شکل‌گیری کانال‌های جریان در مناطق مرطوب به سمت مقطع مستطیل رفته‌است و این درحالی است که خاک‌های غیرچسبنده‌ی تشکیل‌دهنده‌ی کناره‌های شیب‌دار و تقریباً نامشخص هستند.

جدول ۲-۵ مقایسه توان هیدرولیک

مقطع	توان برای سرعت (b)	توان برای عرض (f)	توان برای عمق (d)
مستطیل شکل	۰/۴۰	۰/۰۰	۰/۶۰
مقطع	توان برای سرعت (b)	توان برای عرض (f)	توان برای عمق (d)
میانگین ۱۵۸ ایستگاه گیگینگ در ایالات متحده است.	۰/۴۳	۰/۱۲	۰/۴۵
میانگین ۱۰ ایستگاه Gaging در رودخانه Rhine	۰/۴۳	۰/۱۳	۰/۴۱

۰/۳۶	۰/۲۹	۰/۳۴	جریان‌های گذرا در Semiarid U.S.

جدول (۲-۵) توان‌های هیدرولیک را برای کانال مستطیل شکل با داده‌های گزارش شده توسط لئوپولد و همکاران (۱۹۶۴)، مقایسه می‌کند. توجه داشته‌باشید که ضریب سرعت متوسط برای کلیه مقاطع کانال، نسبتاً ثابت است. تغییر عمده در کاهش توان عمق و افزایش هم‌زمان در توان عرض، در مشخصه‌ی مقطع کانال از کناره‌های شیب‌دار خاک‌های چسبنده به شیب‌های کم عمق مناطق خشک با خاک‌های غیرچسبنده رخ می‌دهد.

برای آب‌هایی از قبیل حوضچه‌ها، دریاچه‌ها و مخازن، سرعت و عمق ممکن است تابعی از جریان نباشد. برای این موارد، هر دو پارامتر سرعت و عمق (b و d) قابل انتخاب و صفر می‌باشند (+). از آن‌جا که Q به توان صفر برابر با یک (۱/۰) است، ضرایب a و c باید سرعت و عمق باشند؛ یعنی:

$$IF b = 0.0 \quad THEN \quad a = V$$

$$IF d = 0.0 \quad THEN \quad c = D$$

هنگامی که توان عمق صفر باشد، WASP 6 با فرض کناره‌های مستطیلی، عمق بخش را با حجم بخش تنظیم می‌کند. برای شبیه‌سازی رودخانه یا جریان خاص برای سایت باید ضرایب هیدرولیک و توان‌ها محاسبه شوند. براون و بارنول (۱۹۸۷) تخمین عوامل (b و d) و سپس واسنجی ضرایب (a و c) را برای مشاهده سرعت و عمق توصیه کردند. توان‌ها ممکن است براساس مشاهدات شکل کانال که در یک بررسی پیشرفته مشخص شده است، انتخاب شوند. اگر مقطع تا حدود زیادی مستطیل شکل با کناره‌های عمودی باشد، اولین مجموعه از توان‌های نمایش داده شده، باید مناسب باشند. اگر کانال‌ها دارای کناره‌های شیب‌دار معمولی برای مناطقی با خاک‌های منسجم باشند، پس مجموعه دوم منبعی مناسب است و اگر جریان در ناحیه‌ی خشک با خاک‌های غیرچسبنده و کناره‌های شیب‌دار کم عمق باشد، آخرین مجموعه از توان‌ها توصیه می‌شود.

ویژگی اصلی کانال که باید در یک بررسی و امکان‌سنجی اولیه به آن توجه شود، شرایط شیب کناره یا روند افزایش عرض با افزایش جریان می‌باشد. واضح است که شیب‌های کناری و مواد در تماس با جریان

نهر در میزان جریان اصلی، از ویژگی‌های بارز مورد توجه در یک شناسایی هستند. نتیجه این بررسی یک راهنمایی کلی است، اما باید توجه داشت که مقادیر برای جریان‌های کناری براساس آن‌ها حاصل می‌شوند.

### ۵-۲-۳- جذب آب منفذی

جاری شدن آب منفذی به داخل یا خارج از بستر می‌تواند به میزان قابل توجهی بر غلظت آلاینده‌های محرک تأثیر بگذارد. بسته به جهت این جریان‌ها و منبع آلاینده‌ها، جذب آب منفذی ممکن است منبع یا مخزن آلاینده‌ها برای ستون آبی باشد. اگر این بخش‌ها در شبکه مدل گنجانده شوند، کاربر ممکن است انتقال همرفتی مواد شیمیایی حل شده در آب منفذی را مشخص نماید. در WASP6، جریان آب منفذی از طریق میدان انتقال ۲ وارد می‌شود. انتقال آب منفذی، آب و مواد شیمیایی محلول را منتقل - نموده، ولی ذرات رسوبات و مواد شیمیایی منتقل نمی‌شوند. مشتقات جرم مواد شیمیایی به دلیل جریان آب منفذی از بخش  $j$  به بخش  $i$  توسط معادله زیر بیان می‌شود:

$$\frac{\partial M_{ik}}{\partial t} = \frac{Q_{ji} f_{Dj} C_{jk}}{n_j} \quad (۸-۵)$$

$M_{ik}$  = جرم شیمیایی "k" در بخش "i"؛

$C_{ik}$  = غلظت کل ماده شیمیایی "k" در بخش "j" ، "mg/l" (g/m<sup>3</sup>)؛

$n_j$  = تخلخل قطعه  $j$ ؛  $L_w/L$ ؛

$f_{Dj}$  = بخش شیمیایی محلول در بخش "j"؛

$Q_{ij}$  = میزان جریان آب منافذ از  $j$  به  $i$  m<sup>3</sup>/day.

کسرهای حل شده  $f_{Dj}$  ممکن است توسط کاربر در مرحله‌ای که در شکل (۲-۱۱) نشان داده شده است، وارد شود. در TOXIC، این پارامترها در هر مرحله از جنبشی جذب محاسبه می‌شوند.

WASP 6 هر جریان منفذی جداگانه از طریق شبکه اعماق دریا را ردیابی کرده و کاربر باید برای هریک از ورودی‌ها (یا جریان خروجی)، یک تابع تداوم و یک تابع زمان را تأمین کند. جریان واقعی از طریق بخش‌هایی از دریا که حاصل ضرب تابع زمان و تابع پیوستگی جریان ورودی است حاصل می‌شود. اگر یک جریان از یک بخش از آب سطحی نشأت بگیرد و یا تخلیه شود، باید عملکرد جریان آب سطحی مربوطه در قسمت جریان ۱ که مطابق با عملکرد آب منفذی است توصیف شود.

### ۵-۲-۴- پراکندگی ستون آب

تبادل ستون آب پراکنده به‌طور قابل‌توجهی در انتقال آلاینده‌های محلول و ذرات معلق در آب منابعی مانند دریاچه‌ها، مخازن، مصب‌ها و حتی در رودخانه‌ها تأثیر می‌گذارد. پراکندگی طولی می‌تواند مهم‌ترین فرآیند رقیق‌ساز غلظت پیک باشد که ممکن است ناشی از بارهای ناپایدار یا نشت آن‌ها باشد. ردیاب‌های طبیعی یا مصنوعی مانند رنگ، شوری یا حتی گرما اغلب برای واسنجی ضرایب پراکندگی برای یک شبکه مدل استفاده می‌شوند.

در WASP 6، پراکندگی ستون آب از طریق میدان انتقال ۱ که در شکل (۲-۱۳) نشان داده شده است، ارائه می‌شود. کاربر ممکن است چندین گروه تبادل را تعریف نماید. در ضمن کاربر باید برای هر گروه، یک تابع زمان ارائه دهد که مقادیر ضریب پراکندگی ( $m^2/sec$ ) را در زمان متغیر داشته باشد. برای هر تبادل در گروه، لازم است یک سطح مشترک، طول مشخصه اختلاط و بخش‌های مجاور را که تبادل در آن رخ می‌دهد، تأمین شود. طول مشخصه اختلاط معمولاً فاصله بین نقاط میانی بخش می‌باشد. ناحیه بین‌سطحی مربوط به منطقه طبیعی بسته به طول مشخصه اختلاط است که توسط بخش‌های مبادله (مساحت مقطع برای مبادلات افقی یا مساحت سطح برای مبادلات عمودی) تقسیم می‌شود. تبادل واقعی بین بخش‌های  $i$  و  $j$  در زمان  $t$  توسط معادله زیر داده می‌شود:

$$\frac{\partial M_{ik}}{\partial t} = \frac{E_{ij}(t) \cdot A_{ij}}{L_{cij}} (C_{jk} - C_{ik}) \quad (9-5)$$

$M_{ik}$  = جرم شیمیایی "k" در بخش "i"، g

$C_{ik}, C_{jk}$  = غلظت مواد شیمیایی "k" در بخش "i" و "j"،  $mg/l$  ( $g/m^3$ )

$E_{ij}(t)$  = تابع زمان ضریب انتشار برای تبادل "ij"،  $m^2/day$

$A_{ij}$  = منطقه بین‌سطحی که توسط بخش‌های "i" و "j" به اشتراک گذاشته می‌شود.  $m^2$

$L_{cij}$  = طول مخلوط مشخصه بین بخش‌های "i" و "j"، m

### ۵-۲-۵- پراکندگی آب منفذی

تبادل آب منفذی که دارای قابلیت پراکندگی می‌باشد، می‌تواند به‌طور قابل‌توجهی بر غلظت آلاینده‌های اعماق دریا، به‌ویژه برای مواد شیمیایی نسبتاً محلول و پیکره‌آبی با بار رسوبی کم تأثیر بگذارد. بسته به گرادیان غلظت محلول، انتشار آب منفذی ممکن است منبع یا مخزن آلاینده‌ها برای ستون آب پوشاننده باشد.

اگر بخش‌های بنتیک در شبکه مدل گنجانده شود، کاربر ممکن است انتقال پراکنده‌ی مواد شیمیایی حل شده در آب منفذی را مشخص نموده و در WASP 6، انتشار آب منفذی را از طریق میدان انتقال ۲ که در شکل (۲-۱۳) نشان داده شده است، وارد نماید و همچنین چندین گروه تبادل را تعریف کند. برای هر گروه تبادل، کاربر باید یک تابع زمان را ارائه کند که مقادیر ضریب پراکنده‌ی (مترمربع در ثانیه) را در زمان تغییر می‌دهد. همچنین، کاربر باید برای هر گروه تبادل یک ناحیه بین‌سطحی، یک طول مشخصه اختلاط و بخش‌هایی که در آن تبادل صورت می‌گیرد، تأمین کند. طول مشخصه اختلاط به‌طور معمول، فاصله بین دو نقطه میانی بخش اعماق دریا (به‌وسیله ضرب داخلی انحنا که تقریباً معکوس تداخل است) می‌باشد. برای تبادل آب منفذی با یک بخش از آب سطحی، طول مشخصه اختلاط معمولاً عمق بخش سطحی اعماق می‌باشد. مساحت بین‌سطحی و مساحت سطحی از اعماق دریا که توسط کاربر وارد می‌شود، در نظر گرفته می‌شود.

امکان دارد چند بخش سطحی بنتیک در بخش ستون آب وجود داشته باشد که شامل رسوبات جداگانه دریا (یا زیستگاه‌ها) می‌باشد. غلظت پراکنده‌ی شیمیایی، ذرات محلول در واحد حجم آب منفذی می‌باشد. تبادل انتشار واقعی بین بخش‌های اعماقی  $i$  و  $j$  در زمان  $t$  توسط معادله (۵-۱۰) بیان می‌شود:

$$\frac{\partial M_{ik}}{\partial t} = \frac{E_{ij}(t)A_{ij}n_{ij}}{\frac{L_{cij}}{n_{ij}}} \left( \frac{f_{Djk}C_{jk}}{n_j} - \frac{f_{Dik}C_{ik}}{n_i} \right) \quad (10-5)$$

$f_{Dik}, f_{Djk}$  = بخش شیمیایی محلول "k" در بخش‌های "i" و "j"،

$n_i$  = میانگین تداخل در فصل مشترک "ij"،  $L_w/L_{ij}$ ،

$E_{ij}(t)$  = تابع زمان ضریب انتشار برای تبادل "ij"،  $m^2/day$ ،

$A_{ij}$  = منطقه بین‌سطحی که توسط بخش‌های "i" و "j" به اشتراک گذاشته می‌شود.  $m^2$ ،

$L_{cij}$  = طول مخلوط مشخصه بین بخش‌های "i" و "j"  $m$ .

### ۵-۲-۶- فرآیندهای مرزی

بخش مرزی با استفاده از تبادل آب خارج از شبکه؛ از جمله ورودی‌های شاخه‌ای، جریان‌های پایین‌دست و تبادل پراکنده‌ی آب آزاد مشخص می‌شود. در WASP 6 با بررسی دو بخش جابه‌جایی و پراکنده‌ی که توسط کاربر مشخص گردیده، می‌توان بخش‌های مرزی آن را تعیین نمود. اگر شماره‌ی یکی از دو بخش جابه‌جایی یا پراکنده‌ی "۰" باشد، شماره بخش دیگر، نشان‌دهنده‌ی یک بخش مرزی است.

بنابراین، برای جریان‌های جابه‌جایی، (۱) دو بخش را یک بخش مرزی بالادست در نظر می‌گیرد. جفت بخش (۰ و ۵)، بخش ۵ را به‌عنوان بخش مرزی پایین‌دست نشان می‌دهد. غلظت مرزی  $C_{Bik}$  (mg/L) برای هر متغیر شبیه‌سازی شده "k" در هر بخش مرزی "i" باید مشخص شود. این غلظت ممکن است در زمان متفاوت باشد. در بخش‌های مرزی بالادست، WASP 6 میزان بارگذاری جرم را از رابطه زیر اعمال می‌کند:

$$V_i S_{Bik} = Q_{oi}(t) \cdot C_{Bik} \quad (۱۱-۵)$$

$S_{Bik}$  = پاسخ نرخ بارگذاری مرزی از شیمیایی "k" در بخش "i"،  $\text{g/m}^3\text{-day}$ .

$V_i$  = حجم بخش مرزی "i"،  $\text{m}^3$ .

$Q_{oi}$  = جریان بالادست به بخش مرزی "i"،  $\text{m}^3/\text{day}$ .

WASP 6 در بخش‌های مرزی پایین‌دست، نرخ بارگذاری جرم را از رابطه زیر اعمال می‌کند:

$$V_i S_{Bik} = -Q_{oi}(t) \cdot C_{ik} \quad (۱۲-۵)$$

$Q_{oi}(t)$  = جریان پایین‌دست از بخش مرزی "i"،  $\text{m}^3/\text{day}$ .

$C_{ik}$  = غلظت داخلی مواد شیمیایی "k" در بخش "i"،  $\text{mg/l}$ .

باید توجه گردد که غلظت مرزی مشخص شده برای محاسبه نرخ بارگذاری مرزی در بخش مرزی پایین‌دست استفاده نمی‌شود. اما اگر جریان خروجی پایین‌دست منفی شود در حقیقت به یک جریان ورودی تبدیل می‌شود. در این حالت، معادله (۱۱-۵) در جایی اعمال می‌گردد که  $Q_{oi} = -Q_{oi}$  است. در بخش‌های مرزی تبادل، WASP 6 نرخ بارگذاری جرم را از رابطه زیر اعمال می‌کند:

$$V_i S_{Bi} = \frac{E_{i(0)}(t) A_{i0}}{L_{ci0}} (C_{Bk} - C_{ik}) \quad (۱۳-۵)$$

هنگامی که غلظت مرزی از غلظت داخلی فراتر رود، جرم به بخش مرزی اضافه می‌شود و هنگامی که غلظت مرزی زیر غلظت داخلی قرار گیرد، جرم از بخش مرزی کم می‌شود.

## ۵-۲-۷- فرآیندهای بارگذاری

WASP 6 این امکان را به کاربر می‌دهد تا نرخ بارگذاری را برای هر متغیر، مشخص نماید. دو نوع بار برای بارهای منبع نقطه‌ای و بارهای رواناب ارائه می‌شود. کاربر می‌تواند در مجموعه داده‌های ورودی اولین مجموعه بارها را مشخص کند. مجموعه دوم بار توسط WASP 6، از یک فایل بارگذاری منبع



غیرنقطه‌ای که توسط یک مدل بارگیری مناسب ایجاد شده‌است، خوانده می‌شود. هر دو نوع بار با نرخ‌های زیر، به ازای کیلوگرم در روز به بخش‌های تعیین شده اضافه می‌شوند:

$$V_i S_{Lik} = 1000 \cdot L_{ik}(t) \quad (۱۴-۵)$$

$S_{Lik}$  = پاسخ نرخ بارگذاری شیمیایی "k" در بخش "i"،  $\text{g/m}^3 - \text{day}$ ،  
 $L_{ik}(t)$  = نرخ بارگذاری مواد شیمیایی "k" به قطعه "i"،  $\text{kg/day}$ .

بارهای منبع نقطه‌ای که به یک سری بارگذاری شناخته می‌شوند، در مقابل مقادیر زمان می‌باشند که، به صورت ورودی عمل می‌کنند. در طی یک شبیه‌سازی، WASP 6 بین این نقاط درگیر می‌شود تا بارهای متغیر زمانی را ارائه نماید. زمان محاسبه‌ی WASP 6 باید توسط کاربر تنظیم شود تا اختلاف در زمان ورودی را بر توابع بارگذاری منبع نقطه‌ای تقسیم کند. اگر گام‌های زمانی به‌طور مساوی تقسیم شوند، کاربر باید حداکثر پنج قدم را در کمترین حالت، به اندازه‌ی ۵ برابر کوچک‌تر از ورودی‌های زمان مبدأ مشخص نماید. اگر کاربر تغییرات بار روزانه را مشخص کند، بطور مثال، حداکثر زمان باید ۲ روز باشد. کاربر باید درک نماید که حجم وارد شده به‌طور مستقیم با جریان ورودی همراه نیست. اگر جریان ورودی با بارگذاری در مقایسه با جریان آب موجود کوچک باشد، هیچ خطای قابل توجهی مطرح نمی‌شود. اگر بارگذاری با جریان ورودی قابل توجه همراه باشد، پس کاربر باید به‌طور کلی جریان‌های مربوطه را به‌صورت جداگانه تحت فشار ستون آبی وارد کند و با تعیین غلظت‌مرزی در جریان ورودی، بارگیری را مرز مدل در نظر بگیرد. اگر تعداد زیادی از بارهای پراکنده خوانده‌شوند، کاربر می‌تواند با استفاده از یک تابع پیوستگی که جریان پایین دست را افزایش می‌دهد، جریان افزایشی ایجاد نماید.

### ۵-۲-۸- پیوند منبع غیرنقطه‌ای

با پیوند دادن WASP 6 به یک شبیه‌ساز روان‌آب‌سطحی سازگار، می‌توان شبیه‌سازی‌های واقعی بارهای منبع غیرنقطه‌ای را انجام داد. این پیوند از طریق یک فایل خارجی فرمت‌شده‌ی انتخابی توسط کاربر در زمان شبیه‌سازی انجام می‌شود. فایل منبع غیرنقطه‌ای حاوی اطلاعاتی است که در آن‌ها سیستم‌ها و بخش‌های WASP 6 بارهای منبع غیرنقطه‌ای دریافت می‌کنند و بارهای غیرصفر را بر اساس سیستم، بخش و روز ثبت و درج می‌کنند.

اگر کاربر با چک کردن کادر گفت‌گو در شکل (۲-۶)، کادر بارگذاری منبع غیرنقطه‌ای را تنظیم نماید، نویی از پرونده‌های منبع غیرنقطه‌ای که قبلاً تهیه شده‌اند (\*NPS)، ارائه می‌گردد. به دنبال انتخاب یک فایل مناسب، بارهای منبع غیرنقطه‌ای در سراسر شبیه‌سازی، یک‌بار از فایل بارگیری ایجادشده توسط

شبیه‌سازی مدل بارگیری قبلی، خوانده می‌شوند. این بارها که توابع مرحله‌ای می‌باشند و روزانه تغییر می‌کنند، تلقی می‌شوند. وقتی کاربر گزینه‌ی بارگذاری منبع غیرنقطه‌ای را بارگیری می‌کند، گام‌های زمانی مدل باید به مدت ۱ روز قابل تقسیم باشد. (گام‌های زمانی لازم نیست که دقیقاً در یک روز قابل تقسیم باشد؛ اگر گام‌های زمانی اندک باشد، هرگونه خطا در حمل‌بار بارگذاری روز قبل به یک روز جدید ناچیز خواهد بود).

فایل بارگذاری منبع غیرنقطه‌ای، یک پرونده با فرمت ASCII است که توسط کاربر انتخاب گردیده- است. این پرونده حاوی اطلاعاتی است که در آن سیستم‌ها و بخش‌های WASP بارهای منبع غیرنقطه‌ای را دریافت می‌کنند و سابقه‌ای از بارهای غیرنقطه‌ای را براساس سیستم، بخش و روز درج می‌نمایند.

شش پرونده شامل پرونده‌ی منبع غیرنقطه‌ای هستند.

خط ۱ فرمت فایل منبع غیرنقطه‌ای،

NPSMOD = نام و یا توصیف منبع غیرنقطه‌ای مدل یا روش تولید، که در فایل خروجی پرونده نیز

ثبت می‌شود. (A15).

NUMSEG = شماره بخش‌هایی که بارهای منبع غیرنقطه‌ای را دریافت می‌کنند. (I5).

INTOPT = گزینه‌ی درون‌یابی ۱ = تابع پله‌ای (اکنون فقط یک در کد) (I5).

NUMSYS = شماره سیستم‌های WASP که بارهای منبع غیرنقطه‌ای دریافت می‌کنند (I5).

Record 2 = بخش‌های بارگیری (I5).

LSEG(I) = شماره بخش‌های دریافت‌کننده بارها (I5).

Record 2 = در بارهای NUMSEG تکرار می‌شود.

Record 3 = سیستم‌های بارگیری (20I5).

LSYS(I) = شماره‌های سیستم دریافت‌کننده بار WASP (I5).

Record 4 = توصیف‌کننده سیستم (A15).

NAME\$Y(I) = نام یا توضیحات سیستم‌های دریافت بار WASP. (A15).

Record 4 = در بارهای NUMSYS تکرار می‌شود.

Record ۵ و ۶ واحدی برای تعداد روزهایی که بارهای غیرصفر رخ می‌دهند، تکرار می‌شوند.

Record 5 = روزهای بارگیری (F10.0).

LDAY = زمان در روز برای دنبال کردن بار غیرصفر است (F10.0).

Record 6 = بارهای منبع غیرنقطه‌ای (A15 , 20F10.0).

NAME\$Y(I) = نام سیستم یا توضیحات (توسط WASP خوانده نشده است) (A15).

WASP "I" سیستم برای شبیه‌سازی منبع غیرنقطه‌ای برای سیستم WASP "I" در کلیه بخش‌های بارگیری "J"، به ترتیب ارائه شده در Record 2. بارها kg/day هستند (20F10.0).  
Record 6 در بارهای NUMSYS تکرار می‌شود.  
Record 1 یک بار ورودی است. Record 2 در بارهای NUMSEG تکرار می‌شود. Record 3 یک بار ورودی است. Record 4 در زمان‌های NUMSYS تکرار می‌گردد. 6, 5 Records به‌عنوان (یک مجموعه بار) در بارهای NUMSYS تکرار می‌شوند. در هر مجموعه، 5 Records یک بار وارد گردیده و Record 6 در بارهای NUMSYS تکرار می‌شود.

### ۵-۲-۹- شرایط اولیه

از آن‌جا که WASP 6 یک مدل پویا می‌باشد، کاربر باید شرایط اولیه برای هر متغیر را در هر بخش مشخص نماید. شرایط اولیه شامل غلظت‌های شیمیایی در ابتدای شبیه‌سازی است. محصول غلظت‌ها و حجم‌های اولیه، توده‌های تشکیل‌دهنده اولیه در هر بخش را تشکیل می‌دهند. برای شبیه‌سازی‌های پایدار، جایی که جریان و بارگذاری ثابت نگه‌داشته شود، پاسخ غلظت حالت پایدار موردنظر می‌باشد و کاربر ممکن است غلظت‌های اولیه را که منطقاً باید نزدیک به غلظت‌های نهایی باشد، مشخص نماید. برای شبیه‌سازی‌های دینامیکی که در آن پاسخ غلظت‌گذرا موردنظر است، غلظت‌های اولیه باید مقادیر اندازه‌گیری شده در ابتدای شبیه‌سازی را منعکس کنند.

علاوه بر غلظت‌های شیمیایی، باید بخش‌های محلول نیز برای هر بخش در ابتدای شبیه‌سازی مشخص شوند. برای ردیاب‌ها، بخش‌های حل‌شده معمولاً روی ۱ تنظیم می‌شوند. برای ردیاب‌ها و هم‌چنین اکسیژن محلول، تغذیه‌گرایی و انتقال‌رسوب، ذره‌های محلول اولیه در طول شبیه‌سازی ثابت می‌مانند. برای شبیه‌سازی‌های شیمیایی آلی، بخش محلول به‌صورت داخلی از ضریب تقسیم‌بندی و غلظت‌رسوب محاسبه می‌شود. جرم‌مخصوص هر ماده‌ی تشکیل‌دهنده باید در شرایط اولیه مشخص گردد. برای ردیاب‌ها، این مقدار باید ۱ باشد.

### ۵-۳- پیاده‌سازی مدل

برای شبیه‌سازی ردیاب با WASP 6، از پیش‌پردازنده یا ویرایشگر متن استفاده کنید تا یک فایل ورودی TOXI ایجاد نماید. پیش‌پردازنده یک فایل ورودی با پارامترهای موجود در فیلدهای مناسب ایجاد می‌کند که در زمان استفاده از ویرایشگر متن، کاربر باید مراقب باشد پارامترها را در قسمت‌های مناسب وارد نماید. پارامترهای ورودی مدل همان‌طور که در پیش‌پردازنده ارائه می‌شوند، به‌صورت زیر سازماندهی می‌گردند.

#### ۴-۵- پارامترهای ورودی مدل

در این بخش پارامترهای ورودی که باید برای حل معادله تعادل جرم WASP 6 مشخص شوند، جمع‌آوری می‌گردند. پارامترهای ورودی برای پیش‌پردازنده WASP 6 در چهار بخش اصلی محیطی، انتقال، مرزی و تبدیل تقسیم‌بندی می‌شوند.

#### ۴-۵-۱- پارامترهای محیط

این پارامترها هویت مدل پایه، از جمله تقسیم‌بندی را تعریف می‌کنند و شبیه‌سازی را کنترل می‌نمایند. **نوع شبیه‌سازی** - کاربر باید مشخص نماید که کدام مدل WASP 6 با مجموعه داده اجرا خواهد شد. گزینه‌های موجود "TOXI" یا "EUTRO" هستند (شکل ۳-۶).

**عناوین شبیه‌سازی** - این امکان وجود دارد که کاربر یک عنوان ۲ خط را برای شبیه‌سازی مشخص نماید. این عنوان می‌تواند شامل هرگونه اطلاعات توصیفی در مورد آب، چارچوب زمانی، آلاینده‌ها، پارامترهای شبیه‌سازی و غیره باشد. کاربر همچنین ممکن است نام‌های موقعیت‌یابی صحیح ورودی گزینه‌های شبیه‌سازی را در Record 4 مشخص نماید. که این فقط برای راحتی کاربر است (شکل ۳-۶). **تعداد بخش‌ها** - کاربر باید بخش‌ها را تعریف نموده و پیش‌پردازنده به‌طور خودکار تعداد قطعه‌ها را شمارش می‌کند (شکل ۳-۸).

**تعداد سیستم‌ها** - کاربر باید تعداد سیستم‌های مدل (متغیرهای حالت) را در شبیه‌سازی مشخص نموده و در پیش‌پردازنده، گزینه‌ی "simulate" را برای مواد شیمیایی ۱ و "bypass" برای مواد شیمیایی ۲ و جامدات (۱-۳) را انتخاب نماید (شکل ۳-۷).

**گزینه‌ی راه‌اندازی مجدد** - کاربر باید گزینه‌ی Restart را مشخص نماید، استفاده از این فایل راه‌اندازی مجدد شبیه‌سازی را کنترل می‌کند. این فایل راه‌اندازی مجدد شرایط نهایی از یک شبیه‌سازی را ذخیره می‌کند و می‌تواند برای وارد کردن شرایط اولیه در یک شبیه‌سازی متوالی استفاده شود. (۱) نه از فایل راه‌اندازی مجدد بخوانید و نه بنویسید. (۲) نتایج شبیه‌سازی نهایی را برای راه‌اندازی مجدد پرونده بنویسید. (۳) شرایط اولیه را از فایل راه‌اندازی مجدد ایجاد شده توسط شبیه‌سازی قبلی بخوانید و نتایج شبیه‌سازی نهایی را در فایل راه‌اندازی مجدد جدید بنویسید. (شکل ۳-۶).

**تجزیه و تحلیل تعادل جرم** - کاربر باید شماره سیستمی را که تجزیه و تحلیل تعادل جهانی برای آن انجام خواهد شد، را مشخص نماید. مقدار ۰ منجر به ایجاد جدول تعادل جرم نمی‌شود. (شکل ۳-۷).

**گزینه‌ی راه‌حل منفی** - به‌طور معمول، غلظت نباید منفی گردد. اگر غلظت پیش‌بینی شده در  $t + \Delta t$  منفی باشد، WASP با افزایش نیمی از غلظت در زمان  $t$ ، مقدار مثبت خود را حفظ می‌کند. گزینه‌ی با راه

حل منفی به شما این امکان را می‌دهد تا این روش را نادیده بگیرید و غلظت منفی را در اختیار شما قرار می‌دهد؛ به عنوان مثال، ممکن است این حالت برای شبیه‌سازی اکسیژن محلول در اعماق مطلوب باشد. کنترل = از غلظت منفی جلوگیری می‌کند. بررسی = غلظت‌های منفی را مجاز می‌سازد (شکل ۲-۶).

**گزینه‌ی گام زمانی** - کاربر باید مشخص کند که گام‌های زمانی در طول شبیه‌سازی چگونه تعیین می‌شوند. در مدل ۱ کاربر تاریخچه زمان ورود را وارد می‌کند؛ و مدل ۲ گام زمانی، زمان را محاسبه می‌نماید (شکل ۳-۶).

**ضریب چسبندگی، بی بعد - ضریب جابه‌جایی  $\bar{\sigma}$**  را می‌توان برای تغییر تقریب اختلاف محدود  $c/\partial x \partial t$  استفاده شده در اصطلاح انتقال از طریق WASP مشخص نمود. برای  $\bar{\sigma} = 0$ ، تقریب اختلاف وارونه استفاده می‌شود. این حالت پایدار بوده و برای اکثر برنامه‌ها توصیه می‌شود. برای  $\bar{\sigma} = 0.5$ ، تقریب اختلاف میانی استفاده می‌شود؛ این حالت در WASP ناپایدار بوده و توصیه نمی‌شود.

در شرایطی که اندازه شبکه و گام زمانی پراکندگی عدد بزرگی را ایجاد می‌کند، یک عامل انتقال غیرصفر مفید می‌باشد. یک عامل انتقال غیرصفر، پراکندگی عددی تولیدشده توسط یک سرعت، طول و گام زمانی خاص را کاهش می‌دهد. بر اساس بلا و گرنی (۱۹۷۰):

$$E_{num} = \frac{U}{2} [(1 - 2V)L - U\Delta t] \quad (۱۵-۵)$$

جدول ۳-۵ مقدار پراکندگی عددی (مترمربع در ثانیه)

U (m/sec) $\bar{\sigma}$	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
$\Delta t = 1000 \text{ sec}$						
0.0	95	180	320	420	480	500
0.1	75	140	240	300	320	300
$\Delta t = 2000 \text{ sec}$						
0.0	95	180	320	420	480	500
0.2	55	100	160	180	160	100
0.3	35	60	80	60	0	--
0.4	15	20	0	--	--	--
$\Delta t = 4000 \text{ sec}$						
0.0	90	160	240	240	160	0
0.1	70	120	160	120	0	--
0.2	50	80	80	0	--	--
0.3	30	40	0	--	--	--
0.4	10	0	--	--	--	--
$\Delta t = 8000 \text{ sec}$						
0.0	60	40	--	--	--	--
0.1	40	0	--	--	--	--
0.2	20	--	--	--	--	--
0.3	0	--	--	--	--	--
0.4	--	--	--	--	--	--

توجه داشته باشید که  $\bar{\sigma}=0$  از این به معادله (۶-۲۰) کاهش می‌یابد. مقادیر  $\ln$  به طول ۲۰۰۰ متر و ترکیب‌های مختلف سرعت و گام زمانی در جدول (۳-۵) ارائه شده‌است. می‌گویند برای یک سرعت خاص، 0/4 متر بر ثانیه، افزایش عددی گام زمانی می‌تواند پراکندگی را کاهش داده و برای  $\bar{\sigma}=0$ ، افزایش گام زمانی از ۱۰۰۰ به ۴۰۰۰ ثانیه  $E_{\text{num}}$  را از ۳۲۰ به ۸۰  $\text{m}^2/\text{sec}$  کاهش می‌دهد. با این حال، اگر لازم باشد مرحله زمان ۱۰۰۰ ثانیه باشد، افزایش  $\bar{\sigma}$  هنوز هم می‌تواند پراکندگی عددی را کاهش دهد. در این حالت، افزایش  $\bar{\sigma}$  از ۰ به 0/4 باعث  $E_{\text{num}}$  کاهش از ۳۲۰ به ۰  $\text{m}^2/\text{sec}$  می‌شود. (گروه A، رکورد ۴، ADFC).

به منظور هم‌گام‌سازی تمام توابع زمانی، می‌بایست زمان اولیه (روز، ساعت، دقیقه) در ابتدای شبیه‌سازی مشخص شود. روز، ساعت و دقیقه می‌تواند ورودی باشد. آغاز شبیه‌سازی از روز اول می‌باشد (شکل ۳-۶).

**زمان نهایی، روزها** - زمان سپری شده در پایان شبیه‌سازی باید مشخص گردد. پایان شبیه‌سازی زمانی اتفاق می‌افتد که زمان نهایی با تاریخ گام زمانی باهم مصادف می‌شوند. زمان نهایی بر روی همان رکورد گام زمانی وارد می‌شود (شکل ۳-۱۸).

**ادغام گام زمانی، روزها** - یک توالی از ادغام گام زمانی ( $\Delta t$ ) باید به همراه فاصله زمانی که در آن اعمال می‌گردد، مشخص شود. اگر از گزینه‌ی گام زمانی مشخص شده توسط کاربر استفاده شود، این گام‌های زمانی در طول شبیه‌سازی استفاده می‌شوند. اگر از گام زمانی محاسبه‌شده WASP استفاده شود، مدل گام‌های داخلی را محاسبه می‌کند. گام‌های زمانی که در این‌جا آورده شده‌اند، حداکثر مجاز می‌باشند (شکل ۳-۶ و شکل ۳-۱۸).

باتوجه به پارامترهای خاص شبکه و انتقال، گام‌های زمانی در محدوده خاصی برای حفظ پایداری و به حداقل رساندن پراکندگی عددی و یا خطاهای راه‌حل، محدود می‌شوند. برای حفظ ثبات در یک بخش، جرم جذب‌شده، پراکنده و تبدیل‌شده باید کم‌تر از جرم ساکن باشد:

$$(\Sigma Q C_j + \Sigma R C_j + \Sigma S_K V_j) \Delta t < V_j C_j \quad (۱۶-۵)$$

حل  $\dot{A}t$  و استفاده در کل شبکه با فاکتورهای مناسب، حداکثر اندازه پایدار مرحله استفاده‌شده توسط WASP 6 را می‌دهد:

$$\Delta t_{max} = 0.9 \text{Min} \left( \frac{V_j}{\sum_i Q_{ij} + \sum_i R_{ij} + 5 \sum_k \left( \frac{S_{Kjk} V_j}{C_j} \right)} \right) \quad (۱۷-۵)$$

معادله‌ی ۱۷ برای سیستم‌های صرفاً جاذب، گام زمانی را ۹۰٪ از حداقل زمان جابه‌جایی بخش تعیین می‌کند. این معادله هم‌چنین برای سیستم‌های کاملاً پراکنده، گام زمانی را ۹۰٪ از حداقل زمان برانگیختگی بخش تعیین می‌نماید. برای سیستم واکنش خطی و بدون انتقال، معادله (۱۷-۵) گام زمانی را برابر با ۱۸٪ زمان واکنش تعیین کرده و غالباً  $\dot{A}t$  توسط جریان‌های جابه‌جایی یا پراکندگی کنترل می‌شود. پراکندگی عددی اختلاط مصنوعی، ناشی از تقریب تفاضل محدود که برای مشتقات استفاده‌شده می‌باشد. اگر ضریب جابه‌جایی  $\bar{\sigma} = 0$  باشد، تقریب اختلاف وارونه از  $\partial c / \partial x$  در اصطلاح انتقال استفاده می‌شود و

$$E_{num} = \frac{UL}{2} \quad (۱۸-۵)$$

L = طول قطعه، متر،

برای طرح اوایلر، تقریب تفاضل رو به جلو از  $\partial c / \partial x$  استفاده می‌شود و

$$E_{num} = \frac{U^2 \Delta t}{2} \quad (19-5)$$

بنابراین، پراکندگی عددی کل عبارت‌است از:

$$E_{num} = \frac{U}{2} (L - U \Delta t) \quad (20-5)$$

توجه داشته‌باشید که افزایش زمان تا  $At/U$  (یا  $V/Q$ ) پراکندگی عددی را به صفر کاهش می‌دهد. شرایط برای ثبات مورد بحث در بالا، نیاز به یک گام زمانی کمی بیش‌تر از  $V/Q$  برای اکثر بخش‌ها دارد. بنابراین برای حفظ ثبات و به حداقل رساندن پراکندگی عددی در یک آب در معرض جریان ناپایدار، دنباله مراحل زمانی باید تا حد ممکن بزرگ باشد، اما در معادله (۱۷-۵) همیشه کم‌تر از  $At_{max}$  می‌باشد (شکل ۱۸-۲).

**فواصل چاپ، روزها** - کاربر باید فواصل چاپ را کنترل کند که تراکم خروجی را در فایل چاپی که به پس‌پردازنده منتقل می‌شود، کنترل نماید. این مدل بعد از هر بازه چاپی، در کل شبیه‌سازی، کلیه متغیرهای ظاهری را در همه بخش‌ها ذخیره می‌کند. می‌توان فواصل مختلف چاپ را برای مراحل مختلف در شبیه‌سازی مشخص نمود. حداقل باید دو بازه چاپ مشخص شود، یکی برای زمان ۰ و دیگری برای زمان نهایی. (شکل ۱۹-۳).

**حجم‌های بخش‌ها،  $m^3$**  - حجم اولیه، باید برای هر بخش مشخص گردد، به‌صورتی که می‌توان آن‌ها را از نمودارهای جهت‌یابی یا مجموعه‌ای از مقاطع عرضی که عمق در مقابل عرض در امتداد رودخانه اندازه‌گیری می‌شود، محاسبه نمود. گاهی اوقات، می‌توان حجم انتقال را از مدت‌زمان حرکت یک اختلاط رنگی خوب تا زمان رسیدن تخمین زد. برای شبیه‌سازی با استفاده از نتایج هیدرودینامیکی، از حجم فایل خلاصه هیدرودینامیکی (\* HYD) استفاده‌شده و پایداری حفظ می‌شود (شکل ۳-۸).

### ۵-۴-۲ - پارامترهای انتقال

این گروه از پارامترهای انتقال، همرفتی و پراکندگی متغیرهای مدل شبیه‌سازی شده را تعریف می‌کند. پارامترهای ورودی شامل جریان‌های همرفتی، سرعت انتقال رسوب، ضرایب پراکندگی، مناطق مقطعی و طول مشخصه هستند. اگرچه واحدهای اسمی موردانتظار مدل SI هستند، اما واحدهای انگلیسی یا سایر واحدها می‌توانند در کنار مشخصات مناسب فاکتورهای تبدیل، استفاده شوند.

**جریان همرفتی  $m^3/sec$**  - جریان‌های ثابت یا ناپایدار را می‌توان بین بخش‌های مجاور و هم‌چنین ورود یا خروج از شبکه که جریان و یا خروجی محسوب می‌شود، مشخص کرد. کاربر باید مراقب باشد خطاهای پیوستگی را بررسی کند، زیرا این مدل نیازی به حفظ تداوم جریان ندارد؛ به‌عنوان مثال، کاربر



امکان مشخص نمودن جریان بیش تری که به بخشی از سطح وارد می گردد را دارد. برای شبیه سازی با استفاده از نتایج هیدرودینامیکی از تداوم جریان، پرونده HYD\* به طور خودکار حفظ می شود (شکل ۳-۱۴).

**ضرایب پراکندگی  $m^2/sec$**  - ضرایب اختلاط پراکندگی را می توان بین بخش های مجاور یا در مرزهای آب آزاد مشخص نمود. این ضرایب می توانند انتشار و نفوذ آب در بخش های عمیق دریا، انتشار عمودی در دریاچه ها و پراکندگی جانبی و طولی در بیکره های بزرگ آبی را مدل سازی کنند. مقادیر ضرایب پراکندگی می توانند برای انتشار مولکولی از  $1 \times 10^{-10} m^2/sec$  برای انتشار مولکولی تا  $5 \times 10^{-10} m^2/sec$  برای اختلاط طولی در برخی از مصب ها متغیر باشند. مقادیر به صورت یک سری تابع پراکندگی و زمان، در روز وارد می شوند (شکل ۳-۱۳).

**مناطق مقطعی،  $m^2$**  - مناطق مقطعی که برای هر ضریب پراکندگی مشخص گردیده اند، منعکس کننده مساحتی هستند که در آن اختلاط اتفاق می افتد. این مناطق می توانند مانند دریاچه ها و یا اعماق، مناطق سطحی برای مبادله عمودی باشند. مناطق در طول شبیه سازی اصلاح نمی شوند تا منعکس کننده تغییرات جریان باشند (شکل ۳-۱۳).

**طول مشخصه اختلاط  $m$**  - طول اختلاط برای هر ضریب پراکندگی مشخص شده و طول مشخصه ای را که در آن اختلاط رخ می دهد، نشان می دهد. این مقادیر به طور معمول، طول هایی بین نقاط مرکزی بخش های مجاور هستند. یک قطعه واحد ممکن است دارای سه یا چند طول اختلاط برای بخش های مجاور، به صورت طولی، جانبی و عمودی باشد. برای بخش های سطحی از اعماق که بخش های ستون آب را به هم وصل می کنند، عمق لایه ای اعماق یک طول مخلوط واقع بینانه تر از نیمی از عمق آب است. (شکل ۳-۱۳).

### ۵-۴-۳- پارامترهای مرزی

این گروه از پارامترها شامل غلظت های مرزی، بارهای زباله و شرایط اولیه است. غلظت های مرزی باید برای هر بخش ورودی، خروجی و یا مبادله جریان مشخص شود. شرایط اولیه نه تنها شامل غلظت اولیه، بلکه میدان جرم مخصوص و میدان انتقال مواد جامد برای هر جامد و کسری حل شده در هر قطعه نیز می باشد.

**غلظت های مرزی،  $mg/L$**  - غلظت های ثابت یا متغیر - زمان برای هر یک از ترکیبات کیفیت آب در هر مرز باید مشخص شود. مرز یک جریان ورودی فرعی، یک جریان خروجی پایین دست یا انتهای یک منبع آب آزاد از شبکه مدل است که اختلاط پراکندگی می تواند در آن رخ دهد. جریان همرفتی و پراکندگی

جریان در مرزها توسط پارامترهای انتقال مشخص شده‌است. مقادیر یک سری عملکرد غلظت و زمان شمرده می‌شود که در روزها وارد می‌شوند (شکل ۳-۱۵).

**بارهای زباله، kg/day** - بارهای ثابت یا متغیر زمانی هستند که ممکن است برای هر یک از ترکیبات با کیفیت آب در چند بخش مشخص شوند. این بارها نمایان‌گر تخلیه فاضلاب شهری و صنعتی، رواناب شهری و کشاورزی، بارندگی و رسوب جوی آلاینده‌ها است. مقادیر این بارها، که یک سری عملکرد بار و زمان در روزها می‌باشد، وارد می‌شوند (شکل ۳-۱۶).

**غلظت‌های اولیه، mg/L** - غلظت هر یک از مواد تشکیل‌دهنده در هر بخش باید برای زمان شروع شبیه‌سازی مشخص گردد. برای آن دسته از پیکره‌های آب که دارای نرخ انتقال کم می‌باشند، این امکان وجود دارد که غلظت اولیه مواد محافظه‌کارانه برای مدت طولانی ادامه یابد. بنابراین، شبیه‌سازی دقیق نیاز به مشخصات دقیق غلظت‌های اولیه دارد. اگر نتوان غلظت اولیه را به‌طور دقیق تعیین نمود، باید شبیه‌سازی‌های طولانی‌تر انجام شود و پیش‌بینی‌های اولیه کاهش یابد (شکل ۳-۱۰).

**کسر محلول** - کسری اولیه از مواد شیمیایی حل شده در قسمت آبی یک بخش، که بخشی از غلظت شیمیایی کل است، وارد می‌شود. کسری محلول در تعیین مقدار مواد شیمیایی منتقل شده توسط جریان آب و پراکندگی آب منفذی و انتقال مواد جامد حائز اهمیت است. کسر محلول را می‌توان از فرآیند جنبشی جذب در زیر سری‌های تبدیل محاسبه نمود (شکل ۳-۱۱).

**جرم مخصوص جامد، g/cm<sup>3</sup>** - جرم مخصوص هر نوع جامد برای محاسبه تخلخل بخش‌های بستر لازم است. تخلخل تابعی از غلظت رسوب و جرم مخصوص هر نوع جامد است (شکل ۳-۷).

**غلظت حداکثر، mg/L** - حداکثر غلظت برای هر ماده سازنده کیفیت آب باید مشخص گردد. اگر غلظت محاسبه شده خارج از این حد باشد، شبیه‌سازی به‌طور خودکار قطع می‌شود. این حالت معمولاً نشان‌گر ناپایداری محاسباتی بوده و معمولاً باید گام زمانی کاهش یابد (شکل ۳-۷).

#### ۵-۴-۵- پارامترهای تبدیل

این گروه از پارامترها شامل پارامترهای متغیر فضایی، ثابت‌ها و توابع زمان جنبشی برای ترکیبات با کیفیت آب می‌باشد. هیچ‌کدام از این موارد برای مواد شیمیایی محلول، لازم نیست.

#### ۵-۴-۵- فایل‌های ورودی خارجی

در این گزینه، ممکن است دو فایل ورودی خارجی توسط کاربران فراخوانی شوند و توسط WASP 6 در حین شبیه‌سازی استفاده گردند. این پرونده‌های فرمت شده ممکن است توسط یک مدل شبیه‌سازی و

یا با خروجی از صفحه گسترده ایجاد شوند؛ به عنوان مثال فایل‌های با فرمت ASCII، ممکن است با استفاده از ویرایشگرهای متن استاندارد ویرایش گردند. پرونده‌های هیدرودینامیکی توسط \*HYD، جایی که کاربر نام ۱ تا ۸ را برای کاراکتر \* تعیین کرده، مشخص می‌شود. فایل‌های بارگذاری منبع غیرنقطه‌ای توسط \*NPS مشخص می‌گردند. محتویات و فرمت این پرونده‌ها در صفحه (۳-۱۳) مشخص شده است.



فصل ششم

انتقال رسوب

انتقال رسوب به‌طور بالقوه یک فرآیند بسیار مهم در سیستم‌های آبی می‌باشد و رسوب‌اضافی می‌تواند به‌طور مستقیم بر کیفیت آب تأثیر بگذارد. از طرفی میزان کیفیت آب و کیفیت زیستگاه‌ها نیز در اعماق کاهش خواهد یافت. انتقال رسوب بر انتقال و سرنوشت ماده شیمیایی تأثیر گذار بوده و به همین خاطر، بسیاری از مواد شیمیایی وجود دارند که به شدت رسوب می‌کنند و تحت ته‌نشینی، آبستگی و رسوب‌گذاری قرار می‌گیرند. به‌علاوه جذب نیز بر تبدیل و انتقال مواد شیمیایی تأثیر می‌گذارد؛ برای مثال، تبخیر و هیدرولیز کاتالیزشده‌ی پایه، با جذب کاهش می‌یابد. هم‌نرخ انتقال رسوب و هم‌غلظت باید در اکثر مطالعات مواد شیمیایی سمی برآورد شود.

به‌طور کلی، ظرفیت انتقال جریان برای رسوب معلق، بیش‌از بار واقعی آن بوده و یکی از مشکلات حوضه، تخمین بارگذاری منبع رسوب یعنی فرسایش حوضه می‌باشد. در مناطقی که آب‌های راکد در پشت سد‌ها و یا در مناطق کم‌تحرک وجود دارد، ممکن‌است ظرفیت انتقال جریان به اندازه کافی کاهش یافته تا رسوب ته‌نشین گردد؛ و همچنین این امکان وجود دارد که میزان قابل‌توجهی از آلاینده‌ها با بیش‌ترین مقدار سرب به‌وجود بیایند. از آن‌جا که انتقال رسوب می‌تواند پیچیده باشد، معمولاً واسنجی خاص در محل ته‌نشینی، شرایط شستشو و رسوب‌گذاری لازم است.

### ۶-۱- مروری بر انتقال رسوب WASP

کسراندازه‌ی رسوب و یا انواع مواد جامد با استفاده از برنامه TOXI شبیه‌سازی می‌گردند. امکان دارد این شبیه‌سازی‌ها کل مواد جامد را به‌عنوان یک متغیر واحد درج کنند یا متناوباً یک یا سه نوع جامد و یا کسری از آن‌ها را نشان دهند. سه نوع جامد توسط کاربر تعریف شده‌است که ممکن‌است ماسه، سیلت، خاک‌رس و یا مواد جامد آلی و مواد جامد معدنی باشند. کاربر با مشخص کردن نسبت ته‌نشینی و فرسایش و همچنین محتوای آلی آن، نوع جامد را تعریف می‌کند.

WASP 6 تعادل ساده‌ی جرم را در هر متغیر جامد و در هر قسمت بر اساس مشخص شدن نرخ جذب ستون آب و میزان پراکندگی، همراه با ته‌نشینی ویژه، فرسایش، دفن و میزان بار بستر انجام می‌دهد. محاسبات تعادل جرم در هر بخش از اعماق دریا و همچنین هر قسمت از ستون آب انجام می‌شود. تراکم جرم یا حجم اعماق در طول شبیه‌سازی تنظیم می‌شود.

کاربر می‌تواند کلیه نرخ انتقال مواد جامد در فضا و زمان را تغییر دهد. با این‌حال، هیچ توصیف خاصی از فرآیند انتقال مواد جامد وجود ندارد؛ به‌عنوان مثال، نسبت فرسایش تابعی از مقاومت برشی رسوب و تنش برشی ستون آب، برنامه‌ریزی نشده‌است. در نتیجه، مدل رسوب TOXI باید توصیفی در نظر گرفته‌شده و برای داده‌های مکانی واسنجی شود.

### ۶-۱-۱- فرآیندهای انتقال رسوب

#### انتقال ستون آب

رسوبات و مواد شیمیایی ذرات موجود در ستون آب می‌توانند به بخش‌های پایین‌تر آب منتقل شده و در بخش‌های بستر سطحی ته‌نشین شوند. در 6 WASP سرعت‌ها و مناطق سطحی در حوزه انتقال ۳، ۴ و ۵؛ نرخ ته‌نشینی، رسوب‌گذاری و میزان شستشو را توصیف می‌کنند. سرعت انتقال ذرات ممکن است هم از نظر زمان و هم در فضا متفاوت باشد و برای به‌دست آوردن نرخ جریان برای مواد جامد و کسرهای ذرات مواد شیمیایی در هر مقطع ضرب می‌شود.

سرعت ته‌نشینی باید در محدوده سرعت استوک متناسب با توزیع اندازه ذرات معلق تنظیم شود:

$$V_s = \frac{8/64g}{18\mu} (\rho_p - \rho_w) d_p^2 \quad (۱-۶)$$

$V_s$  = سرعت استوک برای ذرات با قطر  $d_p$  و جرم‌مخصوص  $n_p$ ، m/day.

$g$  = شتاب گرانش  $981 \text{ cm/sec}^2$ .

$i$  = لزجت مطلق آب =  $0.01$  توازن  $\text{g/cm}^3 \text{-sec}$  در  $20 \text{ C}^\circ$ .

$n_p$  = جرم‌مخصوص جامد،  $\text{g/cm}^3$ .

$n_w$  = جرم‌مخصوص آب،  $1/0 \text{ g/cm}^3$ .

$d_p$  = قطر ذرات، mm.

مقادیر  $V_s$  برای طیف وسیعی از اندازه و تراکم ذرات در جدول (۱-۶) ارائه شده‌است.

جدول ۶-۱ سرعت ته‌نشینی استوک (m/day) در 20 C°

Particle Diameter, mm	Particle Density, g/cm <sup>3</sup>			
	1.80	2.00	2.50	2.70
Fine Sand				
0.3	300.00	400.00	710.00	800.00
0.05	94.00	120.00	180.00	200.00
Silt				
0.05	94.00	120.00	180.00	200.00
0.02	15.00	19.00	28.00	32.00
0.01	3.80	4.70	7.10	8.00
0.005	0.94	1.20	1.80	2.00
0.002	0.15	0.19	0.28	0.32
Clay				
0.002	0.15	0.19	0.28	0.32
0.001	0.04	0.05	0.07	0.08

## تبادل اعماق

سرعت شستشو و ته‌نشینی رسوب باعث تبادل رسوبات اعماق و مواد ذرات شیمیایی می‌شود:

$$W_{BS} = A_{ij}(w_R S_i - w_D S_j) \quad (۲-۶)$$

$W_{BS}$  = نرخ شار رسوب خالص، g/day

$S$  = غلظت رسوب، g/m<sup>3</sup>

$w_D$  = سرعت رسوب، m/day

$w_R$  = سرعت شستشو، m/day

$A_{ij}$  = سطح اعماق دریا، m<sup>2</sup>

$i$  = بخش اعماق دریا،

$j$  = قطعه آب.

سرعت رسوب را می‌توان به حاصل محاسبه سرعت ته‌نشینی سرعت استوکس و رسوب احتمالی

محاسبه کرد:

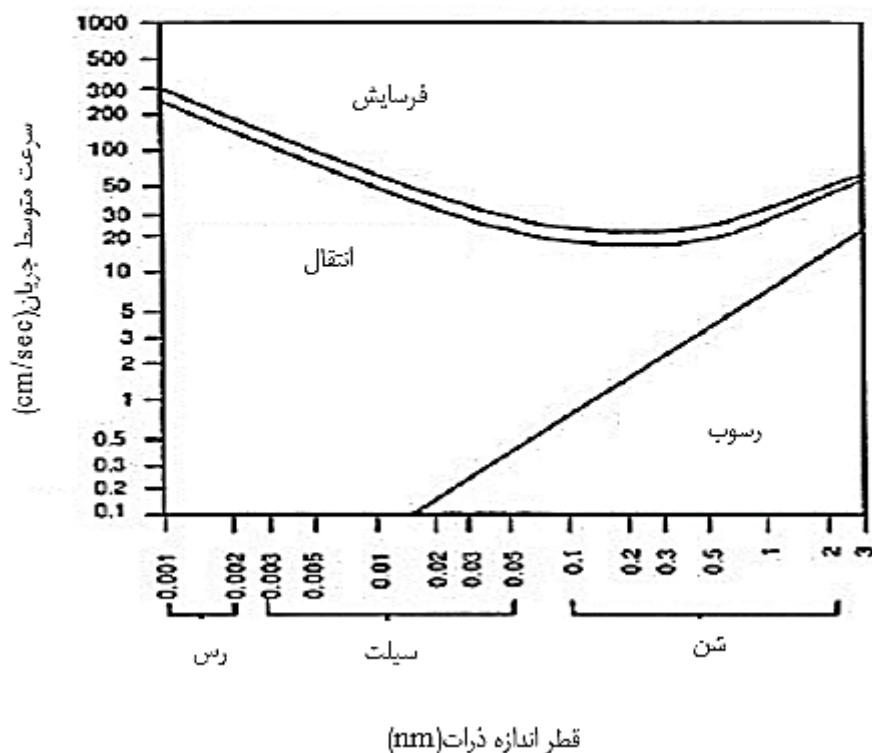
$$w_D = V_s \alpha_D \quad (۳-۶)$$

$\alpha_D$  = احتمال رسوب در هنگام تماس با بستر.



احتمال رسوب، بستگی به تنش برشی در سطح اعماق دریا و اندازه رسوب معلق دارد. به همین ترتیب، سرعت آبستگي بستگی به تنش برشی، اندازه رسوب بستر، انسجام و وضعیت تثبیت رسوب در اعماق دارد. شکل (۶-۱) ب راهنمای اولیه در تعیین رسوب اولیه و سرعت شستشو در نظر گرفته شده است؛ به عنوان مثال، سیلت درشت به قطر  $0/05$  میلی متر می تواند در روز ۱۰۰ تا ۲۰۰ متر در اعماق سقوط کند، اما میانگین سرعت جریان نباید بالاتر از  $0/5$  سانتی متر در ثانیه باشد. درجایی که میانگین سرعت بالاتر از ۳۰ سانتی متر در ثانیه باشد، فرسایش پیش بینی می شود و باید سرعت غیر صفر برای شستشو مشخص شود. برای سیلت نرم با قطر  $0/05$  میلی متر با سرعت ۱ تا ۲ متر در روز، رسوب گذاری حتی در شرایط ساکن نیز پیش بینی نمی شود. در صورتی که میانگین سرعت بالاتر از ۲ متر بر ثانیه باشد، در این حالت باید سرعت غیر صفر رسوب مشخص شود. واسنجی خاص مکانی برای تصحیح برآوردهای اولیه ضروری است.

رابطه بین سرعت جریان، اندازه ذرات، رژیم‌های رسوب، فرسایش، انتقال و ته‌نشینی



شکل ۶-۱ رژیم‌های انتقال رسوب (Graf, 1971)

### ۶-۱-۲- بارگذاری رسوب

بارگذاری رسوب در درجه اول ناشی از فرسایش حوضه آبریز و فرسایش کناره است که به چند طریق می‌توان آن‌ها را اندازه‌گیری کرده و یا تخمین زد و ورودی به هر بخش را یک منبع نقطه‌ای در نظر گرفت. برای برخی از مشکلات، بارهای رسوب متوسط بلندمدت را می‌توان با استفاده از معادله جهانی تلفات خاک (Wischmeier and Smith, ۱۹۷۸) محاسبه نمود. حل مؤثر این فرآیند توسط میلز و همکاران ارائه شده است (۱۹۸۵). این روش برای موارد کوتاه‌مدت یا موارد دینامیکی ذاتی برآورد درستی نمی‌دهد، زیرا

بارگذاری رسوب، بیش تر در طی چند طوفان شدید یا حوادث ذوب برف اتفاق می افتد. در صورت موجود بودن داده های رسوب معلق در ایستگاه های محلی، می توان پیش بینی کرد تا برآوردهای بارگذاری کم ارائه شود. از طرف دیگر، بارهای رواناب روزانه را می توان با یک مدل حوضه شبیه سازی نمود و مستقیماً از یک فایل بارگذاری منبع ناموجود متناسب با آن به دست آورد.

### ۶-۱-۳- بستر رسوب

بستر رسوب نقش مهمی در انتقال و سرنوشت اجزای سازنده ی کیفیت آب دارد. رسوب حاوی آلاینده ها، ممکن است توسط رسوب گذاری و ته نشینی در بستر دفن شوند یا توسط شستشو به ستون آب وارد گردند. در WASP 6 حرکت رسوب در بستر، توسط یکی از دو گزینه کنترل می شود. در گزینه ی اول، حجم بخش بستر ثابت باقی مانده و غلظت رسوب در واکنش بسته به ته نشینی و شستشو متفاوت می باشد. امکان ایجاد فشردگی و یا شستشوی رسوب در این گزینه وجود ندارد. در گزینه ی دوم، حجم بخش بستر به صورت فشرده شده یا فرسایشی، برای رسوب به حجم رسوب افزوده و یا شسته می شود. غلظت رسوب در بستر ثابت است. ممکن است رسوب در هر دو گزینه ی شیمیایی از طریق آب و پراکندگی بستر منتقل شود. **گزینه ی ثابت بستر** - ابتدا گزینه ای که در آن، بستر با حجم ثابت بررسی می گردد، این اجازه را می دهد که غلظت رسوب در بستر، با توجه به شار خالص رسوب تغییر کند. بخش های بستر به دویخش سطح بستر بالارونده و سطح بستر افتان تقسیم می گردد. میزان افزایش یا کاهش سطح بستر به سرعت جریان ورودی رسوب در میدانین جریان ۳، ۴ و ۵ بستگی داشته و برای هر بخش اندازه رسوب نشان داده شده است. رسوب در بستر از طریق ته نشینی اضافه شده و در اثر شستشو از بین می رود.

با فرض این که عمق بستر ثابت بماند و از اختلاط پراکندگی دور شود، تعادل جرم رسوب در بستر بالایی ثابت توسط فرمول زیر محاسبه می شود:

$$d_i \frac{\partial S_i}{\partial t} = w_D S_j - (w_R + w_S) S_i \quad (4-6)$$

$w_s$  = سرعت رسوب بستر فوقانی، m/day

$S_i$  = غلظت رسوب در بستر فوقانی، g/m<sup>3</sup>

$S_j$  = غلظت رسوب در آب، g/m<sup>3</sup>

$d_i$  = عمق بستر فوقانی، m

برای یک لایه پایین بستر.

$$d_k \frac{\partial S_k}{\partial t} = w_S S_i - w_{Sk} S_k \quad (5-6)$$

$w_{ak}$  = سرعت رسوب بستر پایین، m/day

$S_k$  = غلظت رسوب در بستر پایین، g/m<sup>3</sup>

$d_k$  = عمق بستر پایین، m.

در بیش‌تر کاربردها غلظت رسوب بستر با گذشت زمان تقریباً ثابت خواهد بود. در این حالت، مشتق جرم  $\partial S/\partial t$  صفر می‌باشد. تعادل جرم حاصل در بستر فوق عبارت‌است از:

$$w_D S_j = (w_R + w_S) S_i \quad (6-6)$$

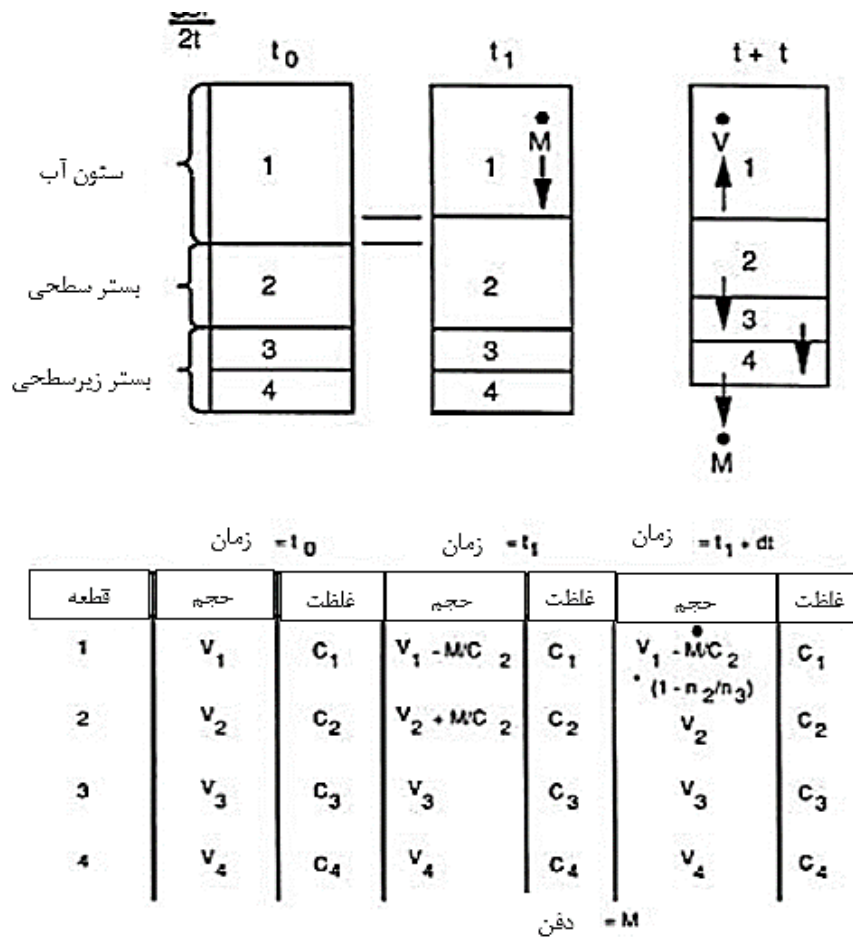
در بستر پایین،

$$w_S S_i = w_{Sk} S_k \quad (7-6)$$

لازم به ذکر است که در این گزینه حجم ثابت، WASP 6 نیازی به تعادل شار رسوب به داخل و خارج از بخش بستر ندارد. بنابراین کاربر باید در نظر داشته‌باشد که شستشو، رسوب‌گذاری و سرعت رسوب، منعکس‌کننده‌ی میزان شار جرم مورد نظر رسوب در بستر می‌باشد. گزینه‌ی حجم ثابت بستر یک لایه بالایی متحرک نیز دارد. این لایه با مشخص کردن نرخ جریان کلی، منجر به جابه‌جایی (میدان جریان یک) بین بخش‌های بالایی بستر مدل‌سازی می‌شود. بنابراین، هنگامی که سرعت جریان  $Q_{ij}$  از قسمت بالایی بستر ز به بخش بالایی بستر  $i$  مشخص می‌گردد؛ رسوب، آب منفذی و مواد شیمیایی موجود در ز به  $i$  منتقل می‌شوند. برای حفظ تعادل جرم در بخش  $i$  باید نرخ جریان مشابهی از  $i$  مشخص گردد. این گزینه امکان انتقال جانبی رسوب را در بستر فوقانی فراهم می‌کند و می‌تواند برای نشان دادن حمل بار در بستر مورد استفاده قرار گیرد.

**گزینه‌ی حجم متغیر بستر** - گزینه‌ی دوم حجم بستر، که گزینه‌ی متغیر حجم بستر گفته می‌شود، اجازه می‌دهد تا حجم بستر در واکنش به رسوب و آبستتگی تغییر کند. دو نوع لایه‌ی بستر در نظر گرفته می‌شود: یک لایه‌ی فشرده‌نشده در بالا و یک یا چند لایه‌ی فشرده‌شده در پایین. هنگامی که رسوب ته‌نشین شده بیش از حد آبستتگی شود، با بالا رفتن سطح بستر، لایه بالایی در حجم افزایش می‌یابد. بعد از گذشت مدت زمانی، حجم اضافه‌شده از بستر بالایی فشرده‌شده و بخشی از بستر پایین در نظر گرفته می‌شود. هنگامی که آبستتگی از ته‌نشینی بیش‌تر گردد، با کاهش سطح بستر، حجم لایه بالایی کاهش می‌یابد. هنگامی که لایه بالایی کاملاً از بین برود، لایه بعدی بستر در معرض آبستتگی قرار می‌گیرد.

در مکان‌هایی که ته‌نشینی رسوب از آب‌سستگی بیش‌تر باشد (شکل ۶-۲)، تراکم بستر، توسط گام زمانی رسوب ایجاد می‌شود. زمان رسوب‌گذاری توسط کاربرد وارد و به‌طور کلی بسیار بزرگ‌تر از گام زمانی شبیه‌سازی خواهد بود. با رسوبات شیمیایی جذب‌شده از ستون آب و رسوب در قسمت بالایی بستر؛ در حجم، جرم رسوب و جرم شیمیایی افزایش اتفاق می‌افتد. غلظت رسوب ثابت می‌ماند، و حجم بستر بالایی تا پایان مدت‌زمان مرحله‌ی رسوب‌گذاری، هم‌چنان افزایش می‌یابد. در این زمان، حجم بستر بالایی که توسط رسوب ته‌نشین شده اضافه گردید، به تراکم بستر پایینی افزایش می‌دهد. از آن‌جا که تخلخل بستر فشرده‌نشده از تخلخل بستر فشرده‌شده بیش‌تر است، آب منفذی و مواد شیمیایی حل‌شده در ستون آب فشرده می‌گردند.



شکل ۶-۲ دفن رسوبات WASP

در طول فشرده‌سازی، قسمت‌های بستر پایین افزایش یافته تا بخش‌های فشرده‌ی بستر بالایی را دربر گیرد. در صورتی که حجم و غلظت رسوب بخش‌های بستر ثابت باقی می‌ماند. قسمتی از بستر زیرین شبکه دفن می‌گردد، با این حال، بخش‌های بستر در پاسخ به رسوب در نظر گرفته می‌شود. بنابراین، جرم شیمیایی در بستر پایین از طریق فشرده‌سازی بستر فوقانی افزوده شده و در اثر دفن رسوب از بین می‌رود. پس از فشرده‌سازی، قسمت بالای بستر به حجم اصلی قبل از ته‌نشینی خود برمی‌گردد. از طرفی غلظت رسوبات و مواد شیمیایی در بستر بالایی با تراکم تغییر نمی‌کند. در بسترهای پایین، حجم بخش و غلظت رسوب بدون تغییر است. جرم شیمیایی از قسمت فشرده شده بستر به بستر زیرین افزوده گردیده و جرم شیمیایی در قسمت بستر پایین از شبکه مدل دفن می‌شود.

در طی چندمرحله زمان رسوب‌گذاری، جرم مخصوص و حجم قسمت بستر بالایی ثابت می‌ماند، به طوری که:

$$S_i \frac{\partial V_i}{\partial t} = A_{ij} W_D S_j - A_{ij} (W_R + W_S) S_i = 0 \quad (۸-۶)$$

و

$$W_S = \frac{(D S_j - W_R S_i)}{S_i} \quad (۹-۶)$$

برای لایه بستر پایین، حجم‌ها به همراه تراکم ثابت نگه‌داشته می‌شوند. برای حفظ تعادل جرم، متوسط سرعت رسوب به‌طور مؤثر از رابطه ذیل استفاده می‌شود:

$$W_{sk} = W_S S_i / S_k \quad (۱۰-۶)$$

برای مکان‌هایی که نرخ شستشوی رسوب از رسوب ته‌نشین شده فراتر می‌رود؛ WASP مانند شکل (۲-۶) پاسخ می‌دهد. از آنجا که رسوب و مواد شیمیایی موجود در آن از بستر فرسایش می‌یابند، در قسمت بالای بستر؛ حجم، عمق، جرم شیمیایی و جرم رسوب کاهش می‌یابد، درحالی که جرم مخصوص آن ثابت است. هنگامی که جرم رسوب در لایه بالایی بستر صفر گردد، تغییر نام بخش انجام می‌شود. تمام خصوصیات باقی‌مانده‌ی بستر، از جمله غلظت شیمیایی، با تغییر نام دوباره، تحت تأثیر قرار نمی‌گیرند؛ به‌عنوان مثال بخش بالایی بستر دارای همان عمق، حجم و غلظت رسوبات و مواد شیمیایی، در بخش بستر قدیمی می‌باشد. یک بخش بستر جدید با همان خصوصیات مشابه سایر بخش‌های بستر ایجاد می‌شود که غلظت شیمیایی آن صفر است. تغییر نام و ایجاد بخش پایینی جدید چرخه فرسایش WASP 6 (یا مرحله زمان) را تکمیل می‌کند. برای یک نتیجه از نحوه‌ی انتخاب گزینه‌ی متغیر حجم‌بستر، رسوب‌گذاری

محدودیت‌های خاصی را بر خصوصیات بخش بستر تعریف شده در مجموعه داده‌های ورودی، اعمال می‌کند. جرم مخصوص (یا غلظت رسوب) بخش بالایی بستر باید کم‌تر یا مساوی تراکم بخش‌های پایین بستر در یک پشته عمودی باشد. از آن‌جا که مراحل فشرده‌سازی به‌طور ضمنی رسوب‌گذاری را کنترل می‌کند، امکان مشخص شدن هیچ‌گونه نرخ رسوب‌گذاری در بسترهای زیرین در میدان‌های انتقال رسوب را ندارند. سرانجام، کاربر برای استفاده از این گزینه رسوب را که متغیر کیفیت به شمار می‌آید، شبیه‌سازی می‌نماید. در واقع رسوب، یک متغیر کیفیت در برنامه سموم بوده، اما در برنامه تغذیه‌گرایی وجود ندارد.

### ۶-۲- پیاده سازی مدل

برای شبیه‌سازی انتقال رسوب با WASP 6، از پیش‌پردازنده یا ویرایش‌گر متن، برای ایجاد یک فایل ورودی TOXI استفاده کنید. مجموعه‌ای از داده‌های ساده برای استفاده است که به صورت قالب ویرایش و سازگاری فراهم شده است. مجموعه داده‌های ورودی مدل و پارامترهای ورودی مشابه با مدل ردیاب محافظه کارانه می‌باشد، که در فصل ۵ تشریح گردیده است. در طول شبیه‌سازی، متغیرهای جامد توسط نرخ جذب آب، پراکندگی ستون آب و همچنین با نرخ انتقال مواد جامد منتقل می‌شوند. در WASP 6، نرخ انتقال مواد جامد در ستون آب و بستر با سه میدان انتقال مواد جامد وارد می‌شود. این میدان‌ها جریان بارگذاری، ته‌نشینی رسوب، آبشستگی و رسوب‌گذاری سه نوع جامد را توصیف می‌کنند. انتقال ذرات مواد شیمیایی یا مواد شیمیایی شبیه‌سازی شده، جریان‌های جامد را دنبال می‌کند. کاربر باید بخش محلول (i.0/0) و میدان انتقال مواد جامد را برای هر جامد شبیه‌سازی شده در شرایط اولیه مشخص نماید. برای شبیه‌سازی جامدات کل، از مواد جامد ۱ استفاده می‌شود.

### ۶-۲-۱- پارامترهای ورودی مدل

در این بخش پارامترهای ورودی که باید برای حل معادلات تعادل رسوب در TOXI مشخص گردند، خلاصه می‌شود. پارامترهای ورودی برای پیش‌پردازنده WASP 6 در چهار بخش اصلی محیطی، انتقال، مرزی و تبدیل آماده می‌شوند. پارامترهای مدل پایه در فصل ۵ تشریح گردیده است.

### ۶-۲-۲- پارامترهای محیطی

این پارامترها ماهیت مدل پایه، از جمله تقسیم‌بندی را تعریف نموده و شبیه‌سازی را کنترل می‌نمایند.

**سیستم‌ها** - برای شبیه‌سازی تنها یک مورد از مواد جامد، "simulate" را برای جامد ۱ و "bypass" را برای پنج سیستم دیگر انتخاب کنید. برای شبیه‌سازی دو نوع جامد، هر دو جامد ۱ و ۲ را انتخاب کنید.

برای شبیه‌سازی سه نوع جامد، باید هر سه "simulate" را انتخاب کنید. سیستم‌های شیمیایی را می‌توان شبیه‌سازی کرده و یا کنار گذاشت (شکل ۲-۷).

**گزینه‌ی حجم بستر** - کاربر باید تعیین نماید که حجم بسترها ثابت نگهداشته شوند و یا مجاز به تغییر هستند. حجم ممکن است با مشخص کردن ۰ ثابت نگه‌داشته شود، در این حالت غلظت رسوبات و تخلخل‌ها در قسمت‌های بستر متفاوت خواهد بود. این امکان وجود دارد که غلظت رسوبات و تخلخل‌ها با مشخص نمودن ۱ ثابت نگه‌داشته شوند، که در این حالت حجم بخش بستر سطحی متفاوت خواهد بود (شکل ۳-۶).

**گام زمانی بستر** - درحالی که محاسبات انتقال جرم در هر گام زمانی مدل تکرار می‌شوند، محاسبات اعماق دریا فقط در این گام زمانی در روز تکرار می‌شوند. اگر گزینه‌ی حجم ثابت برای بستر انتخاب شود، غلظت رسوبات در هر گام زمانی مدل به‌روز گردیده، اما تخلخل‌ها در هر گام زمانی اعماق دریا دوباره محاسبه می‌گردند. اگر حجم بستر متغیر باشد، در هر بار بارگذاری، حجم بخش بالای اعماق به‌روز می‌شود و فشرده‌سازی اعماق، در هر گام زمانی اتفاق می‌افتد. (شکل ۲-۶).

### پارامترهای انتقال

**سرعت انتقال رسوب**  $m/sec$  سرعت بارگذاری رسوب، ته‌نشینی رسوب، آب‌شستگی و رسوب‌گذاری متغیرهای زمانی برای هر نوع جامد قابل محاسبه است. اگر ضریب تبدیل واحدها روی  $1/157 e-5$  گردد، سرعت‌ها در واحد  $m/day$  وارد شده که این سرعت‌ها در مناطق مقطعی داخلی چندبرابر می‌شوند، سرعت ته‌نشینی و بارگذاری رسوب، انتقال مواد جامد و مواد شیمیایی جذب‌شده بین ستون آب و بستر را تعیین می‌کند. سرعت رسوب‌گذاری در واقع عددی را نشان می‌دهد که بستر در پاسخ به رسوب خالص در حال افزایش است (شکل ۲-۱۴).

**مناطق مقطعی،  $m^2$**  - مساحت سطح مشترک باید برای بخش‌های مجاور که انتقال رسوب در آن‌ها رخ می‌دهد، مشخص شود. این مناطق سطحی به وسیله سرعت انتقال رسوب داخلی چندبرابر می‌شوند تا جریان‌های انتقال رسوب را به دست آورند (شکل ۲-۱۴).

### ۶-۲-۳- پارامترهای مرزی

این گروه از پارامترها شامل غلظت‌های مرزی، بارهای زیاله و شرایط اولیه است. غلظت‌های مرزی باید برای هر بخش ورودی، خروجی و یا تبادل جریان مشخص گردد. شرایط اولیه نه‌تنها شامل غلظت اولیه، بلکه میدان جرم‌مخصوص و میدان انتقال مواد جامد برای هر جامد و کسری حل‌شده در هر بخش نیز می‌باشد.



**غلظت‌های مرزی، mg/L-** در هر مرز قطعه، غلظت متغیر زمانی برای کل مواد جامد یا برای هر نوع جامد شبیه‌سازی شده، مشخص می‌گردد. یک قطعه مرزی با تبادل آب از خارج شبکه، شامل ورودی‌های فرعی، جریان‌های پایین‌دست و مبادلات پراکنده آب آزاد مشخص می‌شود (شکل ۲-۱۵).

**بارهای فاضلاب، kg/day-** در هر مرتبه از تخلیه‌ی منبع نقطه‌ای می‌توان بارهای رسوبی متغیر زمانی را برای کل مواد جامد و یا برای هر نوع جامد شبیه‌سازی شده، مشخص نمود. در واقع، این بارها نمایان‌گر تخلیه فاضلاب شهری و صنعتی و یا رواناب شهری و کشاورزی می‌باشند (شکل ۲-۱۶).

**میدان انتقال مواد جامد-** میدان انتقال مرتبط با مواد جامد کل و یا هر نوع مواد جامد، باید تحت شرایط اولیه مشخص شود.

**جرم مخصوص جامد g/cm<sup>3</sup>-** جرم مخصوص متوسط رسوبات کل یا جرم مخصوص هر نوع ماده‌ی جامد باید مشخص شود. از این اطلاعات برای محاسبه تخلخل لایه‌های اعماق دریا استفاده می‌شود. تخلخل تابعی از غلظت رسوب و جرم مخصوص هر نوع جامد است. (شکل ۲-۷).

**غلظت‌های اولیه، mg/L-** غلظت رسوبات کل یا نوع ماده‌ی جامد در هر قطعه باید برای زمان شروع شبیه‌سازی، مشخص شود. اگر از گزینه‌ی حجم اعماق متغیر استفاده شود، غلظت رسوب اعماق دریا که در این مرحله مشخص گردیده، در این‌جا برای کل شبیه‌سازی ثابت خواهد بود (شکل ۲-۱۰).

**کسر محلول-** در هر بخش کسر محلول در جامد، باید بر روی ۰ تنظیم شود (شکل ۲-۱۱).

**پارامترهای تبدیل-** این گروه از پارامترها شامل پارامترهای متغیر فضایی، ثابت‌ها و توابع زمان جنبشی برای ترکیبات با کیفیت آب می‌باشد؛ و هیچ‌یک برای انتقال رسوب ضروری نیست.



فصل هفتم

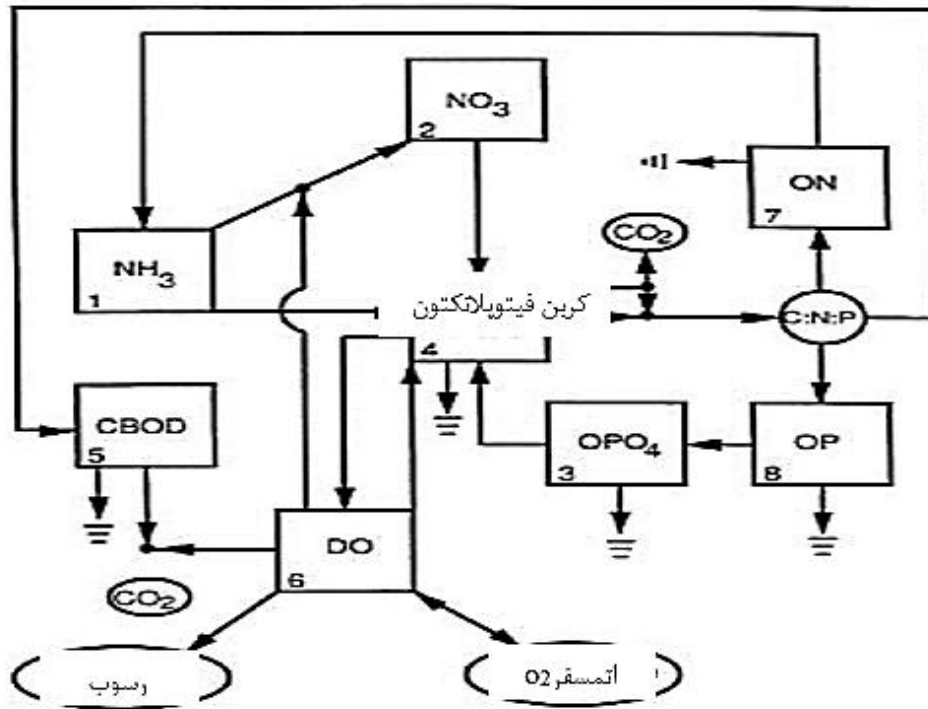
اکسیژن محلول

اکسیژن محلول (DO) یکی از مهم‌ترین متغیرهای تجزیه و تحلیل کیفیت آب می‌باشد، به‌صورتی که غلظت کم مستقیماً روی ماهی تأثیر می‌گذارد و تعادل اکولوژیکی طبیعی را تغییر می‌دهد. از آن‌جا که DO تحت تأثیر بسیاری از دیگر پارامترهای کیفیت آب قرار دارد، این یک شاخص حساس برای سلامت آبزیان می‌باشد.

مدل DO بیش از ۷۰ سال قدمت دارد. معادلات اساسی حالت پایدار توسط استرر و فلیس (۱۹۲۵) ایجاد و مورد استفاده قرار گرفت. توسعه‌های بعدی و برنامه‌های کاربردی، شرایط را به معادله اصلی خود اضافه کرده و تجزیه و تحلیل متغیر- زمان را ارائه کرده‌اند. معادلات اجرا شده در این‌جا کاملاً استاندارد هستند. همان‌طور که در ادامه توضیح داده می‌شود، کاربر می‌تواند برخی یا تمام فرآیندهایی را که با اصطلاحات در این معادلات شرح داده شده، پیاده‌سازی کند.

#### ۷-۱- نمای کلی اکسیژن محلول WASP 6

اکسیژن محلول و متغیرهای مرتبط، با استفاده از برنامه EUTRO شبیه‌سازی می‌شوند. چندین فرآیند فیزیکی و شیمیایی وجود دارند، که می‌توانند بر انتقال و تعامل بین موادمغذی، فیتوپلانکتون، مواد کربنی و اکسیژن محلول در محیط آبی تأثیر بگذارند. شکل (۷-۱) تعامل اصلی چرخه جنبشی موادمغذی و اکسیژن محلول را نشان می‌دهد.



شکل ۷-۱ تعامل متغیر کیفیت EUTRO

EUTRO توسط کاربر در سطوح پیچیده مختلف استفاده گردیده تا برخی یا همه این متغیرها و تعامل‌ها را شبیه‌سازی نماید؛ به‌عنوان مثال، تنها برای شبیه‌سازی نیاز اکسیژن بیوشیمیایی کربن (BOD) و DO، ممکن است کاربر محاسبات متغیرهای ازت، فسفر و فیتوپلانکتون را از راه فرعی انجام دهد. شبیه‌سازی‌ها می‌تواند تقاضای اکسیژن بیوشیمیایی کربن (CBOD) و آمونیاک ( $\text{NH}_3$ ) یا تقاضای اکسیژن بیوشیمیایی ازت (NBOD) فرض شده آمونیاک در نظر گرفته می‌شود. امکان تعیین نیاز اکسیژن رسوب و همچنین نرخ فتوسنتز و تنفس نیز وجود دارد.

چهار سطح پیچیدگی در پایان این بخش شناسایی و ثبت گردیده‌است: (۱) استریت-فلپس، (۲) استریت-فلپس اصلاح‌شده، (۳) تعادل کامل خطی DO، و (۴) تعادل غیرخطی. شبیه‌سازی واقعی فیتوپلانکتون در فصل ۴ شرح داده شده‌است.

## ۲-۷- فرآیندهای اکسیژن محلول

پنج متغیر کیفیت EUTRO می‌توانند مستقیماً در تعادل DO شرکت کنند: کربن فیتوپلانکتون، آمونیاک، نیترات، تقاضای اکسیژن بیوشیمیایی کربنی و اکسیژن محلول. کاهش اکسیژن محلول، حاصل فرآیندهای تنفسی هوازی در ستون آب و فرآیندهای بی‌هوازی در رسوبات زیرین است. به دلیل اهمیت هردو فرآیند، لازم است که فرآیند جنبشی آن‌ها به صورت صریح تدوین شود.

تقاضای اکسیژن بیوشیمیایی کربن

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \underbrace{\partial_{oc} K_{1D} C_4}_{\text{مرگ}} - \underbrace{k \left( \frac{C_6}{K_{BOD} + C_6} \right) C_s}_{\text{اکسیداسیون}} - \underbrace{\frac{V_{S3}(1-f_{DS})}{D} C_s}_{\text{ته‌نشینی}} - \underbrace{\frac{532}{414} k_2 D \Theta D^{(T-20)} \left( \frac{K_{NO3}}{K_{NO3} + C_6} \right) C_2}_{\text{نیتروزن‌زدایی}}$$

اکسیژن محلول

$$\frac{\partial C_6}{\partial t} = \underbrace{k_2 (C_3 - C_6)}_{\text{کاهش}} - \underbrace{k_{6\Theta 6(T-20)} \left( \frac{C_6}{K_{BOD} + C_6} \right) C_s}_{\text{اکسیداسیون}} - \underbrace{\frac{64}{14} k_{12\Theta 12(T-20)} \left( \frac{C_6}{K_{NIT} + C_6} \right) C_1}_{\text{نیتروزن‌زدایی}} - \underbrace{\frac{SOD}{D} \Theta_3^{(T-20)}}_{\text{تقاضای رسوب}} + \underbrace{G_{R1} \left( \frac{32}{12} + \frac{48}{14} \frac{14}{12} (1 - P_{NH3}) \right) C_4}_{\text{رشد فیتوپلانکتون‌ها}} - \underbrace{\frac{32}{12} k_{1R} \Theta_3^{(T-20)} C_4}_{\text{هوالهی مجدد}}$$

شکل ۲-۷ معادلات تعادل اکسیژن

روش‌شناسی تجزیه و تحلیل دینامیک اکسیژن محلول در آب‌های طبیعی، به‌ویژه در جویبارها، نهرها و رودخانه‌ها از نظر منطقی به خوبی توسعه یافته‌است (O'Connor and Thomann, 1972). فرآیندهای مهم و جزئی در EUTRO در ادامه بررسی می‌گردد. خواننده باید به معادلات جنبشی خلاصه‌شده در شکل (۲-۷) و پارامترهای واکنش و ضرایب در جدول (۱-۷) مراجعه کند.

جدول ۱-۷ شرایط واکنشی DO و CBOD

واحد	مقدار حاصل از مدل Estuary Potomac	نشانه گذاری	توصیف
mg O <sub>2</sub> /mg C	۳۲/۱۲	aOC	نسبت اکسیژن به کربن.
mg N/mg C	۰/۲۵	aNC	نسبت نیتروژن به کربن فیتوپلانکتون.
day <sup>-1</sup> - ۱/۰۴۷	۰/۲۱-۰/۱۶	k <sub>d</sub> E <sub>d</sub>	میزان دفع اکسیژن رسانی به میزان ۲۰ درجه سانتی گراد، دما، ضریب.
mg O <sub>2</sub> /L	۰/۵	K <sub>BOD</sub>	ثابت برای محدود کردن اکسیژن نیمه اشباع.
day <sup>-1</sup> - ۱/۰۸	۰/۰۹-۰/۱۳	k <sub>12</sub> E <sub>12</sub>	نیتروژن زدایی در 20°C، دما، ضریب.
mg N/L	۰/۵	K <sub>NIT</sub>	ثابت برای محدود کردن اکسیژن نیمه اشباع.
day <sup>-1</sup> -	۱/۰۸	k <sub>2D</sub> E <sub>2D</sub>	نیتروژن زدایی در 20°C، دما، ضریب.
mg N/L	۰/۱	K <sub>NO3</sub>	ثابت برای محدود کردن اکسیژن نیمه اشباع.
day <sup>-1</sup>	۰/۱-۰/۵	G <sub>p1</sub>	نرخ رشد فیتوپلانکتون.
day <sup>-1</sup>	۰/۱۲۵	k <sub>1R</sub> E <sub>1R</sub>	نرخ تنفس فیتوپلانکتون، ۲۰ درجه سانتی گراد، دما، ضریب.
g/m <sup>2</sup> -day ۱/۰۸	۰/۲-۴/۰	SOD E <sub>S</sub>	تقاضای اکسیژن رسوب، دما، ضریب.
day <sup>-1</sup>	۱/۰۲۸	k <sub>2</sub> E <sub>a</sub>	نرخ هوادهی، ۲۰ درجه سانتی گراد، ضریب دما.
mg O <sub>2</sub> /L	Eq. ۴/۸	C <sub>s</sub>	DO اشباع
none	۰/۵	f <sub>D5</sub>	کسر محلول CBOD
m/day	-	V <sub>s3</sub>	سرعت بارگذاری موادالی

### ۱-۲-۷ - هوادهی

کمبود اکسیژن، یعنی زیر اشباع آبها از طریق هوادهی مجدد جوی دوباره پر می شوند. ضریب نرخ هوادهی تابعی از میانگین سرعت آب، عمق، باد و دما می باشد. در EUTRO، کاربر می تواند به متغیر مکان یا مدل اجازه دهد تا نرخ هوادهی را بر اساس جریان یا بار محاسبه نماید.

EUTRO هوادهی ناشی از جریان را براساس روش کووار (Covar, 1976) محاسبه‌نموده، که این روش به‌ترتیب تابعی از سرعت و عمق می‌باشد. توسط یکی از سه فرمول اوونز، چرچیل یا اوکانر-دوینس، محاسبه می‌شود.

$$k_{qj}(20^{\circ}C) = 5.349v_j^{0.67}D_j^{-1.85} \quad (۲-۷)$$

$$k_{qj}(20^{\circ}C) = 5.049v_j^{0.97}D_j^{-1.67} \quad (۳-۷)$$

یا

$$k_{qj}(20^{\circ}C) = 3.93v_j^{0.50}D_j^{-1.50}$$

$k_{qj}$  = ضریب نرخ هوادهی ناشی از جریان در دمای  $20^{\circ}C$ ,  $day^{-1}$ .

$v_j$  = میانگین سرعت آب در بخش  $j$ , m/sec.

$D_i$  = عمق متوسط بخش، m.

فرمول اوونز به‌طور خودکار، برای بخش‌هایی با عمق کم‌تر از ۲ فوت انتخاب می‌شود. برای بخش‌های عمیق‌تر از ۲ فوت، فرمول اوکانر-دوینس یا چرچیل بر اساس عمق و سرعت انتخاب می‌شوند. رودخانه‌های عمیق و درحال حرکت با سرعت آهسته، به اوکانر-دوینس نیازدارند. جریان‌های نسبتاً کم‌عمق و سریع‌تر به چرچیل نیازدارند. دمای قطعه برای تنظیم  $k_{qj}$  ناشی از جریان (۲۰ درجه سانتی‌گراد) توسط فرمول استاندارد استفاده می‌شود:

$$k_{qj}(T) = k_{qj}(20^{\circ}C)\theta_a^{T-20} \quad (۴-۷)$$

$T$  = دمای آب،  $^{\circ}C$ .

$k_{qj}(T)$  = ضریب نرخ هوادهی در دمای محیط بخش،  $day^{-1}$ .

$E_a$  = ضریب دما، بدون واحد.

هوادهی ناشی از باد توسط اوکانر (۱۹۸۳) تعیین می‌گردد. این روش هوادهی مجدد را که تابعی از سرعت باد، دمای هوا و آب و عمق می‌باشد، با استفاده از یکی از سه فرمول زیر محاسبه می‌کند:

$$k_{wj} = \frac{86400}{100D_j} \left( \frac{D_{ow}}{v_w} \right)^{2.3} \left( \frac{\rho_a}{\rho_w} \right)^{1.2} \frac{\kappa^{1.3}}{\Gamma} \sqrt{C_d}(1000W) \quad (۵-۷)$$



$$k_{wj} = \frac{86400}{100D_j} [(TERM1.100W)^{-1} + (TERM2\sqrt{100W})^{-1}]^{-1} \quad (۶-۷)$$

در جایی که؛

$$TERM1 = \left(\frac{D_{ow}}{v_w}\right)^{2.3} \left(\frac{\rho_a}{\rho_w}\right)^{1.2} \frac{\kappa^{1.3}}{\Gamma_u} \sqrt{C_d}$$

$$TERM2 = \left(\frac{D_{ow}}{\kappa_{z0}} \frac{\rho_a v_a}{\rho_w v_w} \sqrt{C_d}\right)^{1.2}$$

یا

$$K_{wj} = \frac{86400}{100D_j} \left(\frac{D_{ow}}{\kappa_{z0}} \frac{\rho_a v_a}{\rho_w v_w} \sqrt{C_d}\right)^{1.2} \sqrt{100W} \quad (۷-۷)$$

$k_{wj}$  = ضریب نرخ هوادهی ناشی از باد،  $\text{day}^{-1}$

$W$  = سرعت باد متغیر در ارتفاع ۱۰ سانتی متر بالاتر،  $\text{m/sec}$

$T_a$  = دمای هوا،  $^{\circ}\text{C}$

$\bar{n}_a$  = جرم مخصوص هوا، تابعی از  $T_a$ ،  $\text{g/m}^3$

$\bar{n}_w$  = جرم مخصوص آب،  $1/0$ ،  $\text{g/m}^3$

$v_a$  = لزجت هوا، تابعی از  $T_a$ ،  $\text{cm}^2/\text{s}$

$v_w$  = لزجت آب، تابعی از  $T_a$ ،  $\text{cm}^2/\text{s}$

$D_{ow}$  = انتشار اکسیژن در آب، تابعی از  $T$ ،  $\text{cm}^2/\text{s}$

$\hat{A}$  = ضریب وون کارمن،  $0/4$

$v_t$  = سرعت برشی انتقالی، برای مقیاس‌های کوچک، متوسط و بزرگ روی ۹، ۱۰ و ۱۰ تنظیم شده‌است،

$\text{cm/s}$

$v_c$  = سرعت برشی بحرانی، برای مقیاس‌های کوچک، متوسط و بزرگ روی ۲۲، ۱۱ و ۱۱ تنظیم

شده‌است،  $\text{cm/s}$

$z_e$  = زبری معادل، برای مقیاس‌های کوچک، متوسط و بزرگ  $0/25$ ،  $0/35$  و  $0/35$  تنظیم شده،  $\text{cm}$

$z_0$  = زبری مؤثر، تابعی از  $v_c$ ،  $\hat{A}$ ،  $C_d$  و  $W$  است،  $\text{cm}$

$\hat{A}$  = معکوس عدد رینولد، برای مقیاس‌های کوچک، متوسط و بزرگ روی ۱۰، ۳ و ۳ تنظیم شده‌است.

$\hat{A}$  = ضریب بدون بعد، برای مقیاس‌های کوچک، متوسط و بزرگ روی ۱۰،  $6/5$  و  $5$  تنظیم شده‌است.

$\hat{A}_u =$  ضریب بدون بعد، تابعی از  $v_c, \hat{A}, C_d$  و  $W$  است.

$C_d =$  ضریب درگ (کشش)، تابعی از  $v_a, v_t, z_e, \hat{A}, \hat{I}$  و  $W$  است.

معادله ۵-۷ در مکانی که شرایط بین سطوح هموار و نیروهای چسبندگی بر انتقال حرکت تسلط دارند، سرعت باد حداکثر ۶ متر بر ثانیه در نظر گرفته می‌شود.

معادله ۷-۷ در موقعیتی که شرایط بین سطوح ناهموار و آشفتگی‌های جریان مخالف بر انتقال حرکت تسلط دارند، سرعت باد بیش از ۲۰ متر بر ثانیه در نظر گرفته می‌شود.

معادله (۶-۷) در واقع یک منطقه‌ی گذار را نشان می‌دهد که در زیرلایه انتشار متلاشی‌گردیده و ارتفاع زبری افزایش می‌یابد، و در شرایطی که سرعت باد بین ۶ تا ۲۰ متر بر ثانیه می‌باشد، استفاده می‌گردد.

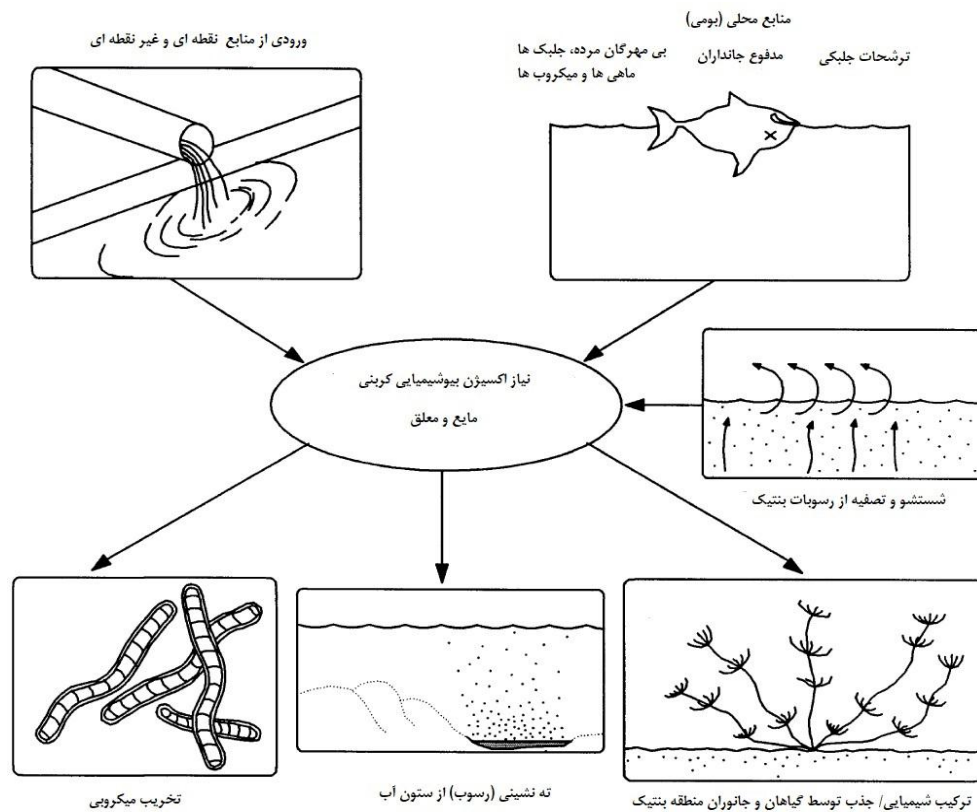
کاربر برای جزئیات بیشتر در مورد محاسبه جرم مخصوص هوا، لزجت هوا و آب، ضریب درگ (کشش)، زبری مؤثر و  $\hat{A}_u$  به (O'Connor, 1983) مراجعه کرده‌است. مقیاس کوچک بیان‌گر شرایط آزمایشگاهی، مقیاس بزرگ بیان‌گر شرایط اقیانوس آزاد و مقیاس متوسط بیش‌تر دریاچه‌ها و مخازن را نشان می‌دهد.

اشباع اکسیژن محلول،  $C_s$ ، به‌عنوان تابعی از دما، در درجه  $K$  و شوری  $S$ ، میلی‌گرم در لیتر تعیین می‌شود (APHA, 1985):

$$C_s = -139.34 + (1.5757 \cdot 10^5)T_K^{-1} - (6.6423 \cdot 10^7)T_K^{-2} + (1.2438 \cdot 10^{10})T_K^{-3} - (8.6219 \cdot 10^{11})T_K^{-4} - 0.5535S(0.031929 - 19.428T_K^{-1} + 3867.3T_K^{-2}) \quad (۸-۷)$$

### ۷-۲-۲- اکسیداسیون کربن

سابقه طولانی کاربردها بیش‌تر بر استفاده از BOD که معیاری برای تقاضای اکسیژن مواد و میزان اکسیداسیون آن و واکنش جنبشی کنترل‌کننده در نظر گرفته شده، متمرکز شده‌است. این امر ثابت‌کرده، آب‌هایی که ترکیبی ناهمگن از پسماندهای آلی با منشأ شهری و صنعتی دارند، مناسب می‌باشد که اندازه‌گیری کل اثرات بالقوه آن‌ها یک ساده‌سازی بزرگ است که یک مشکل پیچیده را به یکی از ابعاد قابل‌تراکم کاهش می‌دهد.



شکل ۷-۳ منابع BOD در محیط‌های آبی

اکسیداسیون مواد کربنی واکنشی کلاسیک BOD بوده که در داخل این مدل از تقاضای اکسیژن بیوشیمیایی نهایی کربن CBOD، برای شاخص تقاضای اکسیژن معادل مواد کربنی استفاده می‌کند. منبع اصلی CBOD، غیر از منابع ساخته شده توسط انسان و رواناب طبیعی، کربن فیتوپلانکتون که در نتیجه مرگ جلبک تولید می‌شود، مضر است. مکانیسم اولیه این ضرر مرتبط با اکسیداسیون CBOD است:



شرایط جنبشی برای اکسیداسیون کربن در EUTRO شامل سه ترم است. یک ثابت نرخ مرتبه اول، یک ترم تصحیح دما و یک ترم تصحیح کاهش DO. دو ترم اول استاندارد هستند. ترم سوم نشانگر کاهش میزان اکسیداسیون هوازی است، زیرا سطح DO به صفر نزدیک می‌شود. کاربرد می‌تواند ثابت

نیمه‌اشباع KBOD که نشان‌دهنده‌ی سطح DO بوده را مشخص نماید، که در آن میزان اکسیداسیون به نصف کاهش می‌یابد. با پیش‌فرض صفر، واکنش حتی در شرایط بی‌هوازی کاملاً پیش می‌رود. مقایسه مستقیم بین داده‌های مشاهده‌شده BOD 5 و خروجی مدل، با استفاده از CBOD داخلی که توسط EUTRO محاسبه می‌گردد، انجام می‌گیرد، زیرا اندازه‌گیری‌های میدانی ممکن است از طریق تنفس جلیک و فروپاشی کربن جلیک با خطا مواجه شود. بنابراین باید یک تصحیح داخلی در مدل محاسبه‌شده CBOD انجام شود تا یک مقایسه معتبر با اندازه‌گیری میدانی انجام شود. در این حالت؛ این نتیجه حاصل می‌شود که متغیر جدید، به محتوای BOD 5 شناخته می‌شود، که از طریق معادله (۷-۱۰) محاسبه می‌شود.

$$\text{Bottle BOD}_5 = C_5(1 - e^{-5k_{dbot}}) + \frac{64}{14}C_1(1 - e^{-5k_{nbot}}) + a_{oc}C_4(1 - e^{-5k_{IR}}) \quad (7-10)$$

$C_5$  = محاسبه داخلی CBOD، mg/L

$C_1$  = محاسبه داخلی  $\text{NH}_3$ ، mg/L

$C_4$  = زیست‌توده فیتوپلانکتون در واحد کربن، mg/L

$a_{oc}$  = نسبت اکسیژن به کربن، mg O<sub>2</sub>/mg C 32/12

$k_{dbot}$  = ثابت میزان دفع اکسیژن‌رسانی "بطری" آزمایشگاهی است،  $\text{day}^{-1}$

$k_{nbot}$  = ثابت نیتروژن‌زایی "بطری" آزمایشگاهی است،  $\text{day}^{-1}$

$k_{1R}$  = ثابت میزان تنفس جلیک در ۲۰ درجه سانتی‌گراد است،  $\text{day}^{-1}$

معادله (۷-۱۱) می‌تواند تخمین کم‌تری از محتوای مشاهده‌شده BOD را ارائه نماید، زیرا تصحیح شامل دفع فساد کربن جلیک می‌باشد که به‌نوبه‌ی خود به‌تعداد فیتوپلانکتون‌های غیرزنده نیز بستگی دارد. توجه داشته‌باشید که در این رابطه "محتوای" آزمایشگاهی CBOD و نرخ نیتروژن‌زایی که توسط کاربر مشخص می‌گردد، مورد استفاده قرار می‌گیرد. نرخ ثابت نیتروژن‌زایی آزمایشگاهی به‌صورت پیش‌فرض صفر می‌باشد که نشان‌دهنده‌ی استفاده از یک مهارکننده‌ی نیتروژن‌زایی است.

### ۷-۲-۳- نیتروژن‌زایی

نیتروژن‌زایی می‌تواند باعث افزایش هدررفت اکسیژن گردد.

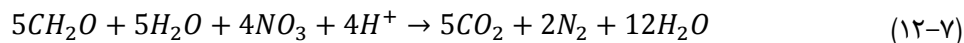


بنابراین برای هر میلی‌گرم ازت اکسیدشده‌ی آمونیاک، ۲ (۳۲/۱۴) میلی‌گرم اکسیژن مصرف می‌شود.

شرایط جنبشی برای نیتروژن‌زایی در EUTRO شامل سه عبارت می‌باشد: ثابت مرتبه اول، ترم تصحیح دما و ترم تصحیح تلفات DO. دو ترم اول استاندارد هستند. ترم سوم نشان‌دهنده‌ی کاهش نرخ نیتروژن‌زایی زمانی که سطح DO به صفر می‌رسد، می‌باشد. کاربر، ثابت نیمه‌اشباع  $K_{NT}$  را مشخص می‌نماید، که نشان‌دهنده‌ی سطح DO است که به این واسطه نرخ نیتروژن‌زایی به نصف کاهش می‌یابد. مقدار پیش‌فرض صفر بوده، که باعث می‌شود تا واکنش حتی در شرایط بی‌هوازی نیز کاملاً پیش‌برود.

### ۷-۲-۴- نیتروژن‌زدایی

در شرایط فشار کم DO، یک واکنش نیتروژن‌زدایی مخزن برای CBOD فراهم می‌کند:



بنابراین برای کاهش هر میلی‌گرم نیتروژن نیتراتی،  $۵/۴$  (۱۲/۱۴) میلی‌گرم کربن مصرف می‌شود، که CBOD را با  $۵/۴$  (۱۲/۱۴) (۳۲/۱۲) میلی‌گرم کاهش می‌دهد. درحالی‌که با نیتروژن‌زدایی در ستون آب افت محسوسی ایجاد نمی‌گردد، اما می‌تواند در شبیه‌سازی شرایط بی‌هوازی در اعماق مهم باشد. شرایط جنبشی برای نیتروژن‌زایی در EUTRO شامل سه ترم است. ثابت مرتبه اول (با نسبت‌های استوکیومتری مناسب)، یک تصحیح دما و ترم تصحیح تلفات DO. دو ترم اول استاندارد هستند. ترم سوم نشان‌دهنده‌ی کاهش نرخ نیتروژن‌زدایی است، زیرا سطح DO از صفر بالاتر می‌رود. کاربر می‌تواند ثابت اشباع  $KNO_3$ ، که نشان‌دهنده‌ی سطح DO می‌باشد را مشخص نماید، به‌صورتی که نرخ نیتروژن‌زدایی در آن به نصف کاهش می‌یابد. مقدار پیش‌فرض صفر می‌باشد، که از واکنش DO در تمام سطوح جلوگیری می‌نماید.

### ۷-۲-۵- ته‌نشینی

در شرایط جریان ساکن، کسر ذرات CBOD می‌تواند از طریق ستون آب به سمت پایین بارگذاری گردیده و در پایین رسوب کند. همچنین می‌تواند دفع اکسیژن کربن در پیکره‌ی آبی ستون آب را به میزان قابل‌توجهی کاهش دهد. با این‌حال رسوب حاوی CBOD و فیتوپلانکتون باعث تقاضای اکسیژن رسوب در اعماق دریا شود. در شرایط جریان زیاد نیز می‌توان ذرات CBOD بستر را دوباره معلق کرد. حالت جنبشی برای ته‌نشینی در EUTRO توسط ذرات معلق جایی که  $f_{D5}$  کسر محلول باشد مشخص و توسط کاربر  $vs3$  و کسر ذرات  $(1 - f_{D5})$  CBOD هدایت می‌گردد. سرعت ته‌نشینی که با توجه به زمان و مکان متفاوت می‌باشد، می‌تواند بخشی از میدان انتقال همرفتی باشد. همچنین تعلیق نیز می‌تواند با استفاده از یک تابع زمان و سرعت جداگانه وارد شود. کسر حل‌شده با متغیر بخش، شرایط اولیه ورودی هستند.

### ۷-۲-۶- رشد فیتوپلانکتون

محصول جانبی از تثبیت کربن فتوسنتزی، تولید اکسیژن محلول می‌باشد؛ به‌صورتی که میزان تولید اکسیژن (و جذب مواد مغذی) متناسب با ثابت نرخ رشد فیتوپلانکتون استوکیومتری است. بنابراین، برای هر میلی‌گرم کربن تولید شده توسط رشد فیتوپلانکتون،  $32/12$  میلی‌گرم  $O_2$  تولید می‌گردد. منبع اکسیژن اضافی از رشد فیتوپلانکتون هنگامی اتفاق می‌افتد که منبع مغذی آمونیاک موجود خالی شود و فیتوپلانکتون شروع به استفاده از نیتрат موجود نماید. برای جذب نیترات مرحله‌ی اول با کاهش آمونیاک، اکسیژن تولید می‌کند:



بنابراین، برای هر میلی‌گرم کربن تولید شده توسط رشد فیتوپلانکتون با استفاده از نیترات  $aNC$  میلی‌گرم از نیتروژن فیتوپلانکتون کاهش می‌یابد، و  $(48/14)$   $aNC$  میلی‌گرم از  $O_2$  تولید می‌شود.

### تنفس فیتوپلانکتون

در نتیجه‌ی تنفس فیتوپلانکتون، اکسیژن موجود در ستون آب کاهش یافته، در واقع روند معکوس فتوسنتز:



$C_4$  کربن فیتوپلانکتون برحسب میلی‌گرم در لیتر می‌باشد و برای هر میلی‌گرم کربن فیتوپلانکتون که توسط تنفس استفاده می‌گردد  $32/12$  میلی‌گرم اکسیژن نیز مصرف می‌شود.

### ۷-۲-۷- مرگ فیتوپلانکتون

مرگ فیتوپلانکتون‌ها موجب تولید کربن آلی شده که قادر به اکسید شدن می‌باشند. حالت جنبشی در EUTRO با استفاده از نرخ مرگ مرتبه اول و نسبت اکسیژن استوکیومتری به کربن  $32/12$ ، کربن فیتوپلانکتون را به CBOD بازیافت می‌کند.

### ۷-۲-۸- تقاضای اکسیژن رسوب

تجزیه مواد آلی در رسوب اعماق دریا می‌تواند تأثیرات عمیقی بر غلظت اکسیژن موجود در آب‌های پوشاننده داشته‌باشد. تجزیه مواد آلی منجر به تقاضای اکسیژن در فصل مشترک رسوب-آب می‌شود. در نتیجه، شارهای منطقه‌ی رسوب می‌توانند مخزن قابل توجهی از اکسیژن برای ستون آب پوشاننده باشند. EUTRO دو گزینه‌ی ورودی توصیفی و محاسبات پیش‌بینی شده برای جریان اکسیژن فراهم می‌کند. گزینه‌ی اول فقط برای شبکه‌های متشکل از بخش‌های ستون آب استفاده می‌شود که معادله

جنبشی آن در شکل (۳-۲) آورده شده است. شار تقاضای اکسیژن رسوب مشاهده شده برای بخش های آب باید در تماس با لایه ای اعماق مشخص شود. تغییرات فصلی در دمای آب می تواند SOD را از طریق ضریب دما تحت تأثیر قرار دهد.

چارچوب محاسبه ای که برای تبادل ستون آب موجود در اعماق دریا در نظر گرفته شده است، براساس مطالعه ای دریاچه ای که تعامل ستون آب-رسوب توسط دی تورو در آن گنجانیده شده است، می باشد. معادلات تعادل جرم  $D_j$ ، CBOD و DO برای یک لایه اعماق ضخیم در شکل (۳-۳) خلاصه گردیده است و همچنین SOD معادل تولید شده برای بخش ستون آب پوشاننده نیز ارائه گردیده است؛ اشتراک های "j" و "i" به ترتیب به یک بخش از اعماق دریا و بخش ستونی آب پوشاننده اشاره دارد.

WASP 6 پارامترهای دقیق تری را برای ته نشینی در اعماق فراهم می نماید که نه تنها شامل سرعت ته نشینی به سمت پایین، بلکه شامل سرعت تعلیق به سمت بالا نیز می شود. در این شرایط، شار ذرات خالص به رسوب، ناشی از تفاوت بین شار ته نشینی نزولی و شار تعلیق به سمت بالایی باشد.

یکی از اولین تصمیماتی که باید در مورد لایه ای اعماق گرفته شود تعیین عمق آن می باشد که دو عامل بر این تصمیم تأثیر می گذارند. اولین مورد، انعکاس مناسبی از ضخامت لایه ای فعال توسط عمقی که تحت تأثیر تبادل رسوب با ستون آب پوشاننده است، می باشد. دومین مورد، مدل مایل به انعکاس یک تاریخچه ای زمانی مناسب و یا "حافظه" در لایه ای رسوب می باشد. یک لایه بیش از حد نازک است و موجودات کفزی "نشان دهنده" و یا تحت تأثیر رسوب موادی هستند که تنها در یک یا دو سال آخر دوره مورد تجزیه و تحلیل قرار خواهند گرفت، یک لایه ای ضخیم و مدل دارای عمر متوسط و بسیار طولانی خواهد بود که کاهش قابل توجهی را در نتیجه کاهش دبی خروجی از تصفیه خانه های فاضلاب نشان نمی دهد. انتخاب ضخامت رسوب توسط نرخ رسوب متغیر فضایی پیچیده تر است. عمق لایه ای اعماق دریا همراه با سرعت رسوب تعیین شده، زمان حبس چندساله یا "حافظه" را فراهم می کند که تقریباً قابل قبولی از لایه ای فعال در نور از گرادیان های آب منفذی مشاهده شده، فراهم می کند.

واکنش های تجزیه که مؤلفه ای معادلات تعادل جرم را ایجاد می نمایند، شامل تجزیه بی هوازی کربن فیتوپلانکتون و تجزیه بی هوازی کربن آلی اعماق دریا هستند. می توان غلظت های منفی محاسبه شده را معادل اکسیژن محصولات نهایی کاهش یافته و یا تولید شده توسط زنجیره ای واکنش های اکسیداسیون و احیا در رسوب در نظر گرفت (شکل ۷-۴).

تقاضای اکسیژن بیوشیمیایی کربن

$$\frac{\partial C_{Sj}}{\partial t} = \theta_{oc} k_{PID} \theta_{PID}^{(T-20)} C_{4j} - k_{DS} \theta_{DS}^{(T-20)} C_{Sj} - \frac{532}{414} k_{2D} \theta_{2D}^{(T-20)} C_{2j} \frac{V_{SS}}{D_j} (1 - f_{DSi}) C_{Sj} + \frac{E_{DIF}}{D_j^2} (C_{Si} f_{DSi} - C_{Sj} f_{DSj})$$

اکسیژن محلول

$$\frac{\partial C_{Sj}}{\partial t} = k_{DS} \theta_{DS}^{(T-20)} + \frac{E_{DIF}}{D_j^2} (C_{6i} - C_{6j})$$

تقاضای اکسیژن رسوب (g/m<sup>2</sup> - day)

$$SOD = \frac{E_{DIF}}{D_j} (C_{6i} - C_{6j})$$

شکل ۴-۷ معادلات تعادل اکسیژن لایه اعماق

از آن‌جا که غلظت اکسیژن محاسبه شده در آب پوشاننده مثبت است، فرض بر این است که گونه‌های کربن کاهش یافته (معادل‌های اکسیژن منفی) که در طول فصل مشترک آب به اعماق منتقل می‌شوند با اکسیژن موجود ترکیب شده و با کاهش اکسیژن در ستون آب پوشاننده به CO<sub>2</sub> و H<sub>2</sub>O اکسید می‌شوند. جدول ۲-۷ خلاصه‌ی واکنش‌ها و پارامترهای CBOD و DO اعماق را نشان می‌دهد. مقادیر پارامترهای توصیف شده از یک مطالعه‌ی اولیه‌ی مدل‌سازی Potomac Estuary ارائه شده‌است.

جدول ۲-۷ CBOD لایه اعماق و شرایط واکنش DO

واحد	مقدار	نشانه‌گذاری	توصیف
day <sup>-1</sup>	۰/۰۰۰۴	k <sub>DS</sub>	میزان تجزیه کربن آلی (به‌عنوان CBOD)
none	۱/۰۸	E <sub>DS</sub>	ضریب دما
day <sup>-1</sup>		k <sub>2D</sub>	نرخ نیتروژن‌زدایی



none		$\dot{E}_{2D}$	ضریب دما
day <sup>-1</sup>		$k_{PzD}$	نرخ تجزیه فیتوپلانکتون
none		$\dot{E}_{PzD}$	ضریب دما
m <sup>2</sup> /day	$2 \times 10^{-6}$	$E_{DIF}$	ضریب تبادل پراکندگی
M	۰/۲ - ۰/۷	$D_j$	عمق لایه‌ی اعماق
		i	لایه‌ی اعماق
		j	ستون آب

### ۳-۷- پیاده‌سازی مدل

برای شبیه‌سازی اکسیژن محلول با WASP 6، از پیش‌پردازنده برای ایجاد یک مجموعه داده ورودی EUTRO استفاده می‌شود. بخش‌هایی از مجموعه داده‌ها که محیط انتقال و مرزی را توصیف می‌کنند، در ورودی مدل EUTRO نیز مشابه مدل ردیاب، محافظه کارانه می‌باشند که در فصل ۲ توضیح داده شد. کاربر ترکیبی از پارامترهای تبدیل و شاید نرخ انتقال جامدات را به این پارامترهای اساسی می‌افزاید. با استفاده از اغلب فرآیندها و شرایط جنبشی که در بالا توضیح داده شده می‌توان از فرآیند جنبشی EUTRO برای تحلیل مشکلات اکسیژن محلول استفاده نمود. برای سهولت کار، چهار سطح پیچیدگی در این جا مشخص شده است: (۱) استریتر-فلپس، (۲) اصلاح شده‌ی استریتر-فلپس، (۳) تعادل کاملاً خطی DO و (۴) تعادل غیرخطی DO.

لطفاً توجه داشته‌باشید که سطوح گسسته‌ی شبیه‌سازی که در این جا مشخص گردیده جزء سطوح دائمی بوده که کاربر می‌تواند آن را پیاده‌سازی نماید.

همراه با پارامترهای ورودی موردنیاز برای حل معادلات توازن DO در EUTRO، در ادامه به‌طور خلاصه در چهار سطح اجرا، شرح داده شده است. پارامترهای ورودی برای WASP 6 در چهار بخش اصلی پیش‌پردازنده، شامل محیط، انتقال، مرزها و تبدیل‌ها آماده می‌شوند. به دلیل این که پارامترهای مدل پایه در فصل ۲ شرح داده شده در این جا تکرار نمی‌گردند. شش جزء از هشت متغیر کیفیت EUTRO که می‌توانند در شبیه‌سازی تعادل DO شرکت نمایند، با اختصارهایی که در این متن استفاده شده‌اند، در جدول (۳-۷) آمده‌اند.

جدول ۷-۳- خلاصه متغیرهای EUTRO مورد استفاده در تعادل DO

متغیر	غلظت	نشانه‌گذاری	واحد
نیتروژن آمونیاک	C <sub>1</sub>	NH <sub>3</sub>	mg N/L
نیتروژن نترات	C <sub>2</sub>	NO <sub>3</sub>	mg N/L
کربن فیتوپلانکتون	C <sub>4</sub>	PHYT	mg C/L
BOD کربن	C <sub>5</sub>	CBOD	mg O <sub>2</sub> /L
اکسیژن محلول	C <sub>6</sub>	DO	mg O <sub>2</sub> /L
نیتروژن آلی	C <sub>7</sub>	ON	mg N/L

### ۷-۳-۱- استریتر- فلپس

ساده‌ترین تعادل اکسیژن محلول، معادلات BOD-DO استریتر- فلپس را به شکلی کمی تغییر یافته حل می‌کند.

$$S_{k5} = -k_d \theta_d^{T-20} C_5 - \frac{v_{S3}}{D} (1 - f_{D5}) C_5 \quad (15-7)$$

$$S_{k6} = +k_2 \theta_2^{T-20} (C_5 - C_6) - k_d \theta_d^{T-20} C_5 - \frac{SOD_T}{D} \quad (16-7)$$

که در آن  $S_{ki}$ ، اصطلاح منبع/مخزن برای متغیر "i" در یک بخش در  $mg / L \cdot day$  است. همان‌طور که ثابت و ضرایب سرعت جنبشی در جدول (۷-۳) تعریف شده‌است، به جز این که  $C_5$  به‌عنوان میزان اکسیژن بیوشیمیایی (نه فقط کربن) تعبیر می‌شود، BOD این معادلات نیز معمولاً در شرایط طراحی جریان کم، به‌خوبی تعریف می‌شوند.

### ۷-۳-۲- پارامترهای محیط

این پارامترها ماهیت مدل پایه، از جمله تقسیم‌بندی را تعریف نموده و شبیه‌سازی را کنترل می‌کنند. سیستم‌ها - "simulate" را برای CBOD و DO؛ و "bypass" را برای شش سیستم دیگر انتخاب کنید و برای اجرا نیز از سیستم CBOD برای نشان دادن BOD کل نهایی استفاده می‌شود. شکل (۷-۲).

**بخش‌ها** - بخش‌های ستون آب باید به روش استاندارد تعریف شوند. اگر قرار است ته‌نشینی BOD شبیه‌سازی شود، کاربر باید یک بخش از اعماق دریا را در زیر بخش‌های ستون آب اضافه نماید. بخش اعماق دریا صرفاً به‌عنوان یک مخزن برای ته‌نشینی آسان BOD عمل خواهد نمود. محاسبات مدل در این بخش از اعماق دریا نباید نادیده گرفته شود. شکل (۲-۸).

### ۷-۳-۳- پارامترهای انتقال

این گروه از پارامترها، انتقال همرفتی و پراکندگی متغیرهای شبیه‌سازی شده‌ی مدل را تعریف می‌نماید.

**شماره میدان‌های جریان** - برای شبیه‌سازی ته‌نشینی، کاربر باید 1 solids را تحت‌جریان همرفتی و همچنین جریان ستون آب را انتخاب نماید. شکل (۲-۱۴).

**انتقال ذرات،  $m^2/sec$**  - نرخ‌های ته‌نشینی و تعلیق متغیر زمانی برای ذرات BOD می‌تواند با استفاده از BQ آرایه پیوستگی 1 Solids و عملکرد زمانی QT وارد شوند؛ و برای هر میدان جریان جامد، مناطق مقطعی تبادل (مترمربع) برای جفت‌های مجاور با استفاده از BQ متغیر فضایی وارد می‌شوند. سرعت ته‌نشینی متغیرهای زمانی را می‌توان یک سری از سرعت‌ها بر اساس متر بر ثانیه به شمار آورده و در مقابل زمان مشخص نمود. اگر ضریب تبدیل واحدها به صورت  $1/157e-5$  تنظیم شود، این سرعت‌ها در واحدهای  $m/day$  وارد می‌گردند. این سرعت‌ها به‌طور داخلی در مناطق مقطعی تکثیر شده و جریان‌هایی در نظر گرفته می‌شوند که ذرات موادالی را از ستون آب حمل نموده و حل می‌شوند. شکل (۲-۱۴).

### ۷-۳-۴- پارامترهای مرزی

این گروه از پارامترها شامل غلظت‌های مرزی، بارهای زباله و شرایط اولیه می‌باشند. غلظت‌های مرزی باید برای هر بخش ورودی، خروجی یا تبادل جریان مشخص شود. شرایط اولیه نه‌تنها شامل غلظت اولیه می‌باشد، بلکه شامل میدان جرم‌مخصوص، میدان انتقال مواد جامد برای هر جامد و کسر حل‌شده در هر بخش است.

**غلظت‌های مرزی،  $mg/L$**  - در مرز هر بخش، غلظت‌های متغیر زمانی باید برای BOD و DO مشخص گردند. یک بخش مرزی با تبادل آب خارج از شبکه، از جمله ورودی‌های فرعی، جریان‌های پایین‌دست و مبادلات پراکندگی آب آزاد مشخص می‌شود (شکل ۲-۱۵).

**بارهای زباله،  $kg/day$**  - برای هر بار تخلیه منبع نقطه‌ای می‌توان بارهای متغیر BOD و DO را مشخص نمود. این بارها می‌توانند نمایان‌گر تخلیه فاضلاب شهری و صنعتی و یا رواناب شهری و کشاورزی باشند (شکل ۲-۱۶).

**میدان انتقال جامد** - میدان انتقال ته‌نشینی ذرات BOD باید در شرایط اولیه مشخص شود. میدان ۳ توصیه می‌شود (شکل ۲-۱۴).

**جرم مخصوص جامد**،  $\text{g/cm}^3$  - مقدار ۰ را می‌توان برای تراکم اسمی BOD و DO وارد نمود. این درحالی است که اطلاعات در EUTRO استفاده نمی‌شوند (شکل ۲-۱۰).

**غلظت‌های اولیه**،  $\text{mg/L}$  - غلظت BOD و DO در هر بخش لزوماً برای زمان شروع شبیه‌سازی، مشخص می‌شود. غلظت صفر برای متغیرهای غیرشبیه‌سازی شده  $\text{NH}_3$ ،  $\text{NO}_3$ ،  $\text{PO}_4$ ،  $\text{NH}_3$ ،  $\text{ON}$ ،  $\text{PHYT}$  و OP توسط پیش‌پردازنده وارد می‌شود (شکل ۲-۱۰).

**کسر محلول** - بخش محلول BOD و DO باید در هر بخش مشخص گردند؛ به‌صورتی که مقادیر DO ۱/۰ بوده و فقط بخش ذرات BOD هستند که در معرض ته‌نشینی قرار می‌گیرد. (شکل ۲-۱۱).

### ۷-۳-۵ - پارامترهای تبدیل

این گروه شامل پارامترهای متغیر فضایی، ثابت‌ها و توابع زمان - جنبشی برای ترکیبات موجود آب می‌باشد. مقادیر پارامترهای ثابت در کل شبکه برای همه اجزای شبیه‌سازی اعمال گردیده و سپس برای هربخش توابع زمان جنبشی از یک سری مقادیر در مقابل زمان، در روزها تشکیل شده‌است.

**دمای آب**،  $^{\circ}\text{C}$  - زمان و متغیر دمای آب را می‌توان با استفاده از پارامتر  $\text{TMPSG}$  مشخص نمود (پارامتر  $\text{TMPFN}$  و توابع زمان (1-4)  $\text{TEMP}$  باید حذف شوند). دما در زمان ثابت خواهند ماند.

**تقاضای اکسیژن رسوب**،  $\text{g/m}^2\text{-day}$  - این متغیر با استفاده از پارامتر  $\text{SOD1D}$  قابل تشخیص بوده و مقادیر آن در هر بخش از ستون آب که با قسمت پایین پیکره آب در تماس هستند، وارد می‌گردد.

**نرخ دفع اکسیژن‌رسانی BOD**،  $\text{day}^{-1}$  - با استفاده از ثابت‌های  $\text{KDC}$  و  $\text{KDT}$ ، می‌توان نرخ دفع اکسیژن‌رسانی BOD و ضریب دما را مشخص نمود.

**نرخ هوادهی مجدد**،  $\text{day}^{-1}$  - سه گزینه برای تعیین ثابت‌های نرخ هوادهی مجدد در EUTRO وجود دارد. در گزینه‌ی اول، با استفاده از ثابت  $\text{K2}$  می‌توان ثابت نرخ مجدد را مشخص و از ضریب دمای داخلی ۰/۲۸ استفاده نمود.

گزینه‌ی دوم: اگر  $\text{K2}$  وارد نشده باشد (و یا روی ۰ تنظیم شده باشد)، توسط EUTRO وارد می‌گردد. در این حالت با استفاده از پارامتر  $\text{REARSG}$  و تابع زمان  $\text{REAR}$  می‌توان ثابت متغیر هوادهی مجدد را وارد نمود. محصول ثابت متغیر مکانی  $\text{REARSG}$  و متغیر زمان  $\text{REARS}$  ثابت هوادهی مجدد ویژه‌است که توسط EUTRO استفاده می‌شود. این مقادیر هوادهی مجدد با یک تابع دما اصلاح نمی‌شوند.

گزینه‌ی دوم: در صورتی است که K2 یا REARSG وارد نگردند؛ در این حالت نرخ هوادهی مجدد واقعی که توسط EUTRO استفاده گردیده یا مقدار جریان ناشی از باد یا هر مقداری که بزرگتر باشد، با کمک سرعت آب، عمق، سرعت باد و دمای آب و هوا محاسبه می‌شود.

برای هر بخش از رودخانه‌ها، سرعت و عمق آب تابعی از جریان است که با استفاده از ضرایب هیدرولیکی وارد شده در مبحث "محیط" محاسبه می‌شود. برای دریاچه‌ها و مصب‌ها، سرعت محیط می‌تواند به صورت متر در ثانیه با استفاده از پارامتر VELFN و توابع زمان (VEL1-4) وارد شود. پارامتر VELFN نشان می‌دهد که کدام تابع سرعت توسط مدل برای هر بخش استفاده خواهد شد. مقادیر ۱، ۲، ۳ و ۴ به ترتیب توابع زمان VELN (1)، VELN (2)، VELN (3) و VELN (4) را فراخوانی می‌کنند. سپس سرعت آب باید از طریق این توابع زمان به صورت یک سری از سرعت در مقابل مقادیر زمانی وارد شود.

برای پیکره‌های آزاد آب، هوادهی بادمحور می‌تواند قابل توجه باشد. کاربر باید با استفاده از توابع زمان WIND و AIRTMP، سرعت باد محیط را به متر در ثانیه و دمای هوا را درجه سانتی‌گراد وارد کند. مقادیر پیش فرض سرعت باد و دمای هوا به ترتیب ۰/۶ متر بر ثانیه و ۱۵ درجه سانتی‌گراد است. مقیاس پیکره آب باید با استفاده از WTYPE ثابت وارد شود. مقادیر ۱، ۲ و ۳ به ترتیب مقیاس آزمایشگاهی، مقیاس دریاچه، مخزن و مقیاس اقیانوس آزاد را نشان می‌دهد. مقدار پیش فرض ۲ است.

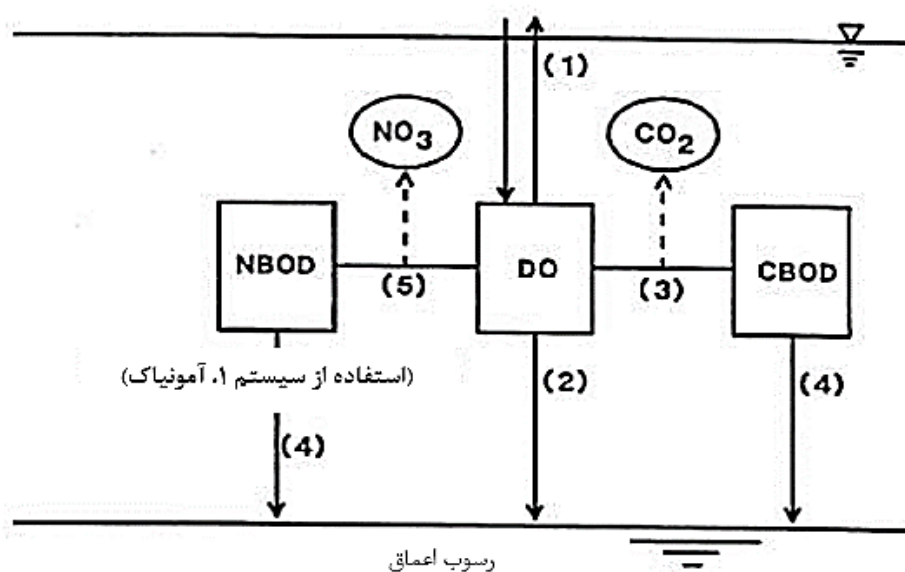
برای مصب، جایی که شوری به طور قابل توجهی بر اشباع DO تأثیر می‌گذارد، می‌توان مقادیر شوری در g/L را با استفاده از پارامتر SAL و عملکرد SALFN وارد کرد. محصول SAL- متغیر فضایی و متغیر زمانی SALFN، مقادیر ویژه‌ی شوری بخش و زمان مورد استفاده توسط EUTRO را می‌دهد. مقادیر میانگین شوری بخش می‌تواند با SAL وارد شود، در حالی که تغییرات نسبی در زمان می‌تواند ورودی SALFN باشد.

در مورد اقلیم‌های شمالی، جایی که پوشش یخ می‌تواند در ماه‌های زمستان در هوادهی مجدد تأثیر بگذارد، کاربر می‌تواند با استفاده از عملکرد زمان XICECVR، کسری از سطح آب موجود برای هوادهی مجدد را وارد کند. مقدار ۱ نشان می‌دهد که کل مساحت سطح برای انجام هوادهی مجدد موجود است. مقدار متغیر زمانی XICECVR با ثابت نگه‌دارنده سرعت برای گزینه‌های ۱ و ۳ تکثیر می‌شود. برای گزینه‌ی ۲، فرض بر این است که پوشش یخ در تابع زمان REAR ساخته شده است.

WTYPE و K2 در EUTRO ثابت شناخته می‌شوند. VELFN، SAL و REARSG در EUTRO پارامتر در نظر گرفته شده‌اند. WIND، VELN (1-4)، SALFN، AIRTMP، XICECVR و REAR نیز در EUTRO توابع زمان شناخته می‌شوند.

### ۷-۴ - استریتر- فلپس اصلاح شده

معادلات اصلاح‌شده‌ی استریتر- فلپس تقاضای اکسیژن بیوشیمیایی را به کسری از کربن و نیتروژن بر اساس دمای هر زمان تقسیم‌بندی می‌نمایند و با در نظر گرفتن این شرط امکان واسنجی واقع بینانه‌تر فراهم می‌شود. با این وجود، معمولاً تخصیص بار زباله برای طراحی در شرایط جریان کم پیش‌بینی می‌شود (شکل ۷-۵).



(۱) هوادگی مجدد

رسوب بنتیک

(۲) تقاضای اکسیژن رسوب

(۳) اکسیژن‌زدایی کربن‌دار

(۴) تخشینی و انباشت مواد آلی

(۵) اکسیژن‌زدایی نیتروژن‌دار

شکل ۷-۵ استریتر- فلپس اصلاح شده

$$S_{k5} = -k_d \theta_d^{T-20} C_5 - \frac{v_{S3}}{D} (1 - f_{D5}) C_5 \quad (17-7)$$

$$S_{kI} = -k_n \theta_n^{T-20} C_5 - \frac{v_{S3}}{D} (1 - f_{DI}) C_I \quad (18-7)$$

$$S_{k6} = +k_2 \theta_2^{T-20} (C_5 - C_6) - k_d \theta_d^{T-20} C_5 - \frac{64}{14} k_n \theta_n^{T-20} C_I - \frac{SOD}{D} \theta_s^{T-20} \quad (19-7)$$

که در آن  $S_{kI}$  اصطلاح منبع/مخزن برای متغیر "i" در یک بخش با  $\text{mg/L-day}$  می‌باشد. ثابت و ضرایب سرعت جنبشی به شرح زیر در جدول (۱-۴) تعریف شده‌است، به جز موارد زیر:

$C_1 =$  نیاز اکسیژن بیوشیمیایی نیتروژن (NBOD)، همان‌طور که توسط TKN، بیان شده‌است.  $\text{mg/L}$  (استفاده از سیستم ۱).

$k_n =$  نرخ ثابت دفع اکسیژن‌رسانی نیتروژن،  $\text{day}^{-1}$ .

$E_n =$  ضریب دما،

$f_{DI} =$  ذرات حل شده NBOD.

برای اجرای این معادلات در EUTRO، سیستم ۱ (در اصل  $\text{NH}_3$ ) باید به‌عنوان نیتروژن BOD به جای آمونیاک تعبیر شود. در اینجا، NBOD توسط نیتروژن کل Kjeldahl (TKN) بیان گردیده است. اگر داده‌های NBOD به‌طور مستقیم اندازه‌گیری شوند، قبل از استفاده در این مدل باید مقادیر را بر ۴/۵۷ تقسیم نمایید. به‌همین ترتیب، پیش‌بینی‌های مدل سیستم ۱ نیز باید قبل از مقایسه با داده‌های NBOD، در ۴/۵۷ ضرب شوند.

### ۷-۴-۱- پارامترهای محیطی

این پارامترها، ماهیت مدل پایه از جمله تقسیم‌بندی را تعریف؛ و شبیه‌سازی را کنترل می‌کنند. سیستم‌ها- "simulate" را برای CBNH3D و DO؛ و "bypass" را برای پنج سیستم دیگر انتخاب می‌کنند و برای این اجراء از سیستم  $\text{NH}_3$  برای نشان‌دادن BOD نیتروژن استفاده می‌شود، همان‌طور که توسط TKN بیان گردیده‌است.

**بخش‌ها-** بخش‌های ستون آب باید به روش استاندارد تعریف شوند. در صورت شبیه‌سازی CBOD یا NBOD، کاربر باید یک بخش از اعماق دریا را در زیربخش‌های ستون آب اضافه نماید. این بخش از اعماق دریا صرفاً عمل یک مخزن برای ته‌نشینی آسان را انجام داده و پیکره محاسبات مدل در این بخش از اعماق دریا نباید نادیده گرفته‌شود.

### ۷-۴-۲- پارامترهای انتقال

این گروه از پارامترها، انتقال همرفتی و پراکندگی متغیرهای مدل را تعریف می‌کنند. **شماره‌ی میدان‌های جریان** - برای شبیه‌سازی ته‌نشینی، کاربر باید مواد جامد ۱ را تحت‌جریان همرفتی و هم‌چنین باید جریان ستون آب را انتخاب کند.

**انتقال ذرات،  $m^3/sec$**  - نرخ ته‌نشینی و تعلیق متغیر زمانی برای ذرات CBOD و NBOD می‌تواند با استفاده از BQ آرایه پیوستگی Solids 1 و عملکرد زمان QT وارد شود. برای هر میدان جریان جامد، مناطق مقطعی تبادل (مترمربع) برای جفت بخش مجاور با استفاده از BQ متغیر فضایی وارد می‌شوند. سرعت ته‌نشینی متغیرهای زمانی را می‌توان یک سری از سرعت‌ها درمقابل زمان مشخص نمود. اگر ضریب تبدیل واحدها به  $1/157e-5$  تنظیم‌گردیده، این سرعت‌ها در واحدهای  $m/day$ ، در مناطق مقطعی داخلی چندبرابر شده و به صورت جریان‌هایی که ماده آلی ذرات را از ستون آب حمل می‌کنند، بهبود می‌یابند.

### ۷-۴-۳- پارامترهای مرزی

این گروه از پارامترها؛ شامل غلظت‌های مرزی، بارهای زباله و شرایط اولیه می‌باشند، به‌صورتی که غلظت‌های مرزی باید برای هر بخش ورودی، خروجی یا تبادل جریان مشخص شوند. شرایط اولیه علاوه‌بر غلظت‌اولیه، شامل میدان جرم‌مخصوص، میدان انتقال مواد جامد برای هر جامد و کسر حل‌شده در هر بخش نیز می‌باشد.

**غلظت‌های مرزی،  $mg/L$**  - در هر بخش مرزی، غلظت‌های متغیر زمانی برای CBOD، NBOD و DO مشخص می‌گردد. از سیستم  $NH_3$  که به صورت TKN می‌باشد، برای نمایش NBOD استفاده می‌گردد. یک بخش مرزی با استفاده از تبادل آب از خارج شبکه؛ از جمله ورودی‌های فرعی، جریان‌های پایین‌دست، و مبادلات پراکندگی آب آزاد مشخص می‌شود.

**بارهای زباله،  $kg/day$**  - برای تخلیه بار منبع نقطه‌ای، می‌توان بارهای متغیر CBOD، NBOD و DO را مشخص نمود که این بارها می‌توانند نمایان‌گر تخلیه فاضلاب شهری و صنعتی و یا رواناب شهری و کشاورزی باشند. از سیستم  $NH_3$  برای نمایش NBOD استفاده می‌شود که به‌صورت TKN بیان می‌شود.

**میدان انتقال جامد** - میدان انتقال مرتبط با ذرات CBOD و بارگذاری NBOD باید در شرایط اولیه مشخص شده و میدان ۳ برای هر دو توصیه می‌شود.



**جرم مخصوص جامد،  $g/cm^3$**  - مقدار صفر را می‌توان برای تراکم اسمی CBOD، NBOD و DO وارد نمود؛ که این اطلاعات در EUTRO استفاده نمی‌شود.

**غلظت اولیه،  $mg/L$**  - غلظت CBOD، NBOD و DO باید برای زمان شروع شبیه‌سازی در هر بخش مشخص گردد. از سیستم  $NH_3$  که به صورت TKN بیان می‌شود، برای نمایش NBOD استفاده می‌گردد. برای متغیرهای غیر شبیه‌سازی شده  $NO_3$ ،  $PO_4$ ، PHYT، ON و OP، غلظت صفر توسط پیش‌پردازنده وارد می‌شود.

**کسر محلول** - در هر بخش مقدار CBOD، NBOD و DO حل شده باید مشخص گردد. به صورتی که مقدار DO، ۱ بوده و فقط بخش ذرات CBOD و NBOD در معرض ته‌نشینی قرار می‌گیرند.

### ۷-۴-۴- پارامترهای انتقال

این گروه از پارامترها شامل پارامترهای متغیر فضایی، ثابت‌ها و توابع زمان جنبشی برای ترکیبات با کیفیت آب می‌باشند. مقادیر پارامترها برای هر بخش و مقادیر ثابت در کل شبکه شبیه‌سازی اعمال می‌شوند. توابع زمان جنبشی از یک سری مقادیر در مقابل زمان، در روزها تشکیل شده‌است.

**دمای آب،  $^{\circ}C$**  - زمان و متغیر دمای آب بخش را می‌توان با استفاده از پارامترهای TMPSPG و TMPFN و توابع زمان (1-4) TEMP مشخص نمود. اگر دما در زمان ثابت بماند، کاربر باید با استفاده از پارامتر TMPSPG دمای قطعه را وارد کند و در آن صورت TMPFN و (1-4) TEMP باید حذف شوند. اگر کاربر بخواهد دمای متغیر زمانی را وارد نماید باید مقادیر پارامتر TMPSPG را بر روی ۱/۰ تنظیم کند. پارامتر TMPFN نشان می‌دهد که تابع دما توسط مدل برای هر بخش استفاده خواهد شد. مقادیر ۱/۰، ۲/۰، ۳/۰ یا ۴/۰ به ترتیب توابع زمان (1) TEMP، (2) TEMP، (3) TEMP و (4) TEMP را فراخوانی می‌کنند. سپس دمای آب از طریق توابع زمان یک سری از دما است که در مقابل مقادیر زمانی وارد می‌شود. محصول TMPSPG و تابع انتخابی TEMP، دمای آب بخش و زمان خاصی که توسط EUTRO استفاده می‌شود را ارائه می‌دهد.

TMPSPG و TMPFN به ترتیب در EUTRO به پارامترهای ۳ و ۴ شناخته شده و (1) TEMP 4 توابع زمان (۱-۴) در EUTRO محسوب می‌شوند.

**تقاضای اکسیژن رسوب،  $g/m^2-day$**  - شار تقاضای اکسیژن رسوب متغیر بخش و ضرایب دما به ترتیب با استفاده از پارامترهای SOD1D و SODTA مشخص می‌شوند. مقادیر باید برای بخش‌های ستون آب که با بخش پایین پیکره آب در تماس هستند وارد شود. اگر دما به موقع ثابت بماند، SODTA قابل حذف می‌باشد.

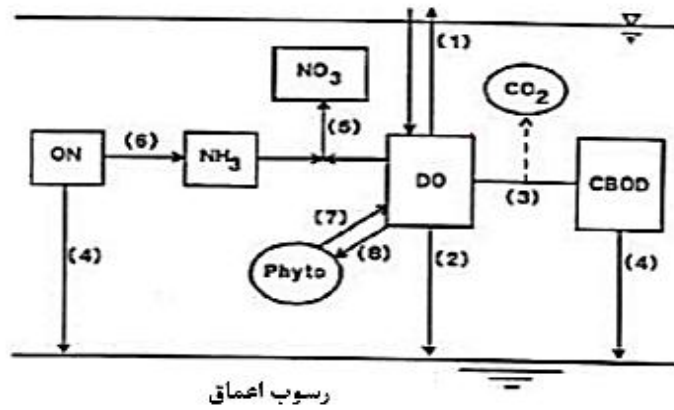
**نرخ دفع اکسیژن‌رسانی CBOD،  $\text{day}^{-1}$**  - نرخ دفع اکسیژن‌رسانی CBOD و ضریب دما می-توانند به ترتیب با استفاده از ثابت‌های KDC و KDT، مشخص شوند.

**نرخ دفع اکسیژن‌رسانی NBOD،  $\text{day}^{-1}$**  - ضریب دفع اکسیژن‌رسانی NBOD و ضریب دما به ترتیب با استفاده از ثابت K12C و K12T مشخص می‌شوند.

**نرخ هوادهی مجدد،  $\text{day}^{-1}$**  - سه گزینه‌ی اساسی برای مشخص کردن هوادهی مجدد شامل؛ ثابت نرخ واحد، ثابت سرعت متغیر و ثابت بودن سرعت و جریان محاسبه‌شده از باد وجود دارد. این گزینه‌ها در بخش استریتر- فلپس توضیح داده شده‌است.

#### ۷-۵- تعادل خطی DO

معادلات کامل تعادل DO، فرآیند NBOD را به معدنی‌شدن و نیتروژن‌زایی تقسیم؛ و اثرات فتوسنتز و تنفس را به سطح فیتوپلانکتون داده‌شده اضافه می‌کند (شکل ۷-۶):



- (۱) مواد هیدروکسی مجدد
- (۲) تقاضای اکسیژن رسوب
- (۳) اکسیژن‌زدایی کربن دار
- (۴) تعفنیتی و انباشت مواد آلی
- (۵) نیتروژن زایی
- (۶) معدنی شدن
- (۷) فتوسنتز
- (۸) تنفس

شکل ۶-۷ تعادل خطی DO

$$S_{k7} = -k_{71}\theta_{71}^{T-20}C_7 - \frac{v_{S3}}{D}(1 - f_{D7})C_7 \quad (20-7)$$

$$S_{k1} = -k_{71}\theta_{71}^{T-20}C_7 - k_{12}\theta_{12}^{T-20}C_1 \quad (21-7)$$

$$S_{k2} = +k_{12}\theta_{12}^{T-20}C_1 \quad (22-7)$$

$$S_{k5} = -k_d \theta_d^{T-20} C_5 - \frac{v_{S3}}{D} (1 - f_{D5}) C_5 \quad (23-7)$$

$$S_{k6} = +k_2 \theta_2^{T-20} (C_5 - C_6) - k_d \theta_d^{T-20} C_5 - \frac{64}{14} k_{12} \theta_{12}^{T-20} C_I \quad (24-7)$$

$$- \frac{SOD}{D} \theta_s^{T-20} + (k_{IC} \theta_{IC}^{T-20} - k_{IR} \theta_{IR}^{T-20}) \frac{32}{12} C_4$$

که در آن  $S_{ki}$  ترم منبع/مخزن برای متغیر "i" در یک بخش در mg/L-day است. علاوه بر این که ثابت و ضرایب سرعت جنبشی در جدول (۴-۱) تعریف گردیده‌اند موارد زیر نیز استفاده می‌شود:

$$k_{71} = \text{نرخ ثابت معدنی‌شدن نیتروژن آلی}, \text{day}^{-1}$$

$$\bar{E}_{71} = \text{ضریب دما،}$$

$k_{1C} = \text{نرخ ثابت متوسط رشد فیتوپلانکتون}, \text{day}^{-1}$ ، (کاربر باید مقدار کم موادمغذی و سبک را وارد کند).

$$\bar{E}_{1C} = \text{ضریب دما،}$$

$$f_{D7} = \text{ذرات حل‌شده نیتروژن آلی.}$$

غلظت‌های ثابت فیتوپلانکتون مورد استفاده در تعادل DO، تحت شرایط اولیه به‌عنوان میکروگرم برلیتر کلروفیل a، وارد می‌شوند. اگر نسبت کربن به کلروفیل وارد نشود، از مقدار پیش‌فرض ۳۰ استفاده می‌شود. کسر ذرات CBOD و ON با میدان انتقال ۳، با ته‌نشینی موادآلی همراه است.

### ۷-۵-۱- پارامترهای محیط

این پارامترها؛ ماهیت مدل پایه از جمله تقسیم‌بندی را تعریف کرده و شبیه‌سازی را کنترل می‌کنند. سیستم‌ها- "simulate" را برای  $NH_3$ ،  $NO_3$ ، CBOD، DO و ON و هم‌چنین "constant" را برای PHYT و "bypass" را برای  $PO_4$  و OP انتخاب کنید.

**بخش‌ها**- بخش‌های ستون آب به روش استاندارد تعریف می‌گردند. در صورت شبیه‌سازی CBOD یا NO، کاربر باید یک بخش از اعماق دریا را در زیر قسمت‌های ستون آب اضافه نماید. این بخش از اعماق دریا که صرفاً مخزن مناسبی برای ته‌نشینی موادآلی عمل نموده را نباید با مبحث محاسبات مدل در این بخش از اعماق دریا، نادیده گرفته شود.

### ۷-۵-۲- پارامترهای انتقال

این گروه از پارامترها؛ انتقال همرفتی و پراکندگی متغیرهای مدل را تعریف می‌کنند.

**شماره میدان‌های جریان** - برای شبیه‌سازی ته‌نشینی، کاربر باید مواد جامد ۱ را تحت جریان همرفتی و همچنین جریان ستون آب را انتخاب نماید.

**انتقال ذرات،  $m^3/sec$**  - نرخ ته‌نشینی و تعلیق متغیر زمانی برای ذرات CBOD و ON می‌تواند با استفاده از BQ آرایه پیوستگی جامد ۱ و تابع زمان QT وارد شوند. برای هر میدان جریان جامد، مناطق تبادل مقطع (مترمربع) برای جفت بخش مجاور با استفاده از متغیر فضایی BQ وارد می‌شوند. سرعت ته‌نشینی متغیرهای زمانی را می‌توان یک سری از سرعت‌ها، بر اساس متر بر ثانیه، در مقابل زمان مشخص نمود. اگر ضریب تبدیل واحدها روی  $1/157 e-5$  تنظیم شود، این سرعت‌ها در واحدهای  $m/day$  در مناطق مقطعی داخلی چندبرابر شده و به صورت جریان‌هایی که ذرات ماده آلی را در ستون آب حمل می‌نمایند، بهبود می‌یابند.

### ۷-۵-۳- پارامترها مرزی

این گروه از پارامترها شامل غلظت‌های مرزی، بارهای زباله و شرایط اولیه می‌باشند، به صورتی که غلظت‌های مرزی باید برای هر بخش ورودی، خروجی یا تبادل جریان مشخص گردند. شرایط اولیه علاوه بر غلظت اولیه، شامل میدان جرم‌مخصوص، میدان انتقال مواد جامد برای هر جامد و کسر حل شده در هر بخش است.

**غلظت‌های مرزی،  $mg/L$**  - در هر بخش مرزی، غلظت‌های متغیر زمان باید برای  $NH_3$ ،  $NO_3$ ، ON، CBOD و DO مشخص شوند. یک بخش مرزی با تبادل آب خارج از شبکه، شامل ورودی‌های فرعی، جریان‌های پایین دست و مبادلات پراکندگی آب آزاد مشخص می‌باشد.

**بارهای زباله،  $kg/day$**  - برای تخلیه بار با منبع نقطه‌ای، می‌توان بارهای متغیر  $NH_3$ ، ON،  $NO_3$ ، CBOD و DO را مشخص نمود؛ در واقع این بارها نمایانگر تخلیه فاضلاب شهری و صنعتی و یا رواناب شهری و کشاورزی می‌باشند.

**میدان انتقال مواد جامد** - بخش انتقال مرتبط با ذرات CBOD و ته‌نشینی تحت شرایط اولیه مشخص گردیده و میدان ۳ برای هر دو توصیه می‌شود.

**جرم‌مخصوص مواد جامد،  $g/cm^3$**  - مقدار صفر را می‌توان برای تراکم اسمی  $NH_3$ ،  $NO_3$ ، ON، CBOD و DO وارد نمود که این اطلاعات در EUTRO استفاده نمی‌شود.

**غلظت‌های اولیه،  $mg/L$**  - در هر بخش، غلظت  $NH_3$ ،  $NO_3$ ، ON، CBOD و DO برای زمان شروع شبیه‌سازی مشخص می‌گردند. همچنین غلظت PHYT، بیان شده که میکروگرم بر لیتر کلروفیل a می‌باشد، مشخص می‌شود. غلظت‌های فیتوپلانکتون در طول شبیه‌سازی ثابت بوده و بر روی فتوسنتز و

تنفس تأثیر می‌گذارد. غلظت صفر برای متغیرهای غیر شبیه‌سازی شده‌ی  $PO_4$  و  $OP$  توسط پیش‌پردازنده وارد می‌شود.

**کسر محلول** - بخش حل‌شده‌ی  $NH_3$ ،  $NO_3$ ،  $ON$ ،  $CBOD$  و  $DO$  باید در هر قسمت مشخص گردد. مقادیر  $DO$  باید ۱ باشد. همچنین تنها بخش ذرات  $CBOD$  و  $ON$  در معرض ته‌نشینی قرار می‌گیرند.

### ۷-۵-۴- پارامترهای تبدیل

این گروه از پارامترها شامل پارامترهای متغیر فضایی، ثابت‌ها و توابع زمان جنبشی برای ترکیبات با کیفیت آب می‌باشند. مقادیر این پارامترها برای هر بخش وارد شده و مقادیر ثابت در کل شبکه، برای کل شبیه‌سازی اعمال می‌گردد. توابع زمان جنبشی از یک سری مقادیر در مقابل زمان، در روزها تشکیل شده‌است.

**دمای آب،  $^{\circ}C$**  - دمای متغیر زمان و قطعه می‌تواند با استفاده از پارامترهای  $TMPFN$  و  $TMPSG$  و توابع زمان  $TEMP(1-4)$  مشخص شده و همان‌طور که در بخش استریتر- فلپس اصلاح شده، توضیح داده شود.

**اکسیژن مورد نیاز رسوب،  $g/m^2-day$**  - شار تقاضای اکسیژن رسوب متغیر بخش و ضرایب دما به ترتیب با استفاده از پارامترهای  $SOD1D$  و  $SODTA$  مشخص می‌شوند. مقادیر باید برای بخش‌های از ستون آب که با بخش پایین پیکره آب در تماس هستند، وارد شود.

**نرخ معدنی شدن نیتروژن،  $day^{-1}$**  - با استفاده از ثابت‌های  $K71C$  و  $K71T$  می‌توان ضریب ثابت معدنی و ضریب دما برای نیتروژن آلی محلول را مشخص نمود.

**نرخ نیتروژن زایی،  $day^{-1}$**  - ضریب ثابت نیتروژن زایی و ضریب دما برای نیتروژن آمونیاک محلول به ترتیب با استفاده از ثابت  $K12C$  و  $K12T$  مشخص می‌شوند.

**نرخ دفع اکسیژن‌رسانی  $CBOD$ ،  $day^{-1}$**  - ضریب دفع اکسیژن‌رسانی  $CBOD$  و ضریب دما می‌توانند به ترتیب با استفاده از ثابت‌های  $KDC$  و  $KDT$ ، مشخص گردند.

**نرخ هوادهی مجدد،  $day^{-1}$**  - سه گزینه‌ی اساسی برای مشخص نمودن هوادهی مجدد وجود دارد؛ یک نرخ ثابت واحد، بخش و ثابت نرخ متغیر زمانی و ثابت سرعت و جریان محاسبه‌شده از باد، این گزینه‌ها در بخش استریتر- فلپس توضیح داده شده‌است.

**نرخ فتوسنتز،  $\text{day}^{-1}$**  - ضریب متوسط رشد فیتوپلانکتون و ضریب دما به ترتیب می‌توانند با استفاده از ثابت K1C و K1T وارد شوند. برای شبیه‌سازی‌های تعادل DO که در آن از پویایی فیتوپلانکتون عبور می‌کند، سرعت رشد که منعکس کننده‌ی محدودیت متوسط نور و موادمغذی در پیکره آبی می‌باشد، باید ثابت باشد.

**نرخ تنفس،  $\text{day}^{-1}$**  - ضریب متوسط تنفس فیتوپلانکتون و ضریب دما می‌تواند به ترتیب ثابت K1RC و K1RT باشد.

### ۶-۷ - تعادل غیرخطی DO

معادلات تعادل غیرخطی DO، بازتابی از غلظت DO را در شرایط موجود که در معادلات تعادل خطی DO در بالا ارائه گردیده است، می‌نمایاند. این بازتاب می‌تواند در مهار نیتروژن‌زایی، اکسیداسیون کربن و نیز تشدید نیتروژن‌زدایی در غلظت کم پتاسیم حائز اهمیت باشد.

برای این سطح از تجزیه و تحلیل، معادلات تعادل خطی DO ارائه‌شده در بالا با اصطلاحات غیرخطی برای اکسیداسیون کربن، نیتروژن‌زایی و نیتروژن‌زدایی تکمیل شده‌است. این شرایط در جدول (۷-۱) ارائه گردیده‌است. محیط، انتقال و پارامترهای مرزی موردنیاز برای اجرای تعادل غیرخطی DO همان مواردی می‌باشد که در تعادل خطی DO ارائه شده و در بالا وجود دارد. کاربر باید پارامترهای تبدیل ارائه‌شده در بالا را با موارد زیر تکمیل نماید.

**نرخ نیتروژن‌زایی،  $\text{day}^{-1}$**  - ضریب ثابت نیتروژن‌زایی و ضریب دما برای نیتروژن آمونیاک محلول به ترتیب با استفاده از ثابت K12C و K12T مشخص می‌شوند. ثابت اشباع برای محدودیت نیتروژن‌زایی اکسیژن با استفاده از ثابت KNIT مشخص می‌گردد.

**نیتروژن‌زدایی،  $\text{day}^{-1}$**  - ضریب ثابت نیتروژن‌زدایی و ضریب دما برای نیتروژن محلول نترات به ترتیب با استفاده از ثابت  $20^\circ\text{C}$  و K20T مشخص می‌شود. ثابت نیمه‌اشباع برای محدود کردن اکسیژن نیتروژن‌زایی را می‌توان با استفاده از  $\text{KNO}_3$  ثابت مشخص نمود. مقدار پیش فرض برای  $\text{KNO}_3$  برابر با ۰ می‌باشد، که حاوی عدم تجمع‌زدایی در غلظت اکسیژن بالاتر از ۰ است.

**نرخ دفع اکسیژن‌رسانی CBOD،  $\text{day}^{-1}$**  - ضریب دفع اکسیژن‌رسانی CBOD و ضریب دما به ترتیب، می‌توانند با استفاده از ثابت‌های KDC و KDT مشخص شوند. ثابت نیمه‌اشباع برای محدود کردن اکسیژن در دفع اکسیژن کربن می‌تواند با استفاده از ثابت KBOD مشخص شود. مقدار پیش فرض برای KBOD صفر می‌باشد که نشان‌گر محدودیت اکسیژن نیست.





## فصل هشتم

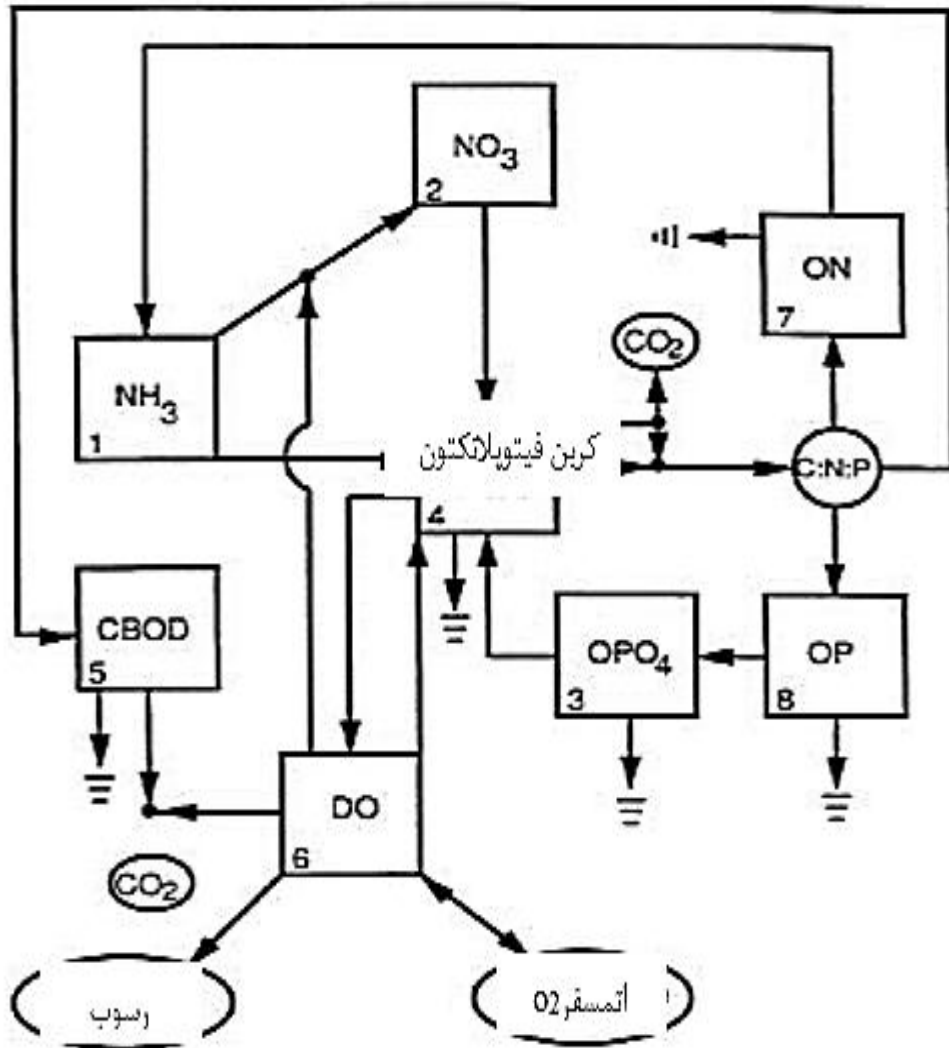
### غنی سازی

در خصوص غنی‌سازی و افزایش غلظت موادمغذی، همچنان در بسیاری از پیکره‌های آبی، نگرانی وجود دارد. غلظت بالای نیتروژن و فسفر می‌تواند منجر به شکوفایی دوره‌ای فیتوپلانکتون‌ها و تغییر تعادل طبیعی در تغذیه شود. سطح اکسیژن محلول می‌تواند به‌طور گسترده‌ای در نوسان بوده و منجر به کاهش غلظت آن در پایین‌ترین اعماق (عمیق‌ترین بخش‌ها) گردد.

افزایش غلظت موادمغذی حدود ۳۰ سال مدل شده‌است. معادلات اجرا شده در این‌جا از مدل Potomac Eutrofication Model (PEM) (تومن و فیتزپاتریک، ۱۹۸۲) گرفته شده و نسبتاً استاندارد می‌باشند. بخش‌های از این متن، برگرفته از متن اصلاح شده‌ی گزارش PEM می‌باشد.

#### ۸-۱- مروری بر تغذیه‌گرایی WASP 6

غنی‌سازی موادمغذی، تغذیه‌گرایی و فرآیند کاهش DO با استفاده از برنامه EUTRO شبیه‌سازی می‌شوند. چندین فرآیند فیزیکی- شیمیایی می‌توانند بر انتقال و تعامل بین موادمغذی، فیتوپلانکتون، مواد کربنی و اکسیژن محلول در محیط آبی تأثیر بگذارند. شکل (۸-۱) اثر متقابل، جنبشی اصلی برای چرخه موادمغذی و اکسیژن محلول را نشان می‌دهد.



شکل ۸-۱ متغیرهای کیفیت EUTRO

EUTRO می‌تواند در سطوح مختلف پیچیدگی، توسط کاربر اجرا گردد تا همه یا تعدادی از این متغیرها و فعل‌وانفعال‌ها را شبیه‌سازی نماید. از نظر پیچیدگی، چهار سطح برای شبیه‌سازی تعادل DO در فصل ۷ شرح داده شده‌است. سه سطح از پیچیدگی برای شبیه‌سازی تغذیه‌گرایی در پایان این بخش شناسایی و ثبت گردیده‌است: (۱) فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی ساده، (۲) فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی میانی و (۳) فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی متوسط با کف دریا. حتی اگر کاربر برنامه‌ریزی‌های شبیه‌سازی ساده‌تری انجام می‌دهد باید با قابلیت‌های کامل EUTRO آشنا شود.

EUTRO واکنش‌های انتقال و تبدیل را تا هشت متغیر حالت شبیه‌سازی می‌نماید که در شکل (۸-۱) نشان داده شده‌است. این واکنش‌ها می‌توانند چهار سیستم متقابل (فعل‌وانفعالی) در نظر گرفته شوند: فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون، چرخه فسفر، چرخه نیتروژن و تعادل اکسیژن محلول. معادله عمومی تعادل جرم WASP 6 برای تمام متغیرهای حالت، قابل حل است. زیرشاخه‌های EUTRO، فرآیندهای تبدیل خاص را به منظور تعیین تعادل عمومی توده‌ای برای هشت متغیر حالت خاص در ستون آبی و کف، به معادله کلی اضافه می‌کنند. پس از یک خلاصه کوتاه از چرخه‌های مواد، ادامه‌ی این بخش جزئیات خاص را برای چندین منبع تبدیل و مخزن ارائه می‌دهد.

#### ۸-۱-۱- چرخه فسفر

فسفر معدنی محلول یا موجود (DIP) با فسفر معدنی ذره‌ای از طریق یک مکانیسم جذب-دفع تعامل می‌کند. DIP توسط فیتوپلانکتون‌ها برای رشد جذب به زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتون افزوده می‌گردند. فسفر از طریق مخزن زیست‌توده فیتوپلانکتون به فسفر آلی محلول؛ و ذرات معلق و فسفر غیرآلی حل شده نیز از طریق تنفس درونی و مرگ‌ومیر غیرشکاری بازگردانده می‌شوند. فسفر آلی با نرخ معدنی شدن وابسته به دما، به فسفر معدنی محلول تبدیل می‌شود.

#### ۸-۱-۲- چرخه نیتروژن

فرآیند جنبشی گونه‌های نیتروژن اساساً مشابه سیستم فسفر می‌باشد. آمونیاک و نترات برای رشد توسط فیتوپلانکتون جذب گردیده و در زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتون گنجانیده می‌شوند. میزان مصرف هر کدام از آن‌ها تابعی از غلظت آن نسبت به کل نیتروژن معدنی (آمونیاک به علاوه نترات) موجود است. نیتروژن از مخزن زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتون به نیتروژن آلی محلول؛ و ذرات معلق و آمونیاک از طریق تنفس درونی و مرگ‌ومیر غیرشکاری بازگردانده می‌شود. نیتروژن آلی با نرخ معدنی شدن وابسته به دما به آمونیاک تبدیل می‌شود و سپس آمونیاک با نرخ نیتروژن‌زایی وابسته به اکسیژن و دما، به نترات تبدیل

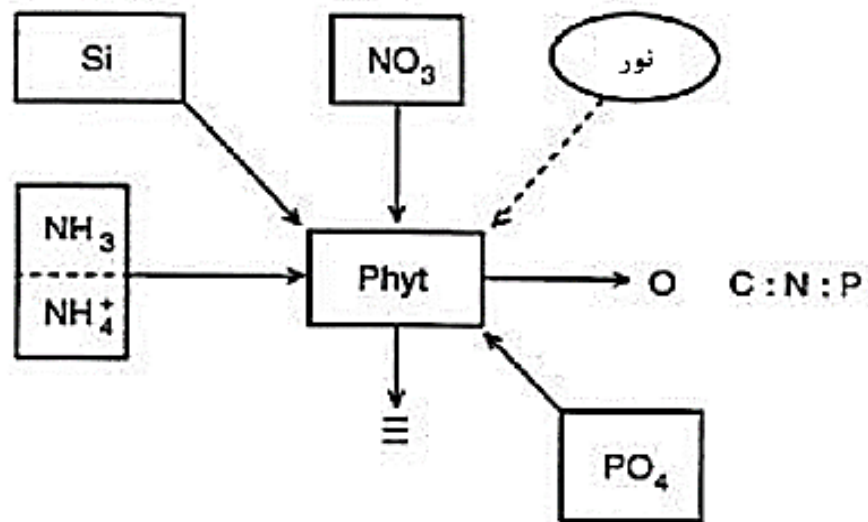
می‌شود. این امکان وجود دارد که نیترات در غیاب اکسیژن در یک دما و نرخ نیتروژن‌زدایی وابسته به اکسیژن به گاز نیتروژن تبدیل شود.

### ۸-۱-۳- اکسیژن محلول

اکسیژن حل‌شده با متغیرهای حالت دیگر نیز همراه می‌شود. هوادهی مجدد و تکامل توسط فیتوپلانکتون‌ها در طول رشد، جزء منابع اکسیژن در نظر گرفته شده هستند. مخزن‌های اکسیژن، تنفس جلبکی، اکسیداسیون کربن فرسایشی و مواد کربنی؛ حاصل از فاضلاب و تخلیه‌ی غیرنقطه‌ای و نیترات‌زایی هستند. این فرآیندها در فصل ۷ مورد بحث قرار گرفته‌اند.

### ۸-۱-۴- فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون

فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون‌ها نقش اصلی را در تغذیه‌گرایی ایفا کرده و بر تمام سیستم‌های دیگر تأثیر می‌گذارد. یک نمای کلی از این سیستم در شکل (۸-۲) نشان داده شده‌است.



$$\frac{\partial C_p}{\partial t} = (R_g - R_d - R_s) C_p$$

$$C_p = \text{غلظت فیتوپلانکتون} \quad (\text{mL}^{-3})$$

$$R_g = \text{نرخ رشد} \quad (T^{-1})$$

$$R_d = \text{مرگ و میر} \quad (T^{-1})$$

$$R_s = \text{ته‌نشینی} \quad (T^{-1})$$

شکل ۸ - ۲ فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون‌ها

ترم واکنش فیتوپلانکتون‌ها،  $S_{k4j}$ ، تفاوت بین نرخ رشد فیتوپلانکتون‌ها و مرگ آن‌ها و نرخ ته‌نشینی در حجم  $V_i$  مناسب در نظر گرفته می‌شود؛ یعنی:

$$S_{k4j} = (G_{p1j} - D_{p1j} - k_{s4j})P_j \quad (1-8)$$

$S_{k4j}$  = مدت واکنش، L-day / میلی گرم کربن،

$P_j$  = جمعیت فیتوپلانکتون، L / میلی گرم کربن،

$G_{p1j}$  = ثابت نرخ رشد،  $\text{day}^{-1}$ ،

$D_{p1j}$  = ثابت مرگ و تنفس در روز اول،  $\text{day}^{-1}$ ،

$K_{s4j}$  = ثابت نرخ بارگذاری،  $\text{day}^{-1}$ ،

$j$  = تعداد قطعه، بدون واحد.

زیرنویس ۱، مقادیر مربوط به فیتوپلانکتون نوع ۱ را مشخص می‌کند (تنها یک نوع در این مدل خاص در نظر گرفته می‌شود)؛ زیرنویس  $j$  به حجمی بودن عنصر در نظر گرفته شده، اشاره دارد. تعادل بین میزان رشد و نرخ مرگ و میر (همراه با انتقال، ته‌نشینی و اختلاط) میزان ایجاد توده‌ی فیتوپلانکتون را در عنصر حجمی  $V_j$  تعیین می‌نماید.

### ۸-۱-۵- رشد فیتوپلانکتون

نرخ رشد جمعیت فیتوپلانکتون‌ها در یک محیط طبیعی، عملکرد پیچیده‌ای از گونه‌های موجود فیتوپلانکتون‌ها و واکنش‌های متفاوت آن‌ها به تابش خورشید، دما و تعادل بین در دسترس بودن مواد مغذی و نیازهای فیتوپلانکتون‌ها می‌باشد. اطلاعات موجود برای تعیین فرآیند جنبشی رشد گونه‌های جلبکی در یک محیط طبیعی به اندازه کافی دقیق نیست. این مدل به جای در نظر گرفتن مشکل گونه‌های مختلف و نیازهای محیطی و مواد مغذی مرتبط با آن‌ها، جمعیت را توسط کل زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتون‌های موجود مشخص می‌نماید.

از کلروفیل  $a$  که متغیر تجمعی محسوب می‌شود، برای یک اندازه‌گیری ساده از کل زیست‌توده که مشخصه‌ی تمام فیتوپلانکتون‌ها می‌باشد، استفاده می‌گردد. مزیت اصلی این روش اندازه‌گیری مستقیم آن است؛ این روش انواع سلول‌ها و سن‌ها را با هم ادغام می‌کند و معیار زنده ماندن سلول‌ها به حساب می‌آید. عیب اصلی در این است که این روش یک اندازه‌گیری کلی و بدون هیچ‌گونه تمایزی از گروه‌های عملکردی می‌باشد (به عنوان مثال، دیاتومه‌ها، گیاهان سبز-آبی). هم‌چنین این اندازه‌گیری ضرورتاً برای وزن خشک گیاه یا واحد کربن مناسب نیست، زیرا با توجه به متغیر بودن نسبت کلروفیل به وزن خشک و متغیر و

غیرفعال بودن نسبت کربن، اندازه‌گیری کلروفیل (phaeopigment) باید بر اساس غلظت کلروفیل زنده و فعال باشد.

با توجه به مباحث ذکر شده، اندازه‌گیری کلی و ساده رضایت‌بخش نیست. در دسترس بودن گسترده‌ی داده‌های کلروفیل از نظر عملی و اساساً استفاده از آن برای اندازه‌گیری کلی جمعیت فیتوپلانکتون‌ها یا زیست‌توده برای واسنجی و صحت‌سنجی مناسب می‌باشد. برای انجام محاسبات داخلی، EUTRO از میزان کربن فیتوپلانکتون برای اندازه‌گیری میزان زیست‌توده جلبک استفاده می‌کند. با استفاده از مکانیسم ثابت یا متغیر کربن به کلروفیل (که قبلاً بحث شد)، ممکن است کلروفیل  $a$  فیتوپلانکتون به‌عنوان متغیر واسنجی و صحت‌سنجی، محاسبه و مورد استفاده قرار گیرد تا در مقایسه با داده‌های کلروفیل مشاهده‌ای به کار برده شود. با انتخاب واحدهای زیست‌توده‌ی ایجاد شده، ممکن است یک نرخ رشد که نرخ تولید زیست‌توده را به‌عنوان تابعی از متغیرهای محیطی مهم (دما، نور و مواد مغذی) بیان می‌دارد، توسعه یابد. نرخ ویژه‌ی رشد در بخش  $G_{PIj}$  مربوط به  $k_{1c}$ ، حداکثر نرخ رشد در  $20$  درجه سانتی‌گراد در نور و مواد مغذی بهینه می‌باشد که از طریق معادله زیر محاسبه می‌گردد.

$$G_{PIj} = k_{1c} X_{RIj} X_{RTj} X_{RNj} \quad (2-8)$$

$X_{RTj}$  = ضریب تنظیم دما، بدون بعد،

$X_{RIj}$  = عامل محدودکننده‌ی نور تابعی از  $I$ ،  $F$ ،  $D$  و  $K_e$  است، بدون بعد،

$X_{RNj}$  = فاکتور محدودیت مواد مغذی تابعی از فسفر و نیتروژن معدنی محلول (DIP و DIN) است، بدون بعد،

$T$  = دمای محیط،  $^{\circ}C$ ،

$I$  = تابع تابش خورشیدی،  $dy/day$ ،

$F$  = نور روز که تابعی از روز است، بدون بعد،

$D$  = عمق ستون آب یا قطعه مدل،  $m$ ،

$K$  = ضریب خاموشی کل نور،  $m^{-1}$ ،

DIP = فسفر معدنی حل شده (ارتو فسفات) موجود برای رشد،  $mg/L$ ،

DIN = نیتروژن معدنی محلول (آمونیاک به‌علاوه نترات) موجود برای رشد،  $mg/L$ ،

بر اساس مطالعات قبلی پویایی فیتوپلانکتون‌ها و براساس مقادیر گزارش‌شده‌ی مطالعات (مانند بوئی

و همکاران، ۱۹۸۵)، می‌توان یک تخمین اولیه از  $k_{1c}$  انجام داد و در پی آن، در طول فرآیند "واسنجی و



صحت‌سنجی " اصلاح کرد. این ثابت حداکثر نرخ‌رشد در طول شبیه‌سازی برای دمای محیط، نور و شرایط موادمغذی تنظیم شده‌است.

**دما** - دمای آب اثر مستقیمی بر نرخ‌رشد فیتوپلانکتون دارد. حداکثر نرخ‌رشد انتخاب‌شده، تصحیح دمای ستون آب با استفاده از متغیر مکانی و زمانی است که در مطالعات میدانی گزارش شده‌است. ضریب تصحیح دما با استفاده از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود:

$$X_{RTj} = \theta_{Ic}^{T-20} \quad (۳-۸)$$

$\bar{E}_{1c}$  = ضریب دما، بدون بعد.

**نور** - شدت‌نوری که فیتوپلانکتون‌ها در محیط طبیعی در معرض آن قرار می‌گیرند، در شدت‌های بالا و در سطح و نزدیک سطح مشترک آب و هوا می‌تواند منجر به بازدارندگی نوری شود، درحالی‌که در عمق زیر منطقه‌ی لایه‌ی نورگیر به دلیل کدورت طبیعی و از طریق وجود جلبک، برای فتوسنتز نور در دسترس نیست.

چارچوب‌های مدل‌سازی توسعه‌یافته توسط دی‌تورو و همکاران (۱۹۷۱) و اسمیت (۱۹۸۰) که بر روی تحلیل منحنی نور فرموله‌شده توسط استیل (۱۹۶۲) تعمیم داده شده‌است، اثرات شدت‌های نور بسیار زیاد و هم اثرات کاهش نور را در ستون آب نشان می‌دهد. کاهش نرخ‌رشد متوسط عمقی لحظه‌ای که توسط دی‌تورو توسعه داده‌شده، در معادله (۴-۸) نشان داده شده‌است و از طریق یکپارچه‌سازی نرخ ویژه رشد در عمق به دست می‌آید:

$$\bar{X}_{RI} = \frac{e}{K_e D} f \left[ \exp \left\{ -\frac{I_a}{I_s} \exp(-K_e D) \right\} - \exp \left( -\frac{I_a}{I_s} \right) \right] \quad (۴-۸)$$

$I_a$  = میانگین شدت‌نور تابشی در ساعات روز در زیر سطح زمین، به‌طور متوسط  $۰/۹ \text{ } \mu\text{mol}/\text{m}^2/\text{day}$  فرض شده‌است.

$I_s$  = شدت‌نور اشباع فیتوپلانکتون‌ها،  $\mu\text{mol}/\text{m}^2/\text{day}$

$K_e$  = ضریب خاموشی نور، از مجموع کاهش نور غیرجلبکی،  $K_e$  و کاهش خودسایه‌اندازی فیتوپلانکتون،  $K_{eshd}$  (همان‌طور که از راه معادله (۵-۸) محاسبه شده‌است)،  $\text{m}^{-1}$ :

$$K_{eshd} = 0/0088P_{chl} + 0/054P_{chl}^{0.67} \quad (۵-۸)$$

$P_{Chl} =$  غلظت کلروفیل فیتوپلانکتون،  $\mu\text{g/L}$ ؛

مقادیر بالای آسمان صاف و شدت نور سطحی برای عرض‌های جغرافیایی مختلف و ماه‌ها در جدول (۱-۸) فراهم شده‌است.

جدول ۱-۸ نمونه اشعه خورشیدی

عرض جغرافیایی	زمان روز	فصل				متوسط سالانه
		بهار	تابستان	پاییز	زمستان	
30°N	Mean <sup>-1</sup>	۶۸۰	۷۵۰	۵۳۰	۴۴۰	۶۰۰
	Mid-Day <sup>2</sup>	۲۱۰۰	۲۲۰۰	۱۷۰۰	۱۴۰۰	۱۹۰۰
40°N	Mean	۶۵۰	۷۴۰	۴۴۰	۳۲۰	۵۴۰
	Mid-Day	۱۹۰۰	۲۱۰۰	۱۴۰۰	۱۰۰۰	۱۶۰۰
50°N	Mean	۵۹۰	۷۱۰	۳۳۰	۱۹۰	۴۶۰
	Mid-Day	۱۷۰۰	۱۹۰۰	۱۰۰۰	۶۵۰	۱۳۰۰

۱. میانگین فصلی را در شرایط آسمان صاف محاسبه نموده که خود نشان‌دهنده‌ی حد بالای انرژی تابشی خورشیدی در سطح دریا می‌باشد. مرجع: ویست و آستل (۱۹۸۰).  
 ۲. mid-day در یک دوره‌ی ۲۴ ساعته با فرض کدورت جوی صفر مقدار آب قابل بارش ۲ سانتی‌متر و مقدار ازن جوی ۳۴ NTP افزایش یافت. مرجع: رایبسون (۱۹۶۶).  
 معادله (۴-۸) کاملاً شبیه به معادله‌ی توسعه‌یافته توسط اسمیت است، که یک گزینه می‌باشد و در این مدل نیز در دسترس می‌باشد:

$$\overline{X_{RI}}(t) = \frac{e}{K_e D} f \left[ \exp \left\{ -\frac{I_0}{I_s} \exp(-K_e D) \right\} - \exp \left( -\frac{I_0}{I_s} \right) \right] \quad (۶-۸)$$

که:

$$I_0(t) = \left( \frac{\pi I}{2f} \right) \text{SIN} \left( \frac{\pi t}{f} \right), \quad t = 0 - f \quad (۷-۸)$$

$$= 0 \quad t = f - I$$

و

$$I_s = \frac{k_{IC} X_{RT} \theta_c e}{\Phi_{max} K_c f u} \quad (۸-۸)$$

$I_0$  = متغیر زمانی شدت نور زیرسطح، با این فرض که در ساعات روز نیمی از تابع خطا را دنبال کند،  $dy/day$ ،  
 $\dot{O}_{max}$  = بازده کوانتوم،  $mg$  کربن ثابت شده در هر مول از کوانتوم نور جذب شده،

$K_c$  = ضریب کاهش در واحد کلروفیل،  $m^2/mg$  کلروفیل  $a$ ،

$K_e$  = ضریب کاهش نور، از مجموع کاهش نور غیرجلبکی،  $K_e$  و کاهش خودسایه‌اندازی فیتوپلانکتون،  
 $K_{eshd}$  (همان‌طور که توسط معادله (۹-۸) محاسبه شده است)،  $m^{-1}$ ،

$$K_{eshd} = K_c P_{chl} \quad (9-8)$$

$f_u$  = ضریب تبدیل واحدها ( $0.083$ )، با فرض این که  $43\%$  تابع نور مرئی و  $1$  مول از فوتون‌ها که معادل  
 $52,000 \text{ cal}$ ،  $m^{-2}-ly$  / مول فوتون،

$\dot{E}_c$  = نسبت کربن به کلروفیل در فیتوپلانکتون، میلی گرم کلروفیل  $a$  / میلی گرم کربن،

$e$  = پایه لگاریتم‌های طبیعی ( $2.71828$ )، بدون واحد،

معادلات (۹-۸) و (۶-۸) ضریب کاهش نور را نشان داده که در طول روز با تابش نور تغییر می‌نماید.

این عبارت به صورت عددی طی طول روز در برنامه کامپیوتری ادغام شده تا محدودیت نور میانگین روزانه  
 به دست آید:

$$\overline{X_{RI}} = \int_0^1 X_{RI}(t) dt \quad (10-8)$$

عبارت  $I_a$  پارامتر اشباع نور وابسته به دما در رابطه نور دی‌تورو ناشناخته می‌باشد و باید از طریق  
 فرآیند صحت‌سنجی-واسنجی تعیین گردد. این عبارت در فرمول اسمیت، توسط پارامترهایی محاسبه  
 می‌گردد که به‌طور منطقی در مقالات مستند شده‌اند. همان‌طور که اسمیت (۱۹۸۰) اشاره می‌نماید، از زمان  
 آزمایش‌های اولیه واربورگ و نگالین (۱۹۲۳)، حداکثر بازده کوانتومی فتوسنتز ( $\dot{O}_{max}$ ) برای طیف وسیعی  
 از شرایط، اندازه‌گیری شده است (توسط کوک، ۱۹۶۰ بررسی شد) و مقدار تقریباً مستقل از دمای  $0.08$  تا  
 $0.1$  مول اکسیژن به ازای هر مول فوتون جذب شده، در حال حاضر به‌طور گسترده ای، برای اندازه‌گیری  
 فتوسنتز گیاهان در آزمایشگاه پذیرفته گردیده است. بنیستر (۱۹۷۴)  $a$  برای پذیرش  $0.06$  مول کربن  
 ( $0.07$  مول  $O_2$ ) به ازای هر مول فوتون که حداکثر بازده برای پلانکتون‌ها در طبیعت شمرده می‌شود،  
 بحث‌های خوبی ارائه می‌دهد. مقادیر مربوط به  $K_c$  در گزارشات عموماً در محدوده  $0.01$  تا  $0.02$   
 ( $m^2 mg^{-1}$ ) قرار گرفته و به‌عنوان میانگین تقریبی پیشنهاد شده است.

ویژگی دوم در چارچوب مدل‌سازی به‌دست آمده از کار اسمیت، محاسبه نسبت متغیر کربن به کلروفیل  
 براساس این فرض می‌باشد که تغییرات در نسبت کربن به کلروفیل رخ می‌دهد تا سرعت رشد ویژه برای  
 شرایط محیطی نور و دما به حداکثر برسد. اسمیت دریافت که فیتوپلانکتون‌ها ترکیب کلروفیل را تنظیم

می‌نمایند به طوری که  $I_s$  تقریباً برابر با ۳۰٪ میانگین نور موجود است. عبارت به کاررفته برای محاسبه نسبت کربن به کلروفیل در معادله (۸-۱۱) نشان داده شده است.

$$\theta_c = 0.3 \cdot \frac{\Phi_{max} K_c f_u}{k_{Ic} X_{RT} e} \cdot I_a \left[ \frac{I - e^{-K_e D}}{K_e \cdot D} \right] \quad (11-8)$$

که در آن عبارت میانگین تابش خورشیدی روزانه در طول ساعات روز، بر اساس  $I_a$  ly/day است. توجه داشته باشید که با جایگزین کردن معادله (۴-۱۱) در (۴-۸) مقدار  $I_s$  برابر با ۳۰٪ میانگین نور در دسترس را خواهد داد.

مروری بر نسبت‌های کربن/کلروفیل گزارش شده در طبیعت (Eppley and Sloane, 1966) نشان می‌دهد که عوامل فیزیولوژیکی (بخشی از هزینه انرژی سنتز کلروفیل در مقایسه با دیگر ترکیبات سلولی) به منظور جلوگیری از این که  $\dot{E}_c$  خیلی کم‌تر از ۲۰ شود، حتی در نور خیلی کم نیز وارد عمل می‌شوند. این حد پایین ۲۰، در زمان تعیین یک مقدار برای  $\dot{E}_c$  در نظر گرفته شده است. مقادیر گزارش شده قبلی  $\dot{E}_c$  از مطالعات ترکیب جلبکی انجام شده توسط آزمایشگاه منطقه‌ای مرکزی سازمان حفاظت محیط زیست (CRL) در جدول (۴-۲)، با مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله (۴-۱۱) مقایسه شده‌اند. بررسی‌ها نشان می‌دهد که میان مقادیر محاسبه شده و اندازه‌گیری شده، یک مطابقت کلی وجود دارد. متأسفانه، هیچ‌گونه مطالعه‌ی ترکیب جلبک‌های زمستانی برای مقایسه در دسترس نمی‌باشد.

**مواد مغذی** - اثرات غلظت‌های مختلف مواد مغذی بر رشد فیتوپلانکتون‌ها مورد بررسی قرار گرفته است و نتایج کاملاً پیچیده است. برای اولین تخمین از تأثیر غلظت مواد مغذی بر نرخ رشد، فرض بر این است که جمعیت فیتوپلانکتون‌های مورد نظر از فرآیند جنبشی رشد موجود، با توجه به مواد مغذی مهم پیروی می‌کند. به عبارت دیگر، در حد مناسب از غلظت سطح تجمع، نرخ رشد در نرخ اشباع برای دمای محیط و شرایط نوری موجود ادامه می‌یابد. با این حال، در غلظت کم سطح تجمع، نرخ رشد به صورت خطی و متناسب با غلظت زیرلایه می‌شود. بنابراین، برای یک ماده مغذی با غلظت  $N_j$  بخش  $z^{th}$  عاملی که با آن نرخ رشد اشباع کاهش می‌یابد، عبارت است از:  $N_j / (K_m - N_j)$ . ثابت  $K_m$  غلظت ماده مغذی می‌باشد که در آن نرخ رشد، نصف نرخ رشد اشباع می‌باشد. به دلیل وجود دو ماده مغذی نیتروژن و فسفر، بیان میکائلیس-منتن برای فرم‌های غیرآلی حل شده هر دو ماده‌ی مغذی ارزیابی شده و حداقل مقدار برای کاهش نرخ رشد اشباع، همان‌طور که توسط معادله (۸-۱۲) نشان داده شده است، انتخاب می‌شود.

جدول ۸-۲ تخمین از تأثیر غلظت موادمغذی بر کربن/کلروفیل a

کربن/کلروفیل a a کربن/کلروفیل $\mu\text{g}/\mu\text{g C}$			
دوره‌ی نمونه برداری	متوسط مشاهده‌شده	دامنه مشاهده‌شده	دامنه پیش‌بینی شده
July 20-Oct. 6, 1970 <sup>1</sup>	۴۵	۲۵-۶۸	۲۴-۲۸
August 1-29, 1977 <sup>2</sup>	۲۸	۱۲-۳۷	۲۳-۲۶
Sept. 7-28, 1978 <sup>2</sup>	۲۱	۱۵-۲۷	۲۶-۳۰
Sept. 7-28, 1978 <sup>3</sup>		۲۶-۳۰	

۱. تجزیه و تحلیل عناصر جلبک‌های سبز-آبی،

۲. تجزیه و تحلیل عناصر آزمایشگاهی از جمعیت کل فیتوپلانکتون،

۳. تخمین ترکیب سلول بر اساس داده‌های میدانی،

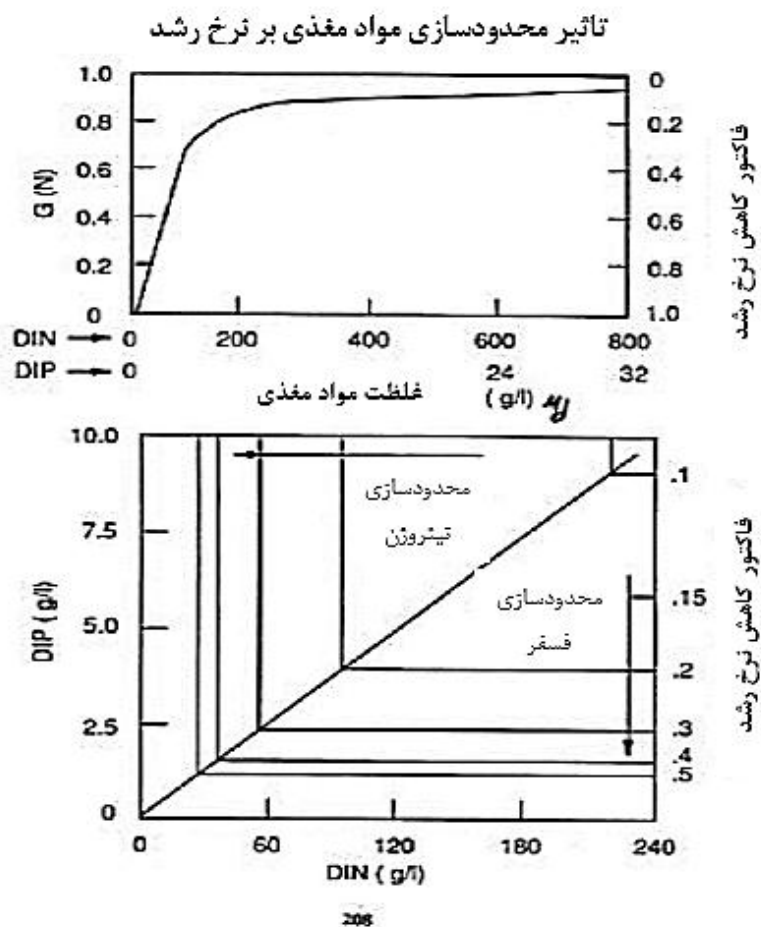
$$X_{RN} = \text{Min} \left( \frac{DIN}{K_{mN} + DIN}, \frac{DIP}{K_{mP} + DIP} \right) \quad (۱۲-۸)$$

تحت اختیار کاربر، ممکن است فرمول ضرب‌پذیر برای محدودیت موادمغذی انتخاب شود. این رابطه دو عبارت را در ۵/۱۲ ضرب می‌کند، ولی به‌طور کلی توصیه نمی‌شود.

شکل (۳-۸) نمودارهای  $G(N)$  و  $G(P)$  در مقابل DIN و DIP به‌ترتیب با  $(K_{mN} = 25 \mu\text{g} - N/L)$  و  $(K_{mP} = 1 \mu\text{g} - P/L)$  را نشان می‌دهد. نمودار بالایی منحنی پاسخ میکالیس-منتن استاندارد را به غلظت‌های مختلف موادمغذی غیرآلی نشان می‌دهد. همان‌طور که دیده می‌شود، تا زمانی که DIN کم‌تر از ۲۰۰ میکروگرم درلیتر (۰/۲ میلی‌گرم درلیتر) یا زمانی که DIP کم‌تر از ۸ میکروگرم درلیتر (۰/۰۰۸ میلی‌گرم درلیتر) باشد، هیچ کاهش قابل‌توجهی در نرخ‌رشد حاصل نمی‌گردد.

نمودار پایین‌تر در شکل (۳-۸) از یک مقیاس مغذی توسعه‌یافته استفاده کرده و رابطه میکالیس-منتن را با فرمت کمی متفاوت‌تر نشان می‌دهد. در این‌جا تأثیر عملکرد می‌تواند به آسانی ارزیابی شود؛ برای مثال، غلظت DIN یک محدوده‌ی خاص از بدنه‌ی آب ممکن است برابر با ۱۰۰ میکروگرم درلیتر داشته‌باشد. برای این‌که فسفر به ماده مغذی محدودکننده در همان موقعیت تبدیل شود، فسفر معدنی محلول باید به سطح ۴ میکروگرم یا کم‌تر برسد. همچنین باید توجه‌داشت که اگر کنترل‌های نیتروژن رو به بالا برقرار شوند، به‌طوری که DIN برای رسیدن به همان هدف به ۶۰ میکروگرم درلیتر کاهش یابد،

آن‌گاه کاهش بیش‌تر DIP به ۲/۵ میکروگرم در لیتر برای حفظ فسفر ماده‌ی مغذی محدودکننده مورد نیاز خواهد بود. به‌عبارت دیگر، با نزدیک‌شدن غلظت ستون آب DIP به سطوح محدودکننده‌ی رشد به دلیل کاهش مداوم در خروجی فسفر منبع نقطه‌ای، هر استراتژی کنترل نیتروژنی که ممکن است ایجاد شود، نیازمند سطوح اضافی حذف فسفر به‌منظور حفظ فسفر ماده‌ی مغذی محدودکننده است.



شکل ۸ - ۳ تأثیر محدودسازی مواد مغذی بر نرخ رشد

### ۸-۱-۶- مرگ فیتو پلانکتون ها

مکانیسم های متعددی پیشنهاد گردیده که به نرخ کاهش زیست توده ی فیتوپلانکتون ها کمک می نمایند: تنفس درونی، تغذیه توسط زئوپلانکتون های گیاه خوار و انگل زدایی. دو مکانیسم اول در مدل های قبلی برای دینامیک فیتوپلانکتون ها گنجانده و نشان داده شده است که اهمیت کلی دارند.

نرخ تنفس درونی فیتوپلانکتون ها، نرخ اکسید شدن کربن آلی آن ها به کربن دی اکسید در واحد وزن کربن آلی فیتوپلانکتون است. تنفس عکس روند فتوسنتز است و به همین ترتیب باعث کاهش زیست توده جمعیت فیتوپلانکتون می شود. اگر نرخ تنفس فیتوپلانکتون به طور کلی، بیش تر از نرخ رشد باشد، کاهش خالص کربن یا زیست توده فیتوپلانکتون وجود دارد.

میزان تنفس درون زا وابسته به دما است (رایلی و همکاران، ۱۹۴۹) و از طریق معادله (۸-۱۳) تعیین

می شود:

$$k_{IR}(T) = k_{IR}(20^{\circ}C)\theta_{IR}^{(T-20)} \quad (۸-۱۳)$$

$$k_{1R}(20^{\circ}C) = \text{تنفس درون زا در } 20^{\circ}C, \text{ day}^{-1}$$

$$k_{1R}(T) = \text{نرخ دمای اصلاح شده, day}^{-1}$$

$$\dot{E}_{1R} = \text{ضریب دما, بدون بعد.}$$

مقادیر گزارش شده ی تنفس درونی در ۲۰ روز از ۰/۰۲ (day<sup>-1</sup>) تا ۰/۶۰ (day<sup>-1</sup>) متفاوت است و بیش ترین مقدار آن بین ۰/۰۵ (day<sup>-1</sup>) و ۰/۲۰ (day<sup>-1</sup>) است. (Bowie et al., 1985) دی تورو و متیستیک (۱۹۸۰) مقدار ۱/۰۴۵ را برای  $\dot{E}_{1R}$  گزارش نمودند. نرخ کاهش زیست توده کل برای فیتوپلانکتون ها در بخش <sup>th</sup> از طریق معادله (۸-۱۴) بیان می شود:

$$D_{IG} = k_{IR}(T) + k_{ID} + k_{IG}Z(t) \quad (۸-۱۴)$$

$$D_{1j} = \text{نرخ کاهش زیست توده, day}^{-1}$$

$k_{ID} =$  میزان مرگ و میر، نشان دهنده ی تأثیر انگلی، یعنی عفونت سلول های جلبک توسط سایر میکروارگانیسم ها و مواد سمی مانند کلر باقیمانده، day<sup>-1</sup>

$$k_{1G} = \text{نرخ تغذیه فیتو پلانکتون در هر واحد جمعیت زئوپلانکتون, L/mgC-day.}$$

$$Z(t) = \text{جمعیت زئوپلانکتون های گیاه خوار از پلانکتون, mgC/L.}$$

توجه داشته باشید که دینامیک جمعیت زئوپلانکتون توسط کاربر توصیف شده است نه شبیه سازی. اگر نوسانات جمعیت در کنترل سطح فیتوپلانکتون ها در یک بدنه خاص آب مهم باشد، ممکن است کاربر

بخواهد زئوپلانکتون‌ها و تغذیه‌ی آن‌ها را شبیه‌سازی نماید. از سوی دیگر، بسیاری از مطالعات تنها به یک ثابت نرخ تغذیه‌ی مرتبه اول نیاز دارند که در آن نرخ تغذیه متناسب با سطوح فیتوپلانکتون در نظر گرفته می‌شود. در این حالت،  $k_{1G}$  می‌تواند روی ثابت مرتبه اول با  $Z(t)$  حذف‌شده (مقدار پیش فرض = ۱) تنظیم شود. نرخ تغذیه گزارش شده از ۰/۱ تا ۱/۵ ( $L/mgC-day$ ) متفاوت می‌باشد (Bowie et al., 1985).

### ۸-۱-۷- ته‌نشینی فیتوپلانکتون‌ها

تجمع فیتوپلانکتون‌ها نقش مهمی در مرگ‌ومیر کلی جمعیت آن‌ها به‌ویژه در دریاچه‌ها و آب‌های ساحلی اقیانوس‌ها دارد. مقادیر سرعت ته‌نشینی فیتوپلانکتون‌ها عمدتاً تحت شرایط آزمایشگاهی ساکن، از ۰/۰۷ تا ۱۸ متر در روز متغیر است. با این حال در برخی موارد سرعت ته‌نشینی صفر یا منفی می‌باشد. ته‌نشینی واقعی در آب‌های طبیعی یک پدیده پیچیده است که تحت تأثیر جریان متلاطم عمودی، گرادیان جرم‌مخصوص و حالت فیزیولوژیکی گونه‌های مختلف فیتوپلانکتون قرار می‌گیرد. اگرچه نرخ ته‌نشینی مؤثر فیتوپلانکتون‌ها تا حد زیادی در یک رودخانه نسبتاً کم‌عمق و یکنواخت به خاطر آشفتگی عمودی کاهش می‌یابد اما هنوز هم می‌تواند به مرگ‌ومیر کلی جمعیت جلبک کمک نماید. علاوه بر این، ته‌نشینی فیتوپلانکتون‌ها می‌تواند منبع موادمغذی مهمی برای رسوبات بوده و نقش مهمی در نیاز اکسیژنی رسوب ایفا نماید. در EUTRO، فیتوپلانکتون‌ها برابر با نوع جامد ۲ هستند. سرعت ته‌نشینی متغیر فیتوپلانکتون‌ها را می‌توان به وسیله‌ی کاربر و سپس با استفاده از میدان انتقال ۴، طبق رابطه زیر به دست آورد:

$$k_{s4j} = \frac{v_{s4ij}}{D_j} \quad (8-15)$$

$k_{s4j}$  = نرخ مؤثر ته‌نشینی یا تلفات فیتوپلانکتون‌ها،  $day^{-1}$

$v_{s4ij}$  = سرعت ته‌نشینی خالص آن‌ها از قطعه  $j$  به قطعه  $i$ ،  $m/day$

$D_j$  = عمق قطعه  $j$  معادل حجم/مساحت،  $m$

### ۸-۱-۸- خلاصه

موارد زیر مشخصات نرخ‌رشد و مرگ جمعیت فیتوپلانکتون‌ها را از نظر متغیرهای فیزیکی شامل نور، دما و غلظت موادمغذی موجود، کامل می‌کند. جدول (3-8) متغیرها و پارامترهای موجود در معادلات رشد خالص را خلاصه می‌کند. با این متغیرها که تابع زمانی شناخته می‌شوند، می‌توان کلروفیل فیتوپلانکتون‌ها را در طول سال محاسبه کرد.



جدول ۸ - ۳ شرایط رشد خالص فیتو پلانکتون‌ها

متغیرهای برون‌زا			
واحد	مقدار	نشانه‌گذاری	توصیف
$m^{-1}$	۰/۱-۵	$K_e$	ضریب انقراض
m	۰/۱-۳۰	D	عمق بخش
$^{\circ}C$	۰-۳۵	T	دمای آب
-	۰/۳-۰/۷	f	تابعی از روز که نور
langleys/day	۲۰۰-۷۵۰	$I_a$	میانگین تابش خورشیدی روزانه سطح
واحد	مقدار	نشانه‌گذاری	توصیف
mgC/L	۰	Z	ثابت نرخ زئوپلانکتون‌ها
واحد	مقدار	نشانه‌گذاری	توصیف
	۲/۰	$k_{1c}$	حداکثر نرخ رشد
none	۱/۰۶۸	$\hat{E}_{1c}$	ضریب دما
mg C/mole photon	۷۲۰/۰	$\ddot{O}_{max}$	حداکثر عملکرد کوانتومی فتوسنتزی
mg Chl a $m^2/$	۰/۰۱۷	$K_c$	کاهش خود-نور فیتوپلانکتون
-	۲۰-۵۰	$\hat{E}_c$	نسبت کربن و کلروفیل
langleys/day	۲۰۰-۵۰۰	$I_s$	شدت نور اشباع
$\mu g N/L$	۲۵/۰	$K_{mN}$	ثابت برای نیتروژن نیمه‌اشباع
$\mu g P/L$	۱/۰	$K_{mP}$	ثابت برای فسفر نیمه‌اشباع
$day^{-1}$	۰/۱۲۵	$k_{1R}$	تنفس درون‌زا
none	۱/۰۴۵	$\hat{E}_{1R}$	ضریب دما
m/day	۰/۱	$v_{s4}$	سرعت بارگذاری
$day^{-1}$	۰/۰۲	$k_{1D}$	نرخ عمق
L/mgC-day	۰	$k_{1G}$	نرخ رشد

به هر حال مواد مغذی به دلیل این که به جمعیت فیتوپلانکتون‌هایی که رشد می‌نمایند وابسته هستند، قابل شناخته‌شدن از قبل نیستند. این سیستم‌ها بهم وابسته بوده و نمی‌توانند به‌طور جداگانه تحلیل شوند. برای محاسبه‌ی کلروفیل که از طریق مجموعه‌ای از شرایط محیطی ایجاد می‌شود، لازم است توازن جرمی برای مواد مغذی و همچنین فیتوپلانکتون‌ها فرموله و تنظیم شود.

### ۸-۱-۹- استوکیومتری و درک فرآیند جنبشی

واحدهای جذب مواد مغذی/جرم جمعیت سنتز شده باید مشخص شود. برای کربن که واحد زیست‌توده‌ی جمعیت محسوب می‌شود، نسبت‌های مربوطه، جرم نیتروژن و فسفر در واحد جرم کربن هستند. انتخاب این نسبت‌ها که توسط دی‌تورو و همکاران (۱۹۷۱) ارائه شده است؛ نشان می‌دهد که دامنه‌ی تغییرپذیری آن‌ها کاملاً بزرگ است. بنابراین استفاده از نسبت‌های ثابت در تحلیل، سوال برانگیز خواهد بود.

بر اساس بررسی‌های پیش‌تر، به هر حال روشن است که دلیل تفاوت این نسبت‌ها، محتوای سلولی تفاوت مواد مغذی می‌باشد که به‌نوبه خود، تابعی از غلظت مواد مغذی خارجی و تاریخچه‌ی گذشته‌ی جمعیت فیتوپلانکتون‌ها می‌باشد. نسبت‌های بالای کربن به نیتروژن یا فسفر با مواد مغذی محدودکننده رشد متناظر است و نسبت‌های کوچک، مواد مغذی اضافی را منعکس می‌کنند. بنابراین با توجه به شرایط خاص می‌توان نسبت‌های مربوطه را انتخاب کرد.

نتیجه این انتخاب این است که استوکیومتری جمعیت تحت شرایط غیرمحدود ممکن است دست کم گرفته شود، اما تحت شرایط محدودکننده باید به درستی تخمین زده شود. بنابراین، احتمال عدم وجود تطابق در طول بخشی از سال در مقابل تخمین صحیح زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتون‌ها در طول دوره‌های محدودیت احتمالی در مواد مغذی، یک شرایط رفتاری در رسیدن به تعادل است. این مورد معمولاً دوره‌ی بحرانی محسوب می‌گردد و چون بیش‌تر سوالاتی که باید پاسخ داده شوند، معمولاً حساس به حداکثر جمعیت تابستان بوده، این انتخاب یک راهکار عملی است. مقایسه نسبت‌های کربن به نیتروژن و کربن به فسفر اندازه‌گیری شده در Estuary Potomac در جدول (۸-۴) ارائه شده است.

جدول ۸-۴- نسبت کربن به نیتروژن، نسبت کربن به فسفر

نسبت‌ها	کربن / فسفر mg P/mg C		کربن / نیتروژن mg N/mg C	
	مقدار میانگین مشاهده شده	دامنه مشاهده شده	مقدار میانگین مشاهده شده	دامنه مشاهده شده
دوره‌های نمونه برداری				
July 20-Oct. 6, 1970 <sup>1</sup>	۰/۰۲۳	۰/۰۱۰-۰/۰۴۶	۰/۲۶	۰/۱۰-۰/۴۸
August 1-29, 1977 <sup>2</sup>	۰/۰۲۴	۰/۰۱۲-۰/۰۲۸	۰/۲۴	۰/۱۵-۰/۳۶
Sept. 7-28, 1978 <sup>2</sup>	۰/۰۳۰	۰/۰۱۷-۰/۰۴۷	۰/۲۶	۰/۱۸-۰/۳۵
Sept. 7-28, 1978 <sup>2</sup>	۰/۰۳۱		۰/۲۶	
Model	۰/۰۲۵		۰/۲۵	

۱. تجزیه و تحلیل عناصر جلبک‌های سبز-آبی،

۲. تجزیه و تحلیل عناصر آزمایشگاهی از جمعیت کلی فیتوپلانکتون،

۳. تخمین ترکیب سلول بر اساس داده‌های میدانی.

پس از مشخص شدن نسبت‌های استوکیومتری، ممکن است معادلات تعادل جرم برای مواد مغذی تقریباً به همان روشی که برای زیست توده‌ی فیتوپلانکتون انجام می‌شود، نوشته شود. تعامل اولیه بین سیستم مواد مغذی و سیستم فیتوپلانکتون، کاهش یا انباشت مواد مغذی مرتبط با رشد فیتوپلانکتون است. یک برهم‌کنش ثانویه رخ می‌دهد که در آن سیستم فیتوپلانکتون به خاطر آزاد شدن نیتروژن و فسفر سلولی ذخیره شده در طول تنفس و مرگ جلبک، به عنوان منبع مواد مغذی عمل می‌کند.

## ۸-۲- چرخه فسفر

سه متغیر فسفر مدل سازی شده‌اند: فسفر فیتوپلانکتون، فسفر آلی و فسفر معدنی (ارتوفسفات). فسفر آلی به ذرات معلق و غلظت‌های محلول توسط شکل‌های متغیر مکانی حل شده تقسیم می‌شود. فسفر معدنی نیز به ذرات و غلظت‌های حل شده توسط شکل‌های متغیر مکانی حل شده تقسیم می‌شود که جذب را منعکس می‌کند. معادلات فسفر در شکل (۸-۴) خلاصه شده‌اند.

فسفر فیتوپلانکتون

$$\frac{\partial(C_4 a_{pc})}{\partial t} = \underbrace{G_{P1} a_{pc} C_4}_{\text{Growth}} - \underbrace{D_{P1} a_{pc} C_4}_{\text{Death}} - \underbrace{\frac{V_{S4}}{D} a_{pc} C_4}_{\text{Settle}}$$

فسفر آلی

$$\frac{\partial C_8}{\partial t} = \underbrace{D_{P1} a_{pc} f_{op} C_4}_{\text{Death}} - \underbrace{k_{83} \Theta_{83}^{(T-20)} \left( \frac{C_4}{K_{mPc} + C_4} \right) C_8}_{\text{Mineralization}} - \underbrace{\frac{V_{S3}(1-f_{DB})}{D} C_8}_{\text{Settle}}$$

فسفر غیرآلی

$$\frac{\partial C_3}{\partial t} = \underbrace{D_{P1} a_{pc} (1-f_{op}) C_4}_{\text{Death}} + \underbrace{k_{83} \Theta_{83}^{(T-20)} \left( \frac{C_4}{K_{mPc} + C_4} \right) C_8}_{\text{Mineralization}} - \underbrace{G_{P1} a_{pc} C_4}_{\text{Growth}}$$

شکل ۴-۸ معادلات چرخه فسفر

جدول ۵-۸ اصطلاحات واکنش فسفر

واحد	مقدار	نشانه‌گذاری	توصیف
mg C/L	-	$P_c$	زیست‌توده فیتوپلانکتون به‌عنوان کربن
day <sup>-1</sup>	(eq 5/2)	$G_{p1j}$	نرخ رشد ویژه فیتوپلانکتون
day <sup>-1</sup>	(eq 5/14)	$D_{p1j}$	نرخ تلف شدن فیتوپلانکتون
mg P/mg C	۰/۰۲۵	apc	نسبت فسفر به کربن
day <sup>-1</sup>	۰/۲۲	$k_{83}$	معدنی‌شدن فسفر محلول در دمای ۲۰ درجه سانتی‌گراد
none	۱/۰۸	$E_{83}$	ضریب دما
mg C/L	۱/۰	$K_{mPc}$	ثابت برای محدودیت فیتوپلانکتون‌های بازیافتی فسفر نیمه‌اشباع برای کاهش فیتوپلانکتون‌های بازیافتی فسفر
none	۰/۵	$f_{op}$	تجزیه فیتوپلانکتون‌های مرده و تنفس‌شده به مخزن فسفر آلی
none	۰/۵	$(1 - f_{op})$	بازیافت فسفر به مخزن فسفات
none	۰/۸۵ ۰/۷۰	$f_{D3}$	کسری از فسفر معدنی محلول در ستون آب
none	-	$f_{D8}$	کسری از فسفر آلی محلول
m/day	-	$V_{s3}$	سرعت بارگذاری موادآلی
m/day	-	$V_{s5}$	سرعت ته‌نشینی رسوب معدنی

### ۸-۲-۱- رشد فیتو پلانکتون‌ها

با رشد فیتوپلانکتون‌ها، فسفر معدنی حل‌شده جذب، ذخیره و به زیست‌توده اضافه می‌شود. برای هر میلی‌گرم کربن فیتوپلانکتون تولید شده، یک میلی‌گرم فسفر غیرآلی جذب می‌شود.

### ۸-۲-۲- مرگ فیتو پلانکتون‌ها

با تنفس و مرگ فیتوپلانکتون‌ها، زیست‌توده به موادآلی و معدنی غیرزنده بازیافت می‌شود. برای هر میلی‌گرم کربن فیتوپلانکتون که مصرف شده و یا از دست می‌رود یک میلی‌گرم فسفر آزاد می‌شود. کسری

از  $f_{op}$  به صورت مواد آلی می‌باشد، درحالی که  $(1 - f_{op})$  به شکل معدنی بوده و برای جذب توسط سلول‌های جلبکی زنده در دسترس است. در کار بر روی دریاچه‌های بزرگ، سهم  $(f_{op})$  ۵۰٪ بود (دی‌تورو و متیستیک، ۱۹۸۰).

### ۸-۲-۳- معدنی شدن

فسفر آلی غیرزنده باید قبل از استفاده توسط فیتوپلانکتون‌ها با معدنی شدن یا تجزیه باکتریایی به فسفر معدنی تبدیل شود. دی‌تورو و متیستیک (۱۹۸۰) در کار خود بر روی دریاچه هورون و خلیج ساگینو یک رابطه باز یافت مواد مغذی پیشنهاد کردند که تابعی از جمعیت فیتوپلانکتون‌های محلی بود. این پیشنهاد بر اساس تجزیه و تحلیل داده‌های میدانی موجود و کار دیگران بود (هندری، ۱۹۷۷؛ لو، ۱۹۷۶؛ هنریکی، ۱۹۳۸؛ منون، ۱۹۷۲؛ و رایو، ۱۹۷۶) که نشان می‌داد زیست‌توده‌ی باکتریایی با افزایش زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتونی افزایش می‌یابد. EUTRO از یک مکانیسم باز یافت اشباع، سازش بین فرآیند جنبشی مرتبه اول معمولی و مکانیزم باز یافت مرتبه دوم استفاده می‌کند که در آن نرخ باز یافت متناسب با زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتون است، همان‌طور که در مطالعات آزمایشگاهی کشت خالص، دانه باکتریایی نشان داده شده است (Jewell and McCarty, 1971).

هنگامی که  $P_c \ll K_{mpc}$  که در آن  $K_{mpc}$  ثابت نیمه‌اشباع برای باز یافت می‌باشد، باز یافت اشباع اجازه‌ی وابستگی مرتبه‌ی دوم در غلظت‌های کم فیتوپلانکتون را می‌دهد؛ به‌صورتی که فیتوپلانکتون تا حد زیادی از ثابت نیمه‌اشباع تجاوز کند. اساساً، اگر جمعیت فیتوپلانکتون‌ها کم باشد، این مکانیزم نرخ باز یافت را کند می‌کند اما اجازه نمی‌دهد که با افزایش فیتوپلانکتون به‌طور مداوم، افزایش یابد. فرض بر این است که در سطوح بالاتر جمعیت، فرآیند جنبشی باز یافت در حداکثر نرخ درجه‌ی اول پیش می‌رود. مقدار پیش‌فرض برای  $K_{mpc}$  صفر است که باعث می‌شود معدنی شدن با نرخ مرتبه اول خود در تمام سطوح فیتوپلانکتون پیش برود.

### ۸-۲-۴- جذب

عامل جذب-دفع بین فسفر غیرآلی حل شده و ذرات معلق در ستون آب وجود دارد. ته‌نشینی جامدات معلق به همراه فسفر غیرآلی جذب شده می‌تواند نقش یک مکانیزم تلفات قابل توجه در ستون آب را ایفا نماید و منبع فسفر در رسوب باشد. از آن‌جا که سرعت واکنش برای جذب-دفع (چند دقیقه) در مقابل سرعت واکنش برای سینتیک بیولوژیکی (روز) است، می‌توان فرضی برای متعادل نمودن واکنش ایجاد کرد. این واکنش تعادلی نشان می‌دهد که فازهای فسفر محلول ذره‌ای "به‌طور آنی" به هر منبع تخلیه‌ی فسفر، زائده

آن و یا فرسایش سطحی جامدات واکنش می‌دهند تا فسفر را با غلظت فاز "تبادل" محلول و جامدات خود دوباره توزیع کنند.

ثابت  $C_{DIP}$  را غلظت فسفر غیرآلی حل شده در ستون آب در نظر بگیرید. این ثابت با غلظت ذرات  $C_{PIP}$  به‌طور متقابل اثر می‌کند. این تعامل ممکن است یک فرآیند جذب-دفع با جامدات و یا یک فرآیند جذب-تخلیه با فیتوپلانکتون باشد. اگر کل جامدات معلق در نظر گرفته شوند، غلظت ذرات به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$C_{PIP} = C_{PIP}M \quad (۸-۱۶)$$

$C_{PIP}$  = غلظت فسفر جذب شده به مواد جامد، mg P/kg M

$M$  = غلظت مواد جامد، kg/L

فسفر معدنی کل، مجموع فسفر معدنی محلول و ذرات فسفر معدنی می‌باشد.

$$C_3 = C_{DIP} + C_{PIP} \quad (۸-۱۷)$$

همان‌طور که قبلاً ذکر شد، فرض اساسی "تبادل لحظه‌ای" بین فرآیندهای جذب-دفع می‌باشد. تعادل بین فسفر معدنی حل شده در ستون آب و غلظت جرم فسفر معدنی جامدها معمولاً برحسب ضریب تقسیم بیان می‌شود:

$$K_{PIP} = \frac{C_{PIP}}{C_{DIP}} \quad (۸-۱۸)$$

$K_{PIP}$  = ضریب تقسیم برای ذرات فسفر، (mg P/kg M) معادل (mg P/L)، یا (L/kg M).

جایگزینی معادله (۸-۱۸) در معادله ۸-۱۶:

$$C_{PIP} = K_{PIP} M C_{DIP} \quad (۸-۱۹)$$

معادله‌ی (۸-۱۹) بخش خطی ایزوترم لانگمیر می‌باشد. اگرچه این معادله، همیشه نشان‌دهنده‌ی شرایط واقعی نیست، اما وقتی غلظت فسفر جاذب بسیار کمتر از ظرفیت جذب نهایی جامدات باشد، یک تخمین منطقی می‌باشد. با ترکیب معادلات (۸-۱۷) و (۸-۱۹)، غلظت کل ممکن است به‌صورت زیر نشان داده شود:

$$C_3 = C_{DIP} + K_{PIP} M C_{DIP} \quad (۸-۲۰)$$

بخش‌های محلول و ذره‌ای می‌توانند به‌ترتیب بیان شوند:

$$f_{D3} = \frac{C_{DIP}}{C_3} = \frac{1}{1 + K_{PIP}M} \quad (21-8)$$

$$f_{P3} = \frac{C_{PIP}}{C_3} = \frac{K_{PIP}M}{1 + K_{PIP}M} \quad (22-8)$$

محدوده‌ی وسیعی از ضرایب تقسیم‌بندی در نوشته‌ها یافت می‌شود. تومان و فیتزپاتریک (۱۹۸۲) مقادیر بین ۱۰۰۰ تا ۱۶۰۰۰ را گزارش کردند. استفاده از محدوده‌ی ضرایب جداسازی از ۱۰۰۰ تا ۱۶۰۰۰ و محدوده‌ی مواد جامد غیرآلی از ۱۰ تا ۳۰ میلی‌گرم در لیتر در ستون آب منجر به محدوده‌ای در بخش فسفر ذره‌ای غیرآلی از ۰/۰۱ تا ۰/۳۳ می‌شود.

$$C_{DIPi} = f_{D3i}C_{3i} \quad (23-8)$$

$$C_{PIPi} = (1 - f_{D3i})C_{3i} \quad (24-8)$$

$C_{3i}$  = کل فسفر معدنی در بخش  $i$ ، mg/L

$f_{D3i}$  = کسری از کل فسفر معدنی اختصاص یافته به فاز حل شده در بخش  $i$

$C_{DIP,i}$  = تعادل فسفر معدنی حل شده در بخش  $i$ ، برای جذب جلیک موجود، mg/L

$C_{PIP,i}$  = تعادل جذب فسفر معدنی در بخش  $i$ ، که ممکن است از ستون آب به لایه‌ی رسوب برسد، mg/L

### ۸-۲-۵ - ته‌نشینی

ذرات فسفر آلی و معدنی باتوجه به سرعت و کسر ذرات توسط کاربر ته‌نشین می‌شوند. فسفر آلی جزئی یکسان با نوع جامد ۱ فرض خواهد شد که معرف موادآلی است. سرعت ته‌نشینی موادآلی متغیر با زمان و بخش  $V_{s3}$  می‌تواند توسط کاربر با استفاده از میدان انتقال وارد شود. شکل‌های محلول فسفر آلی متغیر  $f_{DBj}$  و رودی‌های با شرایط اولیه هستند. فسفر معدنی جزئی یکسان با نوع جامد ۳ فرض می‌شود که نشان‌دهنده‌ی رسوب غیرآلی می‌باشد. زمان و بخش متغیر سرعت ته‌نشینی فسفر غیرآلی  $V_{s5}$  می‌تواند با استفاده از میدان انتقال توسط کاربر وارد شود. شکل‌های محلول فسفر معدنی متغیر،  $f_{DS}$ ، ورودی با شرایط اولیه هستند.

### ۸-۳ - چرخه نیتروژن

چهار متغیر نیتروژن عبارتند از: نیتروژن فیتوپلانکتون، نیتروژن آلی، آمونیاک و نترات. یک خلاصه در شکل (۵-۸) نشان داده شده‌است. جدول (۵-۸) اصطلاحات مورداستفاده در فرآیند جنبشی سیستم نیتروژن را خلاصه می‌کند.



نیترژن فیتوبیولاکتون

$$\frac{\partial(C_4 a_{ne})}{\partial t} = \underbrace{G_{p1} a_{ne}}_{\text{Growth}} C_4 - \underbrace{D_{p1} a_{ne}}_{\text{Death}} C_4 - \frac{V_{s4}}{D} a_{ne} C_4$$

نیترژن آلی

$$\frac{\partial C_7}{\partial t} = \underbrace{D_{F1} a_{w}}_{\text{Death}} f_{en} C_4 - \underbrace{k_{71} \Theta_{71}^{(T-20)}}_{\text{Mineralization}} \left( \frac{C_4}{K_{m7c} + C_4} \right) C_1 - \frac{V_{s3}(1-f_{D1})}{D} C_1$$

نیترژن آمونیاک

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = \underbrace{D_{F1} a_{w}}_{\text{Death}} (1-f_{en}) C_4 + \underbrace{k_{71} \Theta_{71}^{(T-20)}}_{\text{Mineralization}} \left( \frac{C_4}{K_{m7c} + C_4} \right) C_7 - \underbrace{G_{F1} a_{w}}_{\text{Growth}} P_{NH3} C_4 + \underbrace{k_{12} \Theta_{12}^{(T-20)}}_{\text{Nitrification}} \left( \frac{C_6}{K_{m12} + C_6} \right) C_1$$

نیترژن نیترات

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = \underbrace{k_{12} \Theta_{12}^{(T-20)}}_{\text{Nitrification}} \left( \frac{C_6}{K_{m12} + C_6} \right) C_1 - \underbrace{G_{F1} a_{w}}_{\text{Growth}} (1-P_{NH3}) C_4 - \underbrace{k_{2D} \Theta_{12}^{(T-20)}}_{\text{Denitrification}} \left( \frac{K_{m23}}{K_{m23} + C_6} \right) C_2$$

$$P_{NH3} = C_1 \left( \frac{C_1}{(K_{m1} + C_1)(K_{m1} + C_1)} \right) + C_1 \left( \frac{K_{m1}}{(C_1 + C_1)(K_{m1} + C_1)} \right)$$

شکل ۵-۸ معادلات چرخه نیترژن

جدول ۸-۶ شرایط واکنش نیتروژن

مقدار از مدل Potomac Estuary			
واحد	مقدار	نشانه‌گذاری	توصیف
mg N/gm C	۰/۲۵	a <sub>NC</sub>	نسبت نیتروژن به کربن
day <sup>-1</sup>	۰/۰۷۵	k <sub>71</sub>	نرخ معدنی‌شدن نیتروژن آلی در ۲۰ درجه سانتی‌گراد
-	۱/۰۸	E <sub>71</sub>	ضریب دما
day <sup>-1</sup>	۰/۰۹-۰/۰۱۳	k <sub>12</sub>	نرخ نیتروژن‌زایی
mg O <sub>2</sub> /L	۱/۰۸	E <sub>12</sub>	ضریب دما
day <sup>-1</sup>	۲/۰	K <sub>NIT</sub>	ثابت نیمه‌اشباع برای اکسیژن محدودکننده نیتروژن‌زایی
-	۰/۰۹	k <sub>2D</sub>	نرخ نیتروژن‌زدایی در ۲۰ درجه سانتی‌گراد
-	۱/۰۴۵	E <sub>2D</sub>	ضریب دما
mg O <sub>2</sub> /L	۰/۱	K <sub>NO3</sub>	ثابت میکائیلز برای نیتروژن
-	۰/۵	f <sub>ON</sub>	کسری از فیتوپلانکتون‌های مرده و تنفس‌شده‌ی باز یافتی مخزن نیتروژن آلی
-	۰/۵	1 - f <sub>ON</sub>	کسری از فیتوپلانکتون‌های مرده و تنفس‌شده‌ی باز یافتی مخزن نیتروژن آمونیوم
-	eq.۵/۳۰	P <sub>NH3</sub>	اولویت شرایط جذب آمونیاک
-	۱/۰	f <sub>D7</sub>	کسری از نیتروژن آلی محلول
m/day	-	v <sub>S3</sub>	سرعت بارگذاری مواد آلی

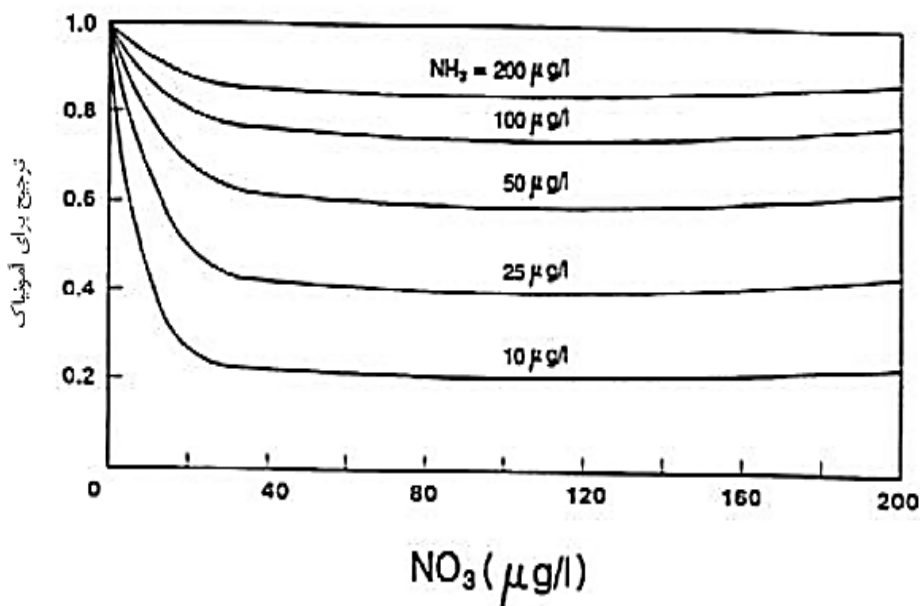
### ۸-۳-۱- رشد فیتوپلانکتون‌ها

با رشد فیتوپلانکتون‌ها، نیتروژن معدنی محلول جذب شده و به زیست‌توده اضافه می‌شود. برای هر میلی‌گرم کربن فیتوپلانکتون تولیدشده، a<sub>NC</sub> میلی‌گرم نیتروژن معدنی جذب می‌شود. آمونیاک و نترات

هر دو برای جذب و استفاده در رشد سلولی توسط فیتوپلانکتون‌ها در دسترس هستند، اما به دلایل فیزیولوژیکی، فرم ترجیحی آمونیاک نیتروژن می‌باشد. عبارت اولویت آمونیاک در شکل (۶-۸) نشان داده شده‌است.

### ساختار ترجیح آمونیاک

$$K_{mN} = 25 \mu\text{g/l}$$



شکل ۶-۸ ترجیح آمونیاک

رفتار این معادله برای مقدار مایکلس  $K_{mN}$ ، به میزان ۲۵ میکروگرم N/L، در شکل (۶-۸) نشان داده شده‌است. این معادله به مقادیر کم آمونیاک و یا نیترات بسیار حساس می‌باشد. برای غلظت معینی از

آمونیاک که با افزایش نیترات موجود در حد تقریباً بالاتری از محدوده‌ی مایکلس می‌باشد، اولویت آمونیاک به خط مجانب می‌رسد. هم‌چنین با افزایش غلظت آمونیاک موجود، سطح فلات در مقادیر نزدیک به مقدار واحد، یعنی اولویت کل آمونیاک کاهش می‌یابد.

### ۸-۳-۲- مرگ فیتو پلانکتون‌ها

با تنفس و مرگ فیتوپلانکتون‌ها، مواد آلی زنده به مواد آلی غیرزنده و معدنی بازیافت می‌شوند. برای هر میلی‌گرم از کربن مصرف‌شده یا ازدست‌رفته توسط فیتوپلانکتون‌ها،  $a_{NC}$  میلی‌گرم نیتروژن آزاد می‌شود. در طول تنفس و مرگ فیتوپلانکتون‌ها، کسری از نیتروژن بافت سلولی به شکل آلی بوده و این درحالی است که  $(1 - f_{on})$  به شکل معدنی نیتروژن آمونیاک می‌باشد. کسری که به مخزن غیرآلی برای مدل‌های دریاچه‌های بزرگ بازیافت می‌شود ۵۰٪ تعیین شده‌است (دی‌تورو و ماتیس‌تیک، ۱۹۸۰).

### ۸-۳-۳- معدنی‌شدن

نیتروژن آلی غیرزنده باید قبل از استفاده توسط فیتوپلانکتون‌ها معدنی شده و یا توسط باکتری به نیتروژن آمونیاک تجزیه شود. در EUTRO مرتبه اول، همان‌طور که در بخش معدنی‌شدن فسفر توضیح داده شد ثابت نرخ دمای تصحیح‌شده با یک دوره‌ی بازیافت اشباع تصحیح می‌شود. اگر جمعیت فیتوپلانکتون‌ها کم باشد، این امر مکانیسم سرعت معدنی‌شدن را کاهش می‌دهد، اما اجازه نمی‌دهد که با افزایش فیتوپلانکتون‌ها این نرخ به‌طور مداوم افزایش یابد. مقدار پیش‌فرض برای ثابت نیمه‌اشباع  $K_{mpc}$  صفر است که باعث می‌شود معدنی‌شدن با نرخ مرتبه‌ی اول خود در تمام سطوح فیتوپلانکتون پیش برود.

### ۸-۳-۴- ته‌نشینی

نیتروژن آلی با توجه به سرعت‌های مشخص‌شده توسط کاربر و بخش‌های ذره‌ای ته‌نشین می‌شود. ذرات نیتروژن آلی برابر با جامد نوع ۱ می‌باشند که نشان‌دهنده‌ی ماده آلی هستند. سرعت ته‌نشینی مواد آلی متغیر با زمان و بخش  $v_{s3}$ ، می‌تواند توسط کاربر و با استفاده از میدان انتقال ۳ وارد شود. شکل‌های محلول نیتروژن آلی متغیر  $f_{D7}$ ، ورودی با شرایط اولیه هستند.

### ۸-۳-۵- نیتروژن‌زایی

نیتروژن آمونیاک در حضور باکتری‌های نیترات‌ساز و اکسیژن به نیتروژن نیترات (نیتروژن‌زایی) تبدیل می‌شود. فرآیند نیتروژن‌زایی در آب‌های طبیعی توسط غنی‌سازهای هوازی انجام می‌شود. نیتروزوموناس و نیتروباکتر در آب‌های شیرین غالب هستند. نیتروژن‌زایی یک فرآیند دو مرحله‌ای است که توسط

باکتری‌های نیتروسوموناس که مسئول تبدیل آمونیاک به نیتريت و نیتروباکترها که مسئول تبدیل نیتريت به نیترات هستند، انجام می‌شود.

شرایط هوازی برای این فرآیند، ضروری می‌باشد. همچنین به نظر می‌رسد که این فرآیند تحت تأثیر مقادیر زیاد یا کم pH به‌ویژه برای pH زیر ۷ و بیش‌تر از ۹ که مانع رشد نیتروسوموناس می‌شود، قرار دارد. در طول دوره‌های جریان بالا یا پسماند متلاطم، باکتری‌های بالادست ممکن است با کمی تأخیر بعد از یک جریان گذرا و قبل از این که بتوانند دوباره به سطوح قابل توجهی برسند، به سمت پایین دست حرکت کنند. فرآیند نیتروژن‌زایی در آب‌های طبیعی، بسته به اکسیژن محلول، pH و شرایط جریان پیچیده است که به‌نوبه‌ی خود منجر به نرخ‌های متغیر زمانی و مکانی نیتروژن‌زایی می‌شود. توجیه درست این پدیده‌ی پیچیده در چارچوب مدل‌سازی دشوار بوده و به یک پایگاه داده نیاز دارد که معمولاً در دسترس نیست.

اصطلاح فرآیند جنبشی برای نیتروژن‌زایی در EUTRO شامل سه قسم است: ثابت نرخ مرتبه اول، بخش تصحیح دما و بخش تصحیح DO در قسمت پایین. بخش سوم نشان‌دهنده‌ی این موضوع می‌باشد که نرخ نیتروژن‌زایی با نزدیک شدن سطح DO به صفر، کاهش می‌یابد. ممکن است کاربر  $K_{NIT}$  ثابت اشباع و یا نیمه‌اشباع را مشخص کند که نشان‌دهنده‌ی سطحی از DO می‌باشد، که در آن نرخ نیتروژن‌زایی به نصف کاهش می‌یابد. مقدار پیش‌فرض صفر می‌باشد که اجازه می‌دهد تا این واکنش حتی در شرایط بی‌هوازی نیز کاملاً پیش برود.

### ۸-۳-۶- نیتروژن‌زدایی

نیتروژن‌زدایی به تبدیل  $NO_3$  (یا  $NO_2$ ) به  $NO_2$  و دیگر محصولات گازی مانند  $NO$  و  $NO_2$  اشاره دارد. این فرآیند توسط تعداد زیادی هتروتروف بی‌هوازی انجام می‌شود. در شرایط عادی با هوای موجود در ستون آب، این موجودات از اکسیژن برای اکسیداسیون موادالی استفاده می‌کنند. در شرایط بی‌هوازی موجود در بستر رسوب یا در شرایط اکسیژن بسیار کم در ستون آب، این موجودات قادر به استفاده از  $NO_3$  که گیرنده‌ی الکترون به شمار می‌روند، هستند.

فرآیند نیتروژن‌زدایی به‌سادگی که یک مخزن نیترات در چارچوب مدل‌سازی می‌باشد، گنجانده شده است. حالت جنبشی برای نیتروژن‌زدایی در EUTRO شامل سه بخش است: ثابت نرخ مرتبه‌ی اول، اصطلاح تصحیح دما، و اصطلاح تصحیح DO در قسمت پایین. دو بخش اول استاندارد هستند و بخش سوم نشان‌دهنده‌ی کاهش نرخ نیتروژن‌زدایی در سطوح DO بالاتر از صفر است. ثابت اشباع  $KNO_3$ ، نشان‌دهنده‌ی سطح DO است که در آن نرخ نیتروژن‌زدایی به نصف کاهش می‌یابد. مقدار پیش‌فرض صفر می‌باشد که از این واکنش در تمام سطوح DO جلوگیری می‌کند. نیتروژن‌زدایی در لایه‌ی رسوب که همیشه در شرایط بی‌هوازی وجود دارد، رخ می‌دهد.

## ۸-۴- تعادل اکسیژن محلول

پنج متغیر کیفیت در تعادل DO شرکت دارند: کربن فیتوپلانکتون، آمونیاک، نترات، اکسیژن بیوشیمیایی کربناته و اکسیژن محلول. یک خلاصه در شکل (۸-۱) نشان داده شده است. کاهش اکسیژن محلول نتیجه‌ی فرآیندهای تنفسی هوازی در ستون آب و فرآیندهای بی‌هوازی در رسوبات زیرین می‌باشد. این فرآیندها به‌طور قابل توجهی باهم مشارکت دارند و در نتیجه لازم است که عملکردشان به‌طور واضح فرموله شود.

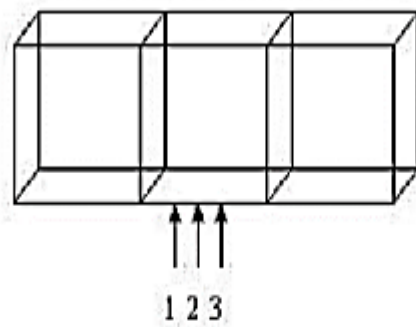
فرآیندهای اکسیژن محلول در EUTRO در فصل ۸ مورد بحث قرار گرفته‌اند. اصطلاحات واکنش CBOD و DO در جدول (۷-۱) خلاصه شده‌اند.

## ۸-۴-۱- اثرات متقابل لایه بنتیک-ستون آب

تجزیه‌ی موادالی در رسوبات کفزی می‌تواند اثرات عمیقی بر غلظت اکسیژن و موادمغذی در آب‌های پوشاننده داشته‌باشد. تجزیه‌ی موادالی، موادمغذی را به آب‌های میان‌بافتی رسوب وارد می‌کند و همچنین منجر به اعمال تقاضای اکسیژن در فصل مشترک آب-رسوب می‌شود. در نتیجه، شارهای ناشی از رسوب می‌تواند منبع مهم موادمغذی یا مخزن اکسیژن برای ستون آب پوشاننده باشد. علاوه بر این، بروز آنوکسی (کمبود اکسیژن) که بخشی از آن به دلیل تقاضای اکسیژن رسوب است، ممکن است به طرز چشم‌گیری باعث افزایش برخی از موادمغذی از طریق مجموعه‌ای از واکنش‌های پیچیده ردوکس شود که حالت و غلظت موادمغذی و فلزات مختلف را تغییر می‌دهد و از این طریق موادمغذی محدود را آزاد می‌کند. اهمیت نسبی تقاضای اکسیژن رسوب و شارهای موادمغذی در مقابل استراتژی‌های کنترل موادمغذی در آینده نیاز به ترکیب یک لایه رسوب پویا (فعال یا دینامیک) و فعل‌وانفعالات مربوط به آن با ستون آب در یک چارچوب را دارد که با آنچه در بخش‌های قبلی مورد بحث قرار گرفت، سازگار است.

EUTRO دو گزینه برای موادمغذی و شارهای اکسیژن فراهم می‌کند: محاسبات توصیفی ورودی و پیش‌بینی شده (شکل ۸-۷). گزینه‌ی اول فقط برای شبکه‌هایی که از بخش‌های ستون آب تشکیل شده‌اند، استفاده می‌شود. شارهای مشاهده‌شده‌ی متغیر فضایی باید برای آمونیاک، فسفات و اکسیژن موردنیاز رسوب مشخص شوند. توابع زمانی ممکن است برای آمونیاک و فسفات که تغییرات فصلی را منعکس می‌کنند، مشخص شوند. تغییرات فصلی در دمای آب می‌تواند SOD را از طریق ضریب دمایی آن تحت تأثیر قرار دهد.

### تبادل رسوب - آب



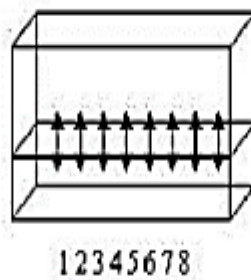
ستون آب

(۱) تشار آمونیاک

(۲) پار فسفات

(۳) بار اکسیژن محلول

$= +F_{NH_4}$	*	ناحیه سطحی	* IFNH
$= +F_{PO_4}$	*	ناحیه سطحی	* IFPO
$= -SOD$	*	ناحیه سطحی	* Theta



رسوب اعماق

شکل ۷-۸ تبادل رسوب-آب

## ۸-۴-۲- شبیه‌سازی لایه بنتیک

چارچوب محاسباتی ثبت شده برای تبادل لایه بنتیک-ستون آب عمدتاً از مطالعه‌ی دریاچه اری که تعاملات ستون‌های آب-رسوب را با هم ترکیب می‌کند، در نظر گرفته شده است که توسط دی‌تورو و کانولی (۱۹۸۰) انجام شد. برای یک لایه بستر سطحی با ضخامت  $D_j$ ، معادلات موازنه‌ی جرم نیتروژن و فسفر در شکل (۸-۸) و جدول (۷-۸) خلاصه شده‌اند. معادلات CBOD و DO بنتیکی در شکل (۷-۴) و جدول (۲-۷) در فصل قبل خلاصه شده‌اند.

نیتروژن آلی

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = k_{PZD} \Theta_{PZD}^{(\Gamma-20)} a_{nc} f_{on} C_4 - k_{OND} \Theta_{OND}^{(\Gamma-20)} C_7$$

Algal decomposition                      Mineralization

نیتروژن آمونیاک

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = k_{PZD} \Theta_{PZD}^{(\Gamma-20)} a_{nc} (1 - f_{on}) C_4 + k_{OND} \Theta_{OND}^{(\Gamma-20)} C_7$$

Algal decomposition                      Mineralization

نیتروژن نیترات

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = -k_{2D} \Theta_{2D}^{(\Gamma-20)} C_2$$

Denitrification

فسفر آلی

$$\frac{\partial C_8}{\partial t} = k_{PZD} \Theta_{PZD}^{(\Gamma-20)} a_{po} f_{op} C_4 - k_{OPD} \Theta_{OPD}^{(\Gamma-20)} f_{D3} C_8$$

Algal decomposition                      Mineralization

فسفر غیرآلی

$$\frac{\partial C_3}{\partial t} = k_{PZD} \Theta_{PZD}^{(\Gamma-20)} a_{po} (1 - f_{op}) C_4 + k_{OPD} \Theta_{OPD}^{(\Gamma-20)} f_{D3} C_8$$

Algal decomposition                      Mineralization

$$Flux_k = \frac{E_{DIF}}{D_j} (C_k f_k - C_k f_k)$$

(for both:  $e$  is amount, water is gram l)

شکل ۸-۸ معادلات مواد مغذی اعماق



جدول ۸ - ۷ ضرایب واکنش موادمغذی اعماق

مقدار حاصل از مطالعه Potomac Estuary			
واحد	مقدار	نشانه‌گذاری	توصیف
day <sup>-1</sup>	۰/۰۲	k <sub>PZD</sub>	نرخ تجزیه‌ی بی‌هوازی جلبک
none	۱/۰۸	É <sub>PZD</sub>	ضریب دما
day <sup>-1</sup>	۰/۰۰۰۴	k <sub>OND</sub>	نرخ تجزیه‌ی نیتروژن آلی
none	۱/۰۸	É <sub>OND</sub>	ضریب دما
day <sup>-1</sup>	۰/۰۰۰۴	k <sub>OPD</sub>	نرخ تجزیه‌ی فسفر آلی
none	۱/۰۸	É <sub>OPD</sub>	ضریب دما
none	-۰/۰۰۰۱ ۰/۰۴۵	f <sub>D3j</sub>	کسری از فسفر معدنی محلول در بستر
m <sup>2</sup> /day	۱۰ <sup>۲</sup> x ۲-۲/۵	É <sub>DIF</sub>	ضریب تبادل انتشار
m	۰/۱-۰/۳	D <sub>j</sub>	عمق لایه‌ی بنتیک
		i	لایه‌ی بنتیک
		j	ستون آب

WASP 6 یک پارامتر دقیق‌تر برای ته‌نشینی در اعماق دریا فراهم می‌کند، که نه تنها شامل یک سرعت ته‌نشینی رو به پایین است، بلکه شامل یک سرعت تعلیق رو به بالا نیز می‌شود. بنابراین در این زمینه، شار خالص ذرات به رسوب به دلیل تفاوت بین شار ته‌نشینی رو به پایین و شار احیای رو به بالا می‌باشد.

**عمق لایه‌ی بنتیک** - یکی از اولین تصمیماتی که در مورد لایه‌ی بنتیک گرفته می‌شود تعیین عمق آن است. دو عامل بر این تصمیم تأثیر می‌گذارند که اولین مورد آن انعکاس مناسب ضخامت لایه‌ی فعال می‌باشد، عمقی که در آن رسوب تحت تأثیر تبادل با ستون آب پوشاننده قرار می‌گیرد. در مرحله‌ی دوم مدل می‌خواهد اطلاعات قبلی در بازه زمانی معقول یا "حافظه" را در لایه‌ی رسوب اعمال کند. این مرحله در یک لایه‌ی بسیار نازک که برای موجودات کفزی لایه‌ی "نشان‌دهنده" می‌باشد و یا تحت تأثیر رسوب موادی قرار می‌گیرد که تنها در یک یا دو سال گذشته مورد تجزیه و تحلیل اتفاق می‌افتد و دیگری یک لایه‌ی ضخیم بوده که مدل آن را به صورت "متوسط" خیلی طولانی خواهد اعمال خواهد کرد، همانند

فسفر که کاهش قابل توجه فسفر رسوبی ناشی از کاهش تخلیه فسفر از تصفیه‌خانه‌های فاضلاب است. انتخاب ضخامت رسوب با نرخ رسوب متغیر مکانی پیچیده‌تر می‌شود. عمق لایه‌ی بنتیک، همراه با سرعت رسوب تعیین شده، زمان حبس چندساله یا "حافظه" را فراهم می‌کند که با توجه به گرادبان آب منفذی مشاهده شده، تقریب قابل قبولی از لایه‌ی فعال را فراهم می‌کند.

**نیتروژن بنتیک** - نکته بعدی استفاده از معادلات تعادل جرم برای گونه‌های نیتروژن در کاهش رسوب است (Berner, 1974) که با فعالیت باکتری در اعماق دریا به آمونیاک هیدرولیز می‌شود. علاوه بر آمونیاک تولید شده توسط هیدرولیز ذرات نیتروژن آلی در اعماق دریا، آمونیاک توسط تجزیه بی‌هوازی جلبک نیز تولید می‌شود. در مطالعه این واکنش، فوری و مک‌کارتی (۱۹۷۰) نشان دادند که سرعت تجزیه بی‌هوازی جلبک‌ها قابل توجه می‌باشد ( $0.022 \text{ day}^{-1} - 0.007$ ). با این حال، محصول نهایی در ابتدا فقط آمونیاک نیست. در عوض، بخشی از نیتروژن جلبکی، به ذرات نیتروژن آلی تبدیل می‌شود که قبل از تبدیل شدن به آمونیاک، باید آب‌کافت (هیدرولیز) شود.

آمونیاک تولید شده توسط آب‌کافت (هیدرولیز) نیتروژن آلی غیرجلبکی و تجزیه نیتروژن فرسایشی جلبک می‌تواند با ستون آب از طریق انتشار مبادله شود. به دلیل شرایط بی‌هوازی موجود در رسوب، نیتروژن‌زایی در رسوبات رخ نمی‌دهد. در صورتی که ممکن است نیتروژن‌زدایی تبدیل نترات به گاز نیتروژن رخ دهد. نترات در ساحل به دلیل تبادل نفوذی با ستون آب پوشاننده وجود دارد.

تجزیه و تحلیل غلظت‌های نیتروژن بنتیک و شار حاصل از آمونیاک نسبتاً ساده است. به دلیل ساده بودن فرآیند جنبشی: تجزیه بی‌هوازی آب‌کافت (هیدرولیز) و فروپاشی بی‌هوازی جلبک که یک محصول نهایی پایدار است، آمونیاک تولید می‌کند که تحت واکنش‌های بی‌هوازی بیش‌تری در رسوبات قرار نمی‌گیرد. معادلات حاصل از چارچوب بالا در شکل (۸-۸) نشان داده شده‌اند و ضرایب در جدول (۶-۱) خلاصه شده‌اند.

**فسفر بنتیک** - تجزیه و تحلیل کامل شارهای فسفر از رسوبات نیاز به محاسبات پیچیده و دقیق شیمی رسوب محلول و تعامل آن با انتقال جرم گونه‌های حل شده دارد. دو دلیل برای این امر وجود دارد: اول؛ کاملاً مشخص است که تشکیل فسفر رسوبات بر غلظت آب میان‌بافتی تأثیر می‌گذارد، در نتیجه بر انتقال آب میان‌بافتی گونه‌های مختلف فسفر نیز تأثیر می‌گذارد. (Nriagu, 1972) دوم؛ غلظت محلول تحت تأثیر واکنش‌های اکسایشی قرار می‌گیرد که به نوبه‌ی خود بر شارهای فسفری که در شرایط هوازی و بی‌هوازی رخ می‌دهند، تأثیر می‌گذارد. (شار فسفر تحت شرایط بی‌هوازی افزایش می‌یابد).

محاسبه‌ی رسوب شیمیایی محلول در خارج از محدوده‌ی این مدل بود. در عوض، یک رویکرد ساده اتخاذ شد که تا حد زیادی متکی بر تجربه بود. فرض بر این است که تجزیه بی‌هوازی فسفر جلبک با

استفاده از ترم‌های سرعت مشابه و ثابت‌های سرعت مشابه برای نیتروژن جلبک رخ می‌دهد و فسفر آلی و معدنی را تولید می‌کند. سپس تجزیه بی‌هوازی فسفر آلی ادامه می‌یابد. بخش متغیر محصول نهایی فسفر غیرآلی حل‌شده در آب میان‌بافتی باقی می‌ماند؛ به‌صورتی که در تشکیل رسوبات نقشی نداشته و توسط جامدات بنتیک نیز جذب نمی‌شود. این تغییر نشان‌دهنده‌ی ترکیب شیمیایی یونی موجودات کفزی در مناطق مختلف از قسمت‌های آب است.

با استفاده از مقادیر فسفر معدنی میان‌بافتی و فسفر مشاهده‌شده‌ی کل می‌توان کسر فسفر غیرآلی محلول را به روشی مشابه با فسفر غیرآلی ستون آب پوشاننده، برای هر گام زمانی از طریق معادله (۸-۳۰)، به هر بخش اختصاص داد (معادله ۸-۲۶). تبادل فسفر محلول با ستون آب نیز مشابه آمونیاک، نترات و اکسیژن محلول می‌باشد. معادلات شار جرم در شکل (۸-۸) نشان داده شده است. اثرات کمبود اکسیژن بر روی شار فسفر رسوبی در چارچوب مدل‌سازی گنجانده نشده است. اگرچه روشی که برای تولید شار فسفر رسوب به کار می‌رود به‌طور کامل رضایت‌بخش نیست، اما حداقل با چارچوبی که شار مواد دیگر در آن تولید می‌شود، سازگار است.

**کربن بنتیک** - واکنش‌هایی که کربن جلبکی و نسوز را به محصولات نهایی خود تبدیل می‌کنند، پیچیده هستند. به‌نظر می‌رسد مرحله‌ی اولیه‌ای که در آن جلبک و کربن نسوز به واسطه‌های واکنشی تبدیل می‌شوند، شبیه به تجزیه نیتروژن آلی و جلبکی نسوز است و در محاسبات بعدی، سرعت تجزیه‌ی کربن و نیتروژن برابر فرض می‌شود. این واسطه‌های واکنش‌پذیر در واکنش‌های بعدی نیز شرکت می‌کنند؛ برای مثال، اسیدهای فرار نسبت به تبدیل شدن به متان واکنش می‌دهند و مکانیسم‌هایی که این واکنش‌ها را کنترل می‌کنند، تاحدودی نامشخص هستند. علاوه بر این، اندازه‌گیری‌های کمی از این گونه‌های میانی دردسترس هستند و محاسباتی که غلظت‌های آن‌ها را به‌طور واضح در خود جای دهد، ضروری می‌باشد. بنابراین، یکی از آن‌ها از فرمول‌بندی ساده و درعین‌حال واقع‌بینانه‌ی این واکنش‌ها استفاده می‌کند.

روش پیشنهادشده توسط دی‌تورو و کونولی (۱۹۸۰) که در این‌جا برجسته شده است، براساس جداکردن واکنش‌های اولیه‌ای می‌باشد که موادآلی رسوبی را به واسطه‌های واکنشی و باقی‌مانده‌ی واکنش‌های ردوکس تبدیل می‌کند. در این روش دی‌تورو و کونولی، معادلات موازنه‌ی جرم را با استفاده از یک متغیر تبدیل و یک رابطه‌ی عمودی، استنتاج می‌کنند که مستقل از جزئیات معادلات ردوکس هستند. درعوض این معادلات تنها توابعی از غلظت جزء هستند که به محاسبه‌ی غلظت جزء کفایت می‌کنند، این معادلات می‌توانند دقیقاً به‌همان روش هر متغیر دیگری را در محاسبه‌ی انتقال جرم در نظر بگیرند.

انتخاب‌های مناسب اجزاء برای محاسبه‌ی پارامترهایی هستند که متغیرهای آبی کربن دار BOD و اکسیژن محلول را برابر می‌کنند. با این حال محدود کردن محاسبات به این اجزاء، امکان شمول صریح اثرات دیگرگونه‌های احیاشده مانند آهن، منگنز و سولفید را که در واکنش‌های ردوکس کلی نقش دارند و ممکن است در تولید تقاضای اکسیژن رسوب دخالت داشته‌باشند، حذف می‌کند. این ساده‌سازی با توجه به ماهیت اولیه محاسبات بنتیک منطقی به‌نظر می‌رسد.

واکنش‌های تجزیه‌ای که معادلات موازنه جرم را ایجاد می‌کنند، شامل: تجزیه‌ی بی‌هوازی کربن جلبکی و تجزیه‌ی بی‌هوازی کربن آلی بنتیک هستند. هر دو واکنش اکسیژن جذب می‌کنند و به سرعت غلظت آن را منفی می‌کنند و نشان می‌دهند که رسوب به جای اکسیدشدن، احیا می‌شود. غلظت‌های منفی محاسبه‌شده را می‌توان معادل اکسیژن محصولات نهایی از واکنش‌های زنجیره‌ای ردوکس که در رسوب رخ می‌دهد، در نظر گرفت.

از آن‌جا که غلظت اکسیژن محاسبه‌شده در آب پوشاننده مثبت است، فرض بر این است که گونه‌های کربن کاهش‌یافته (معادل‌های اکسیژن منفی) که در طول فصل مشترک آب-بنتیک منتقل می‌شوند با اکسیژن موجود ترکیب می‌شوند و با کاهش اکسیژن در ستون آب پوشاننده به  $\text{CO}_2$  و  $\text{H}_2\text{O}$  اکسیده می‌شوند.

معادلات تعادل جرم رسوب برای BOD و DO کربن دار، همراه با معادله تقاضای اکسیژن رسوبی، در شکل (۳-۳) و جدول (۳-۲) نشان داده شده‌اند.

## ۸-۵- پیاده‌سازی مدل

برای شبیه‌سازی غنی‌سازی با WASP 6، از پیش‌پردازنده برای ایجاد مجموعه‌داده‌ی ورودی EUTRO استفاده کنید. برای بخش‌هایی از مجموعه‌داده‌ها که محیط، انتقال و مرزها را توصیف می‌کنند، ورودی مدل EUTRO مشابه ورودی مدل ردیابی محفوظ است که در فصل ۵ توضیح داده‌شد. کاربرد ترکیبی از پارامترهای تبدیل و شاید نرخ‌های انتقال جامدات را به پارامترهای اساسی اضافه خواهد کرد. فرآیند جنبشی EUTRO را می‌توان با استفاده از همه یا برخی از فرآیندها و شرایط جنبشی که در بالا توضیح داده‌شد، برای تحلیل مشکلات غنی‌سازی اجرا کرد. برای راحتی، سه سطح پیچیدگی، در این‌جا شناسایی می‌شوند: (۱) فرآیند جنبشی غنی‌سازی ساده، (۲) فرآیند جنبشی غنی‌سازی میانی و (۳) فرآیند جنبشی غنی‌سازی میانی با ته دریا. لطفاً توجه داشته‌باشید که سطوح گسسته شبیه‌سازی که در این‌جا شناسایی شده‌اند در میان سلسله مراتبی از سطوح هستند که کاربر می‌تواند آن‌ها را اجرا کند.

سطوح اجرای سه‌گانه به‌طور خلاصه در زیر توضیح داده شده‌اند. همراه با پارامترهای ورودی موردنیاز برای حل معادلات غنی‌سازی در EUTRO، پارامترهای ورودی برای WASP 6 نیز در چهار بخش اصلی از پیش پردازنده، محیط، انتقال، مرزها و تبدیل آماده می‌شوند. به‌دلیل این‌که پارامترهای اصلی مدل، در فصل ۵ توضیح داده شده‌اند؛ در این‌جا تکرار نخواهند شد. هشت متغیر کیفیت مورد استفاده به‌صورت خلاصه در این متن، در جدول (۸-۸) فهرست شده‌اند.

جدول ۸ - ۸ خلاصه متغیرهای EUTRO

متغیر	غلظت	نشانه‌گذاری	واحد
نیتروژن آمونیاک	C <sub>1</sub>	NH <sub>3</sub>	mg N/L
نیتروژن نترات	C <sub>2</sub>	NO <sub>3</sub>	mg N/L
فسفر معدنی	C <sub>3</sub>	PO <sub>4</sub>	mg P/L
کربن فیتوپلانکتون	C <sub>4</sub>	PHYT	mg C/L
BOD کربن دار	C <sub>5</sub>	CBOD	mg O <sub>2</sub> /L
اکسیژن محلول	C <sub>6</sub>	DO	mg O <sub>2</sub> /L
نیتروژن آلی	C <sub>7</sub>	ON	mg N/L
فسفر آلی	C <sub>8</sub>	OP	mg N/L

### ۸-۶ - فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی ساده

فرآیند جنبشی غنی‌سازی ساده، رشد و مرگ فیتو پلانکتون‌ها را شبیه‌سازی می‌کند و این درحالی است که با یکی از چرخه‌های مواد مغذی تعامل دارد. رشد می‌تواند با در دسترس بودن نیتروژن غیرآلی یا فسفر غیرآلی و نور محدود شود. این معادلات شامل فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون‌ها هستند:

$$S_{k4} = \left( G_{PI} - D_{PI} - \frac{v_{s4}}{D} \right) C_4 \quad (25-8)$$

و یا چرخه فسفر:

$$S_{k8} = +D_{PI} \text{apc} C_4 - k_{83} \theta_{83}^{T-20} - \frac{v_{s3}}{D} (1 - f_{D8}) C_8 \quad (26-8)$$

$$S_{k3} = +k_{83} \theta_{83}^{T-20} C_8 - G_{PI} \text{apc} C_4 - \frac{v_{s5}}{D} (1 - f_{D3}) C_3 \quad (27-8)$$

یا چرخه نیتروژن:

$$S_{k7} = +D_{PI aNC}C_4 - k_{71} - \theta_{71}^{T-20}C_7 - \frac{V_{s3}}{D}(1 - f_{D7})C_7 \quad (28-8)$$

$$S_{ki} = +k_{71}\theta_{71}^{T-20}C_7 - G_{PI aPC}P_{NH3}C_4 - k_{12}\theta_{12}^{T-20}C_1 \quad (29-8)$$

$$S_{k12} = +k_{12}\theta_{12}^{T-20}C_1 - G_{PI aNC}(1 - P_{NH3})C_4 \quad (30-8)$$

که در آن  $S_{ki}$  عبارت منبع/مخزن برای متغیر "i" در یک بخش، در (mg/L-day) می‌باشد. ثابت‌های سرعت و ضرایب جنشی (سینتیک) در جداول (۵-۸)، (۴-۸) و (۳-۸) تعریف شده‌اند. فیتوپلانکتون‌ها همراه با سه متغیر نیتروژن و یا دو متغیر فسفر در شبیه‌سازی غنی‌سازی ساده استفاده می‌شوند. درحالی که فیتوپلانکتون‌ها به صورت کربن (mg/L) شبیه‌سازی می‌شوند؛ غلظت اولیه و غلظت مرزی توسط کاربر که کلروفیل a (mg/L) محسوب می‌شود، وارد EUTRO می‌شود. غلظت‌های ورودی با استفاده از نسبت کربن تعیین شده توسط کاربر به کلروفیل، به غلظت‌های داخلی تبدیل می‌شوند. اگر نسبت کربن به کلروفیل ورودی نباشد، از مقدار پیش‌فرض ۳۰ استفاده می‌شود. غلظت داخلی نیتروژن فیتوپلانکتون و فسفر فیتوپلانکتون از نسبت نیتروژن تعیین شده توسط کاربر به کربن و نسبت فسفر به کربن محاسبه می‌شود. اگر این نسبت‌ها ورودی نباشند، از مقادیر پیش‌فرض ۰/۲۵ و ۰/۰۲۵ استفاده می‌شوند.

در روش غنی‌سازی ساده فرض می‌شود که مرگ فیتوپلانکتون، نیتروژن و فسفر را به‌طور کامل به نیتروژن آلی و مخزن‌های فسفر آلی باز می‌گرداند. معدنی‌سازی؛ یک تابع درجه‌ی اول ساده می‌باشد که تحت‌تأثیر سطوح فیتوپلانکتون قرار نمی‌گیرد و همچنین نیتروژن‌زایی نیز یک تابع درجه‌ی اول ساده می‌باشد که تحت‌تأثیر اکسیژن محلول قرار نمی‌گیرد. کاهش نور توسط رابطه دی‌تورو، در معادله (۴-۸) توصیف شده‌است و کاربر باید درجه نور اشباع  $I_s$  را واسنجی کند.

اجزای ذرات ON و OP از طریق ته‌نشینی مواد آلی با میدان انتقال ۳ در ارتباط هستند. از طرفی شبیه‌سازی PHYT نیز با میدان انتقال ۴ مرتبط بوده و کسر ذرات  $PO_4$  با میدان انتقال ۵ و ته‌نشینی غیرآلی همراه می‌باشد.

### ۸-۶-۱- پارامترهای محیطی

این پارامترها ماهیت مدل پایه، تقسیم‌بندی و کنترل شبیه‌سازی را تعریف می‌کنند.

**سیستم‌ها** - "simulate" را برای PHYT و ON،  $\text{NH}_3$  و  $\text{NO}_3$  یا OP و  $\text{PO}_4$  انتخاب کنید. برای مواد مغذی شبیه‌سازی نشده "constant" و برای CBOD و DO "bypass" را انتخاب کنید. در طول واسنجی، کاربر ممکن است "constant" یا "bypass" را برای هر متغیر انتخاب شده انتخاب کند. **بخش‌ها** - بخش‌های ستون آب باید به روش استاندارد تعریف شوند. اگر قرار باشد این تنظیمات شبیه‌سازی شوند (به‌عنوان مثال برای ON، OP، PHYT یا  $\text{PO}_4$ )، کاربر باید یک بخش بنتیک منفرد را که شامل تمام بخش‌های ستون آب است، اضافه کند. این بخش بنتیک صرفاً به‌عنوان یک مخزن مناسب برای ته‌نشینی موادالی عمل خواهد کرد. محاسبات مدل در این بخش بنتیک باید نادیده گرفته شود.

### ۸-۶-۲ - پارامترهای انتقال

این گروه از پارامترها انتقال، جابه‌جایی و پراکنده‌گی متغیرهای مدل را تعریف می‌کنند. **شماره میدان‌های جریان** - برای شبیه‌سازی ته‌نشینی ON و OP، کاربر باید جریان مواد جامد ۱ را حین تغییر انتخاب کند. برای شبیه‌سازی ته‌نشینی PHYT، کاربر باید جریان جامدات ۲ و برای شبیه‌سازی ته‌نشینی  $\text{PO}_4$ ، جریان جامدات ۳ را انتخاب کند. همچنین کاربر باید جریان ستون آب را انتخاب کند.

**انتقال ذرات،  $\text{m}^3/\text{day}$**  - متغیر زمان ته‌نشینی و نرخ احیای مجدد برای جامدات ۱، جامدات ۲ و جامدات ۳ می‌تواند ورودی با استفاده از آرایه پیوستگی BQ و تابع زمان QT باشد. برای هر میدان جریان جامدات، مساحت تبادل مقطع (مترمربع) برای جفت‌های قطعه‌ی مجاور ورودی با استفاده از BQ متغیر مکانی است. سرعت‌های ته‌نشینی متغیر با زمان را می‌توان به‌صورت یک سری سرعت متر بر ثانیه برای متغیر زمان مشخص کرد. اگر ضریب تبدیل واحدها روی  $1/157 \text{ e-}5$  تنظیم شده باشد، آن‌گاه این سرعت‌ها، ورودی واحدهای متر بر روز هستند. این سرعت‌ها در نواحی مقطعی چندبرابر می‌شوند و به‌عنوان جریان‌هایی در نظر گرفته می‌شوند که ذرات موادالی را از ستون آب حمل می‌کنند.

### ۸-۶-۳ - پارامترهای مرزی

این گروه از پارامترها شامل غلظت‌های مرزی، بارهای پسماند و شرایط اولیه هستند. غلظت‌های مرزی باید برای هر بخش که ورودی‌ها، خروجی‌ها یا تبادلات جریان را دریافت می‌کند، مشخص شود. شرایط اولیه نه تنها شامل غلظت‌های اولیه بوده، بلکه شامل میدان انتقال جرم و جامدات برای هر جامد و کسر حل در هر بخش نیز می‌شود.

**غلظت مرزی، mg/L -** در هر بخش مرزی، غلظت متغیر زمانی باید برای PHYT که به صورت میکروگرم کلروفیل a بیان می‌شود، مشخص شود. غلظت متغیر زمان نیز باید برای ON، NH<sub>3</sub> و NO<sub>3</sub> یا OP و PO<sub>4</sub> مشخص شود. یک بخش مرزی با استفاده از تبادل آب خارج از شبکه از جمله جریان‌های فرعی، جریان‌های خروجی پایین دست و تبادل باز پخش آب مشخص می‌شود.

**تخلیه بارهای پسماند، kg/day -** برای هر بار تخلیه‌ی منبع نقطه‌ای، بار متغیر زمانی PHYT، ON، NH<sub>3</sub> و NO<sub>3</sub> یا OP و PO<sub>4</sub> را می‌توان مشخص کرد. این بارها می‌توانند نشان‌دهنده‌ی تخلیه‌ی فاضلاب‌های شهری و صنعتی، یا رواناب شهری و کشاورزی باشند. هرگونه بار فیتوپلانکتونی که مشخص شود، باید در واحد کیلوگرم کربن در روز باشند.

**میدان انتقال مواد جامد -** زمینه‌های مرتبط با ته‌نشینی ذرات باید در شرایط اولیه مشخص شوند. مواد جامد ۱ (بخش ۳) برای ON و OP، مواد جامد ۲ (بخش ۴) برای PHYT، و جامدات ۳ (بخش ۵) برای PO<sub>4</sub> توصیه می‌شود.

**جرم مخصوص مواد جامد، g/m<sup>3</sup> -** مقدار ۰ را می‌توان برای جرم مخصوص اسمی PHYT، ON، NH<sub>3</sub> و NO<sub>3</sub> یا OP و PO<sub>4</sub> وارد کرد. این اطلاعات در EUTRO استفاده نمی‌شود.

**غلظت‌های اولیه، mg/L -** غلظت PHY، که به صورت میلی‌گرم بر لیتر کلروفیل a و یا به صورت ON، NH<sub>3</sub> و NO<sub>3</sub> یا OP و PO<sub>4</sub> بیان می‌شود، باید برای زمانی که شبیه‌سازی شروع می‌شود، در هر بخش مشخص شود. همچنین غلظت متوسط برای مواد مغذی شبیه‌سازی نشده که ثابت نگه‌داشته می‌شوند، نیز باید مشخص شود. این غلظت‌های مواد مغذی در طول شبیه‌سازی ثابت باقی می‌مانند و می‌توانند از طریق محدودیت نرخ‌رشد (اگرچه شبیه‌سازی نشده‌است) بر PHYT تأثیر بگذارند. مواد مغذی باید بیش از حد باشند و در نتیجه رشد را تحت تأثیر قرار ندهند. غلظت صفر برای bypassed متغیرهای CBOD و DO توسط پیش‌پردازنده وارد خواهد شد.

**کسر محلول -** کسر حل شده PHYT، برای ON، NH<sub>3</sub> و NO<sub>3</sub> یا OP و PO<sub>4</sub> در هر بخش باید مشخص شود. کسر محلول PHYT باید روی صفر تنظیم شود، و این درحالی‌است که ذرات ریز موجود در مواد مغذی در معرض ته‌نشینی قرار دارند.



### ۸-۶-۴- پارامترهای تبدیل

این گروه از پارامترها شامل پارامترهای متغیر مکانی، ثابت‌ها و توابع زمان جنبشی، برای اجزای کیفیت آب در حال شبیه‌سازی هستند. مقادیر پارامترها برای هر بخش وارد می‌شوند؛ به‌صورتی که مقادیر مشخص برای ثابت‌ها روی کل شبکه برای کل شبیه‌سازی اعمال می‌شوند. توابع زمانی فرآیند جنبشی از یک سری مقادیر در مقابل زمان در روزها تشکیل شده‌اند.

**دمای آب، °C** - بخش متغیر زمان و دمای آب را می‌توان با استفاده از پارامترهای TMPSG و TMPFN و توابع زمانی TEMP (۱-۴) مشخص کرد. اگر دما در زمان ثابت بماند، آن‌گاه کاربر باید دمای بخش را با استفاده از پارامتر TMPSG وارد کرده و دو پارامتر دیگر TMPFN و TEMP (۱-۴) را حذف کند.

اگر کاربر بخواهد درجه حرارت متغیر زمانی را وارد کند، باید مقادیر پارامتر TMPSG را بر روی ۱ تنظیم کند. پارامتر TMPFN نشان می‌دهد که تابع دما توسط مدل برای هر بخش استفاده خواهد شد. همچنین این پارامتر نشان می‌دهد که کدام تابع دما توسط مدل برای هر بخش استفاده خواهد شد. مقادیر ۱، ۲، ۳ یا ۴ به ترتیب توابع زمانی، TEMP(1)، TEMP(2)، TEMP(3) و TEMP(4) را فراخوانی می‌کنند. سپس دمای آب باید از طریق این توابع زمانی در مقابل مقادیر زمانی وارد شود. توابع TMPSG و TEMP، بخش و زمان دمای ویژه‌ی آب مورد استفاده توسط EUTRO را می‌دهند. TMPSG و TMPFN به ترتیب به پارامترهای ۳ و ۴ در EUTRO شناسایی شده‌اند. TEMP (۱-۴) به عنوان توابع زمانی (۱-۴) در EUTRO شناسایی می‌شوند.

**تابش خورشیدی، langleys/day** - متغیر زمانی تابش خورشیدی در سطح آب را می‌توان با استفاده از توابع زمانی ITOT و FDAY توصیف کرد. مقادیر متغیر فصلی تابش خورشیدی در سطح را می‌توان با استفاده از ITOT و یک سری مقادیر تابش در برابر مقادیر زمانی وارد کرد. FDAY تابع تغییر فصل از روز که نور روزانه را می‌دهد و به‌صورت یک سری تابع در برابر مقادیر زمانی وارد می‌شود. EUTRO از خارج قسمت ITOT/Fday برای میانگین شدت تابش در ساعات روز استفاده می‌کند.

**کاهش نور، m<sup>-1</sup>** - زمان و بخش ضرایب متغیر کاهش نور را می‌توان با استفاده از پارامترهای KESG، KEFN و توابع زمانی KE (۱-۵) مشخص کرد. اگر ضرایب کاهش در زمان ثابت باقی‌بمانند، آن‌گاه کاربر باید ضرایب بخش را با استفاده از پارامتر KESG وارد کند. پارامترهای KEFN و KE (۱-۴) نیز باید حذف گردد.

اگر کاربر بخواهد ضرایب متغیر زمانی کاهش نور را وارد کند، آن‌گاه مقادیر پارامتر KESG باید روی ۱ تنظیم و برای هر بخش از مدل استفاده شود. مقادیر ۱، ۲، ۳، ۴، یا ۵؛ توابع KE(1)، KE(2)، KE(3)، KE(4) و KE(5) را به ترتیب فرا خواهند خواند. سپس ضریب کاهش نور باید از طریق این توابع زمانی در برابر مقادیر زمانی وارد شود. خروجی KESG و تابع KE انتخاب شده، ضرایب زمان کاهش نور مورد استفاده توسط EUTRO را خواهد داد.

KESG و KEFN به ترتیب به پارامترهای ۵ و ۶ در EUTRO شناسایی می‌شوند. KE (۱-۴) نیز در EUTRO به توابع زمانی (۸-۱۲) شناسایی می‌شوند.

**نرخ رشد day<sup>-1</sup>** - حداکثر ثابت نرخ رشد فیتوپلانکتون و ضریب دما را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های K1C و K1T وارد نمود.

**نسبت کربن به کلروفیل، mg C/mg Chl** - میانگین نسبت وزن کربن به کلروفیل در فیتوپلانکتون‌ها را می‌توان با ثابت CCHL مشخص نمود. مقدار پیش فرض ارائه شده برای این نسبت در EUTRO، ۳۰ می‌باشد.

**کاهش نور** - نور موجود با استفاده از توابع زمانی که نور فصلی را در سطح آب و ضرایب متغیر- زمانی کاهش نور را توصیف می‌کنند، مشخص می‌شود. این موارد در بالا توضیح داده شده‌اند. گزینه‌ی کاهش نور دی‌تورو را می‌توان با استفاده از مقدار ۱ برای LGHTS تعیین کرد. سپس شدت نور اشباع را می‌توان با استفاده از ثابت IS1 مشخص کرد. مقادیر پیش فرض برای LGHTS و به ترتیب ۱ و ۳۰۰ هستند.

**نرخ تنفس، day<sup>-1</sup>** - متوسط ثابت نرخ تنفس فیتوپلانکتون‌ها و ضریب دما می‌تواند به ترتیب با استفاده از ثابت‌های K1RC و K1RT ورودی باشد.

**نرخ مرگ، day<sup>-1</sup>** - ثابت نرخ مرگ فیتوپلانکتون‌های غیرشکاری را می‌توان با استفاده از ثابت K1D وارد نمود. این درحالی‌است هیچ‌گونه وابستگی دمایی فرض نمی‌شود.

**نسبت فسفر به کربن، mg P/mg C** - میانگین نسبت وزن فسفر به کربن در فیتوپلانکتون‌ها را می‌توان با استفاده از ثابت PCRB مشخص نمود. مقدار پیش فرض EUTRO برای PCRB برابر با ۰/۰۲۵ می‌باشد.

**نرخ معدنی شدن فسفر، day<sup>-1</sup>** - ثابت نرخ معدنی شدن و ضریب دما برای فسفر آلی حل شده را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های K83C و K83T مشخص نمود.

**ثابت فسفر نیمه‌اشباع  $\text{mg P/L}$**  - می‌توان این ثابت را با استفاده از  $\text{KMPG1}$  برای رشد فیتوپلانکتون‌ها مشخص شود. وقتی غلظت فسفر غیرآلی در این سطح است، نرخ رشد فیتوپلانکتون‌ها به نصف کاهش می‌یابد.

**نسبت نیتروژن به کربن،  $\text{mg N / mg C}$**  - متوسط نسبت نیتروژن به کربن در فیتوپلانکتون‌ها را می‌توان با ثابت  $\text{NCRB}$  مشخص نمود. مقدار پیش فرض  $\text{EUTRO}$  برای  $\text{NCRB}$  برابر با  $0.25$  نمود. **نرخ معدنی‌شدن نیتروژن،  $\text{day}^{-1}$**  - ثابت نرخ معدنی‌شدن و ضریب دما برای نیتروژن آلی حل شده را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های  $\text{K71C}$  و  $\text{K71T}$  مشخص نمود.

**نرخ نیتروژن‌زایی،  $\text{day}^{-1}$**  - ثابت نرخ نیتروژن‌زایی و ضریب دما برای نیتروژن آمونیاک حل شده را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های  $\text{K12C}$  و  $\text{K12T}$  مشخص نمود.

**ثابت نیتروژن نیمه‌اشباع،  $\text{mg N / L}$**  - ثابت نیتروژن نیمه‌اشباع برای رشد فیتوپلانکتون‌ها را می‌توان با استفاده از  $\text{KMNG1}$  مشخص نمود. هنگامی که غلظت نیتروژن معدنی در این سطح قرار دارد، سرعت رشد فیتوپلانکتون به نصف کاهش می‌یابد. همان‌طور که در شکل‌های (۸-۵) و (۸-۶) اشاره شده‌است، این پارامتر بر ترجیح آمونیاک  $\text{P}_{\text{NH}_3}$  نیز تأثیر می‌گذارد. زمانی که  $\text{KMNG1} = 0$  می‌باشد مقدار  $\text{P}_{\text{NH}_3}$  نیز برابر با  $1/0$  می‌باشد، اما هنگامی که  $\text{KMNG1}$  بسیار بزرگ می‌شود، مقدار  $\text{P}_{\text{NH}_3}$  نیز به  $\text{C}_1/\text{C}_1 + \text{C}_2$  نزدیک می‌شود.

## ۷-۸ - فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی میانی

فرآیند جنبشی غنی‌سازی ساده، رشد و مرگ فیتوپلانکتون‌های در حال تعامل با چرخه‌ی نیتروژن و فسفر و تعادل اکسیژن محلول را شبیه‌سازی می‌کند. رشد می‌تواند با در دسترس بودن نیتروژن غیرآلی، فسفر غیرآلی و نور محدود شود. فرآیند غنی‌سازی ساده، معادلات  $\text{CBOD}$  و  $\text{DO}$  و همچنین اصطلاحات و توابع غیرخطی خاصی را به فرآیند جنبشی غنی‌سازی ساده که در بالا توضیح داده شد، اضافه می‌کند. معادلات تعادل اکسیژن و پارامترهای فرآیند جنبشی در شکل (۷-۲) و جدول (۷-۱) خلاصه شده‌اند. معادلات چرخه‌ی فسفر و پارامترهای فرآیند جنبشی در شکل (۸-۴) و جدول (۸-۴) خلاصه شده‌اند. معادلات و پارامترهای چرخه‌ی نیتروژن در شکل (۸-۵) و جدول (۸-۵) خلاصه شده‌اند. هم‌چنین معادلات فیتوپلانکتون‌ها در بخش (۸-۴) با پارامترهایی که در جدول (۸-۲) خلاصه شده‌اند، ارائه شده‌اند.

رابطه دی‌تورو یا اسمیت می‌تواند کاهش نور را توصیف کند. این رابطه، معادله‌ی (۸-۵) را از طریق معادله‌ی (۸-۷) به کار می‌برد. این معادلات نسبت کربن به کلروفیل را براساس در دسترس بودن نور؛ سپس شدت نور اشباع را براساس نسبت کربن به کلروفیل پیش‌بینی می‌کنند.

اصطلاحات دیگری که در معادلات فرآیند جنبشی میانی گنجانده شده‌اند، عبارتند از: اثر فیتوپلانکتون بر معدنی شدن فسفر و نیتروژن آلی، محدودیت اکسیژن محلول در نیتروژن‌زایی، واکنش نیتروژن‌زدایی و تغذیه زئوپلانکتون. معادلات تعادل غیرخطی DO می‌تواند در جلوگیری از نیتروژن‌زایی، اکسیداسیون کربن‌دار و در گسترش نیتروژن‌زدایی در جایی که غلظت کم DO رخ می‌دهد، مهم باشد. هر هشت متغیر کیفیت در شبیه‌سازی‌های غنی‌سازی ساده، شبیه‌سازی می‌شوند. با این حال، در طول واسنجی مدل با داده‌های مشاهده‌شده، ممکن است کاربر بخواهد متغیرهای خاصی را نادیده بگیرد یا آن‌ها را ثابت نگه‌دارد؛ به‌عنوان مثال، موادمغذی می‌توانند در غلظت‌های مشاهده‌شده ثابت بمانند، درحالی‌که رشد فیتوپلانکتون و میزان مرگ‌ومیر واسنجی می‌شوند.

### ۸-۷-۱- پارامترهای محیطی

این پارامترها ماهیت مدل پایه، از جمله تقسیم‌بندی را تعریف می‌کنند و شبیه‌سازی را کنترل می‌کنند. **سیستم‌ها** - برای همه‌ی متغیرها "simulate" را انتخاب کنید. در حین واسنجی، کاربر ممکن است برای هر متغیر انتخاب‌شده "constant" یا "bypass" را انتخاب کند.

**بخش‌ها** - بخش‌های ستون آب باید به روش استاندارد تعریف شوند. در صورت شبیه‌سازی (ON) ، OP، PHYT، P<sub>O4</sub> یا CBOD، کاربر باید یک بخش بنتیک را در زیربخش‌های ستون آب اضافه کند. این بخش بنتیک صرفاً یک مخزن مناسب برای ته‌نشینی موادآلی عمل می‌کند. محاسبات مدل در بخش بنتیک نباید نادیده گرفته شود.

### ۸-۷-۲- پارامترهای انتقال

این گروه از پارامترها انتقال همرفتی و پراکنده‌ی متغیرهای مدل را تعریف می‌کنند. **شماره‌ی میدان‌های جریان** - برای شبیه‌سازی جریان ON، OP، و CBOD کاربر باید جریان جامدات ۱ تحت همرفتی را انتخاب کند. برای شبیه‌سازی ته‌نشینی PHYT، کاربر باید جریان جامدات ۲ را انتخاب کند. برای شبیه‌سازی ته‌نشینی P<sub>O4</sub>، کاربر باید جریان جامدات ۳ را انتخاب کند. همچنین کاربر باید جریان ستون آب را انتخاب کند.

**انتقال ذرات**،  $m^3/sec$  - همان‌طور که در بخش غنی‌سازی ساده در بالا توضیح داده‌شد، سرعت‌های ته‌نشینی و احیای متغیر زمانی را می‌توان برای ذرات ON، OP، CBOD، PHYT و P<sub>O4</sub>، مشخص نمود.

**۸-۷-۳- پارامترهای مرزی**

این گروه از پارامترها شامل غلظت‌های مرزی، بارهای پساب و شرایط اولیه می‌باشند. غلظت‌های مرزی باید برای هر بخشی که ورودی‌ها، خروجی‌ها یا تبادلات جریان را دریافت می‌کند، مشخص شود. شرایط اولیه نه تنها شامل غلظت‌های اولیه، بلکه شامل میدان انتقال جرم و جامدات برای هر جامد و کسر محلول در هر بخش نیز می‌شود.

**غلظت مرزی، mg/L-** در هر بخش مرزی، غلظت متغیر زمانی برای این که به صورت میکروگرم برلیتر کلروفیل a بیان شود، باید برای PHYT مشخص شود. غلظت‌های متغیر زمان نیز باید برای هر کدام از ON، NH<sub>3</sub>، NO<sub>3</sub>، OP، PO<sub>4</sub>، CBOD و DO مشخص شوند. بخش مرزی با استفاده از تبادل آب خارج از شبکه، از جمله جریان‌های فرعی، جریان‌های خروجی پایین دست و تبادل بازپخش آب مشخص می‌شود.

**تخلیه بارهای فاضلاب، kg/day-** می‌توان بار متغیر زمانی PHYT، ON، NH<sub>3</sub>، NO<sub>3</sub>، OP، CBOD و DO را برای هر تخلیه با منبع نقطه‌ای مشخص نمود. این بارها می‌توانند نشان‌دهنده‌ی تخلیه‌ی فاضلاب‌های شهری و صنعتی، یا رواناب شهری و کشاورزی باشند. هرگونه بار فیتوپلانکتون باید در واحد کیلوگرم کربن در روز مشخص شود.

**میدان انتقال جامد-** میدان‌های انتقال مرتبط با ته‌نشینی ذرات باید تحت شرایط اولیه مشخص شوند. جامد ۱ (میدان ۳) برای ON، OP و CBOD توصیه می‌شوند. از طرفی ماده‌ی جامد ۲ (میدان ۴) برای PHYT، و محلول ۳ (میدان ۵) برای PO<sub>4</sub> توصیه می‌شود.

**جرم مخصوص جامد، g/cm<sup>3</sup>-** مقدار صفر را می‌توان برای جرم مخصوص اسمی PHYT، ON، NH<sub>3</sub> و NO<sub>3</sub> یا OP و PO<sub>4</sub> و CBOD و DO وارد نمود. این درحالی است که این اطلاعات در EUTRO استفاده نمی‌شود.

**غلظت اولیه، mg/L-** غلظت تمام متغیرها در هر بخش باید برای زمانی که شبیه‌سازی شروع می‌شود مشخص شود. غلظت PHYT به صورت میکروگرم درلیتر کلروفیل a بیان می‌شود.

**کسر محلول-** کسر محلول هر متغیر در هر بخش باید مشخص شود. کسر محلول PHYT باید روی صفر و کسر محلول DO باید روی ۱ تنظیم شود.

### ۸-۷-۴- پارامترهای تبدیل

این گروه از پارامترها شامل پارامترهای متغیر فضایی، ثابت‌ها و توابع زمان جنبشی (سینماتیک) برای اجزای کیفیت آب در حال شبیه‌سازی می‌باشند. مقادیر این پارامترها برای هر بخش وارد می‌شوند. به صورتی که مقادیر مشخص برای ثابت‌ها روی کل شبکه و برای کل شبیه‌سازی اعمال می‌شوند. توابع زمانی فرآیند جنبشی (سینماتیک) از یک سری مقادیر در مقابل زمان در روزها تشکیل شده‌اند.

**دمای آب، °C** - همان‌طور که در بخش غنی‌سازی ساده در بالا توضیح داده شد، متغیر زمان و دمای آب را می‌توان با استفاده از پارامترهای TMPFN، TMPSG و توابع زمانی TEMP (۱-۴)، مشخص نمود.

**تابش خورشیدی، langleys/day** - همان‌طور که در بخش غنی‌سازی ساده در بالا توضیح داده شد، متغیر تابش خورشیدی در سطح آب را می‌توان با استفاده از توابع زمانی ITOT و FDAY، توصیف نمود.

**کاهش نور،  $m^{-1}$**  - همان‌طور که در بخش غنی‌سازی ساده در بالا توضیح داده شد، زمان و بخش ضرایب متغیر کاهش نور را می‌توان با استفاده از پارامترهای KESG، KEFN و توابع زمانی KE (۱-۵)، مشخص نمود.

**نرخ‌رشد،  $day^{-1}$**  - حداکثر ثابت نرخ‌رشد فیتوپلانکتون و ضریب دما را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های K1C و K1T وارد نمود.

**نسبت کربن به کلروفیل،  $mg\ C / mg\ Chl$**  - میانگین نسبت وزن کربن به کلروفیل در فیتوپلانکتون‌ها را می‌توان با ثابت CCHL مشخص نمود. مقدار پیش‌فرض ارائه شده برای این ثابت در EUTRO، ۳۰ می‌باشد. اگر گزینه‌ی تضعیف نور اسمیت انتخاب شود، آن‌گاه CCHL متغیر خواهد بود، و دوباره به‌طور روزانه در سراسر شبیه‌سازی محاسبه می‌شود.

**کاهش نور** - همان‌طور که در بالا توضیح داده شد؛ نور موجود، با استفاده از توابع زمانی که نور فصلی را در سطح آب بخش‌بندی و ضرایب کاهش نور متغیر با زمان را توصیف می‌کنند، مشخص می‌شود. گزینه‌ی کاهش نور دی‌تورو را می‌توان با استفاده از مقدار ۱ برای LGHTS تعیین نمود. شدت نور اشباع، می‌تواند با استفاده از ثابت IS1 در langleys/day، مشخص شود. مقادیر پیش‌فرض برای LGHTS و IS1 به ترتیب ۱ و ۳۰۰ می‌باشند.

گزینه‌ی کاهش نور اسمیت را می‌توان با استفاده از مقدار ۲ برای LGHTS تعیین نمود. پس از آن دو پارامتر دیگر باید مشخص شوند. حداکثر ثابت بازده کوانتومی در فوتون‌های میلی‌گرم کربن بر فوتون را می‌توان با استفاده از ثابت PHIMX مشخص نمود. هم‌چنین ضریب کاهش کلروفیل در ( $mgchl\ a/m^3$ )

می‌تواند با استفاده از ثابت XKC مشخص شود. مقادیر پیش‌فرض برای PHIMX و XKC به ترتیب ۷۲۰ و ۰/۰۱۷ هستند.

**ثابت نیتروژن نیمه‌اشباع، mg N/L-** ثابت نیتروژن نیمه‌اشباع برای رشد فیتوپلانکتون‌ها را می‌توان با استفاده از ثابت KMNG1 مشخص نمود. وقتی غلظت نیتروژن غیرآلی در این سطح است، میزان رشد فیتوپلانکتون را به نصف کاهش می‌دهد. زمانی که  $KMNG = 0$  است مقدار  $P_{NH3}$  نیز برابر یک می‌باشد، اما وقتی KMNG1 بسیار بزرگ می‌شود، مقدار  $P_{NH3}$  به  $C_1/C_1+C_2$  نزدیک می‌شود.

**ثابت فسفر نیمه‌اشباع mg P/L-** رشد فیتوپلانکتون‌ها می‌تواند با استفاده از ثابت KMPG1 مشخص شود. وقتی غلظت فسفر غیرآلی در این سطح است، نرخ رشد فیتوپلانکتون‌ها را به نصف کاهش می‌دهد.

**امکان محدودیت مواد مغذی-** رابطه محدودیت مواد مغذی را می‌توان با استفاده از ثابت NUTLIM مشخص نمود. مقدار ۰، مقدار پیش‌فرض بوده و حداقل مقداری که برای رابطه توصیه می‌شود را انتخاب می‌کند؛ و مقدار ۱ فرمول ضرب‌پذیر را انتخاب می‌کند.

**نرخ تنفس،  $day^{-1}$ -** میانگین ثابت نرخ تنفس درونی فیتوپلانکتون‌ها و ضریب دما، می‌تواند به ترتیب با استفاده از ثابت‌های KIRC و KIRT تعیین شوند.

**نرخ مرگ،  $day^{-1}$ -** ثابت نرخ مرگ فیتوپلانکتون‌های غیرشکاری را می‌توان با استفاده از ثابت K1D تعیین نمود. در صورتی که هیچ‌گونه وابستگی دمایی فرض نشود.

**نرخ تغذیه،  $day^{-1}$ -** تغذیه‌ی زوئوپلانکتون را می‌توان با استفاده از پارامتر ZOOSG، تابع زمانی ZOO ثابت K1G مشخص نمود. نسبت زمان و جمعیت زئوپلانکتون‌های گیاه‌خوار که محصول جمعیت متغیر زمانی ZOO است، در میلی‌گرم زئوپلانکتون C/L و نسبت‌های خاص بخش ZOOSG توصیف می‌شود. نرخ تغذیه در هر واحد جمعیت زئوپلانکتون، می‌تواند با استفاده از ثابت K1G در لیتر بر میلی‌گرم کربن زئوپلانکتون C-day وارد شود. ثابت نرخ تغذیه‌ی حاصل برای فیتوپلانکتون‌ها، محصول متغیر جمعیت زئوپلانکتون و نرخ تغذیه‌ی واحد است. توجه داشته باشید که اگر K1G به صورت L/cell-day بیان شود، ZOO نیز می‌تواند به صورت cells/L بیان شود.

**نسبت فسفر به کربن، mg P / mg C-** متوسط نسبت وزن فسفر به کربن در فیتوپلانکتون‌ها را می‌توان با استفاده از ثابت PCRB ثابت مشخص نمود. مقدار پیش‌فرض EUTRO برای PCRB برابر با ۰/۰۲۵ می‌باشد.

**بازیافت فسفر فیتوپلانکتون‌ها** - کسر فسفر فیتوپلانکتون‌های مرده و دمنده که به مخزن فسفر آلی بازیافت می‌شود را می‌توان با استفاده از FOP ثابت مشخص نمود. مقدار پیش‌فرض برابر با ۱ می‌باشد. کسر فسفر فیتوپلانکتون که مستقیم به فسفر معدنی بازیافت می‌شود  $f_{Op} - 1$  است.

**نرخ معدنی شدن فسفر،  $day^{-1}$**  - ثابت نرخ معدنی شدن و ضریب دما برای فسفر آلی محلول، به ترتیب با استفاده از ثابت‌های K83C و K83T مشخص می‌شوند و اثرات فیتوپلانکتون‌ها در معدنی شدن را می‌توان با استفاده از ثابت KMPHY توصیف کرد. هم‌چنین می‌توان ثابت نیمه‌اشباع برای معدنی شدن وابسته به فیتوپلانکتون‌ها را در میلی‌گرم کربن برلیتر توصیف کرد. با افزایش تراکم فیتوپلانکتون، میزان معدنی شدن افزایش می‌یابد. اگر KMPHY صفر باشد، هیچ اثر فیتوپلانکتونی روی معدنی شدن وجود ندارد. اگر KMPHY بزرگ باشد، تراکم زیادی از فیتوپلانکتون‌ها برای برانگیختگی معدنی شدن موردنیاز است و در نتیجه سطح نسبتاً پایین فیتوپلانکتون می‌تواند منجر به نرخ پایین معدنی شدن شود.

**شار فسفر بنتیک،  $mg/m^2 \cdot day$**  - شار فسفر بنتیک و متغیر زمان را می‌توان با استفاده از پارامتر FPO4 و تابع زمان FPO4 تعیین کرد. محصول متغیر مکانی FPO4 و متغیر زمانی TFPO4، بخش و متغیر زمانی شار بنتیک ویژه برای  $PO_4$  به کار رفته توسط EUTRO رامشخص می‌کند. مقادیر شار در مقابل زمان را می‌توان با استفاده از TFPO4 وارد نمود، درحالی‌که نسبت‌های بخش بدون شار، با استفاده از FPO4 وارد می‌شوند. مقادیر باید برای بخش‌های ستون آب که در تماس با بستر بدنه آب هستند، وارد شوند.

**نرخ (تبدیل) نیتروژن به کربن،  $mg N / mg C$**  - متوسط نرخ تبدیل نیتروژن به کربن در فیتوپلانکتون‌ها را می‌توان با ثابت NCRB مشخص نمود. مقدار پیش‌فرض EUTRO برای NCRB برابر با ۰/۲۵ می‌باشد.

**بازیافت نیتروژن فیتوپلانکتون‌ها** - کسر نیتروژن فیتوپلانکتون‌های مرده و مجاز که به مخزن نیتروژن آلی بازیافت می‌شود، را می‌توان با استفاده از ثابت  $f_{ON}$  مشخص نمود. مقدار پیش‌فرض ۱ بوده و کسری از مقدار نیتروژن فیتوپلانکتون که مستقیماً به آمونیاک بازیافت می‌شود، برابر با  $f_{ON} - 1$  می‌باشد. **نرخ معدنی شدن نیتروژن،  $day^{-1}$**  - ثابت نرخ معدنی شدن و ضریب دما برای نیتروژن آلی محلول را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های K71C و K71T مشخص نمود. اثرات فیتوپلانکتون‌ها در معدنی شدن را می‌توان با استفاده از ثابت KMPHY توصیف کرد. همان‌طور که در بخش معدنی شدن فسفر بیان شد، مقدار ثابت نیمه‌اشباع برای معدنی شدن، وابسته به فیتوپلانکتون‌ها می‌باشد.



**نیتروژن‌زایی،  $\text{day}^{-1}$  -** ثابت نرخ نیتروژن‌زایی و ضریب دما برای نیتروژن آمونیاک حل‌شده را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های K12C و K12T مشخص نمود. هم‌چنین می‌توان ثابت نیمه‌اشباع برای محدودیت اکسیژن نیتروژن‌زایی را با استفاده از KNIT ثابت مشخص نمود. مقدار پیش‌فرض برای KNIT برابر با صفر است که نشان‌دهنده‌ی نبود محدودیت اکسیژن می‌باشد.

**نرخ نیتروژن‌زدایی،  $\text{day}^{-1}$  -** ثابت نرخ نیتروژن‌زدایی و ضریب دما برای نیتروژن‌نترات حل‌شده را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های K20C و K20T مشخص نمود. هم‌چنین می‌توان ثابت نیمه‌اشباع برای محدودیت اکسیژن نیتروژن‌زدایی را با استفاده از ثابت KNO3 مشخص نمود. مقدار پیش‌فرض برای KNO3 برابر صفر است که نشان‌دهنده‌ی نبود نیتروژن‌زدایی در غلظت اکسیژن بالای صفر می‌باشد.

**شار نیتروژن بنتیک (کفزی)،  $\text{mg/m}^2\text{-day}$  -** بخش شار نیتروژن بنتیک و متغیر زمان را می‌توان با استفاده از پارامتر FNH4 و تابع زمانی 4 TFNH مشخص نمود. محصول متغیر مکانی FNH 4 و متغیر زمانی 4 TFNH، بخش و زمان ویژه‌ی شار بنتیک برای NH3 مورد استفاده توسط EUTRO را ارائه می‌دهد. با استفاده از 4 TFNH می‌توان مقادیر شار در مقابل زمان را وارد نمود، درحالی‌که نسبت‌های بخش غیرخالص، با استفاده از FNH 4 وارد می‌شوند. مقادیر باید برای بخش‌های ستون آب که در تماس با کف بدنه آب هستند، وارد شوند.

**تقاضای اکسیژن رسوب،  $\text{mg/m}^2\text{-day}$  -** مقدار تقاضای اکسیژن مورد نیاز رسوبات، به ترتیب با استفاده از پارامترهای SOD1D و SODTA می‌تواند تعیین شود. مقادیر باید برای بخش‌های از ستون آب که در تماس با بستر و بدنه‌ی آب هستند، وارد شوند.

**نرخ هوادهی مجدد،  $\text{day}^{-1}$  -** سه گزینه‌ی اساسی برای تعیین هوادهی مجدد وجود دارد؛ یک ثابت نرخ واحد، ثابت‌های نرخ بخش و متغیر زمانی، و ثابت‌های نرخ جریان و باد محاسبه‌شده. این گزینه‌ها در بخش (۲-۴) تحت پارامترهای تبدیل استریتر-فلیس توضیح داده شده‌اند.

**نرخ اکسیژن‌زدایی CBOD،  $\text{day}^{-1}$  -** ثابت نرخ اکسیژن‌زدایی CBOD و ضریب دما را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های KDC و KDT تعیین کرد. هم‌چنین ثابت نیمه‌اشباع برای محدودیت اکسیژن جهت اکسیژن‌زدایی کربن را نیز می‌توان با استفاده از ثابت KBOD مشخص نمود. مقدار پیش‌فرض برای KBOD برابر با صفر است که نشان‌دهنده‌ی نبود محدودیت اکسیژن است.

### ۸-۸- فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی میانی با لایه بنتیک

شبیه‌سازی تعاملات بنتیک نیاز به افزودن بخش‌های بنتیک به شبکه‌ی مدل دارد. تمامی متغیرهای حالت در بخش‌های بنتیک شبیه‌سازی شده‌اند. بخش‌های محلول  $\text{NH}_3$ ،  $\text{NO}_3$ ،  $\text{PO}_4$ ،  $\text{CBOD}$ ،  $\text{ON}$ ،  $\text{OP}$  و  $\text{DO}$  ممکن است به روش انتشار با ستون آب مبادله شوند. اجزای تشکیل‌دهنده‌ی  $\text{PHYT}$ ،  $\text{PO}_4$ ،  $\text{CBOD}$ ،  $\text{ON}$  و  $\text{OP}$  ممکن است در بخش‌های بنتیک ذخیره یا جدا شوند. نرخ تجزیه‌ی لایه بنتیک برای  $\text{PHYT}$ ،  $\text{CBOD}$ ،  $\text{ON}$  و  $\text{OP}$  باید مشخص شود.

معادلات مورد استفاده شامل مواردی هستند که در شکل (۷-۴) و (۷-۸) نشان داده شده‌اند. پارامترهای نرخ در جداول (۷-۲) و (۸-۶) خلاصه شده‌اند.

بسیاری از پارامترهای محیطی، انتقال، مرزی و تبدیلی مورد نیاز برای اجرای این عملیات، همان پارامترهای موجود در غنی‌سازی میانی هستند که در بالا به آن‌ها اشاره شده‌است. توابع شار فسفر و نیتروژن بنتیک باید حذف و موارد زیر باید اصلاح و یا اضافه شوند.

**بخش‌ها** - بخش‌های ستون آب باید به صورت استاندارد تعریف شوند. علاوه بر این، کاربر باید یک بخش بنتیک در زیر هر بخش از ستون آب (یا توده‌ی بخش‌های ستون آب) اضافه کند. این بخش‌های بنتیک موادالی و غیرالی ته‌نشین شده را از ستون آب بالا دریافت خواهند کرد و می‌توانند مواد را از طریق هوادهی مجدد یا انتشار آب منفذی به ستون آب بازگردانند.

**تجزیه‌ی فیتوپلانکتون‌ها**،  $\text{day}^{-1}$  - کاربر می‌تواند ثابت سرعت و ضریب دما را با استفاده از ثابت‌های  $\text{KPZDT}$  و  $\text{KPZDC}$  برای تجزیه‌ی فیتوپلانکتون‌ها در بخش‌های بنتیک مشخص کند.

**اختلاف BOD کربن دار**،  $\text{day}^{-1}$  - کاربر می‌تواند ثابت سرعت و ضریب دما را با استفاده از ثابت‌های  $\text{KDST}$  و  $\text{KDSC}$  برای تجزیه‌ی  $\text{CBOD}$  در بخش‌های بنتیک مشخص کند.

**تجزیه‌ی نیتروژن آلی**،  $\text{day}^{-1}$  - کاربر می‌تواند ثابت سرعت و ضریب دما را با استفاده از ثابت‌های  $\text{KONDC}$  و  $\text{KT}$  برای تجزیه‌ی نیتروژن آلی در بخش‌های بنتیک مشخص کند.

**تجزیه‌ی فسفر آلی**،  $\text{day}^{-1}$  - کاربر می‌تواند ثابت سرعت و ضریب دما را با استفاده از ثابت‌های  $\text{KopDT}$  و  $\text{KopDC}$  برای تجزیه فسفر آلی در بخش‌های بنتیک مشخص کند.





# فصل نهم

## سموم ساده

برخی از مواد شیمیایی آلی و غیر آلی می‌توانند باعث ایجاد سمیت برای موجودات آبی و یا تمرکز زیستی از طریق زنجیره غذایی شوند. از سوی دیگر انسان‌ها نیز ممکن است از خوردن آب یا ماهی آلوده تأثیر بپذیرند؛ بر این اساس، معیارهای حفاظت از سلامت انسان و جوامع آبی بومی برای مواد شیمیایی خاص و سمیت عمومی اعلام شده‌است.

شبیه‌سازی سم‌شناسی تنها در دهه‌ی گذشته متداول شده‌است. مدل‌های نزدیک‌برد مناطق اختلاط، رقیق‌سازی و پراکندگی بارهای زباله را همراه با سمومی که با آن‌ها مرتبط هستند، شبیه‌سازی می‌کنند؛ و مدل‌های دوربرد مانند WASP 6، انتقال و سرنوشت نهایی مواد شیمیایی را در سراسر بدنه‌ی آب شبیه‌سازی می‌کنند. در حداقل حالت ممکن، این مدل‌ها ستون آب و یک لایه بستر را شبیه‌سازی می‌کنند و شامل تجزیه‌ی شیمیایی و جذب به جامدات می‌باشند و مدل‌های ساده‌تر از ثابت‌های فروپاشی مرتبه‌ی اول و ضرایب تعادلی استفاده می‌کنند. مدل‌های پیچیده‌تر ممکن است مکانیسم‌های مرتبه‌ی دوم فروپاشی و ایزوترم‌های جذب غیرخطی یا ثابت‌های نرخ جذب و دفع مرتبه‌ی اول را به کار گیرند.

چندین فرآیند فیزیکی-شیمیایی می‌توانند بر انتقال و سرنوشت مواد شیمیایی سمی در محیط آبی تأثیر بگذارند. برخی از مواد شیمیایی تحت یک سری واکنش‌های پیچیده قرار می‌گیرند و این درحالی است که برخی دیگر به روش ساده‌تری رفتار می‌کنند. WASP 6 امکان شبیه‌سازی فرآیندهای مختلفی که ممکن است بر مواد شیمیایی سمی تأثیر بگذارند را فراهم می‌کند. این مدل برای ارائه‌ی یک چارچوب گسترده‌ی قابل اجرا برای بسیاری از مشکلات زیست‌محیطی طراحی شده‌است و به کاربر اجازه می‌دهد تا پیچیدگی مدل را با الزامات مسئله مطابقت دهد.

اگرچه مقدار و تنوع بالقوه در داده‌های استفاده‌شده توسط WASP 6 زیاد است، الزامات داده برای هر شبیه‌سازی خاص می‌تواند بسیار کوچک باشد؛ به‌عنوان مثال، امکان شبیه‌سازی یک ماده‌ی شیمیایی با استفاده از نبود واکنش، یا تنها با استفاده از جذب و یک یا دو واکنش تبدیل که به‌طور قابل توجهی بر یک ماده شیمیایی خاص تأثیر می‌گذارند، نیز وجود دارد. در واقع، تمام ثابت‌های شیمیایی، توابع زمانی و پارامترهای محیطی را می‌توان برای مطالعات تجربی نادیده گرفت و تنها ثابت نرخ تبدیل مشخص‌شده توسط کاربر را مورد استفاده قرار داد. بنابراین، WASP 6 می‌تواند به‌عنوان یک مدل آلاینده‌ی آب درجه‌ی اول، برای انجام شبیه‌سازی ردیاب‌های رنگی، نفوذ شوری، یا مرگ کلی فرم مورد استفاده قرار گیرد.

جدول ۹-۱- مروری بر سموم ساده WASP 6

متغیر	سیستم
CHEMICAL 1	۱
SOLIDS 1	۲
SOLIDS 2	۳
SOLIDS 3	۴
CHEMICAL 2	۵
CHEMICAL 3	۶

سم‌شناسی ساده و جامدات مربوطه با استفاده از برنامه‌ی TOXI شبیه‌سازی می‌شوند. TOXI انتقال و تبدیل یک به سه ماده شیمیایی و یک به سه نوع ماده ذره‌ای را شبیه‌سازی می‌کند (کلاس‌های مواد جامد، جدول (۹-۱)). ممکن است این سه ماده‌ی شیمیایی مستقل بوده و یا مانند توالی محصول والد-فرزند با بازده واکنش مرتبط باشند. شبیه‌سازی جامدات در فصل ۱۴ توضیح داده شده‌است و شبیه‌سازی مواد شیمیایی آلی پیچیده‌تر نیز در فصل ۱۰ توضیح داده شده‌است.

ممکن است در یک محیط آبی، مواد شیمیایی سمی بین فازها منتقل شوند و یا توسط هر یک از فرآیندهای شیمیایی و بیولوژیکی تجزیه شوند. فرآیندهای انتقال ساده‌شده‌ی تعریف‌شده در این مدل شامل جذب و تبخیر بوده و فرآیندهای تبدیل نیز شامل تجزیه‌ی زیستی، هیدرولیز، فوتولیز و اکسیداسیون می‌باشند. از این روش برای یک واکنش تعادلی استفاده می‌شود و فرآیندهای تبدیل ساده‌شده با معادلات نرخ مرتبه‌ی اول توصیف می‌شوند.

WASP 6 از معادله‌ی تعادل جرم برای محاسبه‌ی رسوب، جرم شیمیایی و غلظت هر بخش در یک شبکه‌ی خاص استفاده می‌کند که ممکن است شامل آب سطحی، آب زیرین، بستر سطحی و بستر زیرین باشد. در طی یک فرآیند شبیه‌سازی؛ رسوب در میان بخش‌های آب جابجا و پراکنده می‌شود و از بخش‌های بنتیک، رسوب گرفته و فرسایش می‌یابد و در بین بخش‌های بنتیک از طریق رسوب خالص، فرسایش یا بار بستر حرکت می‌کند که در فصل ۷ به تفصیل شرح داده شده‌است.

مواد شیمیایی شبیه‌سازی شده در مجموعه داده‌های ورودی که توسط کاربر مشخص شده‌است، تحت چندین واکنش فیزیکی یا شیمیایی قرار می‌گیرند. مواد شیمیایی در میان بخش‌های آب منتقل

و پخش می‌شوند و از طریق اختلاط پراکنده با بخش‌های بنتیک سطحی مبادله می‌شوند. مواد شیمیایی دسته‌بندی شده از طریق بخش‌های ستون آب ته‌نشین شده و در بخش‌های بنتیک سطحی رسوب کرده و یا فرسایش می‌یابند. مواد شیمیایی حل‌شده در داخل بستر از طریق نفوذ و نفوذ آب منفذی به سمت پایین و یا به سمت بالا حرکت می‌کنند. مواد شیمیایی گروه‌بندی شده نیز از طریق رسوب خالص یا فرسایش به سمت پایین یا بالا حرکت می‌کنند. ثابت‌های سرعت و ضرایب تعادل باید از داده‌های میدانی یا مقالات در مطالعات شیمیایی سمی ساده‌شده تخمین زده شوند.

در هنگام به کار بردن TOXI باید برخی محدودیت‌ها را در ذهن داشت. در وهله‌ی اول غلظت شیمیایی در مناطق نزدیک به سطوح باید ناچیز باشد، به این معنی که مقدار آن باید کم‌تر از نصف حلالیت یا  $10^{-5}$  مولار باشد؛ در غلظت‌های بالاتر، فرضیات جزءبندی و تبدیل خطی شروع به تجزیه می‌کنند. جرم‌مخصوص شیمیایی ممکن است به‌ویژه در نزدیکی منبع، مانند نشت نفت مهم شود. غلظت‌های زیاد می‌توانند بر ویژگی‌های کلیدی محیطی مانند pH و یا جمعیت باکتری‌ها تأثیر بگذارند و در نتیجه سرعت تبدیل را تغییر دهند.

جدول ۹-۲ نمادهای مرتبط با تمرکز استفاده‌شده در معادلات ریاضی

نماد	توصیف	واحد
$C_{ij}$	غلظت شیمیایی کل $i$ در بخش $j$	$mg_c/L$
$C_{wij}$	غلظت ماده شیمیایی محلول در بخش $j$	$mg_c/L$
$\hat{C}_{wij}$	غلظت ماده شیمیایی محلول در آب در بخش $j$ : $\hat{C}_{wij} = C_{wij}/n_j$	$mg_c/L_w$
$C_{sij}$	غلظت ماده شیمیایی $i$ در رسوب نوع " $s$ " در بخش $j$ .	$mg_c/L$
$\hat{C}_{sij}$	غلظت ماده شیمیایی $i$ در رسوب نوع " $s$ " در بخش $j$ : $\hat{C}_{sij} = C_{sij}/M_{sij} \cdot j$	$mg_c/kg_s$
$m_{sj}$	غلظت رسوب نوع " $s$ " در بخش $j$ .	$mg_s/L$
$M_{sj}$	غلظت رسوب نوع " $s$ " در بخش $j$ : $M_j = m_j \cdot 10^{-6}$	$kg_s/L$
$\hat{M}_{sj}$	غلظت رسوب نوع " $s$ " در آب در بخش $j$ .	$kg_s/L_w$
$n_j$	تخلخل یا حجم آب در هر حجم بخش $j$ .	$L_w/L$



$K_{psij}$	ضریب جزءبندی شیمیایی $i$ بر روی رسوب نوع " $s$ " در بخش $j$ .	$L_w/kg_s$
$f_{Dij}$	کسری از مواد شیمیایی $i$ در بخش $j$ در فاز محلول.	-
$f_{sij}$	کسری از مواد شیمیایی $i$ در بخش $j$ در فاز جامد.	-

در TOXI ساده، تعریف نمادهای مرتبط با غلظت مانند جدول (۹-۲) می‌باشد. لطفاً توجه داشته باشید که در توسعه‌ی کلی معادلات زیر، گاهی اوقات اشتراک " $i$ " و " $j$ " برای راحتی حذف می‌شوند.

### ۹-۱- فرآیند جنبشی تبدیل ساده

TOXI به کاربر اجازه می‌دهد تا نرخ‌های واکنش مرتبه‌ی اول ساده را برای واکنش‌های تبدیل هر یک از مواد شیمیایی شبیه‌سازی شده مشخص کند. نرخ‌های مرتبه‌ی اول ممکن است برای کل مواد شیمیایی اعمال شود و با بخش تغییر کند. متناوباً، نرخ‌های ثابت مرتبه‌ی اول ممکن است برای فرآیندهای خاصی از جمله تجزیه‌ی زیستی، هیدرولیز، تجزیه‌ی فتولیز فرار و اکسیداسیون مشخص شوند. این نرخ‌های ثابت ممکن است به‌طور انحصاری یا همان‌طور که در فصل ۱۰ توضیح داده شد، در ترکیب با مدل نرخ محاسبه‌شده، مورد استفاده قرار گیرند؛ به‌عنوان مثال، کاربر ممکن است یک نرخ مرتبه‌ی اول را برای تجزیه‌ی زیستی مشخص کند و TOXI نرخ اتلاف‌سازی را برای فراریت محاسبه کند.

#### ۹-۱-۱- روش ۱: فروپاشی مرتبه‌ی اول کل توده

ساده‌ترین بیان نرخ مجاز به‌صورت توده توسط TOXI، فروپاشی مرتبه‌ی اول می‌باشد، این گزینه، این امکان را به کاربر می‌دهد تا ثابت‌های نرخ فروپاشی مرتبه‌ی اول متغیر مکانی (روز به توان منفی یک) را برای هر یک از مواد شیمیایی شبیه‌سازی شده، مشخص کند. از آن‌جا که این‌ها واکنش‌های فروپاشی، توده‌ای هستند؛ تبدیل شیمیایی به محصولات شبیه‌سازی نشده است.

$$\frac{\partial C_{ij}}{\partial t}_{reaction} = K_{ij} C_{ij} \quad (1-9)$$

$K_{ij}$  = ثابت فروپاشی مرتبه‌ی اول ( $\text{day}^{-1}$ ) برای مواد شیمیایی  $i$  در بخش  $j$ .

ثابت نرخ فروپاشی، یک پارامتر از مدل است که ممکن است، بین بخش‌های مدل متغیر باشد. اگر ثابت نرخ فروپاشی یکنواخت مشخص شود، مواد شیمیایی بدون در نظر گرفتن ورودی مدل دیگر در این نرخ واکنش نشان می‌دهند.

### ۹-۱-۲- روش ۲: تبدیل مرتبه‌ی اول منحصربه‌فرد

این گزینه به کاربر اجازه می‌دهد تا یک ثابت کلی سرعت واکنش درجه‌ی اول را به‌طور جداگانه برای هر یک از فرآیندهای: فراریت، تجزیه‌زیستی ستون آب، تجزیه‌زیستی، هیدرولیز قلیائی، هیدرولیز خنثی، هیدرولیز اسیدی، اکسیداسیون، فوتولیز و یک واکنش اضافی؛ وارد کند. سپس کل واکنش براساس مجموع هر یک از واکنش‌های منفرد محاسبه می‌شود

$$\frac{\partial C_{ij}}{\partial t}_{\text{reaction}} = \sum_{k=1}^N K_i C_{ij} \quad (2-9)$$

$K_{ki}$  = ثابت تبدیل مرتبه اول برای واکنش  $k$  شیمیایی  $i$ ،  $\text{day}^{-1}$ ،

کاربر ممکن است نیمه‌ی عمر را به جای ثابت بودن نرخ فروپاشی مرتبه‌ی اول وارد کند. اگر نیمه‌ی عمر برای واکنش‌های تبدیل فراهم شود، آن‌ها به‌صورت داخلی به ثابت نرخ مرتبه‌ی اول تبدیل خواهند شد؛ همان‌طور که در بالا مورد استفاده قرار گرفتند:

$$K_{ki} = 0.693/T_{Hki} \quad (3-9)$$

$T_{Hki}$  = نیمه‌ی عمر واکنش  $k$  برای مواد شیمیایی  $i$ ، days

### ۹-۲- تعادل جذب

طبقه‌بندی، پیوند مواد شیمیایی محلول بر روی فاز جامد مانند کفزیان و رسوبات معلق، مواد زیستی و گاهی اوقات مواد آلی محلول یا کلوییدی می‌باشد. طبقه‌بندی می‌تواند در کنترل سرنوشت محیط‌زیست و هم در سمیت مواد شیمیایی مهم باشد. این مواد می‌توانند باعث تجمع مواد شیمیایی در رسوبات بستر و یا تجمع زیستی در ماهی‌ها شوند. این روش ممکن است واکنش‌هایی مانند فراریت و هیدرولیز پایه را کاهش دهد یا سایر واکنش‌ها از جمله فوتولیز و هیدرولیز کاتالیز شده با اسید را افزایش دهد.

واکنش‌های طبقه‌بندی معمولاً نسبت به دیگر فرآیندهای محیطی سریع هستند و ممکن است در تعادل فرض شوند. برای غلظت‌های مرتبط با محیط‌زیست (کم‌تر از  $10^{-5}$  M یا نصف حلالیت آب)، جذب موازنه با غلظت شیمیایی محلول، خطی است یا (Karickhoff, 1984):

$$C_S = K_{ps} \cdot C_W \quad (۴-۹)$$

توزیع میان فازها در حالت تعادل، توسط ضرایب تقسیم‌بندی کنترل می‌شود. همان‌طور که در فصل ۶ به‌طور کامل توضیح داده‌شد، کل جرم شیمیایی در هر فاز توسط  $K_{ps}$  و مقدار فاز جامد موجود (DOC) بدون در نظر گرفتن هر فاز کنترل می‌شود، به‌طوری که:

$$f_D = \frac{n}{n + \sum_S K_{ps} \cdot M_S} \quad (۵-۹)$$

و

$$f_S = \frac{K_{ps} \cdot M_S}{n + \sum_S K_{ps} \cdot M_S} \quad (۶-۹)$$

این اجزا در زمان و مکان در طول شبیه‌سازی ضرایب تقسیم، تداخل محاسبه‌شده داخلی و غلظت‌رسوب شبیه‌سازی شده تعیین می‌شوند. با توجه به غلظت کل و کسر فاز ماده شیمیایی  $i$  در بخش  $j$ ، غلظت‌های محلول و جاذب به‌طور منحصربه‌فردی تعیین می‌شوند.

$$C_{wij} = C_{ij} \cdot f_{Dij} \quad (۷-۹)$$

$$C_{sij} = C_{ij} \cdot f_{sij} \quad (۸-۹)$$

علاوه بر فرض تعادل لحظه‌ای، فرض برگشت‌پذیری نیز به‌طور ضمنی در استفاده از این معادلات برقرار می‌باشد. داده‌های آزمایشگاهی برای مواد شیمیایی هیدروفوبیک نشان می‌دهد که پسماند وجود داشته و سرعت دفع بسیار کندتر از جذب است. کریخوف نشان می‌دهد که این اثر ممکن است نتیجه‌ی فرآیند جنبشی درون‌ذره‌ای باشد که در آن ماده‌ی شیمیایی به آرامی به اجزای جاذب اضافه می‌شود. این پدیده به خوبی درک نشده‌است و هیچ‌گونه چارچوب مدل‌سازی کمی برای توصیف آن در دسترس نیست.

مقادیر ضرایب تقسیم‌بندی را می‌توان از آزمایش‌های آزمایشگاهی یا داده‌های میدانی به‌دست آورد. مقادیر ضرایب تقسیم‌بندی را می‌توان از آزمایش‌های آزمایشگاهی یا داده‌های میدانی به‌دست آورد. TOXI نیاز دارد تا یک ضریب تقسیم‌بندی ثابت، یا مجموعه‌ای از ضرایب تقسیم‌بندی زمانی متغیر به مدل وارد شوند.

این گزینه‌ها تحت "اجرای مدل" در زیر توضیح داده شده‌اند. محاسبه‌ی ضرایب تقسیم‌بندی برای مواد شیمیایی آلی در فصل ۶ توضیح داده شده‌است.

### ۹-۳- تبدیل و بازده فرعی

سه ماده شیمیایی که توسط TOXI شبیه‌سازی می‌شوند، ممکن است مستقل بوده و یا ممکن است مانند زنجیره‌ی فرعی-ترکیب، با بازده واکنش مرتبط باشند. تبدیل پیوندی می‌تواند با شبیه‌سازی دو یا سه ماده‌ی شیمیایی و با تعیین ضرایب تابع مناسب برای هر فرآیند اجرا شود:

$$S_{kc1} = \sum_c \sum_k K_{kc} C_c Y_{kc1} \quad , \quad c = 2/3 \quad (9-9)$$

$$S_{kc2} = \sum_c \sum_k K_{kc} C_c Y_{kc2} \quad , \quad c = 1/3 \quad (10-9)$$

$$S_{kc3} = \sum_c \sum_k K_{kc} C_c Y_{kc3} \quad , \quad c = 1/2 \quad (11-9)$$

$S_{kci}$  = تولید شیمیایی "i" از شیمیایی "c" تحت واکنش "k"،  $mg_i/L - day$

$K_{kc}$  = ضریب نرخ مؤثر برای شیمیایی "c" واکنش "k"،  $day^{-1}$

$Y_{kc}$  = ضرایب بازده برای تولید مواد شیمیایی "i" از شیمیایی "c" تحت واکنش "k"،  $mg_i/mg_c$

شکل (۸) برخی از واکنش‌های مرتبط را نشان می‌دهد که می‌توانند با تعیین ضرایب بازده مناسب، شبیه‌سازی شوند.

### ۹-۴- پیاده‌سازی مدل

برای شبیه‌سازی سموم ساده با WASP 6، از پیش‌پردازنده برای ایجاد فایل ورودی TOXI استفاده کنید. مجموعه داده‌ی ورودی مدل و پارامترهای ورودی شبیه به داده‌های مدل ردیابی محافظه کارانه هستند که در فصل ۱ توضیح داده شد. کاربر بخش‌های کفزی، نرخ انتقال جامد و پارامترهای تبدیل را به این پارامترهای اساسی (اشاره شده در فصل ۱) اضافه می‌کند و در طول شبیه‌سازی، مواد جامد و سموم؛ هم توسط میزان جذب ستون آب، هم پراکندگی و هم توسط نرخ انتقال مواد جامد منتقل می‌شوند.

همان‌طور که در فصل ۲ توضیح داده شد، نرخ انتقال مواد جامد در ستون آب و بستر در WASP، که از طریق سه میدان انتقال مواد جامد وارد می‌شوند؛ از جریان جامدها پیروی می‌کند. کاربر باید کسر

محلول (یعنی صفر) و جامدات را مشخص کند. به منظور شبیه‌سازی جامدات کل در میدان انتقال، برای هریک از مواد جامد شبیه‌سازی شده در شرایط اولیه باید از جامدات ۱ استفاده شود.

### ۹-۴-۱- پارامترهای ورودی مدل

این بخش؛ پارامترهای ورودی که باید به منظور حل معادلات سمی ساده در TOXI مشخص شوند را خلاصه می‌کند. کاربر می‌تواند برای خلاصه‌ای از پارامترهای ورودی به معادلات تعادل رسوب که در فصل ۲ به آن اشاره شد، مراجعه کند. پارامترهای ورودی برای WASP 6 در چهار بخش اصلی از محیط پیش‌پردازنده، انتقال، مرزی و تبدیل آماده می‌شوند. پارامترهای اصلی مدل نیز که در فصل ۱ توضیح داده شده‌اند، در این جا تکرار نخواهند شد.

### ۹-۴-۲- پارامترهای محیطی

این پارامترها ماهیت مدل پایه، شامل تقسیم‌بندی و کنترل شبیه‌سازی را تعریف می‌کنند. **سیستم‌ها** - برای شبیه‌سازی یک سم، "simulate" را برای مواد شیمیایی ۱ و "bypass" را برای مواد شیمیایی ۲ و ۳ انتخاب کنید. برای شبیه‌سازی مواد جامد کل به همراه ماده سمی نیز، گزینه‌ی "simulate" را برای مواد جامد ۱ و گزینه‌ی "bypass" را برای جامدات ۲ و ۳ انتخاب کنید. همچنین برای شبیه‌سازی دو یا چند ماده‌ی سمی یا جامد، "simulate" را برای متغیر مناسب انتخاب کنید.

**گزینه‌ی حجم بستر** - کاربر باید تعیین کند که آیا حجم‌های بستر ثابت نگه‌داشته می‌شوند یا اجازه‌ی تغییر دارند. با مشخص کردن صفر، که در آن غلظت رسوب و تخلخل‌ها در بخش‌های بستری تغییر خواهند کرد می‌توان حجم رسوبات را ثابت نگه‌داشت. به همین ترتیب، غلظت‌های رسوب و تخلخل‌ها ممکن است با مشخص کردن ۱ ثابت نگه‌داشته شوند، که در این حالت حجم‌های بخش بستری متفاوت خواهند بود.

**گام زمانی بستر** - درحالی که محاسبات انتقال توده در هر گام زمانی مدل تکرار می‌شوند، محاسبات کفزی خاصی تنها در این گام زمانی از لایه‌ی کفزی در روزها تکرار می‌شوند. اگر گزینه‌ی حجم بستر ثابت انتخاب شود، غلظت رسوب در هر گام زمانی مدل به‌روز می‌شود و تخلخل‌ها در هر مرحله‌ی زمانی از کفزیان دوباره شمارش می‌شوند. اگر حجم بستر متغیر انتخاب شود، حجم بخش بالایی از لایه‌ی کفزی در هر مرحله‌ی زمانی با استفاده از تراکم در هر مرحله‌ی زمانی از لایه‌ی کفزی، به‌روز می‌شود.

### ۹-۴-۳- پارامترهای انتقال

**شماره‌ی میدان جریان** - براساس فرارفت، کاربر دارای یک تا شش انتخاب میدان جریان می‌باشد. به‌منظور شبیه‌سازی انتقال مواد سمی و مواد جامد سطحی، کاربر باید جریان ستون آب را انتخاب کرده و در هنگام شبیه‌سازی جامدات کل، جریان جامدات ۱ را نیز انتخاب کند. برای شبیه‌سازی سه نوع رسوب، کاربر باید جریان جامدات ۱، جریان جامدات ۲ و جریان جامدات ۳ را انتخاب کند.

**جریان‌های ستون آب،  $m^3/sec$**  - جریان‌های ستون آب متغیر با زمان، همان‌طور که در فصل (۶-۲) به تفصیل شرح داده‌شد، مشخص می‌شوند.

**سرعت انتقال رسوبات،  $m/sec$**  - متغیر زمان ته‌نشینی، رسوب، آب‌شستگی و سرعت رسوب‌گذاری را می‌توان برای هر نوع از جامدات مشخص نمود. اگر ضریب تبدیل واحدها روی  $e-5$  تنظیم شده‌باشد، آن‌گاه واحد این سرعت‌های ورودی بر اساس متر بر روز خواهند بود. این سرعت‌ها به‌صورت داخلی در نواحی مقطعی چندبرابر می‌شوند و جریان‌هایی که حامل جامدات و مواد شیمیایی جاذب بین بخش‌ها هستند، در نظر گرفته می‌شوند. سرعت‌های ته‌نشینی در برگیرنده‌ی اجزای مهم انتقال رسوبات معلق در ستون آب می‌باشند و سرعت‌های آب‌شستگی و پراکندگی رسوب، انتقال مواد جامد و مواد شیمیایی جاذب بین ستون آب و رسوبات را تعیین می‌کنند. سرعت رسوب دانه‌ها نشان‌دهنده‌ی سرعتی است که در آن بستر در واکنش به رسوب خالص، در حال افزایش می‌باشد.

**مساحت مقطعی،  $m^2$**  - مساحت سطح مشترک باید برای بخش‌های مجاور که انتقال رسوب در آن‌ها رخ می‌دهد، مشخص شود.

**تعداد میدان‌های تبادل** - تحت شرایط پراکندگی، کاربر یک تا دو انتخاب برای میدان تبادل دارد. برای شبیه‌سازی پراکندگی مواد جامد و سمی آب سطحی، کاربر باید پراکندگی ستون‌های آب را انتخاب کرده و برای شبیه‌سازی تبادل مواد سمی حل‌شده با بستر، انتشار آب منفذی را نیز انتخاب کند.

**پراکندگی ستون آب،  $m^3/sec$**  - پراکندگی ستون آب متغیر با زمان، همان‌طور که در فصل ۲ به تفصیل شرح داده‌شد، مشخص می‌شود.

**ضرایب نفوذ آب منفذی،  $m^2/sec$**  - ضریب نفوذ آب منفذی متغیر با زمان را می‌توان برای تبادل سمی محلول درون بستر یا بین بستر و ستون آب مشخص نمود. اگر ضریب تبدیل واحدها روی  $e-5$  تنظیم شده‌باشد، آن‌گاه واحد این ضرایب ورودی مترمربع بر روز می‌باشد. ضرایب انتشار به‌صورت داخلی در مناطق مقطعی تقسیم بر طول ترکیب مشخصه ضرب می‌شوند و جریانی تلقی می‌شوند که حامل مواد سمی حل‌شده در بین بخش‌های کفزی و ستون آب می‌باشند.

**مساحت مقطعی،  $m^2$**  - مساحت سطح مشترک باید برای بخش‌های مجاور که در آن‌ها نفوذ آب منفذی رخ می‌دهد، مشخص شود. این نواحی سطحی در ضرایب انتشار ضرب شده و بر طول اختلاط مشخصه تقسیم می‌شوند تا جریان تبادل آب منفذی به دست آید.

**طول مشخصه‌ی اختلاط،  $m$**  - طول مشخصه‌ی اختلاط باید برای بخش‌های مجاور که در آن‌ها نفوذ آب منفذی رخ می‌دهد، مشخص شود. مقدار طول اختلاط معمولاً برابر با عمق متوسط بخش‌های آب منفذی درگیر در تبادل می‌باشد. این طول‌های اختلاط به محصول ضرایب انتشار و نواحی مقطعی تقسیم می‌شوند تا جریان تبادل آب منفذی به دست آید.

### ۹-۴-۴- پارامترهای مرزی

این گروه از پارامترها شامل غلظت‌های مرزی، بارهای فاضلاب و شرایط اولیه می‌باشند. غلظت‌های مرزی باید برای هر بخش که ورودی‌ها، خروجی‌ها یا تبدلات جریان را دریافت می‌کند، مشخص شود. شرایط اولیه نه تنها شامل غلظت‌های اولیه می‌باشد، بلکه شامل میدان انتقال جرم و جامدات برای هر جامد و کسر محلول در هر بخش نیز می‌شود.

**غلظت‌های مرزی،  $mg/L$**  - در مرز هر یک از بخش‌ها، غلظت متغیر زمانی باید برای هر سم و برای هر نوع از جامدات شبیه‌سازی شده، تعیین شود. یک بخش مرزی با استفاده از تبادل آب خارج از شبکه؛ از جمله جریان‌های فرعی، جریان‌های خروجی پایین دست و تبادل باز پخش آب مشخص می‌شود.

**بارهای فاضلاب،  $kg/day$**  - برای هر تخلیه با منبع نقطه‌ای، بارهای متغیر زمانی سمی و جامدات را می‌توان مشخص نمود. این بارها می‌توانند نشان‌دهنده‌ی تخلیه فاضلاب‌های شهری و صنعتی، یا رواناب شهری و کشاورزی باشند.

**میدان انتقال مواد جامد** - میدان انتقال مربوط به کل جامدات یا هر نوع از جامدات باید تحت شرایط اولیه مشخص شود.

**جرم مخصوص جامد،  $g/cm^3$**  - جرم مخصوص متوسط کل رسوب یا جرم مخصوص هر نوع جامد باید مشخص شود که از این اطلاعات برای محاسبه‌ی تخلخل بخش‌های بنتیک استفاده می‌شود. پیچیدگی تابعی از غلظت رسوب و جرم مخصوص هر نوع ماده جامد می‌باشد.

**غلظت‌های اولیه،  $mg/L$**  - غلظت ماده‌ی سمی و هر نوع ماده‌ی جامد در هر بخش، باید برای زمانی که شبیه‌سازی شروع می‌شود مشخص شود. اگر از گزینه‌ی حجم متغیر برای لایه‌ی کفزی استفاده شود، غلظت رسوب لایه‌ی کفزی مشخص شده در این جا برای کل شبیه‌سازی ثابت خواهد ماند.

**کسر محلول** - کسر محلول هر جامد در هر بخش باید بر روی صفر تنظیم شود و بخش حل‌شده‌ی سموم با ضریب تقسیم‌بندی و غلظت مواد جامد کنترل می‌شود.

### ۹-۴-۵- پارامترهای تبدیل

این گروه از پارامترها شامل پارامترهای متغیر مکانی، ثابت‌ها و توابع زمان جنبشی برای اجزای کیفیت آب در حال شبیه‌سازی می‌باشند که هیچ‌کدام برای انتقال‌رسوب لازم نیستند.  
**تجزیه‌ی مرتبه‌ی اول** - دو گزینه برای کاهش مرتبه‌ی اول موادمسمی وجود دارد:

#### روش ۱: فروپاشی مرتبه‌ی اول کل توده

استفاده از نرخ تجزیه‌ی مرتبه‌ی اول فشرده و ساده نیازمند این است که کاربر یک ثابت نرخ فروپاشی را برای مواد شیمیایی و برای هر بخش از مدل وارد کند. اگر یک نرخ مرتبه‌ی اول توده‌ای ساده برای یک ماده‌ی شیمیایی خاص مشخص شود، ماده‌ی شیمیایی در آن نرخ، بدون در نظر گرفتن سایر ورودی‌ها تجزیه خواهد شد؛ به‌عنوان مثال، اگر هر دو نرخ فروپاشی متمرکز و یا یک نرخ تبدیل مرتبه‌ی اول ساده یا مرتبه‌ی دوم مشخص شوند، نرخ‌های ساده‌ی مرتبه‌ی اول یا دوم تنها در صورتی استفاده خواهند شد که نرخ توده‌ای صفر باشد.

#### روش ۲: فروپاشی مرتبه‌ی اول منحصربه‌فرد

جدول ۹-۳ نرخ تبدیل مرتبه‌ی اول ساده

واکنش	C <sub>3</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>1</sub>	ثابت
فراریت	۱۳۴۰	۷۴۰	۱۴۰	KV, day <sup>-1</sup>
	۱۳۴۵	۷۴۵	۱۴۵	THV, day
ستون آب تجزیه‌ی بیولوژیکی	۱۳۴۱	۷۴۱	۱۴۱	KBW, day <sup>-1</sup>
	۱۳۴۳	۷۴۳	۱۴۳	THBW, day
لایه بنتیک تجزیه‌ی بیولوژیکی	۱۳۴۲	۷۴۲	۱۴۲	KBS, day <sup>-1</sup>
	۱۳۴۴	۷۴۴	۱۴۴	THBS, day
قلیائی هیدرولیز	۱۳۸۱	۷۸۱	۱۸۱	KHOH, day <sup>-1</sup>
	۱۴۵۲	۸۵۲	۲۵۲	THHOH, day



KHN, day <sup>-1</sup>	۱۸۲	۷۸۲	۱۳۸۲	طبیعی هیدرولیز طبیعی
THHN, day	۲۵۳	۸۵۳	۱۴۵۳	
KHH, day <sup>-1</sup>	۱۸۳	۷۸۳	۱۳۸۳	اسیدی هیدرولیز
THHH, day	۲۵۴	۸۵۴	۱۴۵۴	
KO, day <sup>-1</sup>	۲۵۶	۸۵۶	۱۴۵۶	اکسیداسیون
THO, day	۲۵۷	۸۵۷	۱۴۵۷	
KF, day <sup>-1</sup>	۲۸۷	۸۸۷	۱۴۸۲	فتولیز
THF, day	۲۸۹	۸۸۹	۱۴۸۹	
KE, day <sup>-1</sup>	۵۷۱	۱۱۷۱	۱۷۷۱	واکنش زائد
THE, day	۵۷۲	۱۱۷۲	۱۷۷۲	

استفاده از نرخ تبدیل مرتبه‌ی اول ساده نیازمند این است که کاربر یک ثابت نرخ کلی ( $day^{-1}$ ) یا نیمه‌عمر (day) را برای هر فرآیند خاص شبیه‌سازی شده وارد کند. اگر یک نرخ تبدیل مرتبه اول ساده مشخص شود، اولویت ورودی دیگر برای آن فرآیندهای خاص است؛ به‌عنوان مثال، اگر هم یک مرتبه اول و هم نرخ تبدیل مرتبه دوم مشخص شود، نرخ مرتبه دوم فقط در صورت ثابت بودن نرخ مرتبه اول صفر استفاده می‌شود. اعداد ثابت نرخ تبدیل مرتبه اول در جدول (۳-۵) آورده شده‌است. ضریب‌های تقسیم‌بندی TOXI-TOXI اجازه می‌دهد تا ضریب تقسیم‌بندی واحد ثابت یا مجموعه‌ای از ضرایب تقسیم‌بندی متغیر مکانی متغیر باشد:

### گزینه‌ی ۱: ضریب تقسیم ثابت

جدول ۴-۹ ضریب تقسیم‌بندی ثابت

	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>
Solids 1	۱۱۱	۷۱۱	۱۳۱۱
Solids 2	۱۱۶	۷۱۶	۱۳۱۶
Solids 3	۱۲۱	۷۲۱	۱۳۲۱

این گزینه به کاربر اجازه می‌دهد تا مستقیماً ضریب تقسیم‌بندی ثابت را که در کل شبکه‌ی مدل اعمال می‌شود، وارد کند. این ضرایب تقسیم با استفاده از مجموعه ثابت‌های PIXC در واحدهای ورود به سیستم (Lw/kg) وارد نمی‌شوند. اگر فقط یک نوع ماده‌ی شیمیایی و یک نوع جامد شبیه‌سازی شوند، می‌توان ضریب تقسیم را با تعیین مقداری ثابت ۱۱۱ PIXC(1.1) وارد نمود. تمام اطلاعات مربوط به تقسیم‌بندی دیگر باید حذف شوند (به‌عنوان مثال LKOW، LKOC و FOC).

اگر سه ماده‌ی شیمیایی شبیه‌سازی شوند، کاربر می‌تواند مقادیر ضرایب خود را به یک جامد تولیدی با استفاده از سه مقدار PIXC - ثابت، یعنی ۱۱۱ و ۷۱۱ و ۱۳۱۱ را وارد نماید.

اگر چند نوع ماده‌ی جامد شبیه‌سازی شوند، ضرایب تقسیم می‌توانند به‌طور جداگانه در ورودی هر یک از سه نوع ماده‌ی جامد باشند. ضرایب تقسیم ثابت برای مواد شیمیایی ۱ تا نوع جامد ۲ و ۳ را می‌توان به‌ترتیب با مشخص نمودن مقادیر PIXC مناسب برای ثابت‌های ۱۱۶ و ۱۲۱ وارد نمود.

اعداد ثابت برای تقسیم شیمیایی i به جامد j در جدول (۴-۶) خلاصه شده‌اند.

## روش ۲: ضریب تقسیم متغیر - فضایی

این گزینه به کاربر اجازه می‌دهد تا مستقیماً ضرایب تقسیم متغیرهای فضایی را برای مواد شیمیایی وارد کند. اگر فقط یک نوع ماده‌ی شیمیایی و یک نوع جامد، شبیه‌سازی شوند، می‌توان با تعیین مقادیر متغیر-بخش برای پارامتر FOC (ISEG,1) - 7 ضریب را وارد نمود، و همچنین مقدار ثابت ۱۰۱، LKOC، باید برای مقدار غیر زوجی کوچکی مانند ۲۰- e-۱۱ داده شود.

اگر چند نوع ماده‌ی جامد شبیه‌سازی شوند، آن‌گاه ممکن است مجموعه‌های جداگانه‌ای از ضرایب تقسیم در ورودی هر یک از سه نوع ماده‌ی جامد، وجود داشته باشند. ضرایب تقسیم ثابت برای مواد شیمیایی اول مثل روند قبلی و برای ماده ۲ و ۳ را می‌توان به‌ترتیب با تعیین مقادیر بخش-متغیر برای FOC(ISEG,2)، FOC(ISEG,3) و... تا پارامترهای ۸ و ۹ وارد کرد.

جدول ۵-۹ ضرایب تقسیم ثابت برای مواد شیمیایی

واکنش	C <sub>3</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>1</sub>	ثابت
ستون آب تجزیه‌ی بیولوژیکی YBW <sub>ci</sub>	۱۷۷	۱۷۶		C <sub>1</sub>
	۷۷۷		۷۷۶	C <sub>2</sub>
		۱۳۷۷	۱۳۷۶	C <sub>3</sub>
لایه بنتیک	۱۷۹	۱۷۸		C <sub>1</sub>

C <sub>2</sub>	۷۷۸		۷۷۹	تجزیه‌ی بیولوژیکی YBS <sub>ci</sub>
C <sub>3</sub>	۱۳۷۸	۱۳۷۹		
C <sub>1</sub>		۲۴۶	۲۴۷	قلیائی هیدرولیز YHOH <sub>ci</sub>
C <sub>2</sub>	۸۴۶		۸۴۷	
C <sub>3</sub>	۱۴۴۶	۱۴۴۷		
C <sub>1</sub>		۲۴۸	۲۴۹	طبیعی هیدرولیز YHN <sub>ci</sub>
C <sub>2</sub>	۸۴۸		۸۴۹	
C <sub>3</sub>	۱۴۴۸	۱۴۴۹		
C <sub>1</sub>		۲۵۰	۲۵۱	اسیدی هیدرولیز YHH <sub>ci</sub>
C <sub>2</sub>	۸۵۰		۸۵۱	
C <sub>3</sub>	۱۴۵۰	۱۴۵۱		
C <sub>1</sub>		۲۸۱	۲۸۲	اکسیداسیون YOX <sub>ci</sub>
C <sub>2</sub>	۸۸۱		۸۸۲	
C <sub>3</sub>	۱۴۸۱	۱۴۸۲		
C <sub>1</sub>		۵۶۶	۵۶۷	فوتولیز YF <sub>ci</sub>
C <sub>2</sub>	۱۱۶۶		۱۱۶۷	
C <sub>3</sub>	۱۷۶۶	۱۷۶۷		
C <sub>1</sub>		۵۹۶	۵۹۷	واکنش اضافی YE <sub>ci</sub>
C <sub>2</sub>	۱۱۹۶		۱۱۹۷	
C <sub>3</sub>	۱۷۹۶	۱۷۹۷		

میدان‌های واکنش و ثابت‌های بازده ورودی که ممکن است مشخص شوند، عبارتند از: YBS<sub>ci</sub>، YHOH<sub>ci</sub>، YHN<sub>ci</sub>، YHH<sub>ci</sub>، YBW<sub>ci</sub>، YX<sub>ci</sub> و Y<sub>ci</sub> که در آن C واکنش-دهنده‌ی شیمیایی (۱، ۲ یا ۳) بوده و i نیز محصول شیمیایی (۱، ۲ یا ۳) در واحدهای میلی‌گرم C بر میلی‌گرم i می‌باشد. ضرایب میدان ممکن است همان‌طور که در جدول (۵-۵) آمده‌است، برای تمام ترکیبات ممکن مواد شیمیایی و واکنش‌ها ارائه شود.



فصل دهم  
مواد شیمیایی آلی

در جوامع پیشرفته، مواد شیمیایی آلی تولید، استفاده و به مقدار زیاد دفع می‌شوند. از گروه‌های عمده‌ی این مواد می‌توان به آفت‌کش‌ها، بی‌فنیل‌های چندکلره، هیدروکربن‌های آلیفاتیک هالوژنه، اترهای هالوژنه، آروماتیک‌های تک‌حلقه‌ای، استره‌ای فتالات، هیدروکربن‌های آروماتیک چندحلقه‌ای و نیتروس‌آمین‌ها اشاره کرد. مواد شیمیایی آلی می‌توانند با استفاده از مسیرهای مختلف از جمله، منابع نقطه‌ای تخلیه‌ی فاضلاب و یا منابع غیرنقطه‌ای به صورت رواناب وارد محیط آبی شوند. برخی از این مواد شیمیایی آلی می‌توانند از طریق زنجیر غذایی باعث ایجاد سمیت برای موجودات آبی و یا بیوکسنتره شوند. از آنجایی که ممکن است انسان‌ها از خوردن آب یا ماهی آلوده تأثیر بپذیرند، لذا معیارهایی برای حفاظت از سلامت انسان و جوامع آبیان بومی درمورد برخی مواد شیمیایی آلی اعلام شده‌است.

فرآیندهای محیطی از جمله فرآیندهای فیزیکی (جذب هیدروفوبیک، فراریت و رسوب‌گذاری)، شیمیایی (یونیزاسیون، رسوب‌گذاری، انحلال، هیدرولیز، فوتولیز، اکسیداسیون و احیاء) و بیولوژیکی (تجزیه-زیستی و بیوکسنتره) می‌توانند بر انتقال و سرنوشت مواد شیمیایی آلی در محیط‌های آبی تأثیرگذار باشند. مدل WASP 6، این موارد به استثنای احیاء، ته‌نشینی و انحلال را با وضوح بیش‌تر کنترل می‌کند. اگر فرآیند جنبشی این واکنش‌ها توسط کاربر توصیف شود، می‌تواند به‌عنوان یک واکنش اضافی نیز در نظر گرفته شود.

مدل WASP 6 امکان شبیه‌سازی فرآیندهای مختلفی که ممکن است بر مواد شیمیایی سمی اثرگذار باشند را فراهم می‌کند و هم‌چنین فرضیات نسبتاً کمی را در مورد فرآیندهایی خاص که بر انتقال، تبدیل و واکنش‌های جنبشی تأثیر می‌گذارند، ارائه می‌دهد. این مدل برای ارائه‌ی یک چارچوب گسترده و قابل اجرا برای بسیاری از مشکلات زیست‌محیطی طراحی شده‌است و به کاربر اجازه می‌دهد تا پیچیدگی مدل را با الزامات مسئله مطابقت دهد.

اگرچه مدل WASP 6 قابلیت فراوانی در استفاده از طیف‌گسترده‌ای از مقدار و نوع داده دارد، اما ممکن است برای هر شبیه‌سازی خاص نیاز به داده‌ی زیاد نباشد. بیش‌تر اوقات، شبیه‌سازی‌های شیمیایی آلی تنها از جذب و یک یا دو فرآیند تبدیل که به‌طور قابل توجهی بر یک ماده شیمیایی خاص تأثیر می‌گذارند، استفاده می‌کنند. آن‌چه که توسط توابع فرآیند مرتبه دوم و بار داده‌های ورودی حاصل می‌شود؛ توانایی برون‌یابی با اطمینان بیش‌تر برای شرایط آینده می‌باشد. از طرفی کاربر باید مقدار بهینه‌ی واسنجی تجربی و مشخصات فرآیند را برای هر کاربرد تعیین کند.

جدول ۱۰-۱- مروری بر مواد شیمیایی آلی WASP

سیستم	متغیر
۱	CHEMICAL 1
۲	SOLIDS 1
۳	SOLIDS 2
۴	SOLIDS 3
۵	CHEMICAL 2
۶	CHEMICAL 3

مواد شیمیایی آلی و جامدات مربوطه با استفاده از برنامه TOXI شبیه‌سازی می‌شوند. TOXI انتقال و تبدیل یک به سه ماده‌ی شیمیایی و یک به سه نوع ماده‌ی ذره‌ای را شبیه‌سازی می‌کند (طبقات مواد جامد، جدول (۱۰-۱)). این سه ماده‌ی شیمیایی ممکن است مستقل بوده و یا مانند توالی محصول والد-فرزند، با بازده واکنش مرتبط باشند. شبیه‌سازی جامدات در فصل ۳ توضیح داده شده است و شبیه‌سازی مواد شیمیایی آلی در ادامه توضیح داده خواهد شد. ساختارهای کاری فرآیند شیمیایی آلی از سیستم مدل‌سازی آنالیز EXAMS مشتق شده‌اند (برنز و همکاران، ۱۹۸۲؛ برنز و کلاین، ۱۹۸۵).

هر ماده‌ی شیمیایی آلی ممکن است به صورت یک ترکیب خنثی و تا چهارگونه‌ی یونی وجود داشته باشد. گونه‌های خنثی و یونی می‌توانند در پنج مرحله وجود داشته باشند: محلول، جذب شده در کربن آلی محلول (DOC) و جذب شده به هر کدام از سه نوع ماده‌ی جامد (۸). تعادل مکانی به گونه‌ای فرض می‌شود که توزیع شیمیایی بین هریک از گونه‌ها و فازها توسط ضرایب توزیع یا تقسیم تعریف شود. در این روش، غلظت هرگونه‌ی خاص در هر فاز را می‌توان از غلظت شیمیایی کل محاسبه کرد. بنابراین تنها یک متغیر کیفیت منفرد (سیستم WASP) که نشان‌دهنده‌ی غلظت کل است برای هر ماده‌ی شیمیایی موردنیاز می‌باشد. این مدل از شش سیستم تشکیل شده است سه ماده‌ی شیمیایی و سه ماده‌ی جامد- که معادله‌ی عمومی موازنه جرم WASP 6 برای آن حل شده است.

عوامل دیگری نیز وجود دارند که ممکن است بر انتقال و تبدیل مواد شیمیایی شبیه‌سازی شده تأثیر بگذارند؛ به عنوان مثال، دمای آب بر سرعت واکنش تأثیرگذار بوده و pH نیز می‌تواند بر یونیزاسیون و واکنش‌های هیدرولیز تأثیر بگذارد و همچنین جذب نیز ممکن است بر روی کربن آلی محلول رخ دهد. این غلظت‌ها یا ویژگی‌ها از طریق استفاده از پارامترهای مدل و توابع زمانی در TOXI گنجانده شده‌اند. این

پارامترها به جای شبیه‌سازی به مدل (توصیف‌شده) تخصیص یافته‌اند و ممکن است از لحاظ مکان (به‌عنوان مثال بین بخش‌های مدل) و یا با گذشت زمان تغییر کنند. نمونه‌هایی از غلظت یا ویژگی‌هایی که برای مدل توصیف شده‌اند در جدول (۱۰-۲) ارائه شده‌اند.

جدول ۱۰-۲ نمونه‌ای از پارامترهایی که برای مدل توصیف شده‌اند

پارامتر یا تابع زمان	واحد	متغیر زمان	فرآیندهای جنبشی تحت تأثیر
دمای آب	°C	Y	همه
کربن آلی محلول	mg/L	N	جذب، فوتولیز
ذرات کربن آلی	None	N	جذب
pH	-	Y	هیدرولیز
غلظت اکسیدان	moles/L	N	اکسیداسیون
غلظت باکتریایی	variable	Y	تجزیه‌ی بیولوژیکی
خاصیت اضافی	variable	N	واکنش مرتبه‌ی دوم اضافی
سرعت باد	m/sec	Y	فراریت
دمای هوا	°C	Y	فراریت
غلظت کلروفیل a	mg/L	Y	فوتولیز
شدت نور معمولی	None	Y	فوتولیز (گزینه‌ی ۲ فقط)

#### ۱۰-۱- واکنش‌های سمی و تبدیل

در یک محیط آبی، ممکن است یک ماده‌ی شیمیایی آلی بین فازها منتقل شود و توسط هریک از فرآیندهای شیمیایی و بیولوژیکی تجزیه شود. یونیزاسیون می‌تواند ماده‌ی شیمیایی را به چندین شکل طبقه‌بندی کند. فرآیندهای انتقال تعریف‌شده در این مدل شامل جذب و فراریت بوده و فرآیندهای تبدیل تعریف‌شده نیز شامل تجزیه‌ی زیستی، هیدرولیز، فوتولیز و اکسیداسیون شیمیایی می‌باشند. واکنش‌های جذب و یونیزاسیون با واکنش‌های تعادلی؛ و فرآیندهای دیگر نیز با معادلات نسبی توصیف می‌شوند. معادلات نسبی ممکن است با ثابت‌های مرتبه‌ی اول یا با ثابت‌های ویژه‌ی شیمیایی مرتبه‌ی دوم و پارامترهای خاص محیط تعیین شوند که ممکن است در مکان و زمان متغیر باشند.



WASP 6 از معادله‌ی تعادل جرم برای محاسبه‌ی رسوب، جرم شیمیایی و غلظت برای هر بخش در یک شبکه‌ی خاص استفاده می‌کند که ممکن است شامل آب‌سطحی، آب زیرین، سطح بستر و بستر زیرین باشد. در یک شبیه‌سازی، رسوب در میان بخش‌های آب حرکت کرده و پراکنده می‌شود، در بخش‌های کفزی ته‌نشین شده و فرسایش می‌یابد، و بین بخش‌های کفزی از طریق رسوب خالص، فرسایش یا بار بستر حرکت می‌کند. فصل ۳ به جزئیات فرآیند انتقال سوب TOXI می‌پردازد.

در شبیه‌سازی، ماده‌ی شیمیایی می‌تواند دست‌خوش چندین تبدیل فیزیکی یا شیمیایی شود که می‌توان آن‌ها را در دو گروه واکنش‌های آهسته و سریع طبقه‌بندی کرد. واکنش‌های سریع دارای زمان‌های مشخصی برای واکنش هستند که بسیار سریع‌تر یا برابر با ترتیب گام زمانی در مدل هستند و با فرض تعادل مکانی کنترل می‌شوند. واکنش‌های کند دارای زمان‌های مشخص و طولانی‌تر از گام زمانی مدل می‌باشند. این واکنش‌ها با فرض فرآیند جنبشی مرتبه‌ی اول محلی با استفاده از یک نسبت ثابت و یک‌نواخت انجام می‌شوند. این نسبت، توسط کاربر تعریف و یا در داخل مدل براساس چندین نرخ فرآیند که برخی از آن‌ها از مرتبه‌ی دوم هستند، کنترل می‌شود. بنابراین، نسبت فروپاشی مؤثر مرتبه‌ی اول می‌تواند با زمان و مکان متفاوت باشد و به دفعات موردنیاز در طول یک شبیه‌سازی محاسبه شود.

ماده‌ی شیمیایی در میان بخش‌های آب حرکت کرده و پراکنده می‌شود و توسط اختلاط پراکنده با بخش‌های زیرسطحی مبادله می‌شود. مواد شیمیایی جذب‌شده به وسیله‌ی ستون‌های آب ته‌نشین شده و از بخش‌های زیربستری فرسایش می‌یابند. در داخل بستر، مواد شیمیایی حل شده از طریق پراکندگی و نفوذ آب منفذی به سمت پایین یا بالا حرکت می‌کند. مواد شیمیایی جذب‌شده از طریق رسوب خالص یا فرسایش به سمت پایین یا بالا حرکت می‌کند. هم ثابت‌های نسبی و هم ضرایب تعادل باید در بیش‌تر مطالعات شیمیایی سمی تخمین زده‌شوند. اگرچه این موارد را می‌توان از روی ویژگی‌های شیمیایی و ویژگی‌های محیطی محلی در مدل محاسبه نمود اما بهتر است تا واسنجی یا کالیبراسیون خاص مکانی انجام شود.

هنگام به کار بردن TOXI باید برخی محدودیت‌ها را در نظر گرفت. در وهله‌ی اول، غلظت مواد شیمیایی باید تقریباً ناچیز در نظر گرفته‌شود، به این معنی که کم‌تر از نصف حلالیت یا  $10^{-5}$  مولار باشد. چراکه، در غلظت‌های بالاتر، فرض‌های تقسیم خطی و تبدیل شروع به تغییر می‌کنند. چگالی ماده‌ی شیمیایی ممکن است به‌ویژه در نزدیکی منبع، مانند نشت نفت اهمیت یابد. غلظت‌های زیاد می‌توانند بر ویژگی‌های مهم محیطی مثل pH و یا جمعیت باکتری‌ها تأثیر بگذارند و در نتیجه نسبت تبدیل را تغییر دهند. TOXI چنین پدیده‌ی بازخوردی را شامل نمی‌شود.

### ۱۰-۲- پیاده‌سازی مدل

برای شبیه‌سازی مواد شیمیایی آلی با WASP 6، از پیش‌پردازنده یا ویرایش‌گر متن برای ایجاد یک فایل ورودی TOXI استفاده کنید. مجموعه داده‌ی ورودی مدل و پارامترهای ورودی، مشابه داده‌های مدل ردیابی محافظه‌کارانه هستند که در فصل ۲ توضیح داده شد. کاربر به این پارامترهای اساسی، بخش‌های زیرین، نسبت انتقال مواد جامد و پارامترهای تبدیل را اضافه می‌کند. در طول شبیه‌سازی، مواد جامد و مواد شیمیایی آلی، هم به وسیله پراکندگی و هم سرعت انتشار ستون آب منتقل خواهند شد. در WASP 6؛ همان‌طور که در فصل ۳ توضیح داده شد، نسبت انتقال مواد جامد در ستون آب و بستر از طریق سه میدان انتقال مواد جامد وارد می‌شوند. انتقال ذرات مواد شیمیایی آلی از جریان‌های مواد جامد تبعیت می‌کند. کاربر باید کسر محلول (۰/۰) و میدان انتقال مواد جامد برای هر یک از مواد جامد شبیه‌سازی شده در شرایط اولیه را تعیین کند. برای شبیه‌سازی جامدات کل نیز، باید از جامدات ۱ استفاده شود.

### ۱۰-۲-۱- پارامترهای ورودی مدل

پارامترهای ورودی برای WASP 6 در چهار بخش اصلی از محیط پیش‌پردازنده، انتقال، مرزها و تبدیل آماده می‌شوند. پارامترهای ورودی شیمیایی آلی متشکل از سه بخش اول، مشابه پارامترهای موجود در مدل سموم ساده می‌باشند. برای مطالعه‌ی خلاصه‌ای از این پارامترهای ورودی به بخش (۶-۲) مراجعه کنید. در بخش عنوان شده و در ادامه‌ی این فصل، پارامترهای واکنش شیمیایی آلی توصیف می‌شوند.

### ۱۰-۲-۲- پارامترهای تبدیل

این گروه از پارامترها شامل پارامترهای متغیر مکانی، ثابت‌ها و توابع زمانی جنبشی برای اجزای کیفیت آب در حال شبیه‌سازی می‌باشند. واکنش‌های شیمیایی آلی و پارامترهای ورودی مدل در بخش‌های زیر توضیح داده شده‌اند. از آن‌جا که دمای آب می‌تواند بر هر واکنش شیمیایی تأثیر بگذارد، در این‌جا به توضیح آن پرداخته شده‌است.

**دمای آب، °C** - دمای آب می‌تواند در مکان و زمان تغییر کند و بر سرعت تمام واکنش‌های شیمیایی تأثیر بگذارد. دمای متغیر آب را می‌توان با استفاده از پارامترهای TEMP و TMPFN و دمای تابع زمان TEMPN (۱-۴) مشخص کرد. اگر دما در زمان ثابت بماند، آن‌گاه کاربر باید دمای قطعه را با استفاده از پارامتر TEMP وارد کرده و گزینه‌ی TMPFN و TEMPN (۱-۴) را حذف نماید.

اگر کاربر بخواهد دمای متغیر-زمانی را وارد کند، آن‌گاه باید مقادیر پارامتر TEMP را بر روی ۱ تنظیم نماید. پارامتر TMPFN نشان می‌دهد که کدام تابع دما برای هر بخش در مدل استفاده خواهد شد. مقادیر ۱، ۲، ۳ یا ۴ توابع زمانی را به ترتیب TEMPN (۱)، TEMPN (۲)، TEMPN (۳) و TEMPN

(۴) می‌نامند. دمای آب از طریق این توابع زمانی یک سری دما در مقابل مقادیر زمان وارد می‌شود. پارامتر TEMP و تابع انتخاب‌شده‌ی TEMPN بخش و زمان مخصوص دمای آب مورد استفاده توسط TOXI را نشان می‌دهد.

TEMP و TMPFN به ترتیب به پارامترهای ۳ و ۲ در شناسایی شده‌اند. TEMPN (۴-۱) در TOXI به توابع زمانی (۴-۱) شناسایی می‌شوند. (Group I, Record 2, Group G, Record 4, ) (PARAM(I,3), PARAM(I,2), VALT(1-4,K)).

### نماد سازی

در TOXI، تعریف نمادهای مرتبط با غلظت مانند جدول (۳-۱۰) آسان است. لطفا توجه داشته باشید که در توسعه‌ی کلی معادلات در بخش‌های زیر، گاهی اوقات اشتراک "i" و "j" برای راحتی حذف می‌شوند.

جدول ۳-۱۰ تعریف نمادهای به کار رفته در مدل به همراه واحدهای آنان

نماد	توصیف	واحد
$C_{ij}$	غلظت ماده‌ی شیمیایی کل i در بخش j.	$mg_c/L$
$C_{wij}$	غلظت ماده‌ی شیمیایی محلول در بخش j.	$mg_c/L$
$\hat{C}_{wij}$	غلظت ماده‌ی شیمیایی محلول در آب در بخش j؛ $C_{wij}/n_j$	$mg_c/L_w$
$C_{sij}$	غلظت ماده‌ی شیمیایی در رسوب نوع "s" در بخش j.	$mg_c/L$
$\hat{C}_{sij}$	غلظت ماده‌ی شیمیایی جامد "i" در رسوب نوع "s" در بخش j؛ $C_{sij}/M_{sij}$	$mg_c/kg_s$
$C_{Bj}$	غلظت ماده‌ی شیمیایی DOC-جامد در بخش j.	$mg_c/L$
$\hat{C}_{Bj}$	غلظت ماده‌ی شیمیایی DOC-جامد در بخش j؛ $C_{Bj}/B_j$	$mg_c/kg_B$
$m_{sj}$	غلظت رسوب نوع "s" در بخش j.	$mg_c/L$
$M_{sj}$	غلظت رسوب نوع "s" در بخش j؛ $m \cdot 10^{-6}$	$kg_s/L$
$\hat{M}_{sj}$	غلظت رسوب نوع "s" در آب در بخش j؛ $M_{sj}/n_j$	$kg_s/L_w$
$B_j$	غلظت DOC در بخش j.	$kg_B/L$
$B'_j$	غلظت DOC در آب در بخش j؛ $B_j/n_j$	$kg_B/L_w$
$n_j$	تخلخل یا حجم آب در هر حجم بخش j.	$L_w/L$
$K_{psij}$	ضریب تقسیم‌بندی شیمیایی i در رسوب نوع "s" در بخش j.	$L_w/kg_s$
$K_{pBij}$	ضریب تقسیم شیمیایی i در DOC در بخش j.	$L_w/kg_B$

$f_{Dij}$	کسری مواد شیمیایی $i$ در بخش $z$ در فاز محلول.	-
$f_{Bij}$	کسری از مواد شیمیایی $i$ در بخش $z$ در فاز DOC-جامد	-
$f_{Sij}$	کسری از مواد شیمیایی $i$ در بخش $z$ در فاز جامد "s"	-

### ۱۰-۳- یونیزاسیون

یونیزاسیون، تجزیه‌ی یک ماده‌ی شیمیایی به چندین یون باردار می‌باشد. در یک محیط آبی برخی از مواد شیمیایی ممکن است تنها به شکل خنثی خود وجود داشته باشند، درحالی‌که برخی دیگر از این مواد شیمیایی ممکن است با مولکول‌های آب واکنش دهند و یون‌های باردار مثبت (کاتیونی) و یا منفی (آنیونی) تشکیل دهند. این واکنش‌ها سریع هستند و به‌طور کلی در تعادل (مکانی) فرض می‌شوند. در حالت تعادل، توزیع مواد شیمیایی بین گونه‌های خنثی و یونیزه‌شده توسط pH، دمای آب و ثابت‌های یونیزه‌شدن کنترل می‌شود.

یونیزاسیون می‌تواند به دلیل ویژگی‌های سم‌شناسی و شیمیایی متفاوت گونه‌های خنثی و یونیزه‌شده مهم باشد؛ به‌عنوان مثال در برخی موارد تنها ممکن است شکل خنثی از ماده‌ی شیمیایی، از طریق غشاهای زیستی واکنش داده و یا منتقل شود که منجر به مسمومیت می‌شود. در نتیجه، اغلب لازم است توزیع مواد شیمیایی در میان اشکال یونی را محاسبه کنیم و به آن‌ها اجازه دهیم که در سرعت‌های مختلف واکنش داده و یا تغییر کنند؛ برای مثال ثابت‌های جذب و واکنش مختلف (مانند هیدرولیز، تجزیه‌ی زیستی، فوتولیز و غیره) در TOXI، ممکن است برای هر فرم یونی از ماده شیمیایی مشخص شود.

### ۱۰-۳-۱- بررسی واکنش‌های یونیزاسیون در TOXI

این امکان برای هر یک از سه ماده‌ی شیمیایی که ممکن است در TOXI شبیه‌سازی شوند، وجود دارد که به پنج شکل؛ از جمله (۱) مولکول خنثی، (۲) کاتیون‌های باردار یگانه، (۳) کاتیون‌های باردار دوگانه، (۴) آنیون‌های باردار یگانه و (۵) آنیون‌های باردار دوگانه رخ دهند. هر یک از گونه‌های خنثی یا یونی نیز ممکن است در فاز محلول یا به کربن آلی حل شده (DOC) و یا به سه نوع جامد جذب شوند. در مجموع ممکن است ۲۵ شکل از هر ماده‌ی شیمیایی رخ دهد. هر شکل شیمیایی ممکن است بازفعالیت‌های متفاوتی داشته باشد که توسط میزان تجزیه و تبدیل مختلف منعکس می‌شود. کاربر با مشخص کردن ورودی مدل، روند شکل‌گیری را کنترل می‌کند.

فرض بر این است که یک ماده‌ی شیمیایی که توسط TOXI مدل‌سازی شده‌است، که مولکول‌های خنثی در نظر گرفته می‌شود و ممکن است با مولکول‌های آب واکنش دهد تا به‌صورت انفرادی و احتمالاً،

کاتیون‌ها و آنیون‌های دارای بار دوگانه تشکیل شود؛ برای مثال، ممکن است یک اسید آلی ( $A^{--}$ ) با آب واکنش دهد که به صورت زیر می‌باشد:



به طوری که این ماده‌ی شیمیایی می‌تواند به طور هم‌زمان از یک تا حداکثر پنج‌گونه وجود داشته‌باشد. قانون عمل جمعی را می‌توان برای توصیف تعادل شیمیایی مکانی برای هر یک از این واکنش‌ها به کار برد:

$$K_{b1} = \frac{[AH_3^+][OH^-]}{[AH_2]} \quad (5-10)$$

$$K_{b2} = \frac{[AH_4^{++}][OH^-]}{[AH_3^+]} \quad (6-10)$$

$$K_{a1} = \frac{[AH^-][H^+]}{[AH_2]} \quad (7-10)$$

$$K_{a1} = \frac{[A^{--}][H^+]}{[AH^-]} \quad (8-10)$$

که در آن  $K$  ثابت تعادل برای تشکیل اسید ( $K_{ai}$ ) یا گونه‌های آنیونی، و یا باز ( $K_{bi}$ ) یا گونه‌های کاتیونی می‌باشد.

غلظت کل ماده‌ی شیمیایی ویژه برابر است با مجموع غلظت هر یک از این شکل‌ها که توسط فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$C = AH_2 + AH_3^+ + AH_4^{++} + AH^- + A^{--} \quad (9-10)$$

که ممکن است با قانون عمل جمعی ترکیب شود.

$$C = AH_2 \left[ \frac{K_{b1}}{[OH^-]} + \frac{K_{b1}K_{b2}}{[OH^-]^2} + \frac{K_{b1}}{[H^+]} + \frac{K_{b1}K_{b2}}{[H^+]^2} \right] \quad (10-10)$$

طبق تعریف،  $[H^+] = 10^{-pH}$  و  $[OH^-] = 10^{14-pH}$ ؛ عبارت داخل پرانتز در معادله (۱۰-۱۱) که با D نشان داده می‌شود، می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$C = AH_2 \left[ \frac{K_{b1}}{10^{pH-14}} + \frac{K_{b1}K_{b2}}{(10^{pH-14})^2} + \frac{K_{a1}}{10^{-pH}} + \frac{K_{a1}K_{a2}}{(10^{-pH})^2} \right] \quad (11-10)$$

معادلات (۱۰-۱۱) و (۱۱-۱۰) ممکن است با معادلات (۵-۱۰) ترکیب شوند و برای کسری از مواد شیمیایی کل  $f^k$  که در هریک از گونه‌های شیمیایی k اتفاق می‌افتد حل شوند، با توجه به غلظت کل شیمیایی، pH و ثابت‌های تعادل:

$$f^0 = \frac{1}{D} \quad (12-10)$$

$$f^+ = \frac{K_{b1}/10^{pH-14}}{D} \quad (13-10)$$

$$f^{++} = \frac{K_{b1}K_{b2}/(10^{pH-14})^2}{D} \quad (14-10)$$

$$f^- = \frac{K_{a1}/10^{-pH}}{D} \quad (15-10)$$

$$f^{--} = \frac{K_{a1}K_{a2}/(10^{-pH})^2}{D} \quad (16-10)$$

نرخ واکنش‌های شیمیایی نیز ممکن است با دما تغییر کند به طوری که ثابت‌های تعادل تابعی از دما باشند. وابستگی تابعی این ثابت‌ها به دما را می‌توان با معادله وانت هاف توصیف کرد:

$$\frac{d \ln K_i}{d T_K} = \frac{E_{ai}}{R T_K^2} \quad (17-10)$$

یا به شکل یکپارچه:

$$K_i = \text{ثابت تعادل}$$

$$A_i = \text{ضریب فراوانی،}$$

$$E_{ai} = \text{تغییر استاندارد آنتالپی برای واکنش، kcal/mole}$$

R = ثابت گاز عمومی، °K/mole kcal.

$T_K$  = دمای آب، °K.

$T_{Ri}$  = درجه حرارت مرجع که در آن ثابت واکنش یونیزاسیون ورودی مشاهده شد، °K.

جدول ۱۰-۴ توصیف عبارات به کار رفته در معادلات

واحد SI	دامنه مشترک	نشانه گذاری	توصیف
-	۵-۹	pH	لگاریتم منفی فعالیت یون هیدروژن $[H^+]$
-	-	$pK_{ai}$	لگاریتم منفی ثابت یونیزاسیون برای اسید
-	-	$pK_{bi}$	لگاریتم منفی ثابت یونیزاسیون برای باز
kcal/mole	۴-۸	$E_{ai}$	تغییر آنتالپی برای واکنش یونیزاسیون
°C	۴-۸	T	دمای آب
°C	۲۰-۲۵	$T_{Ri}$	درجه حرارت مرجع

#### ۱۰-۴- پیاده سازی مدل

اطلاعات مورد نیاز برای اجرای یونیزاسیون در TOXI در جدول (۱۰-۴) خلاصه شده است که در وهله اول مشخص می کند که آیا یک نوع یونی خاص در این شبیه سازی گنجانده شده است یا خیر و در صورت انتخاب یک نوع خاص، اطلاعات لازم برای محاسبه ی شکل گیری آن وجود دارد؛ به عنوان مثال، برای محاسبه ی یک گونه ی یونی خاص، لازم است که  $pK$  (لگاریتم منفی) ثابت تعادل را برای تشکیل اسید و یا باز و انرژی فعال سازی مورد استفاده در معادله وانت هاف وارد کنیم تا ثابت تعادل را با دما تنظیم کنیم. اگر انرژی آنتالپی ورودی نباشد هیچ تصحیح دمایی رخ نخواهد داد. اگر هیچ داده ای برای یونیزاسیون وارد نشود، تعادل انجام نمی شود و واکنش ها و تبدیل ها به شکل کلی یا محلول شیمیایی به صورت مناسب اعمال خواهد شد.

علاوه بر ثابت های تشکیل گونه های یونی، به pH و دما (اگر نرخ درجه حرارت تصحیح شود) نیز نیازی باشد. pH و دما پارامترهایی هستند که برای هر بخش از مدل مشخص شده اند و ممکن است ثابت یا متغیر زمانی باشند.

اگر یونیزاسیون در ورودی معین شود، ممکن است نسبت های تبدیل و واکنش جداگانه ای برای هر ویژگی یونی مشخص شود؛ برای مثال، در صورت لزوم، ثابت های مختلف جذب، تجزیه ی زیستی، هیدرولیز،

اکسیداسیون و فتولیز ممکن است برای هر ویژگی یونی مشخص شوند که انعطاف‌پذیری قابل توجهی در کاربرد مدل ایجاد می‌کنند.

جدول ۱۰-۵ ثابت‌های مختلف متغیرهای ورودی

مشخصات یون "i"	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	متغیر ورودی
+	۸۵	۶۸۵	۱۲۸۵	نماد گونه‌ها SFLG <sub>i</sub>
++	۸۶	۶۸۶	۱۲۸۶	
-	۸۷	۶۸۷	۱۲۸۷	
--	۸۸	۶۸۸	۱۲۸۸	
+	۹۱	۶۹۱	۱۲۹۱	لگاریتم منفی ثابت یونیزاسیون، PKA <sub>i</sub>
++	۹۲	۶۹۲	۱۲۹۲	
-	۹۳	۶۹۳	۱۲۹۳	
--	۹۴	۶۹۴	۱۲۹۴	
+	۹۵	۶۹۵	۱۲۹۵	آنتالپی واکنش یونیزاسیون، EPKA <sub>i</sub> kcal/mole
++	۹۶	۶۹۶	۱۲۹۶	
-	۹۷	۶۹۷	۱۲۹۷	
--	۹۸	۶۹۸	۱۲۹۸	
همه	۹۹	۶۹۹	۱۲۹۹	دمای مرجع، TREFI °C

پارامترهای ورودی تبدیل برای یونیزاسیون در زیر خلاصه شده‌اند. اعداد ثابت در جدول (۱۰-۵) داده شده‌اند.

**گزینه‌های یونی** - کاربر ممکن است انتخاب کند که گونه‌های یونی را با تعیین مقادیر ۱/۰ برای ثابت SFLG شبیه‌سازی کند.



**ثابت‌های یونیزاسیون** - برای هر ویژگی یونی که شبیه‌سازی می‌شود، کاربر باید با استفاده از ثابت PKA مقداری را برای لگاریتم منفی فاکتور فراوانی در معادله وانت هاف با استفاده از ثابت فراهم کند. اگر انرژی فعال‌سازی صفر باشد، آن‌گاه برابر است با  $pK_a$  یا  $pK_b$ .

**آنتالپی واکنش، kcal / mol** - برای شبیه‌سازی وابستگی دمایی برای یونیزاسیون، کاربر می‌تواند تغییر آنتالپی استاندارد واکنش تفکیک را با استفاده از ثابت EPKA مشخص کند. آنتالپی واکنش بالاتر باعث وابستگی بیش‌تر به دما می‌شود.

**pH** - کاربر می‌تواند با استفاده از پارامترهای pH، ۱۱ و توابع زمانی ۱۰ و ۱۱، PHNS و PHNW غلظت‌های باکتری بخش و زمان متغیر را تعیین کند. اگر pH در زمان ثابت بماند، کاربر باید با استفاده از پارامتر pH، مقادیر میانگین بخش را وارد کند. PHNS و PHNW نیز باید حذف شوند.

کاربر می‌تواند به ترتیب از طریق توابع زمانی PHNS و PHNW مقادیر ستون آب متغیر زمانی و pH لایه‌ی اعماق را مجموعه‌ای از مقادیر غلظت در نظر بگیرد که در برابر مقادیر زمانی وارد کند. سپس پارامتر pH نشان‌دهنده‌ی نسبت هر بخش از pH به مقادیر تابع زمان می‌باشد. محصول pH و تابع PHNS یا PHNW مقادیر pH بخش و زمان خاص مورد استفاده توسط TOXI را به دست می‌دهد (Group G, Record 4, PARAM(I,11); Group I, Record 2, VALT(10,K), VALT(11,K)).

### ۱۰-۵- تعادل جذب

جذب عبارت است از: پیوند مواد شیمیایی محلول بر روی فاز جامد مانند رسوبات لایه‌ی اعماق و معلق، مواد زیستی و گاهی اوقات مواد آلی محلول یا کلوییدی می‌باشد. جذب می‌تواند هم در کنترل سرنوشت محیط‌زیست و هم در سمیت مواد شیمیایی مهم باشد. این مواد می‌توانند باعث تجمع مواد شیمیایی در رسوبات بستر و یا تجمع‌زیستی در ماهی‌ها شوند. این روش ممکن است واکنش‌هایی مانند فراریت و هیدرولیز پایه را کاهش داده و یا سایر واکنش‌ها از جمله فتولیز و هیدرولیز کاتالیز شده با اسید را افزایش دهد.

واکنش‌های جذب معمولاً نسبت به دیگر فرآیندهای محیطی سریع هستند و ممکن است در تعادل فرض شوند. برای غلظت‌های مرتبط با محیط‌زیست (کم‌تر از  $10^{-5}$  مولار یا نصف حلالیت آب)، جذب و تعادل با غلظت شیمیایی حل شده خطی می‌باشد (Karickhoff, 1984).

$$C_s = K_{ps} \cdot C_w \quad (10-18)$$

در حالت تعادل، توزیع میان فازها توسط ضرایب تقسیم کنترل می‌شود و جرم شیمیایی کل در هر فاز توسط  $K_{ps}$  و مقدار فاز جامد موجود (شامل هر فاز DOC) کنترل می‌شود.

علاوه بر فرض تعادل لحظه‌ای، به‌طور ضمنی در استفاده از معادله (۱۹-۱۰) فرض بر برگشت‌پذیری می‌باشد. داده‌های آزمایشگاهی برای مواد شیمیایی هیدروفوبیک نشان می‌دهد که در واکنش‌های جذب و واجذب پدیده‌ی پسماند وجود دارد و دفع این مواد بسیار کندتر از جذب آن‌ها می‌باشد. کریخوف نشان می‌دهد که این اثر ممکن است نتیجه‌ی فرآیند درون‌ذره‌ای باشد که در آن ماده‌ی شیمیایی به آرامی به اجزای جاذب اضافه می‌شود. این پدیده به خوبی درک نشده‌است و هیچ چارچوب مدل‌سازی کمی برای توصیف آن در دسترس نیست.

### ۱۰-۵-۱- نمای کلی از واکنش‌های جذب TOXI

مواد شیمیایی محلول در ستون آب و بخش‌های اعماق دریا با ذرات رسوب و کربن آلی محلول به فرم پنج فاز محلول، DOC جامد، و رسوب-جامد (سه نوع رسوب "s") در واکنش می‌باشند. واکنش‌ها را می‌توان با توجه به حجم واحد آب به شکل روابط (۱۹-۱۰) و (۲۰-۱۰) نوشت:

$$\dot{M}_s + \dot{C}_w \leftrightarrow C_s/n \quad (19-10)$$

$$\dot{B} + \dot{C}_w \leftrightarrow C_B/n \quad (20-10)$$

که در آن n تخلخل است (حجم آب تقسیم بر حجم کل)،

واکنش رو به جلو، جذب و واکنش رو به عقب، دفع می‌باشد. این واکنش‌ها معمولاً در مقایسه با گام زمانی مدل سریع هستند و می‌توانند در تعادل کلی در نظر گرفته شوند. غلظت فاز  $C_w$ ،  $C_s$  و  $C_B$  توسط ضرایب تقسیم تعادل  $K_{ps0}$  و  $K_{pB}$  (لیتر بر کیلوگرم) کنترل می‌شوند:

$$K_{ps0} = \frac{C_s/n}{\dot{M}_s \dot{C}_w} = \frac{\dot{C}_s}{\dot{C}_w} \quad (21-10)$$

$$K_{pB} = \frac{C_B/n}{\dot{B} \dot{C}_w} = \frac{\dot{C}_B}{\dot{C}_w} \quad (22-10)$$

این معادلات شکل خطی هم‌دمای فریوندلیچ را نشان می‌دهند که در مکان‌های جذب روی رسوب و DOC فراوان هستند:

$$\dot{C}_s = K_{ps} \dot{C}_w \quad (23-10)$$

$$\dot{C}_B = K_{pB} \dot{C}_W \quad (24-10)$$

غلظت شیمیایی کل مجموع غلظت‌های پنج فاز می‌باشد.

$$C = \dot{C}_W n + \sum_S \dot{C}_S M_S + \dot{C}_B B \quad (25-10)$$

با جایگزینی در معادلات (24-10) و (25-10)، فاکتورسازی و تنظیم مجدد شرایط، کسر محلول

$f_D$  را به شما می‌دهد:

$$f_D = \frac{\dot{C}_W n}{C} = \frac{n}{n + K_{pB} \cdot B + \sum_S K_{pB} \cdot M_S} \quad (26-10)$$

به همین ترتیب، بخش‌های رسوب-جامد و DOC-جامد،

$$f_S = \frac{\dot{C}_S M_S}{C} = \frac{K_{pS} M_S}{n + K_{pB} \cdot \sum_S K_{pS} \cdot M_S} \quad (27-10)$$

$$f_B = \frac{\dot{C}_B B}{C} = \frac{K_{pB} B}{n + K_{pB} \cdot \sum_S K_{pS} \cdot M_S} \quad (28-10)$$

بخش‌های محلول ذرات به صورت متغیرهای زمانی و مکانی در طول یک شبیه‌سازی از ضرایب

تقسیم، تخلخل‌های محاسبه شده توسط مدل، غلظت‌های رسوب شبیه‌سازی شده و غلظت‌های معین DOC

تعیین می‌شوند. با در نظر گرفتن غلظت کل و کسرهای پنج فاز، غلظت‌های منحصر به فردی برای محلول،

جاذب و زیست‌بستر تعیین می‌شود (روابط 29-10 تا 31-10):

$$C_W = C \cdot f_D \quad (29-10)$$

$$C_S = C \cdot f_S \quad (30-10)$$

$$C_B = C \cdot f_B \quad (31-10)$$

این پنج غلظت دارای واحد میلی‌گرم بر لیتر می‌باشند و می‌توانند به صورت غلظت در هر فاز بیان شوند:

$$\dot{C}_W = C_W / n \quad (32-10)$$

$$\dot{C}_S = C_S / M_S \quad (33-10)$$

$$\hat{C}_B = C_B/B \quad (34-10)$$

این غلظت‌ها به ترتیب دارای واحدهای  $\text{mg/kg}_b$  و  $\text{mg/kg}_s$  و  $\text{mg/L}_w$  هستند. در برخی موارد، مانند دبی‌های نزدیک، کاربر ممکن است مجبور به تغییر ضرایب تقسیم ورودی برای توصیف اثر جذب ناقص باشد. به عنوان راهنما، کریخوف و موریس (۱۹۸۵) دریافتند که زمان واکنش جذب معمولی به ضریب تقسیم مرتبط است:

$$K_d^{-1} = 0.03k_{ps} \quad (35-10)$$

که در آن  $k_d^{-1}$  ثابت نرخ دفع،  $\text{hr}^{-1}$  است. بنابراین، ترکیباتی که دارای  $K_{ow}S$  بالا ( $10^5$ )، متوسط ( $10^3$ ) و پایین ( $10$ ) هستند برای جذب بر روی ۲٪ رسوبات آلی به ترتیب به زمان‌های واکنش یک روز، نیم‌ساعت و چندثانیه نیاز دارند. باتوجه به این که زمان تعادل تقریباً سه برابر زمان واکنش است، سه ترکیب ذکر شده باید در عرض ۳ روز، ۱ ساعت و ۳۰ دقیقه به تعادل برسند.

#### ۱۰-۵-۲- محاسبه ضرایب تقسیم

مقادیر ضرایب تقسیم را می‌توان از آزمایش‌های آزمایشگاهی به دست آورد. مطالعات آزمایشگاهی برای مواد شیمیایی آلی نشان داده‌اند که ضریب تقسیم وابسته به آب‌گریزی مواد شیمیایی و آلی موجود در رسوبات می‌باشد. TOXI چندین روش اختیاری برای توصیف یا محاسبه‌ی ضرایب تقسیم ارائه می‌دهد. این گزینه‌ها با ورودی داده شناسایی می‌شوند، همان‌طور که در زیر توضیح داده شد.

#### ۱۰-۵-۳- گزینه‌ی ۱: ضرایب تقسیم‌بندی اندازه‌گیری شده

این گزینه به کاربر اجازه می‌دهد تا به‌طور مستقیم ضریب تقسیم را وارد کند. ضرایب تقسیم جداگانه ممکن است ورودی هر یک از سه نوع ماده‌ی جامد باشند. واحد ضریب تقسیم ورودی ( $L_w/kg_s$ ) (نه در واحدهای لگاریتمی) می‌باشد.

#### ۱۰-۵-۴- گزینه‌ی ۲: ضریب تقسیم کربن آلی ورودی

نرمال‌سازی ضریب تقسیم به وسیله‌ی مقدار کربن آلی رسوب، با ضریب محصول نشان داده شده است،  $K_{oc}$  (ضریب تقسیم کربن آلی) نسبتاً مستقل از دیگر ویژگی‌های رسوب یا منشأ جغرافیایی می‌باشد. بسیاری از آلاینده‌های آلی موردعلاقه‌ی فعلی، ترکیبات آب‌گریز و غیرقطبی می‌باشند که ضرایب تقسیم آن‌ها به خوبی با بخش آلی رسوب مرتبط است. ریو و دیویدسون (۱۹۸۰) و کریخوف و همکاران (۱۹۷۹)

عبارات تجربی مرتبط با ضرایب تعادل را به آزمایشگاه توسعه دادند. اندازه‌گیری‌ها منجر به روشی نسبتاً قابل‌اعتماد برای تخمین مقادیر مناسب می‌شوند. هم‌بستگی‌های به‌کاررفته در TOXI عبارتند از:

$$K_{ps0} = f_{ocs} \cdot K_{oc} \quad (۳۶-۱۰)$$

$$K_{pB} = 1/0K_{oc} \quad (۳۷-۱۰)$$

$K_{oc}$  = ضریب تقسیم کربن آلی، ( $L_w/kg_{ocs}$ ) ،

$f_{ocs}$  = کسر کربن آلی رسوب،

$1/0$  = کسر کربن آلی DOC،

گزینه‌ی ۳: محاسبه ضریب تقسیم کربن آلی،

ارتباط  $K_{oc}$  با حلالیت شیمیایی در آب و یا اوکتونال-ضریب تقسیم آب، ابزارهای پیش‌بینی موفقی را برای ترکیب آب‌گریزی شیمیایی در تخمین تقسیم‌بندی آن همراه کرد. اگر مقدار لگاریتم  $K_{oc}$  در دسترس نباشد، با استفاده از هم‌بستگی بین  $K_{oc}$  و  $K_{ow}$  اکتانول-آب ( $L_w/L_{oct}$ )، ضریب تقسیم کربن آلی ( $K_{oc}$ ) در مدل برآورد می‌شود:

$$\log K_{oc} = a_0 + a_1 \log K_{ow} \quad (۳۸-۱۰)$$

که در آن  $a_0$  و  $a_1$  به ترتیب لگاریتم  $0/6$  و  $1/0$  در نظر گرفته می‌شوند. هنگامی که مقدار  $K_{oc}$  تعیین شد، محاسبه‌ی ضریب تقسیم مانند روش ۲ ادامه می‌یابد.

#### ۱۰-۵-۵-۴: محاسبه‌ی تقسیم‌بندی وابسته به جامدات

مقدار ضریب تقسیم به عوامل متعددی علاوه بر درصد کربن آلی ذرات جاذب، بستگی دارد. از این میان شاید مهم‌ترین و بحث برانگیزترین آن‌ها تأثیر غلظت ذرات باشد که اولین بار توسط اوکانر و کونولی (۱۹۸۰) ارائه شد. اوکانر و کونولی براساس شواهد تجربی به این نتیجه رسیدند که ضریب تقسیم با غلظت جامدات رابطه معکوس دارد. تحقیقات زیادی برای اثبات یا رد این یافته انجام شده‌است. این در حالی است که این مسئله هم‌چنان مورد بحث می‌باشد. یک مدل تعادل ذره پیشنهاد شده‌است که اثرات غلظت ذره را توصیف می‌کند و مشخص شد که این مدل با مجموعه‌ی بزرگی از داده‌های مشاهده‌ای جذب-دفع مطابقت دارد. در حال حاضر، این مدل باید یک رابطه‌ی تجربی در نظر گرفته شود. معادله‌ی تعیین‌کننده ضریب تقسیم به صورت زیر است:

$$K_{ps} = \frac{K_{ps0}}{1 + M_s K_{ps0} / v_x} \quad (39-10)$$

$K_{ps0}$  = ضریب تقسیم محدودکننده بدون تعامل ذرات ( $f_{ocs}$  و  $K_{oc}$  برای مواد شیمیایی آلی خنثی)،  
 $M_s$  = غلظت جامدات، kg/L،

$\bar{\sigma}_x$  = نسبت نرخ جذب به نرخ دفع ناشی از ذرات،

دی‌تورو دریافت که  $\bar{\sigma}_x$  در طیف وسیعی از انواع مواد شیمیایی و جامد از مرتبه‌ی ۱ می‌باشد. این فرمول در TOXI گنجانده شده‌است. اگر  $\bar{\sigma}_x$  برابر با ۱ باشد، سپس TOXI حداکثر کسر ذرات را در ستون آب برای کلیه‌ی مواد شیمیایی آبریز ۰/۵ پیش‌بینی می‌کند ( $K_{ps0} M_s > 10$ ).

## اجرا

جدول ۱۰-۶ دامنه و توصیف داده‌های زیر مدل TOXI

واحد	دامنه‌ی مشترک	نشانه‌گذاری	توصیف
mg/L	۱۰-۱۰۰	$m_s$	غلظت رسوب معلق
kg/L	۰/۵-۲	$M_B$	غلظت رسوب کفزی
mg/L	۰-۱۰	DOC, B	کربن آلی محلول
L/kg	$10^{-1}$ - $10^5$	$K_{pi}$	ضریب تقسیم فاز i
L/kg	$10^0$ - $10^5$	$K_D$	ضریب توزیع توده‌ی فلز
-	$10^0$ - $10^6$	$K_{ow}$	ضریب تقسیم اکتانول-آب
-	۰/۰۰۵-۰/۵	$f_{oci}$	کسر کربن آلی، فاز i
-	$1-10^{12}$	$\bar{\sigma}_x$	پارامتر تعامل ذرات

جدول ۱۰-۷ مقادیر ثابت‌های مختلف برای گزینه‌های متغیر

متغیر	$C_1$	$C_2$	$C_3$	توصیف
LKOW	۸۴	۶۸۴	۱۲۸۴	ضریب تقسیم اکتانول-آب $\log_{10}$
LKOC	۱۰۱	۷۰۱	۱۳۰۱	ضریب تقسیم کربن آلی $\log_{10}$
A0	۱۰۲	۷۰۲	۱۳۰۲	تقاطع هم‌بستگی $K_{ow}$ - $K_{oc}$
A1	۱۰۳	۷۰۳	۱۳۰۳	شیب هم‌بستگی $K_{ow}$ - $K_{oc}$
NUX <sub>1</sub>	۱۰۶	۷۰۶	۱۳۰۶	پارامتر تقسیم‌بندی وابسته به جامدات

PIXC <sub>1,1</sub>	۱۱۱	۷۱۱	۱۳۱۱	ضریب تقسیم مستقل (محدودکننده) مواد جامد به مواد جامد ۱
PIXC <sub>1,2</sub>	۱۱۶	۷۱۶	۱۳۱۶	ضریب تقسیم مستقل (محدودکننده) مواد جامد به مواد جامد ۲
PIXC <sub>1,3</sub>	۱۲۱	۷۲۱	۱۳۲۱	ضریب تقسیم مستقل (محدودکننده) مواد جامد به مواد جامد ۳

ویژگی‌های داده‌های زیرمدل TOXI برای جذب در جدول (۱۰-۶) خلاصه شده‌است. برای هر مدل شیمیایی تا ۲۰ ضریب تقسیم تعریف می‌شود که نشان‌دهنده‌ی پنج‌گونه‌ی شیمیایی (یون خنثی به‌علاوه چهار نوع یونی) با چهار جاذب (DOC و سه نوع ماده جامد) می‌باشد. به‌طور معمول، با توجه به گونه‌های یونی و جاذب‌های مدل‌سازی شده فقط از زیرمجموعه‌ای از ضرایب تقسیم استفاده می‌شود. جذب ماده‌ی شیمیایی خنثی بر DOC و ذرات جامد، توسط  $f_{oc}$  (فرض می‌شود برای DOC برابر ۱ است)، ضریب تقسیم آب-اکتانول ماده شیمیایی ( $K_{ow}$ )، رابطه‌ی تعریف‌شده توسط کاربر بین  $K_{oc}$  و  $K_{ow}$  و مقادیر پارامتر تعامل ذرات  $\bar{O}_x$  برای هرگونه، کنترل می‌شود. ضرایب تقسیم گونه‌های یونی ورودی که ضرایب تقسیم محدودکننده می‌باشند، در معادله (۱۰-۴۰) استفاده می‌شوند. اعداد ثابت برای گزینه‌های ضرایب مختلف در جدول (۱۰-۷) ارائه شده‌است.

#### ۱۰-۵-۶- روش ۱: ضریب تقسیم اندازه‌گیری شده

برای هر ترکیب شیمیایی شبیه‌سازی شده، ممکن است ضرایب تقسیم جداگانه برای جذب مولکول خنثی و حداکثر ۴ گونه یونی بر روی هریک از سه نوع ماده‌ی جامد ممکن و DOC وارد شود. ضریب تقسیم ورودی در واحدهای ( $L_w/kg_s$ ) می‌باشد. اگر ضریب تقسیم مشخص باشد، بدون محاسبه‌ی مجدد مورد استفاده قرار می‌گیرد. برای جزئیات بیشتر در مورد ضرایب تقسیم که به‌طور مستقیم تعیین شده‌اند، به فصل ۶ مراجعه کنید.

**ضریب تقسیم جامد،  $L/kg$ -** کاربر می‌تواند مستقیماً ضرایب تقسیم به جامدات را با استفاده از PIXC ثابت تعیین کند. اعداد ثابت برای جذب مولکول خنثی در جدول (۱۰-۷) داده شده‌است.

**ضریب تقسیم DOC-** کاربر می‌تواند ضرایب تقسیم برای جذب گونه‌های یونی به DOC را با استفاده از PIDOC ثابت مشخص کند.

### ۱۰-۵-۷- گزینہ ۲: ضریب تقسیم کربن آلی ورودی

بر اساس این گزینہ، کاربر لگاریتم (پایه ۱۰) ضریب تقسیم کربن آلی ( $K_{oc}$ ) را وارد می‌کند. علاوه بر این، کاربر باید درصد کربن آلی را برای هریک از انواع جامدات شبیه‌سازی شده، وارد کند. کسر کربن آلی و غلظت کربن آلی محلول پارامترهای از مدل هستند که ممکن است برای هر بخش از مدل مشخص شوند. اگر مقداری برای ضریب تقسیم ورودی ( $K_p$ ، گزینہ ۱) موجود باشد، آن‌گاه  $K_{oc}$  استفاده نخواهد شد.

**ضریب تقسیم کربن آلی،  $L/kg$  -** کاربر می‌تواند  $\log_{10}$  ضریب تقسیم کربن آلی را با استفاده از ثابت LKOC مشخص کند. اعداد ثابت در جدول (۷-۱۰) داده شده‌اند.

**کربن آلی مقطعی -** کاربر باید مقدار متغیر بخش کربن آلی را با استفاده از پارامترهای  $FOC(I,1)$ ،  $FOC(I,2)$  و  $FOC(I,3)$  برای هر نوع از جامدات شبیه‌سازی شده، مشخص کند. اعداد پارامتر برای جامدات ۱، ۲ و ۳ به ترتیب ۷، ۸ و ۹ هستند.

**کربن آلی محلول،  $mg/L$  -** کاربر می‌تواند غلظت کربن آلی محلول را با استفاده از پارامتر ۶ (DOC) مشخص کند.

### ۱۰-۲-۱- گزینہ ۳: محاسبه‌ی ضریب تقسیم کربن آلی

تحت این گزینہ، کاربر به مدل اجازه می‌دهد تا  $K_{oc}$  را از یک ضریب تقسیم مشخص آب اکتانول ( $K_{ow}$ ) محاسبه کند. سپس مدل  $K_{oc}$  را با استفاده از معادله‌ی (۱۰-۳۹) محاسبه می‌کند. این گزینہ در صورتی که مقادیر برای لگاریتم ( $K_{oc}$ ) وارد شده باشند، استفاده نخواهد شد.

**ضریب تقسیم اکتانول - آب،  $L_w/L_o$  -** کاربر می‌تواند  $\log_{10}$  ضریب تقسیم آب-اکتانول را با استفاده از ثابت LKOC مشخص کند. اعداد ثابت در جدول (۷-۱۱) داده شده‌اند.

**ضرایب هم‌بستگی -** کاربر باید ضرایب هم‌بستگی مربوط به  $K_{oc}$  و  $K_{ow}$  را با استفاده از ثابت‌های  $A_0$  و  $A_1$  تعیین کند.  $A_0$  و  $A_1$  نقطه‌ی تقاطع و شیب هم‌بستگی است که با معادله‌ی (۱۰-۳۹) توضیح داده شده‌است. مقادیر پیش فرض به ترتیب لگاریتم  $0/6$  و  $1/0$  هستند. اگر این ثابت‌ها وارد نشوند، هم‌بستگی تبدیل به  $K_{oc} = 0/6 K_{ow}$  می‌شود. اعداد ثابت در جدول (۷-۱۰) داده شده‌اند.

**کربن آلی مقطعی -** کاربر باید مقدار متغیر بخش کربن آلی را با استفاده از پارامترهای  $FOC(I,1)$ ،  $FOC(I,2)$  و  $FOC(I,3)$  برای هر نوع جامدات شبیه‌سازی شده، مشخص کند. اعداد پارامتر برای جامدات ۱، ۲ و ۳ به ترتیب ۷، ۸ و ۹ هستند.



**کربن آلی محلول، mg/L** - کاربر می‌تواند غلظت کربن آلی محلول را با استفاده از پارامتر ۶ DOC مشخص کند.

### ۱۰-۲-۲ - گزینه‌ی ۴: تقسیم‌بندی وابسته به مواد جامد

کاربر ممکن است اثر غلظت جامدات بر جذب سطحی را با استفاده از مقدار  $\bar{O}_x$  از مرتبه ۱ (برای جزئیات بیش‌تر به دی‌تورو، ۱۹۸۵ مراجعه کنید) اضافه کند. اگر کاربر یک مقدار ورودی برای  $\bar{O}_x$  ارائه نکند، به‌صورت پیش‌فرض هرگونه اثر جامدات روی ضریب تقسیم حذف خواهد شد. از آن‌جا که انتظار می‌رود دفع ناشی از برخورد تنها در ستون آب رخ دهد، تقسیم‌بندی مربوط به مواد جامد تنها برای بخش‌های ستون آب محاسبه می‌شود (که در آن تخلخل بیش‌تر از ۰/۹۹ است). علاوه بر پارامتر تعامل ذرات، کاربر باید برای یک ضریب تقسیم گزینه‌ی ۱، ۲، یا ۳ که در بالا توضیح داده شد، فراهم کند.

**پارامتر تعامل ذرات** - کاربر ممکن است تقسیم‌بندی مربوط به مواد جامد را با تعیین مقدار مناسب برای ثابت NUX اجرا کند. مقدار مرتبه‌ی ۱ باعث می‌شود که ضریب تقسیم ورودی با افزایش جامدات معلق در معادله‌ی (۱۰-۴۰) کاهش یابد. مقادیر بزرگ‌تر NUX اثر مواد جامد بر تقسیم‌بندی را کاهش می‌دهد و مقدار پیش‌فرض  $10^{12}$ ، این رفتار را به‌طور مؤثر حذف می‌کند. اعداد ثابت برای اثر جامدات روی مولکول خنثی در جدول (۱۰-۷) داده شده است.

### ۱۰-۶-۶ - فراریت

فراریت، حرکت ماده‌ی شیمیایی در فصل مشترک آب و هوا می‌باشد زیرا غلظت محلول خنثی در تلاش است تا با غلظت فاز گاز تعادل برقرار کند. تعادل زمانی اتفاق می‌افتد که فشارنسبی واردشده توسط ماده‌ی شیمیایی در محلول برابر با فشارنسبی ماده‌ی شیمیایی در هوای پیرامون شود. نسبت تبادل، متناسب با شیب بین غلظت محلول، غلظت در جو پیرامون و رسانایی در طول فصل مشترک دو سیال است و هدایت الکتریکی تحت تأثیر خواص شیمیایی (وزن مولکولی، ثابت قانون هنری) و شرایط محیطی (آشفتگی کنترل شده با سرعت باد، سرعت جریان و عمق آب) در فصل مشترک آب و هوا می‌باشد.

### ۱۰-۳-۱ - بررسی فراریت در TOXI

همان‌طور که در ۸ نشان داده شده، غلظت محلول تلاش می‌کند با غلظت فاز گاز تعادل برقرار کند؛

$$\frac{\partial C}{\partial t_{volot}} = \frac{K_v}{D} \left( f_a c - \frac{C_a}{\frac{H}{RT_K}} \right) \quad (40-10)$$

$$K_v = \text{نرخ انتقال, m/day}$$

$$D = \text{عمق قطعه, m}$$

$$f_D = \text{کسری از کل مواد شیمیایی محلول,}$$

$$C_a = \text{غلظت جوی, ug/L}$$

$$R = \text{ثابت عمومی گاز, } 8/206 \times 10^{-5} \text{ atm} - \text{m}^3/\text{mol}^\circ\text{K}$$

$$T_K = \text{دمای آب, } ^\circ\text{K}$$

$$H = \text{ضریب قانون هنری برای تقسیم‌بندی شیمیایی هوا - آب, } \text{atm} - \text{m}^3/\text{mol}$$

تبادل زمانی رخ می‌دهد که غلظت محلول برابر با فشارنسبی تقسیم بر ثابت قانون هنری باشد.

در TOXI، پدیده‌ی فراریت برای ماده‌ی شیمیایی محلول در یک بخش از ستون آب‌سطحی می‌تواند با سرعتی که توسط مدل مقاومت بین دو لایه‌ی آب و هوا تعیین شده‌است، کنترل شود (Whitman, 1923). در روش دو مقاومتی فرض بر این است که دو "نوار راکد" در هر دو طرف با بخش‌های کاملاً مخلوط محدود شده‌اند. اختلاف غلظت به‌عنوان نیروی محرکه‌ی انتشار لایه‌ی آب عمل می‌کنند. اختلاف فشار، باعث انتشار لایه‌ی هوا می‌شود. با توجه به ملاحظات موازنه‌ی جرم، واضح است که جرم یکسان باید از هر دو غشاء عبور کند، بنابراین دو مقاومت به‌صورت سری ترکیب می‌شوند، به‌طوری که رسانایی عکس مقاومت کل می‌باشد:

$$K_v = (R_L + R_G)^{-1} = \left[ K_L^{-1} + \left( K_G \frac{H}{RT_K} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (41-10)$$

$$R_L = \text{مقاومت فاز مایع, day/m}$$

$$K_L = \text{ضریب انتقال فاز مایع, m/day}$$

$$R_G = \text{مقاومت فاز گاز, day/m}$$

$$K_G = \text{ضریب انتقال فاز گاز, day/m}$$

درواقع مقاومت دیگری با عنوان مقاومت انتقال بین دو واسط نیز وجود دارد، اما ناچیز فرض می‌شود. این امر ممکن است در دو مورد درست نباشد: در شرایط بسیار آشفته و در حضور آلاینده‌های فعال سطحی. اگرچه روش دو مقاومتی، مدل ویتمن؛ با فرض لایه‌های یکنواخت ساده شده‌است، اما نسبت به مدل‌های پیچیده‌تر دقیق‌تر می‌باشد.

مقدار  $K_v$  هدایت آبی، به شدت آشفته‌گی در بدنه‌ی آب و در هوای پیرامون بستگی دارد. ماکس و لیون (۱۹۷۵) در مورد شرایطی بحث کرده‌اند که تحت آن، مقدار  $K_v$  در مرحله‌ی اول با شدت آشفته‌گی در آب تعیین می‌شود. با افزایش ضریب قانون هنری، هدایت آبی به‌طور فزاینده‌ای تحت تأثیر شدت آشفته‌گی در

آب قرار گرفته و با کاهش ضریب قانون هنری، مقدار هدایت به‌طور - فزاینده‌ای، تحت تأثیر شدت آشفستگی جوی قرار می‌گیرد.

از آن‌جا که، ضریب قانون هنری با افزایش فشار بخار یک ترکیب افزایش و با افزایش حلالیت یک ترکیب کاهش می‌یابد، بنابراین ترکیبات با قابلیت انحلال پایین، بسیار فرار هستند که به احتمال زیاد محدودیت‌های انتقال جرم در آب را نشان می‌دهند و ترکیبات با قابلیت انحلال بالا نسبتاً غیرفرار بوده و به احتمال زیاد محدودیت‌های انتقال جرم در هوا را نشان می‌دهند. پدیده‌ی فراریت معمولاً در دریاچه‌ها و مخازن به نسبت کم‌تر از رودخانه‌ها و نهرها رخ می‌دهد.

در مواردی که به احتمال زیاد نرخ فراریت توسط سطح آشفستگی در فاز آب کنترل می‌شود می‌توان از نتایج آزمایش‌های آزمایشگاهی برآورد کرد. در روش میل و همکاران (۱۹۸۲)، فراریت مواد آلاینده؛ به وسیله‌ی فلاسک کوچک حاوی یک محلول آفت‌کش حل‌شده در آب که عاری از اکسیژن است محاسبه می‌شود. برای این کار لازم است فلاسک حاوی محلول برای دوره‌های زمانی مشخص تکان داده‌شود و درنهایت در این روش، مقدار آلاینده از دست‌رفته و اکسیژن به‌دست‌آمده از فراریت اندازه‌گیری؛ و نسبت رسانایی (KVOG) برای آلاینده‌ها و اکسیژن محاسبه می‌شود. همان‌طور که توسط تسیوگلوو و والاس (۱۹۷۲) نشان داده شده‌است، این نسبت باید بدون توجه به آشفستگی در بدنه‌ی آب ثابت باشد. بنابراین، اگر ضریب هوادهی مجدد برای یک بدنه‌ی آبی دریافت‌کننده معلوم باشد یا بتوان آن را تخمین زد و یا نسبت رسانایی برای آلاینده به ضریب هوادهی مجدد اندازه‌گیری شده‌باشد، هدایت آلاینده قابل تخمین است.

ثابت سرعت نوسانات محاسبه‌شده ورودی برای دمای ۲۰ درجه سانتی‌گراد است. دمای قطعه با استفاده از رابطه:

$$K_{v,T} = K_{20} \theta^{T-20} \quad (42-10)$$

$\bar{E}_v$  = ضریب تصحیح دما،

T = دمای آب، °C،

نرخ‌های ورودی فراریت به‌طور مستقیم تنظیم نمی‌شوند.

### محاسبه نرخ‌های انتقال

روش‌های مختلفی برای محاسبه‌ی ضرایب انتقال فاز مایع ( $K_L$ ) و گاز ( $K_G$ ) ارائه شده‌اند که برخی از آن‌ها در TOXI قرار دارند. روش خاص مورد استفاده در مدل از طریق انتخاب کاربر از میان یکی از شش گزینه‌ی فراریت شناسایی می‌شود که هرکدام به‌طور خلاصه در زیر توضیح داده شده‌است.

**۱۰-۳-۲- گزینه‌ی ۱ فراریت**

این گزینه امکان استفاده از نرخ‌های نوسانات اندازه‌گیری شده را فراهم می‌کند. نرخ‌های ورودی ( $K_v$ ) (m/day)، پارامترهایی هستند که ممکن است نسبت به مکان و زمان متغیر باشند.

**۱۰-۳-۳- گزینه‌ی ۲ فراریت**

این گزینه به کاربر اجازه می‌دهد، تا یک مقدار ثابت از هوادهی مجدد اکسیژن را وارد کند که سپس برای نشان دادن ثابت انتقال غشای مایع برای ماده‌ی شیمیایی خاص تنظیم می‌شود. تنظیم به دو روش انجام می‌شود؛ در روش اول، کاربر می‌تواند نسبت اندازه‌گیری شده‌ی اکسیژن به تبادله شیمیایی را وارد کند تا نرخ  $K_L$  از طریق آن محاسبه شود.

$$K_L = K_a \cdot K_{v0} \quad (۱۰-۴۳)$$

$K_a$  = سرعت هوادهی مجدد، m/day

$K_{v0}$  = نسبت نرخ فراریت به نرخ هوادهی مجدد،

اگر  $K_{ov}$  ارائه نشود، TOXI نسبت را براساس وزن‌های مولکولی  $O_2$  و نسبت شیمیایی که در زیر نشان داده شده‌است محاسبه خواهد کرد.

$$K_L = K_a \sqrt{32/M_w} \quad (۱۰-۴۴)$$

$M_w$  = وزن مولکولی مواد شیمیایی، g/mole

بر اساس این گزینه، نرخ انتقال گاز (KG) با استفاده از روش اوکونرز محاسبه می‌شود (مراجعه به گزینه‌ی ۴).

**۱۰-۳-۴- گزینه‌ی ۳ فراریت**

با مشخص شدن این گزینه، ضریب انتقال غشای مایع مانند گزینه‌ی ۲ محاسبه خواهد شد. با این حال، ضریب انتقال غشای گاز با استفاده از روش مکانی محاسبه می‌شود (گزینه‌ی ۵ را ببینید).

**۱۰-۳-۵- گزینه‌ی ۴ فراریت**

ضرایب انتقال غشاهای مایع و گاز محاسبه شده در این گزینه، در انواع مختلف بدنه‌ی آب متفاوت هستند. نوع بدنه‌ی آب یکی از ثابت‌های فراریت شمرده شده‌است و می‌تواند یک به صورت یک جریان جاری، رودخانه یا مصبی و یا برکه و دریاچه را کد باشد. فرمول‌بندی‌های مورد استفاده برای محاسبه‌ی ضرایب انتقال باتوجه به نوع بدنه‌ی آب در زیر نشان داده شده‌است.

الف) جریان نهر، رودخانه یا مصب: برای یک سیستم جریان (نوع ۰) ضرایب انتقال با تلاطم ناشی از جریان کنترل می‌شوند. برای سیستم‌های جریان، ضریب انتقال غشای مایع ( $K_L$ ) با استفاده از روش کووار (Covar 1976)، محاسبه می‌شود. که در آن، معادله‌ی مورد استفاده با سرعت و عمق قطعه متفاوت می‌باشد. ابتدا ضریب انتقال برای اکسیژن محلول با استفاده از معادله‌های ارائه شده در زیر محاسبه و سپس  $K_L$  از معادله (۴۴-۱۰) یا (۴۵-۱۰) محاسبه می‌شود.

برای بخش‌هایی با عمق کم‌تر از ۰/۶۱ متر از فرمول اوونز برای محاسبه نرخ هوادهی مجدد اکسیژن استفاده می‌شود:

$$K_a = 5/349 \frac{U^{0/67}}{D^{0/85}} \quad (45-10)$$

$u$  = سرعت آب، m/s

$D$  = عمق قطعه، m

برای بخش‌هایی با سرعت کم‌تر از ۰/۵۱۸ متر برثانیه یا عمق بیش‌تر از  $u^{2/9.135} ۱۳/۵۸۴$  از فرمول اوکونر-دوبینز استفاده می‌شود:

$$K_L = \left( \frac{D_w u}{D} \right)^{0/5} 8/64 \cdot 10^4 \quad (46-10)$$

که در آن  $D_w$  ضریب نفوذ ماده‌ی شیمیایی در آب (مترمربع برثانیه) است که از:

$$D_w = \frac{22 \cdot 10^{-9}}{M_w^{2/3}} \quad (47-10)$$

در همه‌ی موارد دیگر، از فرمول چرچیل برای محاسبه‌ی نرخ هوادهی مجدد استفاده می‌شود:

$$K_a = 5/049 \frac{U^{0/969}}{D^{0/672}} \quad (48-10)$$

ضریب انتقال گاز ( $K_G$ ) برای سیستم‌های درحال جریان ثابت فرض می‌شود.

ب) دریاچه و یا مخزن: برای یک سیستم ساکن (نوع ۱) ضرایب انتقال با آشفستگی ناشی از باد کنترل می‌شوند. برای سیستم‌های ساکن، ضریب انتقال فیلم مایع ( $K_L$ ) با استفاده از معادلات اوکونر محاسبه می‌شود:

$$K_L = U^* \left( \frac{\rho_a}{\rho_w} \right)^{0/5} \frac{\kappa^{0/33}}{\lambda_2} S_{cw}^{-0/67} \quad (49-10)$$

$$K_L = U^* \frac{\kappa^{0/33}}{\lambda_2} S_{ca}^{-0/67} \quad (50-10)$$

که در آن  $U^*$  سرعت برشی (متر بر ثانیه) است که از،

$$U^* = C_d^{0/5} W_{10} \quad (51-10)$$

$C_d$  = ضریب درگ (0/0011)،

$W_{10}$  = سرعت باد ۱۰ متر بالاتر از سطح آب، m/sec

$\bar{n}_a$  = جرم مخصوص هوا، از محاسبه‌ی داخلی دمای هوا، kg/m<sup>3</sup>

$\bar{n}_w$  = جرم مخصوص آب، از محاسبه‌ی داخلی دمای آب، kg/m<sup>3</sup>

$\bar{I}$  = ثابت وون کارمنز، (0/74)،

$\bar{e}_2$  = ضخامت زیرلایه‌ی جاذب بدون بعد، (4)،

$S_{ca}$  و  $S_{cw}$  عدد اشمیت به ترتیب هوا و آب محاسبه‌شده از،

$$S_{ca} = \frac{\mu_a}{\rho D_a} \quad (52-10)$$

$$S_{cw} = \frac{\mu_w}{\rho D_w} \quad (53-10)$$

$D_a$  = انتشار مواد شیمیایی در هوا، m<sup>2</sup>/sec

$D_w$  = انتشار مواد شیمیایی در آب، m<sup>2</sup>/sec

$\mu_a$  = ویسکوزیته‌ی هوا، از محاسبه‌ی داخلی دمای هوا، kg/m-sec

$\mu_w$  = ویسکوزیته‌ی آب، از محاسبه‌ی داخلی دمای آب، kg/m-sec

ضریب انتشار شیمیایی در آب با استفاده از معادله‌ی (۴۸-۱۰) و ضریب انتشار شیمیایی در هوا

( $m^2/sec$ ,  $D_a$ ) محاسبه‌شده از:

$$D_a = \frac{1/9 \cdot 10^{-4}}{M_w^{2/3}} \quad (54-10)$$

بنابراین  $K_G$  متناسب با باد و نسبت عکس با وزن مولکولی توان ۴/۹ متناسب است.

### ۱۰-۳-۶- گزینه‌ی ۵ فراریت

همانند روش ۴، ضرایب انتقال فیلم مایع و گاز محاسبه‌شده در این گزینه با نوع بدنه‌ی آب متفاوت

است. نوع بدنه‌ی آب یکی از ثابت‌های فراریت مشخص شده‌است و می‌تواند یک جریان جاری مانند

رودخانه، مصب، برکه و یا دریاچه‌ی راکد باشد. تفاوت اصلی این است که در یک بدنه‌ی شناور، آشفتگی

در مرتبه‌ی اول، یک است. تابع سرعت جریان و برش باد در آبیگرهای راکد غالب می‌باشد. فرمول‌بندی‌های مورد استفاده برای محاسبه‌ی ضرایب انتقال با نوع بدنه‌ی آب تغییر می‌کند که در زیر نشان داده شده است. الف) جریان باد، رودخانه یا مصب برای محاسبه ضرایب انتقال غشاهای مایع و گاز برای بدنه‌های آبی جاری همانند گزینه‌ی ۴ عمل شود.

ب) آبیگر راکد یا دریاچه براساس این گزینه، ضرایب انتقال غشاهای مایع و گاز با استفاده از فرمول‌های توصیف شده توسط مک کی و یون (۱۹۸۳) محاسبه می‌شوند. معادلات مک کی عبارتند از:

$$K_L = 10^{-6} + 0/00341U^{*2/2}Sc_w^{-0/5} \quad U^* > 0/3 \quad (55-10)$$

$$K_L = 10^{-6} + 0/0144U^{*2/2}Sc_w^{-0/5} \quad U^* < 0/3 \quad (56-10)$$

$$K_G = 10^{-3} + 0/0462U^*Sc_a^{-0/67} \quad (57-10)$$

## اجرا

جدول ۱۰-۸ مشخصات داده‌های فراریت TOXI

واحد	دامنه	نشانه‌گذاری	توصیف
m/day	۰/۶-۲۵	$K_v$	رسانایی اندازه‌گیری شده یا واسنجی شده
atm-m <sup>3</sup> /mole	۱۰ <sup>-۷</sup> -۱۰ <sup>-۱</sup>	H	ثابت قانون هنری
μg/L	۰-۱۰۰۰	$C_a$	غلظت مواد شیمیایی موجود در جو
g/mole	۱۰-۱۰ <sup>۳</sup>	$M_w$	وزن مولکولی
m/day	۰/۶-۲۵	$K_a$	ضریب هوادهی مجدد (رسانایی اکسیژن)
-	۰-۱	$k_{ov}$	نسبت تبخیر اندازه‌گیری شده به هوادهی مجدد
m/sec	۰-۲	$u_x$	سرعت فعلی
m	۰/۱-۱۰	D	عمق آب

دمای آب	T	۳۰-۴	°C
سرعت باد ۱۰ متر بالاتر از سطح	W <sub>10</sub>	۰-۲۰	m/sec

اگرچه محاسبات زیادی در تعیین فراریت وجود دارد اما بیش‌تر آن‌ها در مدل و با استفاده از مجموعه‌ی کوچکی از داده‌ها انجام می‌شوند. مشخصات داده‌های فراریت TOXI در جدول (۱۰-۸) خلاصه شده‌اند. همه‌ی ثابت‌ها موردنیاز نیستند. اگر ثابت قانون هنری نامعلوم باشد، فراریت در مدل با استفاده از فشاربخار و قابلیت انحلال محاسبه می‌شود و اگر K<sub>ov</sub> اندازه‌گیری نشود، در مدل با استفاده از وزن مولکولی و ضرایب انتقال غشای مایع معین یا برآوردشده، محاسبه خواهد شد. فراریت فقط برای ستون آب سطحی که بر اساس نوع قطعه‌ی مشخص شده در ورودی شناسایی شدند، مجاز است. انواع این بخش عبارتند از: (۱) بخش‌های آب سطحی (نوع ۱)، (۲) بخش‌های آب زیرسطحی (نوع ۲)، (۳) بخش‌های رسوب سطحی (نوع ۳)، و (۴) بخش‌های رسوب زیرسطحی (نوع ۴).

تغییرات پارامترهای ورودی برای هرگزینه‌ی فراریت که باید توسط کاربر مشخص شوند، در زیر ارائه شده‌اند. اعداد ثابت در جدول (۱۰-۹) فهرست شده‌اند. برای تمام گزینه‌های فراریت سه ثابت: عدد گزینه‌ی فراریت، ثابت قانون هنری و غلظت شیمیایی جو باید وارد شوند. عمق تقسیم‌بندی (از داده‌های گروه C) باید مشخص شود.

جدول ۱۰-۹ ثابت‌های موردنیاز برای گزینه‌های فراریت

متغیر	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	توصیف
WTYPE	۲	۲	۲	نوع بدنه‌ی آب (0 = جریان‌دار، 1 = راکد)
AIRTMP	۵	۵	۵	فاکتور دمای هوای تابع زمان
ATMOS	۸	۶۰۸	۱۲۰۸	غلظت مواد شیمیایی اتمسفر، ug/L
MOLWT	۸۱	۶۸۱	۱۲۸۱	وزن مولوکولی مواد شیمیایی
SOLG	۸۲	۶۸۲	۱۲۸۲	حلالیت مواد شیمیایی در آب، mg/L
VAPRG	۸۳	۶۸۳	۱۲۸۳	فشار بخار مواد شیمیایی، torr
XV	۱۳۶	۷۳۶	۱۳۳۶	گزینه‌های تبخیر: 0 = none اندازه‌گیری شده = ۱



				هوادهی مجدد اندازه گیری شده + معادله ی اوکانر = ۱ هوادهی مجدد اندازه گیری شده + معادله ی مک کی = ۳ محاسبه شده با معادله ی اوکانر = ۳ محاسبه شده با معادله ی مک کی = ۵
HENRY	۱۳۷	۷۳۷	۱۳۳۷	ثابت قانون هنری، $\text{atm}\cdot\text{m}^3/\text{mole}$
KLT	۱۳۸	۷۳۸	۱۳۳۸	فاکتور تصحیح دمای تبخیر
KVOG	۱۳۹	۷۳۹	۱۳۳۹	نسبت تبخیر اندازه گیری شده به نرخ هوادهی مجدد

**گزینه‌ی فراریت** - کاربر باید گزینه‌ی فراریت را با استفاده از ثابت XV انتخاب کند. مشخص کردن مقدار صفر از وقوع پدیده‌ی فراریت جلوگیری خواهد کرد. مقادیر (۱-۵) از گزینه‌های (۱-۵) فراریت استفاده می‌شود، همان طور که در متن بالا بیان شده است: (۱) نرخ‌های فراریت مستقیماً وارد می‌شوند (۲) فراریت از ثابت‌های نرخ هوادهی مجدد ورودی و معادله اوکانر برای انتقال گاز محاسبه می‌شود (۳) فراریت از ثابت نرخ هوادهی مجدد ورودی و معادله مک کی برای انتقال گاز محاسبه می‌شود (۴) در سیستم‌های جریان، فراریت با استفاده از نرخ هوادهی مجدد محاسبه شده از روش اوکانرز و نرخ انتقال گاز ۱۰۰ متر در روز و در سیستم‌های راکد از طریق معادلات اوکانرز برای انتقال مایع و گاز محاسبه می‌شود (۵) در سیستم‌های جریان، فراریت با استفاده از نرخ هوادهی مجدد محاسبه شده از روش اوکانرز و نرخ انتقال گاز ۱۰۰ متر در روز محاسبه می‌شود؛ در سیستم‌های ساکن، فراریت از معادلات مک کی برای انتقال مایع و گاز محاسبه می‌شود.

**ثابت قانون هنری،  $\text{atm}\cdot\text{m}^3/\text{mole}$**  - کاربر باید عدد ثابت قانون هنری را برای تقسیم آب-هوا از نظر میزان هر ماده‌ی شیمیایی با استفاده از ثابت هنری مشخص کند.

**غلظت جوی،  $\text{ug/L}$**  - کاربر باید غلظت متوسط جوی ماده‌ی شیمیایی را با استفاده از ثابت ATMOS مشخص کند. اگر این غلظت صفر باشد، فراریت همیشه باعث از دست رفتن مواد شیمیایی از بدنه آب می‌شود.

**۱۰-۳-۷-گزینۀ ۱ فراریت**

در این گزینه، ثابت‌های نرخ فراریت متغیر می‌توانند مستقیماً وارد شوند.

**نرخ‌های فراریت، m/day-** هنگامی که XV روی ۱ تنظیم می‌شود، کاربر می‌تواند با استفاده از پارامتر ۵، REAR و تابع زمانی ۱۲، REARN بخش ورودی و نرخ فراریت متغیر زمانی را وارد کند. محصول REAR متغیر مکانی و REARN متغیر زمانی؛ ثابت‌های نرخ هوادهی خاص برای هر بخش و زمان مورد استفاده توسط TOXI، را ارائه می‌دهد. این مقادیر فراریت توسط تابع دما اصلاح نمی‌شوند.

**۱۰-۳-۸-گزینۀ ۲ فراریت**

در این گزینه، نرخ فراریت از ثابت‌های نرخ هوادهی مجدد وارد شده توسط کاربر و روش اوکانرز برای انتقال گاز محاسبه می‌شود. داده‌های ورودی مورد نیاز برای گزینۀ ۲ در زیر لیست شده‌اند. برای سیستم‌های جریان، از سرعت باد و دمای هوا استفاده نمی‌شود و ممکن است حذف شوند.

**نوع بدنۀ آب-** کاربر باید نوع بدنۀ آب را با استفاده از WTYPE مشخص کند. مقدار صفر نشان‌دهندۀ بدنۀ جریان آب مانند رود، رودخانه و یا دهانه بوده و مقدار ۱ نشان‌دهندۀ بدنۀ آب راکد مانند استخر، مخزن و یا دریاچه می‌باشد.

**نرخ هوادهی مجدد m/day-** هنگامی که XV روی ۲ تنظیم می‌شود، کاربر می‌تواند قطعۀ ورودی و نرخ هوادهی مجدد متغیر زمانی را با استفاده از پارامتر ۵، REAR و تابع زمانی ۱۲، REARN وارد کند. محصول REAR متغیر مکانی و REARN متغیر زمانی؛ ثابت‌های نرخ هوادهی خاص برای هر بخش و زمان مورد استفاده توسط TOXI، را ارائه می‌دهد. این مقادیر هوادهی مجدد توسط تابع دما اصلاح نمی‌شوند.

**نسبت فراریت به هوادهی مجدد-** کاربر می‌تواند نسبت فراریت به هوادهی مجدد را با استفاده از ثابت KVOG که به صورت تجربی اندازه‌گیری شده است، مشخص کند. اگر این ثابت داده نشود، این نسبت از وزن مولکولی محاسبه می‌شود.

**وزن مولکولی g/mol-** کاربر می‌تواند وزن مولکولی را با استفاده از ثابت MOLWT مشخص کند. در صورتی که مقدار اندازه‌گیری شده‌ی مشخصی برای نسبت فراریت به هوادهی مجدد ارائه نشود، از ثابت MOLWT برای محاسبه این نسبت استفاده می‌شود.

**سرعت باد، m/sec-** کاربر می‌تواند با استفاده از پارامتر ۴، WVVEL و تابع زمان ۹، WINDN سرعت باد را برای متغیرهای بخش و زمان مشخص کند. ثابت‌های نرخ هوادهی مجدد خاص برای هر

بخش و زمان مورد استفاده توسط TOXI را به ترتیب با متغیر مکانی WVEL و متغیر زمانی WINDN ارائه می‌دهند. سرعت باد باید در ارتفاع ۱۰ متری بالای سطح آب اندازه‌گیری شود.

**دمای هوا، °C-** کاربر می‌تواند دمای هوا برای متغیر-زمانی را با استفاده از ثابت AIRTMP و تابع زمانی ۱۳، AIRTMPN مشخص کند. دمای هوای محیط به صورت محصول AIRTMP و AIRTMPN محاسبه می‌شود. برای یک دمای ثابت هوا، AIRTMPN می‌تواند حذف شود. برای دماهای متغیر هوا، کاربر باید AIRTMP را بر روی ۱ تنظیم کند و یک سری از مقادیر دمای هوا در برابر زمان را از طریق AIRTMPN وارد نماید.

### ۱۰-۳-۹- گزینه‌ی ۳ فراریت

در این گزینه، نرخ فراریت از ثابت‌های نرخ هوادهی مجدد ورودی توسط کاربر و روش مک‌کی برای انتقال گاز محاسبه می‌شود. داده‌های ورودی مورد نیاز همانند گزینه‌ی ۲ می‌باشد. برای سیستم‌های جریان، از سرعت باد و دمای هوا استفاده نمی‌شود و ممکن است حذف شود.

### ۱۰-۳-۱۰- گزینه‌ی ۴ فراریت

در این گزینه، نرخ فراریت در سیستم‌های جریان با استفاده از نرخ هوادهی مجدد محاسبه شده از روش کووارز و نرخ انتقال گاز ۱۰۰ متر در روز و در سیستم‌های راکد از طریق معادلات اوکانرز برای انتقال مایع و گاز محاسبه می‌شود. داده‌های ورودی مورد نیاز برای گزینه‌ی ۴ در زیر، لیست شده‌اند. ممکن است اثر سرعت باد و دمای هوا برای سیستم‌های جریان؛ و اثر سرعت آب برای سیستم‌های راکد، چشم پوشی شود.

**سرعت آب، m/sec-** سرعت‌های جریان متغیر در سیستم‌های جریان، با استفاده از ضرایب هندسه هیدرولیکی محاسبه می‌شوند که در فصل ۲ توضیح داده‌شد. در بیش‌تر مواقع هیچ ورودی دیگری از طرف کاربر لازم نیست. اگر مصبی تحت شرایط جزر و مد شبیه‌سازی شود، جریان‌های خالص سرعت آب در محیط واقعی را برای استفاده در محاسبات تبخیر فراهم نمی‌کنند. در این حالت کاربر باید با استفاده از پارامتر ۱، VELFN و توابع زمانی (۵-۸)، VELN (۱-۴)، سرعت‌های آب متغیر زمان و بخش را وارد کند.

پارامتر VELFN مشخص می‌کند که کدام تابع سرعت متوسط مدل برای هر بخش استفاده خواهد شد. مقادیر ۱/۰، ۲/۰، ۳/۰ یا ۴/۰ به ترتیب توابع زمانی VELN(1)، VELN(2)، VELN(3) و VELN(4) را فراخوانی می‌کنند. سپس سرعت آب باید از طریق این توابع زمانی به صورت یک سری سرعت در برابر مقادیر زمانی وارد شود.

**نوع بدنه آب- گزینه ۲** را در بالا ببینید.  
نسبت تبخیر به هوادهی مجدد- گزینه ۲ را در بالا ببینید.  
وزن مولکولی g/mol- گزینه ۲ را در بالا ببینید.  
سرعت باد، m/sec- گزینه ۲ را در بالا ببینید.  
دمای هوا، C- گزینه ۲ را در بالا ببینید.

### ۱۰-۳-۱۱- گزینه‌ی ۵ فراریت

در این گزینه، نرخ فراریت در سیستم‌های جریان با استفاده از نرخ هوادهی مجدد محاسبه شده از روش کوارز و نرخ انتقال گاز ۱۰۰ متر در روز و در سیستم‌های راکد از طریق معادلات مک‌کی برای انتقال مایع و گاز محاسبه می‌شود. داده‌های ورودی موردنیاز برای گزینه‌ی ۵ مشابه گزینه‌ی ۴ می‌باشد. برای سیستم‌های جریان، از سرعت باد و دمای هوا استفاده نمی‌شود و ممکن است حذف شود. برای سیستم‌های راکد سرعت آب ممکن است حذف شود.

### ۱۰-۷-۱- هیدرولیز

هیدرولیز یا واکنش شیمیایی با آب، مسیر اصلی تجزیه‌ی بسیاری از مواد آلی سمی می‌باشد. هیدرولیز واکنشی است که در طی آن پیوندهای مولکولی مواد شیمیایی شکسته می‌شوند و با هیدروژن یا جزء هیدروکسیل آب تشکیل پیوندی جدید می‌دهند. واکنش‌های هیدرولیز معمولاً توسط اسید و یا باز کاتالیز می‌شوند، چراکه سرعت این واکنش در یک دمای مشخص با غلظت یون هیدروژن یا هیدروکسید کنترل می‌شود (Wolfe, 1980). به‌عنوان نمونه یک واکنش در شکل (۸) نشان داده شده است. واکنش می‌تواند توسط یون‌های هیدروژن کاتالیز شود و یا با مصرف یون‌های هیدروکسید پیش برود. شکل (۸) اثرات هیدرولیز باز بر کاربایل، هیدرولیز خنثی بر کلرومتان، و هیدرولیز اسید و باز بر ۲، ۴-D را نشان می‌دهد.

### ۱۰-۷-۱- بررسی واکنش‌های هیدرولیز در TOXI

واکنش هیدرولیز توسط TOXI و براساس فرآیند تجزیه‌ی ساده شبیه‌سازی می‌شود، هم‌چنین می‌توان این واکنش را با استفاده از نرخ‌هایی که در مرتبه‌ی اول برای مواد شیمیایی خنثی و در مرتبه‌ی دوم برای اشکال یونی آن هستند، شبیه‌سازی کرد. نرخ مرتبه‌ی دوم وابسته به pH و دما می‌باشد.

**۱۰-۷-۲- گزینه ۱: هیدرولیز مرتبه‌ی اول**

این گزینه، این امکان را به کاربر می‌دهد تا یک ثابت نرخ مرتبه‌ی اول برای هیدرولیز خنثی، قلیائی و یا اسیدی وارد کند. سپس این ثابت نرخ مرتبه‌ی اول به غلظت شیمیایی کل اعمال می‌شود (به بخش ۵-۳ مراجعه کنید).

**۱۰-۷-۳- گزینه ۲: هیدرولیز مرتبه‌ی دوم**

کاربر با انتخاب گزینه‌ی ۲، واکنش هیدرولیز را با مسیرهای خاص کاتالیز شده با اسید، خنثی یا باز برای گونه‌ها و فازهای مختلف از هر ماده‌ی شیمیایی در نظر می‌گیرد. واکنش‌ها مربوط به مواد شیمیایی خنثی در مرتبه‌ی اول و مواد شیمیایی اسیدی یا بازی در مرتبه‌ی دوم می‌باشند:

$$K_{HN} = \sum_i \sum_j k_{nij} f_{ij} \quad (58-10)$$

$$K_{HH} = \sum_i \sum_j k_{aij} [H^+] f_{ij} \quad (59-10)$$

$$K_{HOH} = \sum_i \sum_j k_{bij} [OH^-] f_{ij} \quad (60-10)$$

$K_{HN}$  = ثابت نرخ هیدرولیز خنثی،  $\text{day}^{-1}$

$K_{HH}$  = ثابت نرخ هیدرولیز اسید خالص کاتالیز شده،  $\text{day}^{-1}$

$K_{HOH}$  = ثابت نرخ هیدرولیز باز خالص کاتالیز شده،  $\text{day}^{-1}$

$k_{aij}, k_{bij}$  = ثابت نرخ اسید خالص کاتالیز شده و باز برای گونه‌ی یونی  $i$  در فاز  $j$ ، به ترتیب،  $\text{molar}^{-1} \text{day}^{-1}$

$k_{nij}$  = ثابت نرخ خنثی گونه‌ی یونی در فاز  $j$ ،  $\text{day}^{-1}$

$f_{ij}$  = کسر شیمیایی گونه‌ی یونی  $i$  در فاز  $j$ ،  $\text{day}^{-1}$

نرخ‌ها نیز تحت تأثیر دما قرار دارند و TOXI نرخ‌ها را با استفاده از تابع آرنیوس مبتنی بر دما تنظیم

می‌کند.

$$K_{HOH} = \sum_i \sum_j k_{bij} [OH^-] f_{ij} \quad (61-10)$$

## اجرا

$$T_K = \text{دمای آب، } ^\circ\text{K}$$

$$T_R = \text{نرخ دمای مرجع برای واکنش گزارش شده، } ^\circ\text{K}$$

$$E_{aH} = \text{انرژی فعال‌سازی آرنیوس برای واکنش هیدرولیز، } ^\circ\text{K kcal/mole}$$

$$R = 1/99 \text{ cal/mole } ^\circ\text{K}$$

$$1000 \text{ cal/kcal}$$

## اجرا

جدول ۱۰-۱۰ مشخصات داده‌های هیدرولیز TOXI

واحد	دامنه	نشانه‌گذاری	توصیف
-	۵-۹	pH	لگاریتم منفی فعالیت یون هیدروژن $H^+$
-	$0-10^7$	$k_{HNij}$	ثابت نرخ هیدرولیز اسید گونه $i$ فاز $j$
$\text{day}^{-1}$	$0-10^2$	$k_{HNij}$	ثابت نرخ هیدرولیز خنثی گونه $i$ فاز $j$
-	$0-10^7$	$k_{HBij}$	ثابت نرخ هیدرولیز بازگونه $i$ فاز $j$
$^\circ\text{C}$	۴-۳۰	T	دمای آب
-	۱۵-۲۵	$E_{aHj}$	انرژی فعال‌سازی برای واکنش هیدرولیز

مشخصات داده‌های هیدرولیز TOXI در جدول (۱۰-۱۰) خلاصه شده‌اند. علاوه بر این، ممکن است، نرخ‌های ساده‌ی مرتبه‌ی اول در گزینه‌ی ۱ و بخش واکنش‌های ساده TOXI توضیح داده شود. اگر هیچ داده‌ی هیدرولیزی وارد نشود، آن‌گاه اثر هیدرولیز در شبیه‌سازی‌ها گنجانده نخواهد شد.

## گزینه‌ی ۱

در این گزینه، کاربر یک یا چند مورد از موارد: ثابت نرخ هیدرولیز اسیدی، خنثی و یا باز را وارد می‌کند. **ثابت نرخ هیدرولیز مرتبه‌ی اول**،  $\text{day}^{-1}$  - کاربر می‌تواند مقادیر ثابت نرخ کلی باز، خنثی و هیدرولیز اسیدی را به ترتیب با استفاده از ثابت‌های ۱۸۱، ۱۸۲ و ۱۸۳ برای ماده‌ی شیمیایی ۱، ثابت‌های ۷۸۱، ۷۸۲ و ۷۸۳ برای ماده‌ی شیمیایی ۲ و ثابت‌های ۱۳۸۱، ۱۳۸۲ و ۱۳۸۳ برای ماده‌ی شیمیایی ۳ وارد کند.

نرخ‌ها مرتبه اول هستند و بر کل مواد شیمیایی اعمال می‌شود. اگر هر کدام از این نرخ‌های مرتبه‌ی اول در ورودی مشخص شوند، بدون در نظر گرفتن ثابت‌های هیدرولیز، مورد استفاده قرار خواهند گرفت.

## گزینه‌ی ۲:

جدول ۱۰-۱۱ ثابت‌های هیدرولیز اسیدی

متغیر ورودی	C <sub>3</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>1</sub>	فاز "i" یا واکنش "k"
دمای مرجع، TREFH, °C	۱۳۸۴	۷۸۴	۱۸۴	همه
هیدرولیز قلیائی، KH2O <sub>1,i1</sub> M <sup>-1</sup> day <sup>-1</sup>	۱۳۸۶	۷۸۶	۱۸۶	آب
	۱۳۹۱	۷۹۱	۱۹۱	DOC
	۱۳۹۶	۷۹۶	۱۹۶	رسوب
هیدرولیز خنثی، KH2O <sub>2,i1</sub> day <sup>-1</sup>	۱۴۰۱	۸۰۱	۲۰۱	آب
	۱۴۰۶	۸۰۶	۲۰۶	DOC
	۱۴۱۱	۸۱۱	۲۱۱	رسوب
هیدرولیز اسیدی، KH2O <sub>3,i1</sub> M <sup>-1</sup> day <sup>-1</sup>	۱۴۱۶	۸۱۶	۲۱۶	آب
	۱۴۲۱	۸۲۱	۲۲۱	DOC
	۱۴۲۶	۸۲۶	۲۲۶	رسوب
انرژی فعال‌سازی، E <sub>ak</sub> , kcal/mole °K	۱۴۳۱	۸۳۱	۲۳۱	قلیائی
	۱۴۳۶	۸۳۶	۲۳۶	خنثی
	۱۴۴۱	۸۴۱	۲۴۱	اسیدی

در این گزینه می‌توان ضرایب واکنش را به صورت ثابت‌ها مشخص کرد. اگر ماده‌ی شیمیایی شبیه‌سازی شده یونیزه نشود (که با ثابت‌های ورودی یونیزه‌شدن کنترل می‌شود) ثابت‌های هیدرولیز اسیدی، باز و خنثی می‌توانند ورودی فاز جاذب و رسوب DOC شیمیایی باشند که این ثابت‌ها در جدول (۱۰-۱۱) خلاصه شده‌است. اگر یونیزه‌شدن ماده‌ی شیمیایی امکان‌پذیر باشد، آن‌گاه برای شبیه‌سازی فاز محلول ممکن است ثابت‌ها برای جذب هر نوع گونه‌ی یونی بر DOC و رسوب وارد شوند. علاوه بر این، pH باید به منظور محاسبه‌ی هیدرولیز اسید و باز تأمین شود. pH یک پارامتر ورودی می‌باشد که باید

برای هر بخش از مدل مشخص شود و ممکن است ثابت یا در زمان متغیر باشد. توابع زمانی pH جداگانه ممکن است برای آب‌های سطحی و بخش‌های اعماق مشخص شوند.

اگر کاربر می‌خواهد TOXI را براساس دما تنظیم کند، آن‌گاه انرژی‌های فعال‌سازی غیرصفر که تابع آرنیوس مبتنی بر دما را طلب می‌کند باید مشخص شوند. انرژی‌های فعال‌سازی ممکن است برای هر نوع خاص یونی مشخص شوند و هر واکنش هیدرولیز (اسید، خنثی، باز) شبیه‌سازی شود. اگر هیچ انرژی فعال‌سازی داده نشود، آن‌گاه نسبت‌ها با دمای آب محیط تنظیم نخواهد شد.

**نرخ هیدرولیز باز  $M^{-1}day^{-1}$** ، - کاربر می‌تواند ثابت‌های نرخ هیدرولیز باز مرتبه‌ی دوم برای هر فاز (محلول، DOC-جذب، و رسوب-جذب) و هرگونه یونی را با استفاده از ثابت KH20 مشخص کند. اعداد ثابت برای مولکول خنثی در جدول (۷-۱۰) خلاصه شده‌اند. KH20<sub>1,1,1</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی محلول اشاره دارد؛ KH20<sub>1,2,1</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی DOC-جذب اشاره دارد؛ KH20<sub>1,3,1</sub> به مواد شیمیایی خنثی با منشأ رسوبی اشاره دارد.

**نرخ هیدرولیز خنثی،  $day^{-1}$**  - کاربر با استفاده از ثابت KH20 می‌تواند ثابت‌های سرعت هیدرولیز خنثی مرتبه‌ی اول را برای هر فاز (محلول، DOC-جذب، و رسوب-جذب) و هرگونه یونی مشخص کند. اعداد ثابت برای مولکول خنثی در جدول (۷-۱۰) خلاصه شده‌اند. KH20<sub>2,2,1</sub> به ماده شیمیایی خنثی، به محلول اشاره دارد؛ KH20<sub>2,2,1</sub> به ماده شیمیایی خنثی DOC-جذب اشاره دارد؛ KH20<sub>2,3,1</sub> به مواد شیمیایی خنثی با منشأ رسوبی اشاره دارد.

**نرخ هیدرولیز کاتالیزشده‌ی اسیدی،  $M^{-1}day^{-1}$**  - کاربر می‌تواند ثابت‌های سرعت هیدرولیز کاتالیزشده اسیدی مرتبه دوم را برای هر فاز (محلول، DOC-جذب، و رسوب-جذب) و هرگونه ویژگی یونی با استفاده از ثابت KH20 مشخص کند. اعداد ثابت برای مولکول خنثی در جدول (۷-۱۰) خلاصه شده‌اند. KH20<sub>3,3,1</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی محلول، KH20<sub>3,2,1</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی DOC-جذب و KH20<sub>3,3,1</sub> به مواد شیمیایی خنثی با منشأ رسوبی اشاره دارد.

**انرژی فعال‌سازی آرنیوس،  $^{\circ}K \text{ kcal/mole}$**  - کاربر می‌تواند با استفاده از ثابت EHOH، انرژی‌های فعال‌سازی را برای هر ماده‌ی شیمیایی مشخص کند. اعداد ثابت در جدول (۷-۱۰) خلاصه شده‌اند. اگر EHOH حذف‌شود یا روی صفر تنظیم شود، نرخ هیدرولیز تحت‌تأثیر دما قرار نخواهد گرفت.



**دمای مرجع، °C-** در دمای مرجع نرخ هیدرولیز با استفاده از رگرسیون ثابت اندازه‌گیری می‌شود. کاربر می‌تواند دمای مرجع را با استفاده از ثابت‌های خلاصه‌شده در جدول (۷-۱۰) مشخص کند. اگر دمای مرجع ارائه نشود، آن‌گاه پیش‌فرض ۲۰ درجه فرض می‌شود.

**pH** - کاربر می‌تواند مقادیر pH متغیر را با استفاده از پارامترهای ۱۱، pH و توابع زمانی ۱۰ و ۱۱، PHNW و PHNS تعیین کند. pH در بخش آب، محصول pH و PHNW خواهد بود؛ و در یک بخش از اعماق، محصول pH و PHNS خواهد بود. برای ثابت pH، کاربر باید مقادیر را از طریق پارامتر pH وارد کند. توابع زمان باید حذف‌شوند و برای pH متغیر زمانی، کاربر باید یک سری pH را در مقابل مقادیر زمانی از طریق PHNW و PHNS وارد کند. سپس مقادیر پارامتر pH نشان‌دهنده‌ی نسبت pH در هر بخش به تابع زمان است.

### ۱۰-۸- فوتولیز

تجزیه‌ی نوری (فوتولیز) تبدیل یا تجزیه‌ی ترکیبی است که مستقیماً از جذب انرژی نوری ناشی می‌شود. یک مثال از چندین مسیر فتوشیمیایی در فصل ۸ داده شده‌است. این واکنش تابعی از مقدار و توزیع طول‌موج نور تابشی، ویژگی‌های ترکیب در جذب نور و بازده نور جذب‌شده می‌باشد. فوتولیز را می‌توان براساس مکانیزم جذب انرژی به دو نوع مستقیم و غیرمستقیم طبقه‌بندی کرد. فوتولیز مستقیم نتیجه‌ی جذب مستقیم فوتون‌ها توسط مولکول شیمیایی سمی می‌باشد. فتولیز غیرمستقیم یا حساس‌شده نتیجه‌ی انتقال انرژی به ماده‌ی شیمیایی سمی از برخی مولکول‌های دیگر است که با جذب تابش صورت می‌گیرد.

### ۱۰-۸-۱- بررسی واکنش‌ها فوتولیز TOXI

فوتولیز واکنشی است که در طی آن یک ماده‌ی شیمیایی با جذب انرژی نوری تبدیل می‌شود. ضریب مرتبه‌ی اول برای فوتولیز را می‌توان از نرخ جذب و بازده کوانتومی برای هر ویژگی و فاز یونی محاسبه کرد:

$$K_{pG} = \sum_i \sum_j k_{ai} \phi_{ij} f_{ij} \quad (۶۲-۱۰)$$

$K_{pG}$  = ضریب نرخ فوتولیز مرتبه‌ی اول در شدت نور محیط،  $\text{day}^{-1}$ ،

$k_{ai}$  = میزان جذب خاص نور خورشید برای نمونه  $i$ ،  $\text{E/mole-day}$  یا  $(\text{E/L})/(\text{mole/L})/\text{day}$ ،

$\phi_{ij}$  = بازده واکنش کوانتومی  $i$  در فاز  $j$ ،  $\text{mole/E}$ ،

$f_{ij}$  = کسری از مواد شیمیایی به‌عنوان نمونه  $i$  در فاز  $j$ ،

کاربر ممکن است مشخص کند که مدل، ثابت نرخ فتولیز مرتبه‌ی اول را محاسبه می‌کند و یا ممکن است یک نسبت سطح آب نزدیک (برای شرایط بدون ابر فرضی) فراهم کند. اگر ثابت‌نسبی ارائه شده توسط کاربر نشان‌دهنده‌ی شرایط در مکانی غیر از بدنه‌ی آب مدل‌سازی شده باشد، مدل نسبت را برای اختلاف عرض جغرافیایی بین این دو و هرگونه اختلاف در پوشش ابر را اصلاح می‌کند. گزینه‌های محاسبه-ی تلفات ناشی از فتولیز به‌طور خلاصه در زیر توضیح داده شده‌است.

### ۱۰-۸-۲- گزینه‌ی ۱ فتولیز

کاربر با انتخاب این گزینه می‌تواند نرخ فتولیز از جذب‌مولی، شدت نور محاسبه شده و بازده کوانتومی ماده‌ی شیمیایی را محاسبه کند. برای محاسبه‌ی ثابت‌نسبی، TOXI طیف طول موج بین ۲۸۰ و ۸۰۰ نانومتر را به ۴۶ فاصله تقسیم می‌کند. برای هر فاصله، کاربر باید ضریب جذب‌مولی را مشخص کند. شدت نور در هر یک از ۴۶ طول موج به‌طور داخلی از محل بدنه‌ی آب (یعنی عرض جغرافیایی)، زمان از سال و شرایط جوی (نوع توده هوا، رطوبت‌نسبی، کدورت و محتوای ازن، ابرناکی) محاسبه می‌شود. مکان و زمان از سال برای تعریف شدت نور در لبه‌ی بیرونی اتمسفر استفاده می‌شود. شرایط جوی برای تعریف زوال نور در جو به کار می‌رود. شدت نور و جذب‌مولی با استفاده از مسیری‌نوری (d) که توسط کاربر تعریف شده برای محاسبه‌ی نسبت جذب نور خورشید خاص استفاده می‌شود. ثابت‌نسبی مرتبه‌ی اول با استفاده از معادله‌ی (۱۰-۶۳) محاسبه می‌شود. این محاسبه مستقیماً از EXAMS II (Burns and Cline, 1985) گرفته شده‌است و براساس فرمول‌های منتشر شده توسط گرین، کراس و اسمیت (۱۹۸۰) می‌باشد.

نسبت جذب‌ویژه‌ی نور خورشید، انتگرال یا مجموع تمام پهنای باند نور متوسط ضرب شده در جذب-مولی و مسیر نوری می‌باشد:

$$k_{ai} = \sum_k I_{Gk} \epsilon_{ki} d(2303)(86400)/(6.023 \times 10^{23}) \quad (۱۰-۶۳)$$

$I_{Gk}$  = شدت نور متوسط طول موج k ، photons/cm<sup>2</sup>-sec

$\epsilon_{ki}$  = ضریب جذب‌مولی طول موج k با استفاده از گونه i ، L/mole-cm-ln 10

d = نسبت مسیر نوری به مسیر عمودی، cm/cm

2303 = (ln 10/ln e) (cm<sup>3</sup>/L)

86400 = sec/day

$6/022 \times 10^{23}$  = عدد آوگادرو، photons/E

کاهش نور با فرمول یکپارچه بیر-لمبرت برای هر طول موج k محاسبه می‌شود:

$$\frac{I_{Gk}}{I_{ok}} = \frac{1 - \exp(-dK_e D)}{dK_e D} \quad (۶۴-۱۰)$$

$I_{ok}$  = شدت نور از طول موج k در زیر سطح آب، photons/cm<sup>2</sup>-sec.

$K_e$  = ضریب کاهش نور متغیر مکانی، m<sup>-1</sup>.

D = عمق بخش آب، m.

### ضرایب خاص کاهش نور

جدول ۱۰-۱۲ ضرایب کاهش نور برای طول موج‌های کمتر از ۳۷۰

شماره	طول موج	آب خالص l/m	جامد L/mg-m	DOC L/mg-m	کلروفیل L/gm-m
۱	۲۸۰/۰	۰/۲۸۸	۰/۳۴	۷/۹۰	۱۴۵
۲	۲۸۲/۵	۰/۲۶۸	۰/۳۴	۷/۶۵	۱۳۸
۳	۲۸۵/۰	۰/۲۴۹	۰/۳۴	۷/۴۱	۱۳۲
۴	۲۸۷/۵	۰/۲۳۱	۰/۳۴	۷/۱۱	۱۲۶
۵	۲۹۰/۰	۰/۲۱۵	۰/۳۴	۶/۹۵	۱۲۰
۶	۲۹۲/۵	۰/۱۹۴	۰/۳۴	۶/۷۳	۱۱۵
۷	۲۹۵/۰	۰/۱۷۴	۰/۳۴	۶/۵۲	۱۰۹
۸	۲۹۷/۵	۰/۱۵۷	۰/۳۴	۶/۳۰	۱۰۶
۹	۳۰۰/۰	۰/۱۴۱	۰/۳۴	۶/۱۲	۱۰۱
۱۰	۳۰۲/۵	۰/۱۳۳	۰/۳۴	۵/۹۴	۹۵
۱۱	۳۰۵/۰	۰/۱۲۶	۰/۳۴	۵/۷۶	۹۰
۱۲	۳۰۷/۵	۰/۱۱۹	۰/۳۴	۵/۵۷	۸۵
۱۳	۳۱۰/۰	۰/۱۰۵	۰/۳۴	۵/۳۹	۸۰
۱۴	۳۱۲/۵	۰/۰۹۹۴	۰/۳۴	۵/۲۲	۷۸
۱۵	۳۱۵/۰	۰/۰۹۵۲	۰/۳۴	۵/۰۶	۷۵
۱۶	۳۱۷/۵	۰/۰۹۰۳	۰/۳۴	۴/۹۰	۷۲

۷۰	۴/۷۴	۰/۳۴	۰/۰۸۴۴	۳۲۰/۰	۱۷
۶۸	۴/۵۶	۰/۳۴	۰/۰۷۹۳	۳۲۳/۱	۱۸
۶۴	۴/۱۷	۰/۳۴	۰/۰۶۷۸	۳۳۰/۰	۱۹
۵۹	۳/۶۴	۰/۳۴	۰/۰۵۶۱	۳۴۰/۰	۲۰
۵۵	۳/۱۵	۰/۳۴	۰/۰۴۶۳	۳۵۰/۰	۲۱
۵۵	۲/۷۴	۰/۳۴	۰/۰۳۷۹	۳۶۰/۰	۲۲
۵۱	۲/۳۴	۰/۳۴	۰/۰۳۰۰	۳۷۰/۰	۲۳

جدول ۱۰-۱۳ ضرایب کاهش نور برای طول موج‌های بیشتر از ۳۷۰

شماره	طول موج	آب خالص l/m	جامد L/mg-m	DOC L/mg-m	کلروفیل L/gm-m
۲۴	۳۸۰/۰	۰/۰۲۲۰	۰/۳۴	۲/۰۰	۴۶
۲۵	۳۹۰/۰	۰/۰۱۹۱	۰/۳۴	۱/۶۴	۴۲
۱	۲۸۰/۰	۰/۲۸۸	۰/۳۴	۷/۹۰	۱۴۵
۳۰	۴۴۰/۰	۰/۰۱۴۵	۰/۳۴	۰/۷۵۳	۳۲
۳۱	۴۵۰/۰	۰/۰۱۴۵	۰/۳۴	۰/۶۵۴	۳۱
۳۲	۴۶۰/۰	۰/۰۱۵۶	۰/۳۴	۰/۵۷۳	۲۸
۳۳	۴۷۰/۰	۰/۰۱۵۶	۰/۳۴	۰/۵۰۴	۲۶
۳۴	۴۸۰/۰	۰/۰۱۷۶	۰/۳۴	۰/۴۴۴	۲۴
۳۵	۴۹۰/۰	۰/۰۱۹۶	۰/۳۴	۰/۳۹۶	۲۲
۳۶	۵۰۳/۷۵	۰/۰۲۹۵	۰/۳۴	۰/۳۵۷	۱۹
۳۷	۵۲۵/۰	۰/۰۴۹۲	۰/۳۴	۰/۲۸۲	۱۴
۳۸	۵۵۰/۰	۰/۰۶۳۸	۰/۳۴	۰/۲۲۸	۱۰
۳۹	۵۷۵/۰	۰/۰۹۴۰	۰/۳۴	۰/۱۸۸	۸
۴۰	۶۰۰/۰	۰/۲۴۴	۰/۳۴	۰/۱۵۸	۶

۵	۰/۰	۰/۳۴	۰/۳۱۴	۶۲۵/۰	۴۱
۸	۰/۰	۰/۳۴	۰/۳۴۹	۶۵۰/۰	۴۲
۱۳	۰/۰	۰/۳۴	۰/۴۴۰	۶۷۵/۰	۴۳
۳	۰/۰	۰/۳۴	۰/۷۶۸	۷۰۶/۲۵	۴۴
۲	۰/۰	۰/۳۴	۲/۴۷	۷۵۰/۰	۴۵
۰	۰/۰	۰/۳۴	۲/۰۷	۸۰۰/۰	۴۶

$I_{ok}$  برای هر طول موج براساس زمان از سال، عرض جغرافیایی، ارتفاع زمین، پوشش ابر، نوع جرم هوا، رطوبت نسبی، کدورت اتمسفر و مقدار اوزون محاسبه می‌شود. ویژگی‌های جوی می‌توانند به صورت ماهانه تغییر کنند یا به صورت میانگین سالانه مشخص شوند. محاسبه‌ی مقدار نسبت مسیر نوری به عمق عمودی ( $d$ ) دشوار است، اما بهترین مقدار ممکن  $1/19$  می‌باشد. (Hutchinson, 1967) با این حال، ممکن است در حضور غلظت زیادی از ذرات، پراکندگی به  $2$  نزدیک شود. برای اطمینان از به کار بردن مقدار مناسب ورودی در محاسبات، پیشنهاد می‌شود در صورت نامعتبر بودن مقدار ورودی، مقدار این پارامتر به  $1/19$  تنظیم شود.

ثابت‌های سرعت فوتولیز برای هر بخش از ستون آب از ثابت سرعت نزدیک به سطح محاسبه شده و نسبت کاهش نور در ستون آب ( $K_e$ ) تعیین می‌شوند. مقدار  $K_e$  برای هر طول موج براساس فرمول گرفته شده از EXAMS II محاسبه می‌شود:

$$K_e = K_{ew} + \eta_1 CHL + \eta_2 DOC + \eta_3 m \quad (65-10)$$

$K_{ew}$  = ضریب از بین رفتن آب خالص،  $1/m$ ،

$CHL$  = غلظت کلروفیل فیتوپلانکتون،  $mg/L$ ،

$DOC$  = غلظت کربن آلی محلول،  $mg/L$ ،

$m$  = غلظت جامدات،  $mg/L$ ،

$\eta_3$  = ضرایب کاهش خاص،

مقادیر  $K_{ew}$ ،  $\eta_1$ ،  $\eta_2$ ،  $\eta_3$  برای هریک از ۴۶ طول موج در برنامه به عنوان شرح داده در زیر روال و در جداول (۱۰-۱۲) و (۱۰-۱۳) نشان داده شده است. میانگین ضرایب نرخ فوتولیز برای هر طول موج محاسبه می‌شود و سپس در مجموع یک نرخ کلی به دست می‌آید.

## ۱۰-۸-۳- گزینه‌ی ۲ فوتولیز

در این گزینه، میزان جذب نور خورشید در سطح  $K_{aRi}$  ( $E/mol\text{-day}$ ) توسط کاربر برای هر نمونه شبیه‌سازی شده‌است. همانند EXAMSII، سپس نرخ ورودی همان‌طور که در زیر نشان داده شده‌است، تنظیم می‌شود.

$$k_{ai} = \sum_i \sum_j k_{oRi} I_o (I_G/I_o) (1 - 0/056C) X_L \quad (۶۶-۱۰)$$

$I_o$  = کاربر تابع زمان شدت نور نرمال شده را مشخص می‌کند که به نسبت نور محیط به شدت نور مرجع، بستگی دارد.

$C$  = پوشش ابر (در دهم، 0-10)،

$X_L$  = ضریب تصحیح عرض جغرافیایی، محاسبه شده توسط،

$$X_L = \left[ \frac{19169/65 + 87054/63 \cos(0/039L)}{19169/65 + 87054/63 \cos(0/039L_{Rf})} \right] \quad (۶۷-۱۰)$$

$L$  = عرض جغرافیایی بدنه‌ی آب،

$L_{Rf}$  = عرض مرجع که در آن میزان فوتولیز سطح اندازه‌گیری شد،

متوسط کاهش شدت نور،  $I_G/I_o$  به صورت بالا از فرمول بیر-لمبرت محاسبه می‌شود (معادله ۱۰-۶۵). بنابراین شدت نور برای هر بخش از مدل دارای مقدار صفر تا یک می‌باشد.

ضریب کاهش ممکن است به‌طور مستقیم به‌عنوان یک پارامتر مدل مشخص شود و می‌تواند با تغییر بخش متغیر باشد. اگر ضریب خاموشی مشخص نشود با استفاده از معادله‌ی (۱۰-۶۶) و مقادیر ذکر شده در جدول (۱۰-۱۲) و (۱۰-۱۳) از طول موج تعیین شده توسط کاربر، حداکثر جذب نور برای گونه‌های شیمیایی خاص (خنثی، آنیونی یا کاتیونی) تعیین می‌شود. اگر طول موج حداکثر جذب، خارج از محدوده‌ی طیفی مربوطه (۲۸۰-۸۲۵ نانومتر) باشد آن‌گاه TOXI طول موج ۳۰۰ نانومتر را فرض می‌کند.

پس از تنظیم میزان جذب نور مرجع خورشید با شرایط محیطی، سرعت فوتولیز مرتبه‌ی اول، و بازده کوانتومی واکنش از معادله‌ی (۱۰-۶۳) محاسبه می‌شود.

گزینه‌ی ۲ فوتولیز اغلب با استفاده از ثابت‌های نسبی فوتولیز مرتبه‌ی اول مرجع به جای نسبت جذب نور مرجع خورشید اجرا می‌شود. اگر ثابت‌های سرعت مرتبه‌ی اول مرجع برای  $k_{aRi}$  ورودی باشند، پس معادله‌ی (۱۰-۶۷)، ثابت  $k_{ai}$  را ب ثابت نرخ مرتبه‌ی اول ( $day^{-1}$ ) تنظیم شده با شرایط نور محیط محاسبه

می‌کند. سپس ثابت نرخ فوتولیز مرتبه‌ی اول کل از معادله‌ی (۶۳-۱۰) که در آن بازده کوانتومی روی ۱ تنظیم شده، محاسبه می‌شود.

جدول ۱۰-۱۴ مشخصات داده‌های فوتولیز TOXI

واحد	دامنه	نشانه‌گذار ی	توصیف
day <sup>-1</sup>	۰-۱۰	K <sub>PR</sub>	ثابت نرخ مشاهده شده برای ماده‌ی شیمیایی با شدت نور مرجع I <sub>R</sub>
E/mole-day	?	K <sub>aR</sub>	نرخ جذب نور خورشید برای ماده‌ی شیمیایی با شدت نور مرجع مشاهده شده I <sub>R</sub>
E/cm <sup>2</sup> – sec	۱۰ <sup>-۷</sup> – ۲x۱۰ <sup>-۶</sup>	I <sub>R</sub>	نرخ شدت نور مرجع عامل فوتولیز K <sub>PR</sub> یا میزان جذب K <sub>aR</sub>
-	۰-۱۰	I <sub>O</sub>	نسبت شدت نور سطح به شدت نور مرجع (I <sub>O</sub> /I <sub>R</sub> )
m <sup>-1</sup>	۰/۱-۵	Ke	ضریب استهلاک نور در ستون آب
mg/L	۱۰ <sup>-۳</sup> -۱۰ <sup>-۱</sup>	CHL	غلظت کلروفیل
mg/L	۰-۱۰	DOC	کربن آلی محلول
m	۰/۱-۱۰	D	عمق قطعه ستون آب
moles/E	۰-۰/۵	Ö <sub>ij</sub>	کسر عملکرد کوانتومی واکنش برای نمونه i در فاز j
L/mole-cm-ln 10	۰-?	ā <sub>ki</sub>	جذب مولی توسط طول موج k توسط نمونه i
m	۰-۵۰۰۰	ELEVG	ارتفاع بدنه‌ی آب
degrees	۰-۹۰	L	عرض جغرافیایی بدنه‌ی آب
degrees	۰-۹۰	L <sub>Rf</sub>	عرض جغرافیایی مرجع
tenths	۰-۱۰	C <sub>G</sub>	پوشش ابر، کسری از آسمان

-	۱-۴	AIRTYG	نوع هوا (روستایی، شهری، دریایی یا استوایی)
percent	۰-۱۰۰	RHUMG	رطوبت نسبی
km	۰-؟	ATURBG	کدورت اتمسفر، با ضخامت لایه آتروسول معادل
cm NTP	۰-؟	OZONEG	محتوای ازن

## اجرا

مشخصات داده‌های فوتولیز TOXI در جدول (۱۰-۱۴) خلاصه شده‌است. علاوه بر این، همان‌طور که در فصل ۶ نشان داده‌شد، ممکن است یک ثابت نسبی مرتبه‌ی اول کلی برای هر ماده شیمیایی توسط کاربر تأمین شود. اگر ثابت نسبی مرتبه‌ی اول مشخص شود، بدون در نظر گرفتن سایر مشخصات ورودی از آن استفاده می‌شود. برای محاسبات فوتولیز که در این فصل توضیح داده شد، الزامات ورودی در ادامه توضیح داده خواهد شد.

### ۱۰-۸-۴- گزینه‌ی ۱ فوتولیز

در گزینه‌ی ۱، TOXI جذب نور خورشید و سرعت تجزیه‌ی فتولیتیک سطح را محاسبه می‌کند. **گزینه‌ی فوتولیز** - کاربر باید گزینه‌ی فوتولیز را با استفاده از XPHOTO انتخاب کند: ارزش صفر به معنی بدون واکنش فوتولیز، ارزش ۱ به معنای این که برای محاسبه‌ی نرخ فوتولیز از جذب مولی استفاده می‌شود و در نهایت، با انتخاب ارزش ۲، نرخ فوتولیز از نرخ اندازه‌گیری سطح استخراج می‌شود. از اعداد ثابت ۲۸۶، ۸۸۶ و ۱۴۸۶ به ترتیب برای مواد شیمیایی ۱، ۲ و ۳ استفاده کنید.

**ضریب مولی،  $L/mole\text{-}cm\text{-}ln10$**  - کاربر می‌تواند مقادیر ضریب جذب مولی را با استفاده از ثابت ABS برای هر ویژگی یونی در بیش از ۴۶ طول موج تعیین کند. طول موج‌های عدد در جداول (۱۰-۱۲) و (۱۰-۱۳) فهرست شده‌اند. مقادیر ضریب جذب برای هر ویژگی یونی در تمام فازها (آبی، DOC-جذب، رسوبی-جذب) اعمال می‌شود. اعداد ثابت برای گونه‌ی یونی خنثی در جدول (۱۰-۱۵) خلاصه شده‌است. **بازده کوانتومی،  $moles/einstein$**  - کاربر می‌تواند مقادیر بازده کوانتومی واکنش را برای هر فاز (محلول، DOC-جذب، رسوب-جذب) و هر گونه‌ی یونی را با استفاده از ثابت QANTG مشخص کند. اعداد ثابت برای ملکول خنثی در جدول (۱۰-۱۵) خلاصه شده‌است. به این صورت که QANTG<sub>11</sub> به



ماده‌ی شیمیایی خنثی، QANTG<sub>21</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی و جاذب DOC و QANTG<sub>31</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی با لایه رسوبی اشاره دارد.

**تاریخ میلادی** - کاربر باید تاریخ میلادی را برای شروع شبیه‌سازی با استفاده از ثابت 1- TO مشخص کند.

**ارتفاع، m** - کاربر باید متوسط ارتفاع زمین را با استفاده از ثابت 3-ELEVG، مشخص کند.

جدول ۱۰-۱۵ ثابت‌های مختلف برای ملکول خنثی

متغیر	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>
ABS <sub>1L</sub>	۳۰۱-۳۴۶	۹۰۱-۹۴۶	۱۵۰۱-۱۵۴۶
QANTG <sub>11</sub>	۵۵۱	۱۱۵۱	۱۷۵۱
QANTG <sub>21</sub>	۵۵۶	۱۱۵۶	۱۷۵۶
QANTG <sub>31</sub>	۵۶۱	۱۱۶۱	۱۷۶۱

**عرض، درجه و زمان** - کاربر باید عرض بدنه‌ی آب را با استفاده از ثابت 4-LATG مشخص کند. **گزینه‌ی نور** - با استفاده از ثابت XLITE، کاربر دارای گزینه‌های کنترل‌کننده‌ی چگونگی محاسبه‌ی TOXI و استفاده از شدت نور می‌باشد. اگر مقدار این ثابت صفر باشد به معنی نبود محاسبه‌ی نور بوده و اگر برابر با ۱ باشد بیانگر محاسبه‌ی شدت متوسط سالانه نور بوده و اگر برابر با ۲ باشد محاسبه‌ی شدت نور متوسط نشان داده شده برای ماه به روش TO می‌باشد و اگر مقدار این پارامتر برابر با ۳ باشد، محاسبه‌ی شدت نور ماهانه یک تابع مرحله‌ای می‌باشد.

**مسیر نوری** - کاربر می‌تواند نسبت مسیر نوری به عمق عمودی را با استفاده از ثابت DFACG 7 مشخص کند. مقدار پیش فرض برای این پارامتر ۱/۱۷ فرض شده است.

**پوشش ابر، دهم** - کاربر باید میانگین پوشش ابر ماهانه یا سالانه را با استفاده از بسته‌ی ثابت مشخص کند. مقادیر ماهانه را می‌توان با استفاده از اعداد ثابت ۱۱-۲۲ و میانگین سالانه را با استفاده از عدد ۲۳ وارد نمود.

**نوع هوا** - کاربر باید نوع میانگین توده هوا را با استفاده از AIRTYG مشخص کند. مقادیر ۱، ۲، ۳، یا ۴ به ترتیب مناطق روستایی، شهری، دریایی یا تروپوسفری را انتخاب خواهند کرد. مقادیر ماهانه را می‌توان با استفاده از اعداد ثابت ۲۴-۳۵ و میانگین سالانه را با استفاده از عدد ۳۶ وارد نمود.

**رطوبت نسبی، درصد-** کاربر باید میانگین رطوبت نسبی روز را با استفاده از ثابت RHUMG مشخص نماید. مقادیر ماهانه می‌توانند با استفاده از اعداد ثابت ۳۷-۴۸ وارد شوند و میانگین سالانه را می‌توان با استفاده از عدد ۴۹ وارد نمود.

**اختلالات جوی، km-** کاربر باید میانگین کدورت جوی (در ضخامت معادل لایه آیروسول، km) را با استفاده از ثابت ATURBG مشخص نماید. مقادیر ماهانه را می‌توان با استفاده از اعداد ثابت ۵۰-۶۱ و میانگین سالانه را با استفاده از عدد ۶۲ وارد نمود.

**محتوای اوزون، cm NTP-** کاربر باید میانگین محتوای اوزون (cm NTP) را با استفاده از ثابت OZONEG مشخص نماید. مقادیر ماهانه را می‌توان با اعداد ثابت ۶۳-۷۴ و میانگین سالانه را با استفاده از عدد ۷۵ وارد نمود.

**کربن آلی حل شده، mg/L-** کاربر می‌تواند غلظت کربن آلی محلول را با استفاده از پارامتر 6-DOC مشخص نماید (Group G, Record 4, PARAM(I,6)).

**غلظت کلروفیل a، mg/L-** با استفاده از پارامتر ۱۰، CHPHL و تابع زمانی ۱۴، CHLN تعیین می‌شود. اگر غلظت کلروفیل در زمان ثابت بماند، کاربر باید با استفاده از پارامتر CHPHL، غلظت میانگین بخش را وارد و CHLN را حذف نماید.

کاربر ممکن است غلظت کلروفیل a متغیر زمانی را از طریق تابع زمانی CHLN، که مجموعه‌ای از غلظت در مقابل مقادیر زمانی است، وارد کند و پس از آن پارامتر CHPHL، نسبت غلظت هر بخش به مقادیر تابع زمان را نشان می‌دهد. محصول تابع CHPHL و CHLN غلظت کلروفیل خاص زمان و بخش مورد استفاده توسط TOXI را نشان می‌دهد. (Group G, Record 4, PARAM(I,10); Group I, Record 2, VALT(14,K))

### ۱۰-۸-۵- گزینه‌ی ۲ فوتولیز

در گزینه‌ی ۲، TOXI سرعت جذب نور خورشید مشاهده شده یا نرخ واپاشی فتولیتیک تحت شرایط مرجع به شرایط محیطی را برون‌یابی می‌کند. داده‌های ورودی مورد نیاز در ادامه توضیح داده شده‌اند.

**گزینه‌ی فوتولیز-** کاربر باید گزینه‌ی فوتولیز را با استفاده از XPHOTO انتخاب کند: به این صورت که اگر این مقدار برابر با صفر باشد بدون فوتولیز بوده، اگر برابر با ۱ باشد، نرخ فوتولیز از جذب مولی محاسبه شده و اگر ۲ باشد نرخ فوتولیز از نرخ سطح اندازه‌گیری شده، برون‌یابی می‌شود. از اعداد ثابت ۲۸۶، ۸۸۶ و ۱۴۸۶ به ترتیب برای مواد شیمیایی ۱، ۲ و ۳ استفاده کنید.

**نرخ فوتولیز اندازه‌گیری شده،  $day^{-1}$**  - کاربر ممکن است ثابت نرخ فوتولیز اندازه‌گیری شده را تحت شرایط مرجع و با استفاده از ثابت KDPG مشخص کند. مقادیر برای مولکول خنثی مواد شیمیایی ۱، ۲ و ۳ را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های ۲۹۱، ۸۹۱ و ۱۴۹۱ وارد کرد. مقادیر جداگانه را می‌توان برای هرگونه یونی وارد کرد. اگر یک ثابت نسبی مرتبه اول، مرجع ورودی باشد، بازده کوانتومی باید بر روی ۱ تنظیم شود.

**نرخ جذب نور خورشید اندازه‌گیری شده،  $einstein/mole-day$**  - کاربر ممکن است نرخ جذب نور خورشید اندازه‌گیری شده تحت شرایط مرجع را با استفاده از ثابت KDPG مشخص کند. مقادیر برای مولکول خنثی مواد شیمیایی ۱، ۲ و ۳ را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های ۲۹۱، ۸۹۱ و ۱۴۹۱ وارد نمود و همچنین می‌توان مقادیر جداگانه را برای هرگونه یونی وارد نمود. اگر میزان جذب نور مرجع خورشید ورودی باشد، بازده کوانتومی متناظر باید مشخص شود.

**بازده کوانتومی،  $moles/einstein$**  - کاربر می‌تواند مقادیر بازده کوانتومی واکنش را برای هر فاز (محلول، DOC-جاذب، رسوب-جاذب) و هرگونه یونی با استفاده از ثابت QANTG مشخص کند. اعداد ثابت برای مولکول خنثی در جدول (۱۰-۱۵) خلاصه شده است. QANTG<sub>11</sub>، QANTG<sub>31</sub> و QANTG<sub>21</sub> به ترتیب به، ماده‌ی شیمیایی خنثی حل شده، ماده‌ی شیمیایی خنثی DOC-جاذب و ماده‌ی شیمیایی خنثی با منشأ رسوبی اشاره دارند. مقادیر جداگانه را می‌توان برای هرگونه یونی وارد کرد.

**عرض مرجع، درجه و مقادیر ثابت** - کاربر می‌تواند عرض جغرافیایی را مشخص کند که در آن نرخ‌های فتولیتیک آب سطحی مرجع با استفاده از ثابت RFLATG اندازه‌گیری شده‌اند. مقادیر مواد شیمیایی ۱، ۲ و ۳ را می‌توان به ترتیب با اعداد ثابت ۲۸۸، ۸۸۸ و ۱۴۸۸ وارد نمود.

**حداکثر موج جذب،  $nm$**  - کاربر باید، طول موج حداکثر جذب را با استفاده از ثابت LAMAXG مشخص کند. مقادیر برای نوع خنثی مواد شیمیایی ۱، ۲ و ۳ را می‌توان به ترتیب با استفاده از ثابت‌های ۲۹۶، ۸۹۶ و ۱۴۹۶ وارد نمود و همچنین می‌توان مقادیر جداگانه را برای هرگونه یونی وارد نمود.

**عرض، درجه و زمان** - کاربر باید عرض بدنه‌ی آب را با استفاده از ثابت LATG 4 مشخص کند. **پوشش ابر** - کاربر باید میانگین پوشش ابر ماهانه یا سالانه را با استفاده از ثابت CLOUDG مشخص کند. مقادیر ماهانه را می‌توان با استفاده از اعداد ثابت ۱۱-۲۲؛ و میانگین سالانه را با استفاده از عدد ۲۳ وارد نمود.

**شدت نور** - کاربر می‌تواند شدت نور نرمال شده‌ی متغیر-زمان (بدون بعد) را با استفاده از تابع زمان ۱۵، PHTON مشخص کند. این تابع برای تنظیم ثابت نرخ اندازه‌گیری شده تحت شدت نور مرجع کنترل شده به یک ثابت نرخ پیش‌بینی شده تحت شدت نور محیط استفاده می‌شود. مقدار پیش‌فرض برای این تابع ۱/۰ می‌باشد.

**کاهش نور،  $m^{-1}$**  - کاربر می‌تواند ضرایب کاهش نور هر بخش را برای نور فعال فتوشیمیایی با استفاده از پارامتر ۱۲، XKE2 مشخص کند. هنگامی که این عدد صفر است ضرایب خاموشی از غلظت جامدات، DOC و کلروفیل a برای طول موج حداکثر جذب محاسبه می‌شوند. DOC و کلروفیل a پارامترهای از مدل مشخص شده‌اند که ممکن است بین بخش‌ها و در طول زمان تغییر کنند. ورودی آن‌ها در بخش فوق توضیح داده شده‌است. نور تحت پوشش یخ صفر (فرض بر زمانی است که دمای آب به صفر می‌رسد) تنظیم شده‌است، که فرض می‌شود زمانی است که دمای آب به صفر می‌رسد.

#### ۱۰-۹-اکسیداسیون

اکسیداسیون شیمیایی مواد سمی آلی در سیستم‌های آبی می‌تواند نتیجه‌ی فعل‌وانفعال بین رادیکال‌های آزاد و آلاینده‌ها باشد. رادیکال‌های آزاد در نتیجه‌ی واکنش‌های فتوشیمیایی تشکیل می‌شوند. رادیکال‌های آزادی که در مقالات مورد توجه قرار گرفته‌اند، شامل: رادیکال‌های آلکیل پراکسی،  $RO_2$  رادیکال‌های OH و اکسیژن یکتایی می‌باشند.

#### ۱۰-۹-۱- مروری بر واکنش‌های اکسیداسیون TOXI

در TOXI اکسیداسیون به صورت یک فرآیند عمومی مرتبه‌ی دوم برای گونه‌ها و فازهای مختلف از هر ماده‌ی شیمیایی مدل‌سازی شده‌است:

$$K_o = [RO_2] \sum_i \sum_j k_{oij} f_{ij} \quad (۱۰-۶۸)$$

$K_o$  = ثابت نرخ اکسیداسیون خالص،  $day^{-1}$ ،

$[RO_2]$  = غلظت مولی اکسیدان، moles/L،

$k_{oij}$  = ثابت نرخ اکسیداسیون مرتبه‌ی دوم برای مواد شیمیایی نمونه i در فاز j، L/mole-day،

ضرایب واکنش ممکن است به صورت ثابت مشخص شوند، این ضرایب ثابت شامل ثابت‌های انرژی فعال‌سازی می‌باشند که به صورت صفر باقی می‌مانند. اگر کاربر بخواهد با استفاده از TOXI، نسبت‌ها را بر اساس تابع آرنیوس که براساس دماست، مشخص کند در نتیجه انرژی اکتیواسیون غیر صفر مشخص

می‌شود، به طوری که با استفاده از ثابت‌های تعیین شده می‌توان محاسبات زیر را برای هر ثابت  $k$  انجام می‌دهند:

$$k(T_K) = k(T_R) \exp[100E_{ao}(T_K - T_R)/(RT_K T_R)] \quad (۱۰-۶۹)$$

انرژی فعال‌سازی ممکن است برای هرگونه یونی شبیه‌سازی شده مشخص شود. در صورت مشخص نبودن انرژی فعال‌سازی، ثابت‌ها با توجه به دمای محیط آب کنترل نمی‌شوند. به دلیل تعداد زیاد رادیکال‌های آلکیل پراکسی که به طور بالقوه در محیط وجود دارند، به دست آوردن تخمین  $k_{ox}$  برای هرگونه غیرممکن است. میل و همکاران (۱۹۸۲) برآورد ضریب‌نسبی را با استفاده از ترشیوبوتیل هیدروپراکساید به صورت عامل اکسیدکننده‌ی مدل پیشنهاد کردند و همچنین بیان کردند که آلکیل پراکساید‌های دیگر فعالیتی مشابه با یک ترتیب بزرگ را نشان می‌دهند. ضرایب سرعت مرتبه‌ی دوم به عنوان ثابت‌های ورودی TOXI در نظر گرفته می‌شوند.

علاوه بر برآورد ضریب‌نسبی، یک برآورد از غلظت رادیکال‌های آزاد نیز باید انجام شود تا به طور کامل عبارتی برای اکسیداسیون رادیکال‌های آزاد تعریف شود. میل و همکاران (۱۹۸۲) غلظت‌های  $RO_2$  به ترتیب  $10^{-9}$  M و  $OH$  روی  $10^{-7}$  M برای تعداد محدودی از بدنه‌های آبی را گزارش می‌کنند. زپ و کلاین (۱۹۷۷) مقدار متوسطی را به ترتیب  $10^{-12}$  M برای اکسیژن یکتایی در بدنه‌های آبی نمونه‌برداری شده گزارش کردند. فوتولیز مولکول‌های آلی طبیعی می‌باشد. اگر آب کدر و یا خیلی عمیق باشد، رادیکال‌های آزاد احتمالاً تنها نزدیک فصل مشترک آب-هوا تولید می‌شوند و در نتیجه اکسیداسیون شیمیایی اهمیت کم‌تری خواهد داشت. در چنین مواردی، غلظت‌های ذکر شده در بالا تنها در مناطق نزدیک به سطح بدنه‌های آبی مناسب هستند و غلظت‌های اکسیدکننده‌ی مولی با استفاده از پارامتر OXRADG (ISEG) وارد TOXI می‌شوند.

## اجرا

جدول ۱۰-۱۶ ویژگی‌های داده‌های اکسیداسیون TOXI

واحد	دامنه	نشانه‌گذاری	توصیف
L/mole-day		$k_{Oij}$	ثابت نرخ اکسیداسیون برای نمونه $i$ ، فاز $j$
kcal/mole °K	۱۵-۲۵	$E_{aoi}$	انرژی فعال‌سازی برای اکسیداسیون نوع $i$
°C	۴-۳۰	T	دمای آب
moles/L	$۱۰^{-۱۷}$ - $۱۰^{-۸}$	RO <sub>2</sub>	غلظت اکسیدان

ویژگی‌های داده‌های اکسیداسیون TOXI در جدول (۱۰-۱۶) خلاصه شده‌اند. دمای آب و غلظت اکسیدان‌ها پارامترهای ورودی هستند که ممکن است برای هر بخش از مدل مشخص شوند. دما ممکن است متغیر زمانی نیز باشد (ورودی به‌عنوان یک سری زمانی). اگر انرژی فعال‌سازی تأمین نشود، هیچ اصلاح دمایی انجام نخواهد شد. داده‌های ورودی در زیر توضیح داده شده‌اند.

جدول ۱۰-۱۷ ثابت‌های مختلف برای مولکول‌های خنثی

متغیر	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>
TREFO	۲۵۸	۸۵۸	۱۴۵۸
KOX20 <sub>11</sub>	۲۶۱	۸۶۱	۱۴۶۱
KOX20 <sub>21</sub>	۲۶۶	۸۶۶	۱۴۶۶
KOX20 <sub>31</sub>	۲۷۱	۸۷۱	۱۴۷۱
EOX <sub>1</sub>	۲۷۶	۸۷۶	۱۴۷۶

**نرخ اکسیداسیون، L/mol - day** - کاربر می‌تواند ثابت‌های سرعت اکسیداسیون مرتبه‌ی دوم را برای هر فاز (محلول، DOC جاذب و جاذب رسوب) و هرگونه‌ی یونی را با استفاده از KOX20 مشخص کند. اعداد ثابت برای مولکول خنثی در جدول (۱۰-۱۷) خلاصه شده‌است. KOX20<sub>11</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی حل‌شده اشاره دارد. KOX20<sub>21</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی با جاذب DOC اشاره دارد؛ KOX20<sub>31</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی با لایه‌ی رسوبی اشاره دارد.

**انرژی فعال‌سازی، kcal/moleK-** کاربر می‌تواند انرژی‌های فعال‌سازی را برای هر ماده‌ی شیمیایی با استفاده از ثابت EOX مشخص کند. اعداد ثابت در جدول (۱۰-۱۷) خلاصه شده‌اند. اگر EOX حذف شود و یا روی صفر تنظیم شود، نسبت اکسیداسیون تحت‌تأثیر دما قرار نخواهد گرفت.

**دمای مرجع، °C-** کاربر ممکن است دمای مرجع را که در آن نرخ اکسیداسیون با استفاده از TREFO ثابت اندازه‌گیری شده‌است، مشخص کند. اعداد ثابت در جدول (۱۰-۱۷) خلاصه شده‌اند. اگر دمای مرجع ارائه نشود، آن‌گاه مقدار پیش‌فرض برای دما، ۲۰ درجه فرض می‌شود.

غلظت اکسیدکننده، mole/L- کاربر باید غلظت اکسیدکننده‌ی متغیر بخش را با استفاده از پارامتر ۱۳، OXRAD مشخص کند. (Group G, Record 4, PARAM(I,13)).

### ۱۰-۱۰- تجزیه‌ی بیولوژیکی

تجزیه‌ی باکتریایی که گاهی به آن تبدیل میکروبی، تجزیه‌زیستی و یا بیولیز گفته می‌شود، تجزیه‌ی ترکیبی توسط سیستم‌های آنزیمی در باکتری‌ها می‌باشد. نمونه‌هایی از آن را در فصل ۸ مشاهده می‌کنید. اگرچه این تغییرات می‌توانند سموم را سم‌زدایی و معدنی کنند و باعث خنثی‌شدن سموم شوند از طرفی نیز، باعث فعال شدن سموم می‌شوند.

تجزیه‌ی بیولوژیکی شامل فرآیندهای گسترده و پیچیده‌ی حمله آنزیمی توسط موجودات زنده به مواد شیمیایی آلی می‌باشد. باکتری‌ها و به میزان کم‌تر قارچ‌ها، واسطه‌ی تجزیه‌ی بیولوژیکی در سیستم‌های آب‌سطحی هستند. دی‌هالوژناسیون، دی‌آکیلاسیون، هیدرولیز، اکسیداسیون، احیا، تقسیم حلقه و واکنش‌های تراکمی همه به‌طور متابولیک و یا از طریق ارگانوسم‌هایی که قادر به استفاده از مواد شیمیایی که بستری برای رشد نیستند، رخ می‌دهند.

دو نوع کلی از تجزیه‌ی بیولوژیکی شناخته شده‌است: متابولیسم رشد و هم‌متابولیسم. متابولیسم رشد زمانی رخ می‌دهد که ترکیب آلی عمل منبع غذایی برای باکتری‌ها را انجام می‌دهد. زمان‌های سازگاری از ۲ تا ۲۰ روز، توسط میلز و همکاران، ۱۹۸۵ پیشنهاد شد. سازگاری ممکن است برای برخی مواد شیمیایی و یا در محیط‌های بدون پوشش شدید موردنیاز نباشد. زمان‌های سازگاری در محیط‌های با تراکم‌اولیه پایین ممکن است طولانی باشد. (Mills et al., 1985) برای مواردی که زیست‌تخریب‌پذیری محدود به اندازه‌ی جمعیت تجزیه‌کننده است، انطباق اولیه برای جمعیت‌های اولیه‌ی بالا از میکروپ، سریع‌تر و برای جمعیت‌های اولیه‌ی پایین، کندتر است. پس از انطباق، تجزیه‌ی بیولوژیکی با سرعت درجه‌ی اول سریع پیش می‌رود. هم‌متابولیسم زمانی رخ می‌دهد که ترکیب آلی منبع غذایی باکتری نباشد. سازگاری به ندرت، ضروری است و سرعت تبدیل در مقایسه با متابولیسم رشد کند است.

فرآیند جنبشی رشد جمعیت باکتری‌ها که یک ماده‌ی شیمیایی سمی را تجزیه می‌کند، تقریباً ناشناخته است. وجود زیرلایه‌های رقیب و دیگر باکتری‌ها، سمیت مواد شیمیایی نسبت به باکتری‌های تجزیه‌کننده و امکان سازگاری با مواد شیمیایی یا متابولیسم، تعیین مقدار تغییرات در جمعیت را دشوار می‌سازد. در نتیجه، مدل‌های شیمیایی سمی به جای مدل‌سازی مستقیم باکتری‌ها، فعالیت بیولوژیکی ثابتی را در نظر می‌گیرند. اغلب ثابت‌های سرعت تجزیه‌ی زیستی مرتبه‌ی اول اندازه‌گیری شده از دیگر سیستم‌های آبی، به‌طور مستقیم مورد استفاده قرار می‌گیرند.

### ۱۰-۱-۱- بررسی واکنش‌های تجزیه‌ی بیولوژیکی TOXI

در TOXI، ممکن است ثابت‌های نسبی تجزیه‌ی بیولوژیکی مرتبه‌ی اول یا نیمه‌عمر برای ستون آب و لایه‌های اعماق مشخص شود. اگر این ثابت‌های سرعت، تحت شرایط مشابه اندازه‌گیری شده باشند، این روش (مرتبه اول) به اندازه‌ی روش‌های پیچیده‌تر دقیق خواهد بود. اگر نسبت‌های مرتبه‌ی اول در دسترس نباشند، این نسبت‌ها باید برای شرایط باکتریایی مختلف برون‌یابی شوند، آن‌گاه روش مرتبه‌ی دوم می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. فرض می‌شود که جمعیت باکتری‌ها تحت تأثیر حضور ترکیب در غلظت‌های پایین قرار نمی‌گیرد. فرآیند جنبشی مرتبه‌ی دوم برای مواد محلول، DOC-جاذب و رسوب-جاذب شیمیایی در نظر گرفته می‌شوند:

$$K_{BW} = P_{bac}(t) \sum_i \sum_j k_{Bij} f_{ij} \quad j = 1, 2 \quad (70-10)$$

$$K_{Bs} = P_{bac}(t) \sum_i \sum_j k_{Bij} f_{ij} \quad j = 3 \quad (71-10)$$

$K_{BW}$  = ثابت نرخ تجزیه‌ی بیولوژیکی خالص در آب،  $\text{day}^{-1}$

$K_{Bs}$  = ثابت نرخ تجزیه‌ی بیولوژیکی خالص در رسوب،  $\text{day}^{-1}$

$k_{Bij}$  = ثابت نرخ تجزیه‌ی بیولوژیکی مرتبه‌ی دوم برای نمونه‌ی  $i$ ، فاز  $j$ ،  $\text{ml/cell-day}$

$P_{bac}(t)$  = تراکم جمعیت باکتری فعال در بخش،  $\text{cell/ml}$

$f_{ij}$  = کسری از مواد شیمیایی به‌عنوان نمونه‌ی  $i$  در فاز  $j$

$$k_{Bij}(T) = k_{Bij} Q_{Tij}^{(20-T)/10} \quad (72-10)$$

$Q_{Tij}$  = فاکتور تصحیح دما "Q-10" برای تجزیه‌ی بیولوژیکی نمونه‌ی  $i$ ، فاز  $j$ ،

$T$  = دمای محیط در یک بخش،  $^{\circ}\text{C}$



ضرایب تصحیح دما نشان‌دهنده‌ی افزایش در ثابت‌های نسبی تجزیه‌ی بیولوژیکی ناشی از افزایش دمای  $10^{\circ}\text{C}$  هستند. معمولاً مقادیر در محدوده‌ی  $1/5$  تا  $2$  هستند. عوامل محیطی به‌غیر از دما و اندازه‌ی جمعیت می‌توانند نسبت‌های باکتریایی را محدود کنند. فاکتورهای کاهش پتانسیل باید به‌صورت خارجی توسط کاربر در نظر گرفته شود. محدودیت مواد مغذی می‌تواند در محیط‌های الیگوتروفیک مهم باشد. غلظت‌های کم اکسیژن محلول نیز می‌تواند موجب کاهش نرخ تجزیه‌ی زیستی شود و این اثر در TOXI شبیه‌سازی نشده‌است. در غلظت‌های پایین‌تر از حدود  $1$  میلی‌گرم بر لیتر اکسیژن محلول (DO)، نسبت‌ها شروع به کاهش می‌کنند. هنگامی که شرایط غیررسمی غالب می‌شود، بیش‌تر مواد آلی به آرامی تجزیه‌ی بیولوژیکی می‌شوند. از آن‌جا که پیش‌بینی واکنش‌های تجزیه‌ی بیولوژیکی نسبت به واکنش‌های فیزیکی و شیمیایی معمولاً دشوارتر است، واسنجی مکانی مهم‌تر می‌شود.

تجزیه‌ی بیولوژیکی را می‌توان با استفاده از ثابت‌نسبی مرتبه‌ی اول متغیر نسبت به جمعیت باکتریایی اجرا نمود. اگر ثابت‌های سرعت مرتبه‌ی اول ورودی  $P_{bac}$  باشند، آن‌گاه ارزش ثابت‌های سرعت مرتبه‌ی دوم  $k_{Bij}$  باید در معادله‌های  $(71-10)$  و  $(72-10)$ ،  $1/0$  در نظر گرفته شوند.

## اجرا

ویژگی‌های داده‌های تجزیه‌ی بیولوژیکی TOXI در جدول  $(10-18)$  خلاصه شده‌است. ثابت‌های نرخ مرتبه‌ی دوم برای آب و بخش‌های بستر را می‌توان به‌صورت ثابت تعیین نمود. ضریب تصحیح دما می‌تواند در صفر باقی بماند که و پس از آن ضرایب تصحیح دمای غیرصفر به‌صورت ثابت تعیین می‌شوند. پارامترهای ورودی موردنیاز برای اجرای تجزیه‌ی زیستی، در زیر آورده شده‌است.

جدول ۱۰-۱۸ ویژگی‌های داده‌های تجزیه بیولوژیکی TOXI

واحد	دامنه مشاهده شده	نشانه‌گذاری	توصیف
day <sup>-1</sup>	۰-۰/۵	K <sub>bw</sub>	نرخ تجزیه بیولوژیکی مشاهده‌شده مرتبه-ی اول در ستون آب
day <sup>-1</sup>	۰-۰/۵	K <sub>Bs</sub>	نرخ تجزیه بیولوژیکی مشاهده‌شده مرتبه‌ی اول در لایه کفزی
cells/mL	۱۰ <sup>۷</sup> -۱۰ <sup>۲</sup>	P <sub>abc</sub>	فعالیت باکتریایی یا غلظت عامل باکتری
mL/cell-day	۰-۱۰ <sup>۷</sup>	k <sub>abIJ</sub>	ضرایب نرخ مرتبه‌ی دوم مشاهده‌شده برای نمونه‌ی i
-	۱/۲-۲/۵	Q <sub>Tij</sub>	ضرایب دمای تجزیه بیولوژیکی برای نمونه‌ی i، فاز z
°C	۴-۳۰	T	دمای آب

جدول ۱۰-۱۹ ثابت‌های مختلف سرعت تجزیه زیستی

متغیر	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>
KBW	۱۴۱	۷۴۱	۱۳۴۱
KBS	۱۴۲	۷۴۲	۱۳۴۲
KBIO20 <sub>11</sub>	۱۴۶	۷۴۶	۱۳۴۶
KBIO20 <sub>21</sub>	۱۵۱	۷۵۱	۱۳۵۱
KBIO20 <sub>31</sub>	۱۵۶	۷۵۶	۱۳۵۶
Q10DIS <sub>1</sub>	۱۶۱	۷۶۱	۱۳۶۱
Q10DOC <sub>1</sub>	۱۶۶	۷۶۶	۱۳۶۶
Q1PAR <sub>1</sub>	۱۷۱	۷۷۱	۱۳۷۱

**نرخ مرتبه‌ی اول، day<sup>-1</sup>** - کاربر ممکن است ثابت‌های سرعت تجزیه زیستی مرتبه‌ی اول را برای ستون آب و بخش‌های کفزی با استفاده از ثابت‌های KBW و KBS مشخص کند. اگر مقادیر غیر صفر

برای این ثابت‌ها مشخص شوند، به‌طور مستقیم و با کنار گذاشتن محاسبات مرتبه‌ی دوم مورد استفاده قرار خواهند گرفت. اعداد ثابت در جدول (۱۰-۱۹) داده شده‌اند.

**ضریب هم‌بستگی مرتبه‌ی دوم، mL/cell-day** - کاربر ممکن است ثابت‌های سرعت تجزیه‌ی زیستی مرتبه‌ی دوم را برای هر فاز (محلول، DOC-جاذب، و رسوب-جاذب) و هرگونه یونی را با استفاده از ثابت KBIO مشخص کند. اعداد ثابت برای مولکول خنثی در جدول (۱۰-۱۹) خلاصه شده‌است. KBIO<sub>20</sub><sub>11</sub>، KBIO<sub>20</sub><sub>21</sub> و KBIO<sub>20</sub><sub>31</sub> به ترتیب به ماده‌ی شیمیایی محلول، ماده‌ی شیمیایی خنثی تحت پوشش DOC-جاذب و ماده‌ی شیمیایی خنثی با رسوب-جاذب اشاره دارد.

**ضریب‌های دما** - کاربر ممکن است با استفاده از ثابت‌های Q10DIS، Q102DOC و Q10PAR ضرایب تصحیح دما را برای فاز محلول، DOC-جاذب و رسوب-جاذب هر شیمیایی تعیین کند. این ثابت‌ها فاکتور ضرب برای نرخ تجزیه‌ی بیولوژیکی مربوط به افزایش دمای ۱۰ °C را نشان می‌دهند. اعداد ثابت در جدول (۱۰-۱۹) خلاصه شده‌اند. اگر مقادیر Q10 حذف شوند یا روی صفر تنظیم شوند، دما بر نرخ تجزیه‌ی بیولوژیکی تأثیر نخواهد داشت.

**سطوح جمعیت باکتری‌ها، cell/mL** - کاربر می‌تواند غلظت‌های باکتری بخش و متغیر زمانی را با استفاده از پارامترهای ۱۴، BAC، و توابع زمان ۱۶ و ۱۷، BACNW و BACNS مشخص کند. محدوده‌ی اندازه‌ی جمعیت در جدول (۱۰-۱۹) ارائه شده‌است. اگر غلظت باکتری‌ها در زمان ثابت باقی بماند، کاربر باید با استفاده از پارامتر BAC، غلظت میانگین بخش را وارد کند. BACNS و BACNW نیز باید حذف شوند.

جدول ۱۰-۲۰ غلظت‌های باکتری هر بخش

نوع بدنه‌ی آب	اعداد باکتریایی (cells/ml)	مرجع
دریاچه‌ی الیگوتروفیک	۵۰-۳۰۰	a
دریاچه‌ی مزوتروفیک	۴۵۰-۱۴۰۰	a
دریاچه‌ی اورتروفیک	۲۰۰۰-۱۲۰۰۰	a
مخزن یوتروفیک	۱۰۰۰۰-۵۸/۰۰۰	a
مخزن یوتروفیک	۴۰۰-۲/۳۰۰	a
رسوبات سطحی دریاچه	$8 \times 10^9$ - $5 \times 10^{10}$ cells/100 g dry wt	-

۴۰ آب‌های سطحی	$5.0 \times 10^6 - 8$	b
رسوبات جریان	$1.0^7 - 1.0^8$ cells/100 g	c
رودخانه رور (زمستان)	$3 \times 10^4$	d

**مرجع:**

Wetzel (1975). روش شمارش نامشخص.  
 Paris et al (1981). شمارش باکتریایی با استفاده از شمارش صفحه.  
 Herbes & Schwall (1978). شمارش باکتریایی با استفاده از شمارش صفحه.  
 Larson et al. (1981). شمارش باکتریایی با استفاده از شمارش صفحه.  
 کاربرد با استفاده از توابع زمانی BACNW و BACNS، می‌تواند به ترتیب غلظت باکتری‌های موجود در یک ستون آب و اعماق آب را که متغیرهای زمانی اند، به مدل وارد کند. سپس پارامتر BAC نسبت غلظت هر بخش به مقادیر تابع زمان را نشان می‌دهد. محصول BAC و تابع BACNW یا BACNS غلظت‌های باکتری هر بخش و زمان مورد استفاده توسط TOXI را ارائه می‌دهد.  
 (Group G, Record 4, PARAM(I,14); Group I, Record 2, VALT(16,K), VALT(17,K))

**۱۰-۱۱- واکنش اضافی**

یک واکنش مرتبه‌ی دوم اضافی در TOXI گنجانده شده‌است. این واکنش اضافی به کاربر اجازه می‌دهد تا اثر فرآیندهای در نظر گرفته نشده توسط TOXI را شبیه‌سازی کند. واکنش به ثابت سرعت و پارامتر محیطی بستگی دارد که ممکن است برای مثال یک عامل احیاکننده یا اکسیدکننده در نظر گرفته شود. سرعت واکنش نیز ممکن است با دما تغییر کند.

**۱۰-۱۱-۱ بررسی واکنش‌های اضافی TOXI**

TOXI به کاربر اجازه می‌دهد تا واکنش مرتبه‌ی دوم اضافی را برای گونه‌ها و فازهای مختلف از هر ماده‌ی شیمیایی مشخص کند:

$$K_E = [E] \sum_i \sum_j k_{eij} f_{ij} \quad (10-73)$$

$K_E$  = نرخ ثابت واکنش اضافی خالص،  $\text{day}^{-1}$

[E] = شدت خاصیت محیط‌زیست این واکنش،

$k_{eij}$  = ثابت نرخ مرتبه‌ی دوم برای مواد شیمیایی به‌عنوان نمونه در فاز j، در  $\text{day}^{-1}$  {E<sup>-1</sup>}

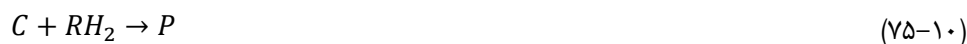
$f_{ij}$  = کسری از مواد شیمیایی نمونه‌ی i در فاز j؛

ضرایب واکنش ممکن است به‌صورت ثابت‌ها مشخص شوند، این ضرایب ثابت شامل ثابت‌های انرژی فعال‌سازی می‌باشند که به‌صورت صفر باقی می‌مانند. سپس انرژی فعال‌سازی غیرصفر مشخص می‌شود، به‌طوری که ثابت‌های محاسبات زیر را برای هر ثابت سرعت k به‌دست می‌آورند:

$$k(T_K) = k(T_R) \exp[1000E_{ao}(T_K - T_R)/(RT_K T_R)] \quad (74-10)$$

$E_{ae}$  = انرژی فعال‌سازی آرنیوس برای واکنش اضافی، kcal/mole-°K

انرژی‌های فعال‌سازی ممکن است برای هرگونه یونی شبیه‌سازی شده، مشخص شود. اگر هیچ انرژی فعال‌سازی داده نشود، ثابت‌های سرعت با دمای آب محیط تنظیم نخواهد شد. روند یک فرآیند جنبشی که ممکن است با این واکنش اضافی مدل‌سازی شود، کاهش می‌باشد. اگر مدل‌سازی کاهش می‌باشد، [E] می‌تواند غلظت عوامل احیاکننده‌ی محیطی RH<sub>2</sub> تفسیر شود، به‌طوری که:



[E] = غلظت RH<sub>2</sub>، moles/L

$k_e$  = ثابت نرخ مرتبه‌ی دوم، L/mole-day

P = محصول کاهش‌یافته.

مقدار عامل احیاکننده و ثابت سرعت مرتبه‌ی دوم باید توسط مطالعات فرآیند جنبشی آزمایشگاهی شناسایی و تعیین شود. اگر هر دو عامل اکسیدکننده و احیاکننده‌ی محیط‌زیست بیش از حد باشند، آن‌گاه دو ماده‌ی شیمیایی می‌توانند به‌صورت یک جفت ردوکس شبیه‌سازی شوند:



$C_1$  = ماده‌ی شیمیایی کاهش‌یافته،

$C_2$  = ماده‌ی شیمیایی اکسیده‌شده،

RO<sub>2</sub> = عامل اکسیدکننده،

RH<sub>2</sub> = عامل کاهنده.

در مطالعات فرآیند جنبشی آزمایشگاهی با کنترل غلظت‌های [RO<sub>2</sub>] و [RH<sub>2</sub>] می‌تواند ثابت‌های سرعت برای اکسیداسیون و احیا را تعیین کنند که به‌ترتیب با عبارات  $k_{ox}$  و  $k_E$  مشخص می‌شوند. ضرایب

$Y_{E12}$  و  $Y_{O12}$  نیز باید به عنوان ضرایب ثابت تعیین شوند. غلظت‌های متغیر فضایی  $[RO_2]$  و  $[RH_2]$  باید به عنوان پارامترها مشخص شوند.

## اجرا

الزامات داده‌های ورودی برای واکنش‌های مرتبه‌ی دوم شامل ثابت‌های نسبی واکنش مرتبه‌ی دوم هستند که ممکن است برای هر شکل خاص و جاذب مشخص شوند (حل شده، جاذب DOC و جاذب ذرات). اگر نسبت‌ها تصحیح شوند، آن‌گاه کاربر می‌تواند دمای مرجع را تأمین کند که در آن نسبت واکنش اضافی اندازه‌گیری شده و انرژی فعال‌سازی برای واکنش می‌باشد. سپس نسبت‌ها با استفاده از تابع آرنیوس بر پایه‌ی دما تنظیم می‌شوند. اگر انرژی فعال‌سازی تأمین نشود، هیچ اصلاح دمایی انجام نخواهد شد. ویژگی "اضافی" محیط آبی که واکنش اضافی را تحت تأثیر قرار می‌دهد، پارامتری می‌باشد که ممکن است بین بخش‌ها متفاوت باشد، برای مدل مشخص شده‌است. واحدهای ویژگی اضافی باید با آن‌هایی که برای ثابت‌نسبی مرتبه‌ی دوم استفاده می‌شوند سازگار باشند. محصول ویژگی اضافی و ثابت‌نسبی مرتبه‌ی دوم باید دارای واحدهای  $day^{-1}$  باشد. دما ممکن است متغیر زمانی نیز باشد (ورودی به عنوان یک سری زمانی). داده‌های ورودی در جدول زیر توضیح داده شده‌اند.

جدول ۱۰-۲۱ داده‌های ورودی

متغیر	$C_1$	$C_2$	$C_3$
TREFE	۵۷۳	۱۱۷۳	۱۷۷۳
KE20 <sub>11</sub>	۵۷۶	۱۱۷۶	۱۷۷۶
KE20 <sub>21</sub>	۵۸۱	۱۱۸۱	۱۷۸۱
KE20 <sub>31</sub>	۵۸۶	۱۱۸۶	۱۷۸۶
EEX <sub>1</sub>	۵۹۱	۱۱۹۱	۱۷۹۱

**نرخ واکنش اضافی،  $L/mol-day$**  - کاربر ممکن است ثابت‌های سرعت اضافی مرتبه‌ی دوم را

برای هر فاز (حل شده، DOC-جاذب و رسوب-جاذب) و هرگونه یونی را با استفاده از ثابت KE20 مشخص کند. اعداد ثابت برای مولکول خنثی در جدول (۱۰-۲۰) خلاصه شده‌است، KE20<sub>11</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی محلول، KE20<sub>21</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی و DOC-جاذب و KE20<sub>31</sub> به ماده‌ی شیمیایی خنثی جاذب رسوب اشاره دارد.

**انرژی فعال‌سازی، kcal/moleK** - کاربر می‌تواند انرژی‌های فعال‌سازی را برای هر ماده‌ی شیمیایی با استفاده از ثابت EEX مشخص کند. اعداد ثابت در جدول (۱۰-۲۱) خلاصه شده‌اند. اگر EEX حذف شود یا روی صفر تنظیم شود، نرخ اکسیداسیون تحت تأثیر دما قرار نخواهد گرفت.

**دمای مرجع، °C** - کاربر ممکن است دمای مرجع را که در آن نرخ اکسیداسیون با استفاده از رگرسیون ثابت اندازه‌گیری شده است، مشخص کند. اعداد ثابت در جدول (۱۰-۲۱) خلاصه شده‌اند. اگر دمای مرجع ارائه نشود، آن‌گاه مقدار پیش فرض ۲۰ درجه فرض خواهد شد.

**غلظت محیطی اضافی، mole/L** - کاربر باید متغیر بخش را با استفاده از پارامتر ۱۵، EXENV مشخص کند.

(Group G, Record 4, PARAM(I,15)).





## فصل يازدهم

### منابع

1. Alexander, M. 1980. Biodegradation of Toxic Chemicals in Water and Soil. In: Dynamics, Exposure, and Hazard Assessment of Toxic Chemicals, R. Haque, editor. Ann Arbor Science, Ann Arbor, MI.
2. Ambrose, R.B. 1987. Modeling Volatile Organics in the Delaware Estuary. American Society of Civil Engineers. Journal of Environmental Engineering, V. 113, No. 4, pp 703-721.
3. Ambrose, R.B. et al. 1988. WASP4, A Hydrodynamic and Water Quality Model— Model Theory, User's Manual, and Programmer's Guide. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA. EPA/600/3-87-039.
4. APHA (American Public Health Association). 1985. Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater, 15th Edition. APHA. Washington, DC.
5. Bannister, T.T. 1974a. Production Equations in Terms of Chlorophyll Concentration, Quantum Yield, and Upper Limit to Production. Limnol. Oceanogr. 19:1-12.
6. Bannister, T.T. 1974b. A General Theory of Steady State Phytoplankton Growth in a Nutrient Saturated Mixed Layer. Limnol. Oceanogr. 19:13-30.
7. Barber, M.C., L.A. Suarez, and R.R. Lassiter. 1991. Modelling Bioaccumulation of Organic Pollutants in Fish with an Application to PCBs in Lake Ontario Salmonids. Canadian J. Fisheries and Aquatic Sciences. Vol. 48, pp. 318-337.
8. Bella, D.A. and W.J. Grenney. 1970. Finite-Difference Convection Errors. Journal of the Sanitary Engineering Division, ASCE, Vol. 96, No. SA6, pp. 1361-1375.
9. Berner, R.A. 1974. Kinetic Models for the Early Diagenesis of Nitrogen Sulfur, Phosphorus, and Silicon in Anoxic Marine Sediments. In: The Sea, Vol. 5, ed. E.D. Goldberg. J. Wiley and Sons. New York.
10. Bowie, G.L., W.B. Mills, D.B. Porcella, C.L. Campbell, J.R. Pagenkopf, G.L. Rupp, K.M. Johnson, P.W.H. Chan, S.A. Gherini and C.E. Chamberlin. 1985. Rates, Constants, and Kinetics Formulations in Surface Water Quality Modeling. Second Edition. U.S. Environmental Protection Agency Athens, GA. EPA-600/3-85-040.

11. Brown, L.C. and T.O. Barnwell. 1987. The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and User Manual. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA. EPA/600/3-87-007.
12. Burns, L.A., D.M. Cline, and R.R. Lassiter. 1982. Exposure Analysis Modeling System (EXAMS): User Manual and System Documentation, U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA. EPA-600/3-82-023.
13. Burns, L.A. and D.M. Cline. 1985. Exposure Analysis Modeling System, Reference Manual for EXAMS II. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA. EPA-600/3-85-038.
14. Connolly, J.P. and R. Winfield. 1984. A User's Guide for WASTOX, a Framework for Modeling the Fate of Toxic Chemicals in Aquatic Environments. Part 1: Exposure Concentration. U.S. Environmental Protection Agency, Gulf Breeze, FL. EPA-600/3-84-077.
15. Connolly, J.P. and R.V. Thomann. 1985. WASTOX, A Framework for Modeling the Fate of Toxic Chemicals in Aquatic Environments. Part 2: Food Chain. U.S. Environmental Protection Agency, Gulf Breeze, FL and Duluth, MN. Covar, A.P. 1976. Selecting the Proper Reaeration Coefficient for Use in Water Quality Models. Presented at the U.S. EPA Conference on Env. Simulation and Modelling.
16. Covar, A.P. 1976. Selecting the Proper Reaeration Coefficient for Use in Water Quality Models. Presented at the U.S. EPA Conference on Environmental Simulation Modeling, April 19-22, 1976. Cincinnati, Ohio.
17. Di Toro, D.M., D.J. O'Connor, and R.V. Thomann. 1971. A Dynamic Model of the Phytoplankton Population in the Sacramento San Joaquin Delta. Adv. Chem. Ser. 106, Am. Chem. Soc., Washington, DC., pp. 131-180.
18. Di Toro, D.M. and J.P. Connolly. 1980. Mathematical Models of Water Quality in Large Lakes, Part 2: Lake Erie. EPA-600/3-80-065. pp. 90-101.
19. Di Toro, D.M. and W.F. Matystik. 1980. Mathematical Models of Water Quality in Large Lakes, Part 1: Lake Huron and Saginaw Bay. EPA-600/3-80-056. pp.28-30.
20. Di Toro, D.M., J.J. Fitzpatrick, and R.V. Thomann. 1981, rev. 1983. Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) and Model Verification Program

- (MVP) - Documentation. Hydrosience, Inc., Westwood, NY, for U.S. EPA, Duluth, MN, Contract No. 68-01-3872.
21. Di Toro, D.M. 1985. A Particle Interaction Model of Reversible Organic Chemical Sorption, *Chemosphere* 14(10):1503-1538.
22. Eppley, R.W. and P.R. Sloane. 1966. Growth Rates of Marine Phytoplankton: Correlation with Light Absorption by Cell Chlorophyll a. *Physiol. Plant.* 19:47-59.
23. Foree, E.C. and P.L. McCarty. 1970. Anaerobic Decomposition of Algae. *Environ. Sci. & Technol.* 4(10), pp. 842-849.
24. Graf, W.H. 1971. *Hydraulics of Sediment Transport*. McGraw-Hill, New York.
25. Green, A.E.S., K.R. Cross, and L.A. Smith. 1980. Improved Analytical Characterization of Ultraviolet Skylight, *Photochem. and Photobio.* 31:59-65.
26. Hendry, G.S. 1977. Relationships Between Bacterial Levels and Other Characteristics of Recreational Lakes in the District of Muskoka. Interim Microbiology Report, Laboratory Services Branch, Ontario Ministry of the Environment.
27. Henrici, Arthur T., 1938. Seasonal Fluctuation of Lake Bacteria in Relation to Plankton Production. *J. Bacteriol.*, 35:129-139.
28. Herbes, S.E. and L.R. Schwall. 1978. Microbial Transformation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Pristine and Petroleum-Contaminated Sediments. *Appl. And Environ. Microbiology*, Volume 35, No. 2. pp. 306-316.
29. Hutchinson, G.E. 1967. *A Treatise on Limnology. Vol. II. Introduction to Lake Biology and Limnoplankton*. Wiley. New York. pp. 306-354.
30. Jewell, W.J. And P.L. McCarty. 1971. Aerobic Decomposition of Algae. *Environ. Sci. Technol.* 1971. 5(10). p. 1023.
31. JRB, Inc. 1984. Development of Heavy Metal Waste Load Allocations for the Deep River, North Carolina. JRB Associates, McLean, VA, for U.S. EPA Office of Water Enforcement and Permits, Washington, DC.
32. Karickhoff, S.W., D.S. Brown, and T.A. Scott. 1979. Sorption of Hydrophobic Pollutants on Natural Sediments. *Water Res.* 13:241-248.

33. Karickhoff, S.W. 1984. Organic Pollutant Sorption in Aquatic Systems. J. Hydraul. Eng. Div. ASCE. Vol. 110, p. 707.
34. Karickhoff, S.W. and K.R. Morris. 1985. Sorption Dynamics of Hydrophobic Pollutants in Sediment Suspensions. Environ. Toxicology and Chem. 4:469-479.
35. Kok, B. 1960. Efficiency of Photosynthesis. In: W. Ruhland (Edison), *Hanbuch der Pflanzenphysiologie*. Vol 5, Part 1. Springer, Berlin. pp.563-633.
36. Larson, R.J. G.G. Clinckemaillie, and L. VanBelle. 1981. Effect of Temperature and Dissolved Oxygen on Biodegradation of Nitritotriacetate. Water Research, Volume 15. pp. 615-620.
37. Leopold, L.B. and T. Maddox. 1953. The Hydraulic Geometry of Stream Channels and Some Physiographic Implications, Professional Paper 252, U.S. Geological Survey, Washington, DC.
38. Leopold, L.B., M.B. Wolman and J.P. Miller. 1964. *Fluvial Processes in Geomorphology*, W. H. Freeman and Co., San Francisco, CA.
39. Lowe, W.E. 1976. Canada Centre for Inland Waters 867 Lakeshore Road, Burlington, Canada L7R 4A6. Personal communication.
40. Mackay, D. and P.J. Leinonen. 1975. Rate of Evaporation of Low-Solubility Contaminants from Water Bodies to Atmospheres. Environ. Sci. Technology. 7:611-614.
41. Mackay, D. and W.Y. Shiu. 1984. Physical-Chemical Phenomena and Molecular Properties, in *Gas Transfer at Water Surfaces*. Brutsaert, W. and G.H. Jirka, Eds. D. Reidel, Boston.
42. Menon, A.S., W.A. Gloschenko, and N.M. Burns. 1972. Bacteria-Phytoplankton Relationships in Lake Erie. Proc. 15th Conf. Great Lakes Res. 1972:94:101. Inter. Assoc. Great Lakes Res.
43. Mill, T., W.R. Mabey, P.C. Bomberger, T.W. Chou, D.G. Herdry, and J.H. Smith. 1982. *Laboratory Protocols for Evaluating the Fate of Organic Chemicals in Air and Water*. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA. EPA-600/3-82-0220.

44. Mills, W.B., D.B. Porcella, M.J. Unga, S.A. Gherini, K.V. Summers, Lingfung Mok, G.L. Rupp, G.L. Bowie, and D.A. Haith. 1985. Water Quality Assessment: A Screening Procedure for Toxic and Conventional Pollutants, Parts 1 and 2. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA. EPA-600/6-85-002a and b.
45. Nriagu, J.O. 1972. Stability of Vivianite and Ion-Pair Formation in the System  $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2\text{-H}_3\text{PO}_4\text{-H}_2\text{O}$ . *Geochim. Cosmochim. Acta.* 36. p. 459.
46. O'Connor, D.J. and R.V. Thomann. 1972. Water Quality Models: Chemical, Physical and Biological Constituents. In: *Estuarine Modeling: An Assessment*. EPA Water Pollution Control Research Series 16070 DZV, Section 702/71. pp.102-169.
47. O'Connor, D.J., J.A. Mueller, and K.J. Farley. 1983. Distribution of Kepone in the James River Estuary. *Journal of the Environmental Engineering Division, ASCE.*109(E2):396-413.
48. O'Connor, D.J. 1983. Wind Effects on Gas-Liquid Transfer Coefficients. *Journal of Environmental Engineering*, Volume 109, Number 9, pp. 731-752.
49. Paris, D.F., W.C. Steen, G.L. Baughman and J.T. Barnett, Jr. 1981. Second-Order Model to Predict Microbial Degradation of Organic Compounds in Natural Waters. *Applied and Environmental Microbiology.* 4(3):603-609.
50. Rao, S.S. 1976. Observations on Bacteriological Conditions in the Upper Great Lakes. 1968-1974. Scientific Series. No. 64. Inland Waters Directorate CCIW Branch, Burlington, Ontario.
51. Rao, P.S.C. and J.M. Davidson. 1980. Estimation of Pesticide Retention and Transformation Parameters Required in Nonpoint Source Pollution Models. *Environmental Impact of Nonpoint Source Pollution*. Ann Arbor Science, Ann Arbor, MI. pp. 23-67.
52. Riley, G.A., H. Stommel and D.F. Bumpus. 1949. Quantitative Ecology of the Plankton of the Western North Atlantic. *Bull. Bingham Oceanog. Coll.* 12(3):1-169.
53. Robinson, N., ed. 1966. *Solar Radiation*. Elsevier Publishing, Amsterdam, London, and New York. 347 pp.

54. Smith, R.A. 1980. The Theoretical Basis for Estimating Phytoplankton Production and Specific Growth Rate from Chlorophyll, Light and Temperature Data. *Ecological Modeling*. 10. pp. 243-264.
55. Steele, J.H. 1962. Environmental Control of Photosynthesis in the Sea. *Limnol. Oceanogr.* 7:137-150.
56. Streeter, H.W. and E.B. Phelps. 1925. A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River, III, Factors Concerned in the Phenomena of Oxidation and Reaeration. U.S. Public Health Service, Public Health Bulletin No. 146, 75 pp.
57. Reprinted by U.S. DHEW, PHA, 1958. Thomann, R.V. 1975. Mathematical Modeling of Phytoplankton in Lake Ontario, 1. Model Development and Verification. U.S. Environmental Protection Agency, Corvallis, OR. EPA-600/3-75-005.
58. Thomann, R.V., R.P. Winfield, D.M. Di Toro, and D.J. O'Connor. 1976. Mathematical Modeling of Phytoplankton in Lake Ontario, 2. Simulations Using LAKE 1 Model. U.S. Environmental Protection Agency, Grosse Ile, MI, EPA-600/3-76-065.
59. Thomann, R.V., R.P. Winfield, and J.J. Segna. 1979. Verification Analysis of Lake Ontario and Rochester Embayment Three Dimensional Eutrophication Models. U.S. Environmental Protection Agency, Grosse Ile, MI, EPA-600/3-79-094.
60. Thomann, R.V. and J.J. Fitzpatrick. 1982. Calibration and Verification of a Mathematical Model of the Eutrophication of the Potomac Estuary. Prepared for Department of Environmental Services, Government of the District of Columbia, Washington, D.C.
61. Tsivoglou, E.E. and J.R. Wallace. 1972. Characterization of Stream Reaeration Capacity. U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC EPA-R3-72-012.
62. Warburg, O. and E. Negelein. 1923. Uber den einfluss der Wellenlange auf den Energieumsatz bei der Kohlensaureassimilation. *A. Phys. Chem.* 106:191-218.
63. Weast, R.C., and M.J. Astle, ed. 1980. CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press, Boca Raton, FL.

64. Wetzel, R.G. 1975. *Limnology*. W.B. Saunders Co. Philadelphia. 743 pp.
65. Whitman, R.G. 1923. A Preliminary Experimental Confirmation of the Two-Film Theory of Gas Absorption. *Chem. Metallurg. Eng.* 29:146-148.
66. Wischmeier, W.H. and D.D. Smith. 1978. Predicting Rainfall Erosion Losses - A Guide to Conservation Planning. Agriculture Handbook No. 537. U.S. Dept. of Agriculture, Washington, DC.
67. Wolfe, N.L. 1980. Determining the Role of Hydrolysis in the Fate of Organics in Natural Waters. pp. 163-178 in R. Haque (Ed.) *Dynamics, Exposure, and Hazard Assessment of Toxic Substances*. Ann Arbor Science Publishers, Ann Arbor.
68. Zepp, R.G. and D.M. Cline. 1977. Rates of Direct Photolysis in Aquatic Environment. *Environ. Sci. Technol.* 11:359-366.



فصل دوازدهم  
محاسبات pH و قلیائیت

## ۱-۱۲- مقدمه

مقدار pH، قلیائیت و کل الگوریتم‌های کربن غیرآلی که در WASP ترکیب می‌شوند، به‌طور مستقیم از QAL2K و QUAL2Kw به‌دست می‌آیند. هر تلاشی برای اطمینان از این‌که اجرای محاسبه pH در WASP با QAL2K سازگار است، انجام شد. بخش‌های زیر عمدتاً از مستندات QUAL2K گرفته شده‌اند و در صورت مناسب بودن معادلات برای مطابقت با فرضیات و اجرای فرآیند جنبشی در WASP، اصلاح شده‌اند.

## ۱-۲- محاسبه pH

معادلات تعادل، موازنه‌ی جرم و الکتریسیته‌ی آب شیرین تحت سلطه‌ی کربن معدنی را تعریف می‌کنند (استوم و مورگان ۱۹۹۶).

$$K_1 = \frac{[HCO_3^-][H^+]}{[H_2CO_3^*]} \quad (1-12)$$

$$K_2 = \frac{[CO_3^{2-}][H^+]}{[HCO_3^-]} \quad (2-12)$$

$$K_w = [H^+][OH^-] \quad (3-12)$$

$$c_T = [H_2CO_3^*] + [HCO_3^-] + [CO_3^{2-}] \quad (4-12)$$

$$Alk = [HCO_3^-] + 2[CO_3^{2-}] + [OH^-] - [H^+] \quad (5-12)$$

که  $K_1$ ،  $K_2$  و  $K_w$  ثابت‌های اسیدی هستند و Alk قلیائی [eqL<sup>-1</sup>] شامل،  $H_2CO_3^+$  مجموع دی‌اکسیدکربن و کربنیک‌اسید محلول،  $HCO_3^-$  یون بی‌کربنات،  $CO_3^{2-}$  یون کربنات،  $H^+$  یون هیدرونیوم،  $OH^-$  یون هیدروکسید بوده، و  $c_T$  نیز شامل غلظت کل کربن معدنی [mole L<sup>-1</sup>] می‌شود. براکت‌ها [] غلظت‌های مولی را تعیین می‌کنند.

توجه داشته‌باشید که قلیائیت در واحدهای eq/L برای محاسبات داخلی بیان می‌شود. قلیائیت برای ورودی و خروجی، به‌صورت mgCaCO<sub>3</sub>/L نشان داده می‌شود. این دو واحد به هم مربوط هستند.

$$Alk(mgCaCO_3/L) = 50000 \times Alk(eq/L) \quad (6-12)$$

ثابت‌های تعادل برای دما اصلاح می‌شوند.

هارند و هامر (۱۹۳۳):

$$pK_w = \frac{4787/3}{T_a} + 7/1321 \log_{10}(T_a) + 0/010365T_a - 22/80 \quad (7-12)$$

پلامر و بوسنبرج (۱۹۸۲):

$$\begin{aligned} \log K_1 &= -356/3094 - 0/06091964T_a + 2173437/T_a \\ &+ 126/8339 \log T_a \\ &- 1,684,915/T_a^2 \end{aligned} \quad (8-12)$$

پلامر و بوسنبرج (۱۹۸۲):

$$\log K_2 = -107/8871 - 0/032252849T_a + 5151.79/T_a + 38/92561 \log T_a - 563,713.9/T_a^2 \quad (9-12)$$

سیستم غیرخطی پنج معادله‌ی هم‌زمان (۱ تا ۵) را می‌توان به صورت عددی برای پنج ناشناخته حل کرد:  $[H_2CO_3^*]$ ،  $[HCO_3^-]$ ،  $[CO_3^{2-}]$ ،  $[OH^-]$  و  $[H^+]$ . یک راه‌حل کارآمد را می‌توان با ترکیب معادلات (۱)، (۲) و (۴) برای تعریف مقادیر (استوم و مورگان ۱۹۹۶) به دست آورد.

$$\alpha_0 = \frac{[H^+]^2}{[H^+]^2 + K_1[H^+] + K_1K_2} \quad (10-12)$$

$$\alpha_1 = \frac{K_1[H^+]}{[H^+]^2 + K_1[H^+] + K_1K_2} \quad (11-12)$$

$$\alpha_2 = \frac{K_1K_2}{[H^+]^2 + K_1[H^+] + K_1K_2} \quad (12-2)$$

ضرایب  $\alpha_0$ ،  $\alpha_1$  و  $\alpha_2$  به ترتیب کسری از کل کربن آلی در میزان دی‌اکسید کربن، بی‌کربنات و کربنات در معادلات (۱۲-۳)، (۱۲-۱۱) و (۱۲-۱۲) هستند که می‌توانند در معادله‌ی (۱۲-۴) جایگزین شده و منتج به رابطه زیر شوند:

$$ALK = (\alpha_1 + 2\alpha_2) + \frac{K_w}{[H^+]} - [H^+] \quad (13-12)$$

بنابراین، به منظور حل کردن معادله برای تعیین pH، باید قسمت  $[H^+]$  را از رابطه‌ی (۱۲-۱۴) به دست آورد؛

$$f([H^+]) = (\alpha_1 + 2\alpha_2)c_T + \frac{K_w}{[H^+]} - [H^+] - Alk \quad (12-14)$$

قابل ذکر است که pH با استفاده از رابطه‌ی (۱۲-۱۵) محاسبه می‌شود؛

$$pH = -\log_{10}[H^+] \quad (12-15)$$

ریشه‌ی معادله‌ی (۱۲-۱۴) با یک روش عددی تعیین می‌شود. کاربر می‌تواند انتخاب دو مرحله‌ای، نیوتن-رافسون یا روش برنت (چاپا و کاناله ۲۰۰۶، چاپا ۲۰۰۷) را همان‌طور که بر روی برگه QUAL2K مشخص شده‌است، انجام دهد. روش نیوتن-رافسون سریع‌ترین راه‌حل بوده، اما گاهی اوقات می‌تواند واگرا شود. درمقابل، روش دو بخشی آهسته‌تر، اما قابل‌اعتمادتر می‌باشد. به دلیل این‌که روش برنت سرعت را با قابلیت اطمینان متعادل می‌کند، این روش، روش پیش‌فرض می‌باشد.

### ۱۲-۲-۱- کربن معدنی کل ( $c_T$ )

غلظت کربن غیر معدنی کل به خاطر اکسیداسیون سریع کربن و تنفس گیاه افزایش یافته و از طریق فتوسنتز گیاه از بین می‌رود. با توجه به این‌که آب با دی‌اکسیدکربن اشباع شده و یا نشده باشد دو حالت وجود دارد؛ به این صورت که یا دی‌اکسید کربن جذب شده و یا از دست می‌رود.

$$S_{cT} = r_{cco}FastCOxid + r_{cca}PhytoResp + r_{cca}\frac{BotAlgResp}{H} - r_{cca}PhytoPhoto - r_{cca}\frac{BotAlgPhot}{H} CO_2Reaer \quad (12-16)$$

$$CO_2Reaer = k_{ac}(T)([CO_2]_s - a_0c_T) \quad (12-17)$$

که  $K_{ac}(T)$  ضریب هوادهی مجدد دی‌اکسید کربن وابسته به دما  $[/d]$ ، و  $[CO_2]_s$  غلظت اشباع کربن دی‌اکسید  $[mole/L]$  می‌باشد، ضرایب استوکیومتری از روابط زیر محاسبه می‌شوند:

$$r_{cca} = r_{ca} \left( \frac{gC}{mgA} \right) \times \frac{moleC}{12gC} \times \frac{m^3}{1000L} \quad (12-18)$$

$$r_{cco} = \frac{1}{r_{oc}} \left( \frac{gC}{gO_2} \right) \times \frac{moleC}{12gC} \times \frac{m^3}{1000L} \quad (19-12)$$

### ۱۲-۲-۲- کربن دی اکسید اشباع

CO<sub>2</sub> اشباع با قانون هنری محاسبه می شود.

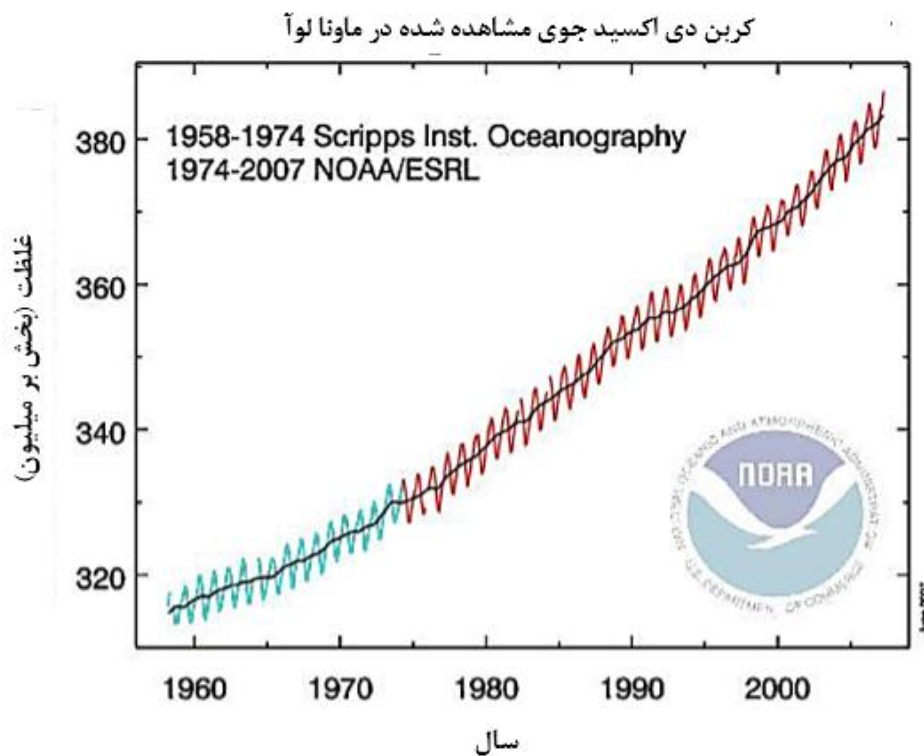
$$[CO_2]_s = K_H P_{CO_2} \quad (20-12)$$

که K<sub>H</sub> ثابت قانون هنری [mole (L atm<sup>-1</sup>)] و P<sub>CO<sub>2</sub></sub> فشار نسبی کربن دی اکسید در اتمسفر [atm] می باشد. توجه داشته باشید که فشار جزئی یک ثابت یا یک تابع زمان محیط در نظر گرفته می شود و در واحد ppm وارد می شود. این برنامه به صورت داخل ppm را به atm تبدیل می کند (atm/ppm)<sup>-۶</sup>. (۱۰)

مقدار K<sub>H</sub> را می توان تابعی از دما محاسبه نمود (ادموند و جیسکس، ۱۹۷۰).

$$pK_H = - \frac{2375/73}{T_a} - 0/0152652T_a + 14/0184 \quad (21-12)$$

فشار جزئی CO<sub>2</sub> افزایش یافته در جو، بیش تر به دلیل احتراق سوخت های فسیلی می باشد. این مقدار در سال ۲۰۰۷ تقریباً معادل atm 10<sup>-3/146</sup> (383/7 ppm) بوده است.



شکل ۱۲-۱ غلظت ثبت شده دی‌اکسید کربن در جو مطابق رصدخانه ماونا لویا، هاوایی

ضریب انتشار  $CO_2$  را می‌توان از نرخ هوادهی مجدد اکسیژن محاسبه کرد.

$$k_{ac}(20) = \left(\frac{32}{44}\right)^{0/25} = 0/923k_a(20) \quad (۲۲-۱۲)$$

### ۱۲-۲-۳- تأثیر ساختارهای کنترل: $CO_2$

همان‌طور که برای اکسیژن محلول نیز وجود داشت، انتقال گاز کربن دی‌اکسید در جریان می‌تواند تحت تأثیر حضور ساختارهای کنترل باشد. WASP فرض می‌کند که کربن دی‌اکسید مشابه با اکسیژن محلول رفتار می‌کند. بنابراین، تعادل جرم کربن معدنی برای عنصر بلافاصله در پایین دست ساختار به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\frac{dc_{T,i}}{dt} = \frac{Q_{i-1}}{V_i} c'_{T,i-1} - \frac{Q_i}{V_i} c_{T,i} - \frac{Q_{ab,i}}{V_i} c_{T,i} + \frac{E'_i}{V_i} (c_{T,i+1} - c_{T,i}) \quad (23-12)$$

$$+ \frac{Wc_{T,i}}{V_i} + Sc_{T,i}$$

که  $c'_{T,i-1}$  غلظت کربن معدنی که وارد عنصر می‌باشد [mgO<sub>2</sub>/L].

$$c'_{T,i-1} = (\alpha_1 + \alpha_2)c_{T,i-1} + CO_{2,s,i-1} - \frac{CO_{2,s,i-1} - \alpha_2 c_{T,i-1}}{r} \quad (24-12)$$

جایی که  $r_d$  از الگوریتم انتقال سد برای اکسیژن محلول محاسبه می‌شود.

### ۱۲-۲-۴- قلیائیت (ALK)

همان‌طور که در مدل حاضر خلاصه شده‌است، تغییرات در قلیائیت ناشی از مکانیزم‌های مختلف حساب می‌شود.

جدول ۱۲-۱ فرآیندهایی که اثر قلیائی دارند

تغییر قلیائی	ایجادشده	به کار رفته	فرآیند
کاهش	NO <sub>3</sub>	NH <sub>4</sub>	Nitrif
افزایش		NO <sub>3</sub>	Denitr
کاهش	SRP		OPHydr
افزایش	NH <sub>4</sub>		ONHydr
کاهش		NH <sub>4</sub>	PhytoPhoto
افزایش		NO <sub>3</sub>	
افزایش		SRP	
افزایش	NH <sub>4</sub>		PhytoResp
کاهش	SRP		
کاهش		NH <sub>4</sub>	PhytoUpN
افزایش		NO <sub>3</sub>	
افزایش		SRP	PhytoUpP
افزایش	NH <sub>4</sub>		PhytoExcrN
کاهش	SRP		PhytoExcrP

BotAlgUpN	NH4		کاهش
	NO3		افزایش
BotAlgUpP	SRP		افزایش
BotAlgExcrN		NH4	افزایش
BotAlgExcrP		SRP	کاهش

لازم به ذکر است که محاسبات قلیائی در مازول تغذیه‌گرایی پیشرفته‌ی WASP شامل تأثیر فلزات نیست.

### ۱۲-۲-۵- نیتروژن‌زایی

فرآیند نیتروژن‌زایی از آمونیوم استفاده و نیترات ایجاد می‌کند. از این‌رو، به دلیل این که یک یون مثبت گرفته‌می‌شود و یک یون منفی ایجاد می‌شود، قلیائی با دو معادل کاهش می‌یابد. تغییر در قلیائیت می‌تواند مربوط به نرخ نیتروژن‌زایی باشد.

$$S_{a,nitr} = \frac{2eq}{moleN} \frac{moleN}{14/007N} \frac{gN}{10^6 \mu gN} \frac{50,000 mgCaCO_3}{1eq} Nitrif \left( \frac{\mu gN}{Ld} \right) \quad (۲۵-۱۲)$$

### ۱۲-۲-۶- نیتروژن‌زدایی

در فرآیند نیتروژن‌زدایی از نیترات استفاده شده و گاز نیتروژن ایجاد می‌شود. از این‌رو، به دلیل این که یون منفی برداشته‌شده و یک ترکیب خنثی ایجاد می‌شود، قلیائیت یک برابر افزایش می‌یابد. تغییر در قلیائیت می‌تواند مربوط به میزان دفع نیتروژن‌زایی باشد.

$$S_{a,denitr} = \frac{1eq}{moleN} \frac{moleN}{14/007N} \frac{gN}{10^6 \mu gN} \frac{50,000 mgCaCO_3}{1eq} Ditrif \left( \frac{\mu gN}{Ld} \right) \quad (۲۶-۱۲)$$

جایی که r,s نسبت‌ها را به مقدار متناظر قلیائی تبدیل می‌کند. ضرایب استوکیومتری از الگوریتم‌های موادغذی در WASP مشتق می‌شوند.



## ۱۲-۲-۷- هیدرولیز P آلی

هیدرولیز P آلی منجر به ایجاد فسفات معدنی می‌شود. بسته به pH؛ فسفات ۱ (pH 2 تا ۷) یا ۲ (pH 7 تا ۱۲) بارمنفی خواهد داشت. از این‌رو، به دلیل ایجاد یون‌های منفی، قلیائیت به ترتیب یک یا دو برابر کاهش می‌یابد. تغییر در قلیائی می‌تواند مربوط به میزان هیدرولیز P باشد.

$$S_{a,OPh} = -(\alpha_{H_2PO_4} + 2\alpha_{HPO_4} + 3\alpha_{PO_4}) \frac{eq \text{ mole } P}{mole } \frac{gP}{30/974P} \frac{50,000mgCaCO_3}{10^6\mu gP} \frac{OPHydr}{1eq} \quad (27-12)$$

که

$$\alpha_{H_2PO_4} = \frac{K_{p1}[H^+]^2}{[H^+]^3 + K_{p1}[H^+]^2 + K_{p1}K_{p2}[H^+] + K_{p1}K_{p2}K_{p3}} \quad (28-12)$$

$$\alpha_{HPO_4} = \frac{K_{p1}K_{p2}[H^+]}{[H^+]^3 + K_{p1}[H^+]^2 + K_{p1}K_{p2}[H^+] + K_{p1}K_{p2}K_{p3}} \quad (29-12)$$

$$\alpha_{PO_4} = \frac{K_{p1}K_{p2}K_{p3}}{[H^+]^3 + K_{p1}[H^+]^2 + K_{p1}K_{p2}[H^+] + K_{p1}K_{p2}K_{p3}} \quad (30-12)$$

که

$$K_{p3} = 10^{-12/35} \text{ و } K_{p2} = 10^{-7/2} , K_{p1} = 10^{-2/15}$$

## ۱۲-۲-۸- هیدرولیز N آلی

هیدرولیز N آلی منجر به ایجاد آمونیاک می‌شود. بسته به pH، آمونیاک به شکل یون آمونیوم با یک بار مثبت (pH < 9) یا گاز آمونیاک خنثی (pH > 9) خواهد بود. از این‌رو، هنگامی که یون‌های مثبت ایجاد می‌شوند، قلیائیت با یک معادل افزایش می‌یابد. تغییر در قلیائیت می‌تواند مربوط به میزان هیدرولیز N باشد.

$$S_{a,ONh} = F_i \frac{1eq \text{ mole } N}{mole } \frac{gN}{14/007N} \frac{50,000mgCaCO_3}{10^6\mu gN} \frac{ONHdr}{1eq} \left( \frac{\mu gN}{Ld} \right) \quad (31-12)$$

### ۱۲-۲-۹- فتوستنز فیتوپلانکتون

فتوستنز فیتوپلانکتون نیتروژن را برای آمونیاک یا نیترات و فسفر را برای فسفات معدنی جذب می‌کند. اگر آمونیاک منبع اصلی نیتروژن باشد، منجر به کاهش قلیائیت خواهد شد، زیرا جذب یون‌های آمونیوم با بار مثبت بسیار بیش‌تر از جذب یون‌های فسفات با بار منفی می‌باشد. اگر نیترات منبع اصلی نیتروژن باشد، منجر به افزایش قلیائیت می‌شود زیرا هم نیترات و هم فسفات بار منفی دارند. فرمول زیر، تغییر قلیائی به فتوستنز فیتوپلانکتون را بسته به منابع غذایی و هم‌چنین خصوصیات آن‌ها را با توجه به pH تنظیم می‌کند،

$$\begin{aligned}
 S_{a,PhyTP} & \quad (۳۲-۱۲) \\
 &= \frac{50,000CaCO_3}{1eq} \left( -r_{na}P_{ap}F_i \frac{1eq}{moleN} \frac{moleN}{14/007N} \frac{gN}{10^6\mu gN} \right. \\
 &+ r_{na}(1 - P_{ap}) \frac{1eq}{moleN} \frac{moleN}{14/007N} \frac{gN}{10^6\mu gN} \\
 &+ r_{ap}(\alpha_{H_2PO_4} + 2\alpha_{HPO_4} + 3\alpha_{PO_4}) \frac{1eq}{moleP} \frac{moleP}{30/97P} \frac{gP}{10^6\mu gP} \left. \right) \\
 &\times PhytoPhoto \left( \frac{\mu gA}{Ld} \right)
 \end{aligned}$$

### ۱۲-۲-۱۰- جذب مواد مغذی فیتوپلانکتون

فیتوپلانکتون نیتروژن را برای آمونیاک و یا نیترات و فسفر را برای فسفات معدنی استفاده می‌کند. فرمول زیر، تغییر در میزان قلیائی میزان جذب فیتوپلانکتون را بسته به منابع غذایی و هم‌چنین خصوصیات آن‌ها را طبق pH نشان می‌دهد،

$$S_{a,PUp} = \left( (-P_{ap}F_i + (1 - P_{ap})) \frac{1eq \text{ moleN}}{moleN} \frac{gN}{14/007N} \frac{gN}{10^6 \mu gN} \right. \quad (33-12)$$

$$\times \frac{PhtoUp(\mu gN/L/d)}{H(m)}$$

$$+ (\alpha_{H_2PO_4} + 2\alpha_{HPO_4}$$

$$+ 3\alpha_{PO_4}) \frac{1eq \text{ moleP}}{moleP} \frac{gP}{30/97P} \frac{gP}{10^6 \mu gP}$$

$$\left. \times \frac{PhtoUp(\mu gN/L/d)}{H(m)} \right)$$

### ۱۲-۲-۱۱ - دفع موادمغذی فیتوپلانکتون

فیتوپلانکتون آمونیاک و فسفات معدنی را دفع می‌کند. فرمول زیر مربوط به تغییر قلیائی در میزان دفع فیتوپلانکتون با توجه تأثیر pH بر روی عناصر غذایی می‌باشد،

$$S_{a,PEx} = \frac{50,000CaCO_3}{1eq} \left( F_i \frac{1eq \text{ moleN}}{moleN} \frac{gN}{14/007N} \frac{gN}{10^6 \mu gN} \right. \quad (34-12)$$

$$\times \frac{PhtoUp(\mu gN/L/d)}{H(m)}$$

$$- (\alpha_{H_2PO_4} + 2\alpha_{HPO_4}$$

$$+ 3\alpha_{PO_4}) \frac{1eq \text{ moleP}}{moleP} \frac{gP}{30/97P} \frac{gP}{10^6 \mu gP}$$

$$\left. \times \frac{PhtoUp(\mu gN/L/d)}{H(m)} \right)$$

### ۱۲-۲-۱۲ - جذب موادمغذی جلبک

جلبک‌های کف نیتروژن را برای آمونیاک یا نیترات و فسفر را برای فسفات معدنی جذب می‌کنند. فرمول زیر، تغییر در مقدار قلیائیت به میزان جذب جلبک‌های کف را بسته به منابع غذایی و همچنین خصوصیات آن‌ها را طبق pH تنظیم می‌کند،

$$S_{\alpha,BAUp} = \frac{50,000CaCO_3}{1eq} \left( \begin{aligned} & (-P_{ap}F_i) \\ & + (1 - P_{ap}) \frac{1eq}{moleN} \frac{moleN}{14/007N} \frac{gN}{10^6\mu gN} \\ & \times \frac{BotAlgUpP(mgN/m^2/d)}{H(m)} \\ & + (\alpha_{H_2PO_4} + 2\alpha_{HPO_4} \\ & + 3\alpha_{PO_4}) \frac{1eq}{moleP} \frac{moleP}{30/97P} \frac{gP}{10^6\mu gP} \\ & \times \frac{BotAlgUpP(mgP/m^2/d)}{H(m)} \end{aligned} \right) \quad (35-12)$$

## ۱۲-۲-۱۳- دفع مواد مغذی جلبک کف

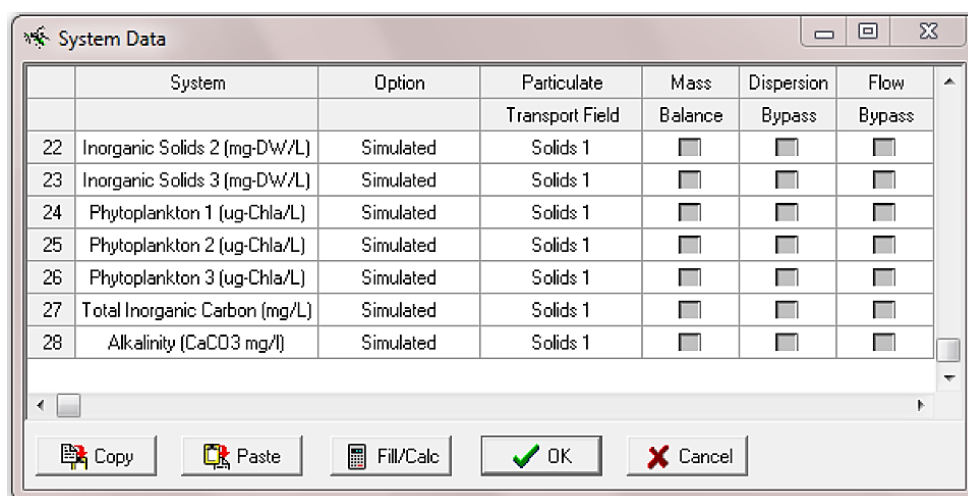
$$S_{\alpha,BAEx} = \frac{50,000CaCO_3}{1eq} \left( \begin{aligned} & F_i \frac{1eq}{moleN} \frac{moleN}{14/007N} \frac{gN}{10^6\mu gN} \\ & \times \frac{BotAlgExP(mN/m^2/d)}{H(m)} \\ & - (\alpha_{H_2PO_4} + 2\alpha_{HPO_4} \\ & + 3\alpha_{PO_4}) \frac{1eq}{moleP} \frac{moleP}{30/97P} \frac{gP}{10^6\mu gP} \\ & \times \frac{BotAlgExP(mgN/m^2/d)}{H(m)} \end{aligned} \right) \quad (36-12)$$

## ۱۲-۳- ورودی مدل

داده‌های مورد نیاز برای پشتیبانی از کاربرد مدل خوراک‌وری پیشرفته برای پیش‌بینی pH در زیر شرح داده شده‌است.

### ۱۲-۳-۱- سیستم

برای گنجاندن محاسبات pH در چارچوب WASP، دو متغیر کیفیت اضافی (کل کربن معدنی و قلیائی) به مدل خوراک‌وری پیشرفته اضافه شدند. توصیه می‌شود در صورت نبود نیاز به محاسبات pH کاربر گزینه‌ی شبیه‌سازی خود را در By-Pass تنظیم کند (شکل ۱۲-۲).



شکل ۱۲-۲ متغیرهای کیفیت WASP برای محاسبه pH

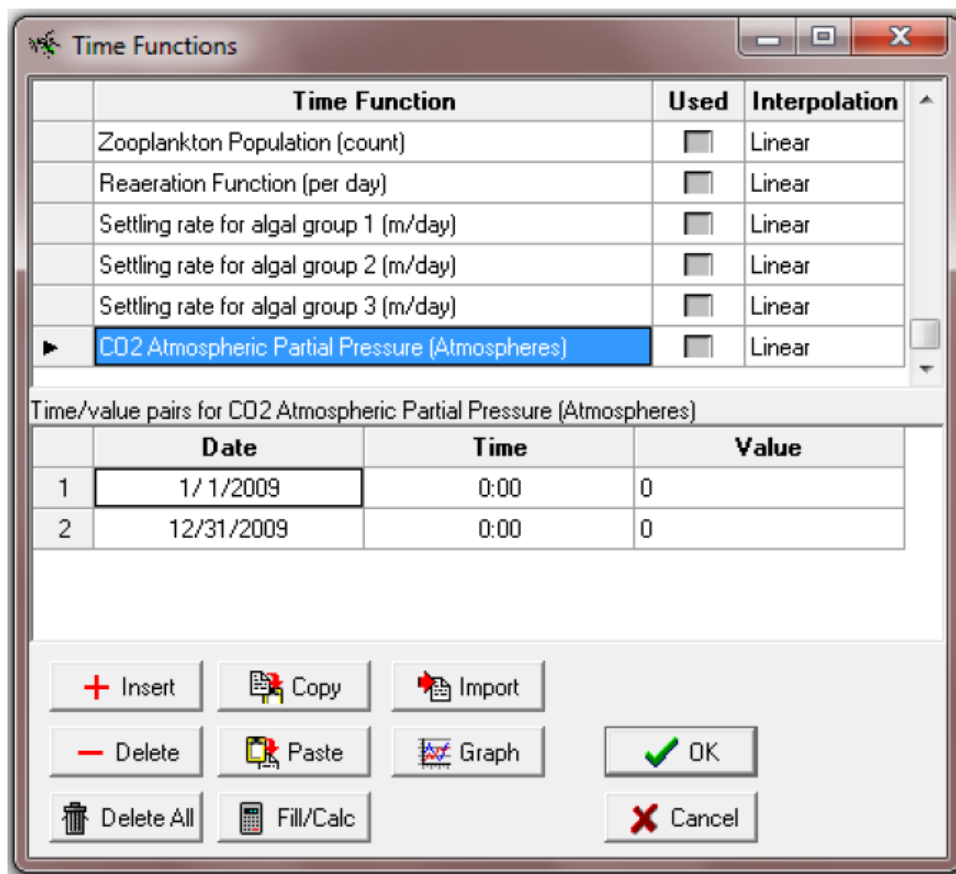
توجه: اگر یک فایل ورودی تغذیه‌گرایی WASP قبلی (WIF) را به ماژول جدید ارتقاء داده‌اید، چندین مرحله وجود دارد که باید انجام دهید.

- گزینه‌ی شبیه‌سازی را در صفحه‌ی سیستم (تصویر بالا برای شبیه‌سازی) تنظیم کنید.
- شما باید وارد صفحه‌ی Flow and Exchange شوید و روی ok کلیک کنید (این باعث می‌شود تا رابط، متغیر کیفیت جدید (کربن معدنی کل و قلیائیت) را به صفحه‌ی شرایط مرزی اضافه کند.
- به صفحه‌ی شرایط مرزی بروید و pH و غلظت قلیائی را وارد شبکه‌ی مدل خود کنید.
- برای محاسبه‌ی pH اطلاعات موردنیاز در زیر را تکمیل کنید.

### ۱۲-۳-۲- توابع زمان

شکل ۳ تابع زمان، محیطی جدید را برای فراهم کردن فشارنسبی متغیر زمانی برای دی‌اکسیدکربن نشان می‌دهد. اگر کاربر یک تابع و ثابت زمانی که در بخش ۲-۳ گفته شد را مشخص کند، از تابع زمان

محیطی استفاده خواهد شد. توجه داشته‌باشید، کاربر انتخاب می‌کند که کدام توابع زمانی در نظر گرفته‌شوند و باید دکمه‌ی "Used" را برای اطلاعات مربوط به مدل بررسی کنند. برای هر تابع زمانی تعریف می‌شود که کاربر باید مجموعه‌ای از داده‌ها که حداقل شامل دو نقطه می‌باشد، را ارائه دهد.

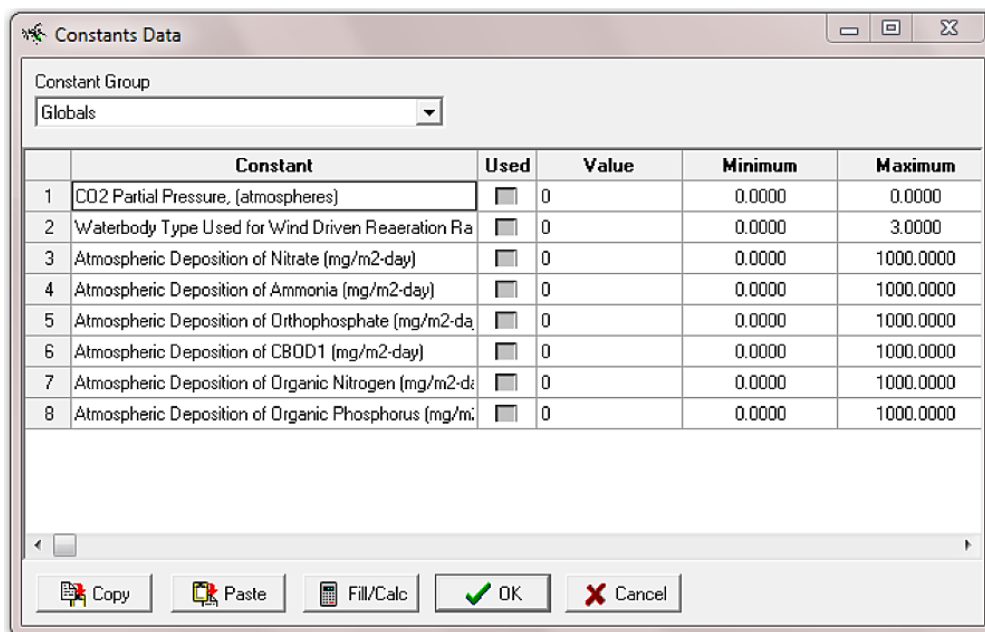


شکل ۱۲-۳ عملکرد زمان برای فشار جزئی اتمسفر  $CO_2$

### ۱۲-۳-۳- ثابت‌ها

شکل ۴ نشان می‌دهد که کاربر تنها، ثابت موردنیاز برای محاسبه pH را مشخص می‌کند (اگر به‌عنوان تابع زمان مشخص نشده باشد). فشار نسبی اتمسفر کربن دی‌اکسید با انتخاب ثابت‌ها و گروه ثابت‌های جهانی در ماژول تغذیه‌گرایی پیشرفته مشخص شده‌است. برای جابجایی بین گروه ثابت‌ها، از فهرست کشویی استفاده کنید. توجه داشته‌باشید که کاربر مقادیر ثابت را مشخص می‌کند، اما باید دکمه

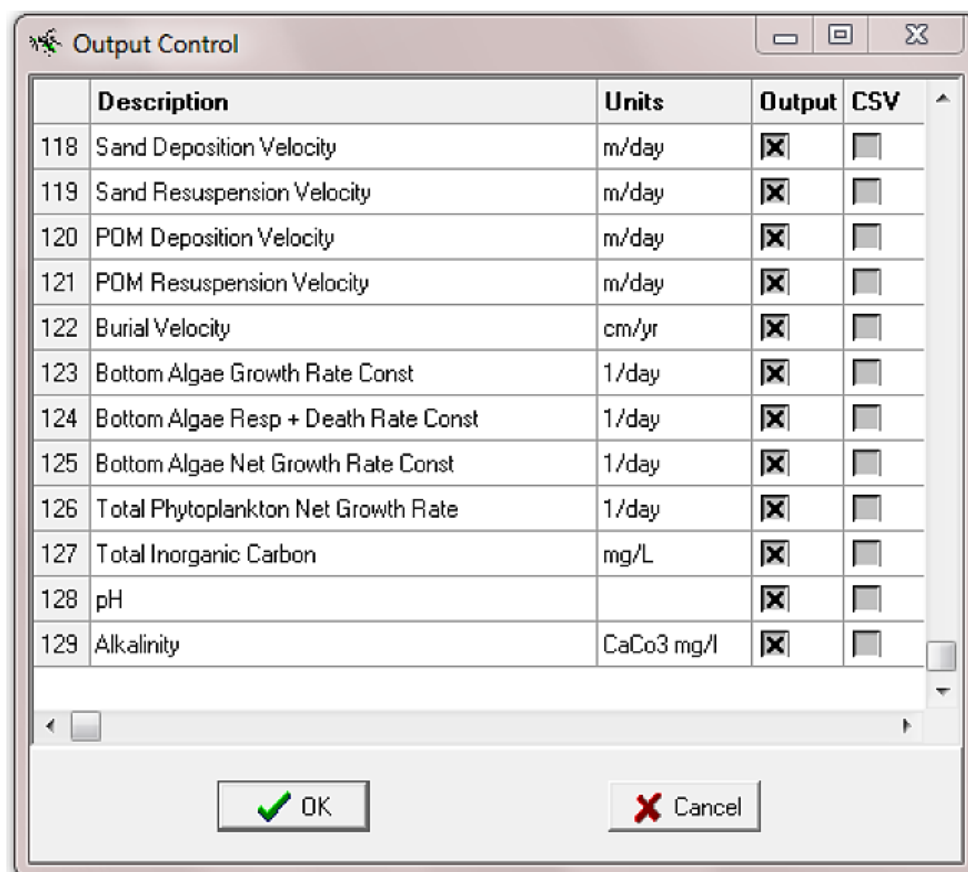
رادیویی "Used" را نیز بررسی کند. نبود علامت‌گذاری در این کادر، رابط ارسال این اطلاعات به مدل را حفظ می‌کند. اگر یک تابع زمان همان‌طور که در بخش ۲-۳ توضیح داده شد، داده‌های مربوط به فشارنسبی اتمسفر کربن‌دی‌اکسید را فراهم کند، جایگزین مقدار مشخص شده در این جا می‌شود.



شکل ۱۲-۴ ثابت فشارنسبی اتمسفر برای CO<sub>2</sub>

### ۱۲-۳-۴- متغیرهای خروجی

متغیرهای خروجی از pH قلیائی و کل محاسبه کربن معدنی در ماژول خوراک‌وری پیشرفته در شکل ۱۲-۵ آمده است. متغیر خروجی برای کل کربن معدنی (متغیر کیفیت)، قلیائی (متغیر کیفیت)، pH (محاسبه‌شده) و آمونیاک (محاسبه‌شده) برای خروجی اضافه شده‌است. متغیرهای بررسی‌شده در جعبه‌ی "Output" در دسترس نرم‌افزار پس‌پردازنده‌ی گرافیکی WASP خواهند بود. WASP برای هر متغیر با جعبه‌ی بررسی‌شده‌ی "CSV"، یک پرونده‌ی جداشده با کاما حاوی خروجی برای همه‌ی بخش‌ها و همه‌ی زمان‌های خروجی تولید می‌کند. در این مثال، متغیرهای خروجی CSV بررسی‌شده به روش مستقیم یا غیرمستقیم به شبیه‌سازی جلبک کف مرتبط هستند.



شکل ۱۲-۵ متغیرهای خروجی WASP برای محاسبه pH

## ۱۲-۴-منابع

1. Chapra, S.C., Pelletier, G.J. and Tao, H. 2008. QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality, Version 2.11: Documentation and Users Manual. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA., Steven.Chapra@tufts.edu.



## فصل سیزدهم

### راهنمای انتقال جریان آب

### ۱۳-۱- چکیده

مدل انتقال جریان استاندارد WASP 8 جریان آب را از طریق شبکه‌ی جریان فرعی محاسبه می‌کند که ممکن است شامل هر دو بخش بسته و آزاد باشد. این کتابچه‌ی راهنمای تکمیلی، الگوریتم‌های هیدرولیک را برای کاربر مستند می‌کند که شامل معادلات انتقال و هیدروژئومتری، ورودی و خروجی مدل و یک سری آزمایش‌های تأیید مدل می‌باشد.

در روندیابی رودخانه‌ها به صورت جریان آزاد، می‌توان از مدل یک بعدی برای حوضچه‌ها، مرداب‌ها و یا زهکش‌هایی که تحت تأثیر آب برگشتی هستند، استفاده کرد. مسیریابی جریان موج‌سینماتیک یک گزینه‌ی ساده، اما واقع‌بینانه می‌باشد که هدایت انتقال پراکنده را از طریق بخش‌های جریان آزاد انجام می‌دهد. معادله‌ی موج‌سینماتیک انتشار موج‌جریان، تغییرات ناشی از جریان، حجم، عمق و سرعت حاصل از جریان متغیر بالادست را محاسبه می‌کند. این معادله‌ی شناخته‌شده یک راه‌حل از معادله‌ی تداوم جریان یک‌بعدی و یک شکل ساده از معادله‌ی حرکت می‌باشد که اثرات گرانش و اصطکاک را در نظر می‌گیرد. انتقال پراکنده از طریق بخش‌های حوضچه توسط یک معادله‌ی سرریز با هلال تیز کنترل می‌شود. این معادله، جریان را بر اساس ارتفاع آب در بالای سرریز محاسبه می‌کند. حوضچه دارای بخش آبی سطح درحال جریان (epilimnion) و نیز بخش‌های زیرزمینی راكد (hypolimnion) می‌باشد.

برای جریان پویا از طریق بخش‌های مرداب، معادلات حرکت از DYNHYD یک راه‌حل ساده برای محاسبه‌ی خروجی‌ها و تغییرات حاصل در سرعت، ارتفاع سطح، عمق و حجم ارائه می‌دهد. جریان سیال به‌وسیله‌ی جریان‌های بالادست و پایین‌دست با هد متغیر، معادلات یک‌بعدی را حل کرده و انتشار موج‌بلند را از طریق یک سیستم آب‌سطحی توصیف می‌کند، درحالی که هر دو شتاب و حجم را حفظ می‌کنند. این رویکرد اثرات جاذبه، اصطکاک و حرکت همرفتی را در نظر می‌گیرد، با فرض این که جریان عمدتاً یک‌بعدی می‌باشد؛ یعنی شتاب‌های معمولی در جهت جریان ناچیز بوده و می‌توان کانال‌ها را به اندازه‌ی عرض بالای ثابت با یک عمق هیدرولیکی متغیر (به‌عنوان مثال "مستطیلی") نمایش داد که شیب آن پایین می‌باشد. از این گزینه می‌توان برای نشان‌دادن بدنه‌های آبی دوبعدی (x-y) با شبکه‌ی گره‌پیوندی شاخه‌ای استفاده کرد.

برای اجرای مازول انتقال جریان WASP 8، کاربر باید اطلاعات مربوط به بخش و اطلاعات جریان را تهیه کند. اطلاعات موردنیاز مربوط به این بخش شامل طول، عرض و عمق برای شرایط متوسط‌جریان و همچنین دامنه‌های پایین و ضرایب اصطکاک مانینگ می‌باشد. برای کنترل شکل کانال، ممکن است عوامل گسترش عمق هیدروژئومتریک و حداقل عمق کانال برای شرایط جریان صفر مشخص شود. با مقدار پیش‌فرض ۰/۰۰۱ متر، شیب‌های پایین و کمتر از  $(10^{-6} - 10^{-8})$  دلالت بر حوضچه یا بخش‌های شناور دارند.

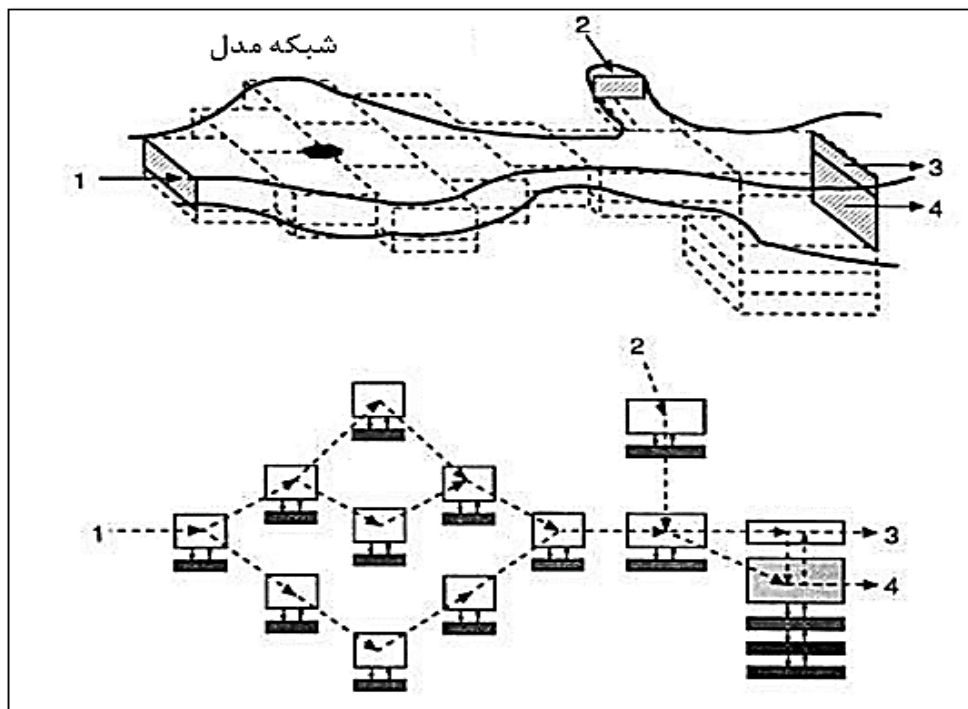
برای بخش‌های حوضچه، حداقل عمق کانال ارتفاع سرریز تفسیر می‌شود. اطلاعات جریان موردنیاز شامل مسیرهای جریان برای کانال اصلی و هریک از شاخه‌های فرعی و همچنین توابع زمان جریان ورودی برای دوره‌ی شبیه‌سازی می‌باشد.

متغیرهای انتقال که خروجی محسوب می‌شوند، برای هر یک از ماژول‌های جنبشی WASP 8 ارائه می‌شوند. خروجی استاندارد شامل خروجی قطعه، عمق، سرعت و عرض می‌باشد.

### ۱۳-۲- مقدمه

برنامه‌ی شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب WASP 8، (دی‌تورو و همکاران ۱۹۸۳، آمبرووس و همکاران ۱۹۸۸، وول و همکاران ۲۰۰۱، وول و همکاران ۲۰۰۶) به‌طور کلی دارای یک چارچوب تعادل جرم پویا برای مدل‌سازی سرنوشت آلاینده‌ها و انتقال در آب‌های سطحی می‌باشد. با استفاده از روش مدل‌سازی می‌توان محفظه‌ی انعطاف‌پذیر WASP را در یک، دو یا سه بعد با انتقال جاذب و پراکندگی بین محفظه‌های بدنی گسسته یا "بخش" اعمال نمود. WASP مجموعه‌ای از ماژول‌ها را فراهم می‌نماید تا امکان شبیه‌سازی متغیرهای کیفیت آب معمولی و همچنین سموم فراهم شود.

مدل‌های جنبشی WASP مبتنی بر مجموعه معادلات انتقال و تبدیل می‌باشد. انتقال پراکنده توسط جریان آب از طریق یک شبکه‌ی محاسباتی مشخص انجام می‌شود (به‌عنوان مثال شکل ۱۳-۱). جریان ورودی غلظت‌های مرزی را به شبکه وارد می‌کند و جریان‌های داخلی بیش‌تر اجزای سازنده را در طول مسیرهای مشخص شده از طریق شبکه و خارج از مرزهای پایین‌دست منتقل می‌کنند.



شکل ۱۳-۱ شبکه مدل با مسیرهای انتقال پراکنده

### ۱۳-۳-۳-ضمیمه

#### ۱۳-۳-۱- میدان‌های انتقال WASP

انتقال پیشرفته در WASP 8 به شش نوع مجزا یا "میدان" تقسیم می‌شود. اولین میدان، انتقال جریان پراکنده در ستون آبی می‌باشد. جریان پراکنده، اجزای کیفیت آب و آب را حمل می‌کند که سبب رقیق شدن می‌شود. میدان انتقال دوم، حرکت آب منفذی در بستر رسوب را مشخص می‌کند. مواد تشکیل دهنده‌ی کیفیت آب محلول در بستر، با جریان آب منافذ حمل می‌شوند. میدان‌های انتقال سوم، چهارم و پنجم انتقال آلاینده‌های ذره‌ای توسط ته‌نشینی، تعلیق و دفن مواد جامد را مشخص می‌کنند (رویکرد توصیفی). WASP 8 این امکان را به کاربر می‌دهد تا نرخ‌های ته‌نشینی و تعلیق را به‌طور مستقیم‌تر با استفاده از پارامترهای قطعه مشخص کند. WASP 8 همچنین یک روش مکانیکی برای انتقال رسوب را اجرا می‌کند (به دفترچه‌ی راهنمای کاربر در بخش انتقال رسوب مراجعه کنید). اجزای کیفیت آب که با

ذرات جامد حمل می‌شوند بین ستون آب و بستر رسوب حمل می‌شوند. میدان انتقال ششم نشان‌دهنده‌ی تبخیر، بارش یا بخش‌های آب‌سطحی می‌باشد.

### ۱۳-۳-۲- جریان آب‌سطحی WASP

ستون آب پیشرفته به‌طور مستقیم انتقال آلاینده‌های محلول و ذرات معلق را در بسیاری از بدنه‌های آبی کنترل می‌کند. علاوه بر این، تغییرات در سرعت و عمق ناشی از جریان‌های متغیر می‌تواند بر فرآیندهای جنبشی مانند هوادهی مجدد، فراریت و فوتولیز تأثیر بگذارد. در WASP، جریان ستون آب ورودی از طریق میدان انتقال ۱ می‌باشد. الگوهای گردش را می‌توان با استفاده از یکی از ۶ گزینه‌ی موجود جریان/انتقال توصیف کرد (جدول ۱۳-۱).

جدول ۱۳-۱ گزینه‌های انتقال جریان WASP 8

گزینه‌ی جریان	شرح
مسیریابی جریان	از جریان مشخص شده برای قطعه استفاده می‌کند؛ حجم، عمق، و سرعت با جریان تنظیم نمی‌شود.
مسیریابی نه‌ر	از جریان مشخص شده برای قطعه استفاده می‌کند؛ حجم، عمق، و سرعت برای جریان متغیر براساس هیدروژئومتری تنظیم می‌شوند.
موج سینماتیک	از مسیر حرکت موج جنبشی برای تقسیم‌بندی براساس شیب و زبری پایین استفاده می‌کند.
سرریز حوضچه	از ارتفاع سرریز برای کنترل جریان در سطح صاف فرضی استفاده می‌کند.
پیوند هیدرودینامیکی	انتقال مفصل توسط مدل هیدرودینامیک خارجی ارائه شده است.
موج دینامیک	استفاده از ارتفاع سطح آب و شیب سطح برای محاسبه‌ی جریان

### ۱۳-۳-۲-۱- گزینه‌های جریان توصیفی آب‌سطحی WASP

در WASP دو گزینه‌ی جریان توصیفی مسیریابی نه‌ر و مسیریابی جریان وجود دارد. خروجی از یک جریان توصیفی برابر با مجموع جریان‌های ورودی به آن بخش است. برای جریان‌یابی، در صورت تغییر جریان ورودی، هیچ تعدیلی در حجم، عمق و سرعت وجود ندارد. برای مسیریابی جریان؛ حجم، عمق و سرعت با جریان و براساس ضرایب هیدروژئومتری مشخص تغییر می‌کند.

### ۱۳-۲-۳-۲- گزیندهی موج جنبشی جریان نهر WASP

گزیندهی جریان موج جنبشی برای ارائه‌ی شبیه‌سازی واقعی‌تر دینامیک جریان در شاخه‌های شبکه‌های یک‌بعدی اجرامی‌شود. جریان جنبشی توسط شیب کف و زبری کف کنترل می‌شود. رابطه موج جنبشی می‌تواند برای بیش‌تر سیستم‌های نهر و رودخانه‌های کوچک استفاده شود. WASP جریان رو به پایین از طریق شبکه را در پاسخ به جریان‌ات و برداشت‌های متغیر زمانی شبیه‌سازی می‌کند.

همانند گزیندهی جریان توصیفی، کاربر باید هم یک تابع پیوستگی و هم یک تابع زمانی را برای هر جریان ورودی (یا خروجی) تأمین کند. مسیرهای جریان ممکن است واگرا شده (شاخه) و سپس دوباره متصل شوند. برای بخش‌های آب‌سطحی، کاربر باید شیب کف، عوامل زبری و هم‌چنین پهنا و عمق را برای شرایط جریان متوسط و نمای هیدرولیکی عمق را برای کانال‌های غیرمستطیلی مشخص نماید. این مدل از توابع مسیر جریان، جریان ورودی همراه با هندسه‌ی کانال و ضرایب هیدرولیکی مشخص برای محاسبه‌ی حرکت آب متغیر-زمان (جریان‌ها و سرعت‌ها) و هیدروژئومتری کانال (عرض‌های بالا، عمق متوسط مقطعی و حجم) استفاده می‌نماید.

با شروع نسخه‌ی ۷.۳، شبکه‌ی جریان، شامل بخش‌های جریان حوضچه همراه با بخش‌های جریان جنبشی می‌باشد. جریان از میان بخش‌های حوضچه توسط یک سد، سرریز و یا طوفان طبیعی با هد پایین‌دست کنترل می‌شود. برای این بخش‌ها، کاربر باید شیب کف ۰ (یا کم‌تر از  $(10^{-6}-6)$ ) و ارتفاع سرریز پایین‌دست را مشخص نماید. لازم به ذکر است بخش‌های حوضچه ممکن است شامل لایه‌های آب راکد زیرین باشند.

با آغاز نسخه‌ی ۸، شبکه‌ی جریان شامل بخش‌های جریان پویا (یا "آب راکد") همراه با جریان جنبشی و بخش‌های جریان حوضچه می‌باشد. جریان دینامیک توسط گرادیان‌های ارتفاع، سرعت سطح و هم‌چنین زبری کف کنترل می‌شود. برای این بخش‌ها، کاربر باید شیب کف را بر روی صفر تنظیم کند و ارتفاع کف را در مرجع نقطه‌ی کنترل پایین‌دست مشخص کند.

### ۱۳-۴- توسعه‌ی معادلات

#### ۱۳-۴-۱- هیدروژئومتری

در استفاده‌ی درست از WASP برای شبیه‌سازی جریان‌ها و رودخانه‌ها، توصیف درستی از هیدروژئومتری قطعه که تابعی از جریان شمرده می‌شود، می‌تواند مهم باشد. برای گزیندهی جریان اتصال هیدرودینامیکی از سرعت و عمق محاسبه‌شده توسط مدل هیدرودینامیک در WASP استفاده می‌شود. برای گزیندهی جریان داخلی (جریان خالص، جریان ناخالص، موج جنبشی)، مجموعه‌ای از ضرایب تخلیه‌ی

هیدرولیکی مشخص شده توسط کاربر، رابطه‌ی بین سرعت، عمق و جریان در بخش‌های آب‌سطحی را تعریف می‌کند. این روش از پیاده‌سازی در QAL2E پیروی می‌کند (براون و بارنول، ۱۹۸۷). برای گزینه‌های جریان توصیفی (جریان خالص، جریان ناخالص)؛ سرعت و عمق بخش بر طرح انتقال تأثیر نمی‌گذارد، این گزینه‌ها تنها در محاسبه‌ی نرخ هوادهی مجدد و فراریت مورد استفاده قرار می‌گیرند. برای گزینه‌ی جریان موج‌جنبشی؛ سرعت، عرض و عمق قطعه برای محاسبات انتقال ضروری هستند. ضرایب تخلیه اعم از عمق و سرعت جریان بر اساس مشاهدات تجربی از رابطه‌ی جریان با سرعت و عمق استوار است (لئوپولد و مادوکس، ۱۹۵۳). این معادلات سرعت، عرض کانال و عمق مرتبط با جریان را از طریق توابع توان مرتبط می‌سازند:

$$v = vmult . Q^{vexp} \quad (۱-۱۳)$$

$$R = dmult . Q^{dexp} \quad (۲-۱۳)$$

$$B = mult . Q^{bexp} \quad (۳-۱۳)$$

که در آن  $v$  سرعت (متر بر ثانیه)،  $R$  شعاع هیدرولیکی، یا عمق متوسط مقطعی (متر)،  $B$  عرض بالای (متر)،  $vmult$ ،  $dmult$  و  $mult$  ضرایب تجربی و  $vexp$ ،  $dexp$  و  $bexp$  نماهای تجربی هستند.

$$\begin{aligned} Q &= v . A = v . R . B \\ &= (vmult . Q^{vexp}) . (dmult . Q^{dexp}) . (mult . Q^{bexp}) \\ &= (vmult . dmult . mult) Q^{vexp+dexp+bexp} \end{aligned} \quad (۴-۱۳)$$

به منظور بررسی، روابط هیدرولیک زیر وجود دارد:

$$vmult . dmult . mult = 1 \quad (۵-۱۳)$$

$$vexp + dexp + bexp = 1 \quad (۶-۱۳)$$

گزینه‌های جریان خالص و ناخالص در WASP نیازمند تعیین روابط هیدرولیکی برای سرعت و عمق هستند؛ ضرایب عرض به‌طور داخلی از معادله‌ی ۵ و ۶ محاسبه می‌شوند. گزینه‌ی جریان موج‌جنبشی نیازمند تعیین نمای عمق هیدرولیکی  $d_{xp}$  همراه با عمق  $D_m$  و عرض  $B_m$  تحت شرایط جریان متوسط می‌باشد. از معادله‌ی مانینگ (به‌روز شده) برای محاسبه‌ی سرعت  $v_m$  تحت شرایط جریان متوسط و برای محاسبه‌ی جریان متوسط  $Q_m$  از عمق، عرض و سرعت استفاده می‌شود.

$$v_m = \frac{D_m^{2/3} \cdot S_f^{1/2}}{n} \quad (7-13)$$

$$Q_m = V_m \cdot D_m \cdot B_m \quad (8-13)$$

با در نظر گرفتن یک مجموعه‌ی ثابت از نماهای هیدرولیکی روابط زیر برقرار می‌باشد (ضمیمه، به بخش 6-1 مراجعه شود).

$$v_{exp} = (2/3) \cdot d_{xp} \quad (9-13)$$

$$b_{exp} = 1 - d_{xp} - v_{exp} \quad (10-13)$$

در نهایت مجموعه‌ی ثابتی از ضرایب هیدرولیکی از عرض میانگین جریان، معادلات هندسه هیدرولیکی و معادله مانینگ به دست می‌آیند:

$$b_{mult} = B_m \cdot Q_m^{-b_{exp}} \quad (11-13)$$

$$v_{mult} = 1/\alpha \quad (12-13)$$

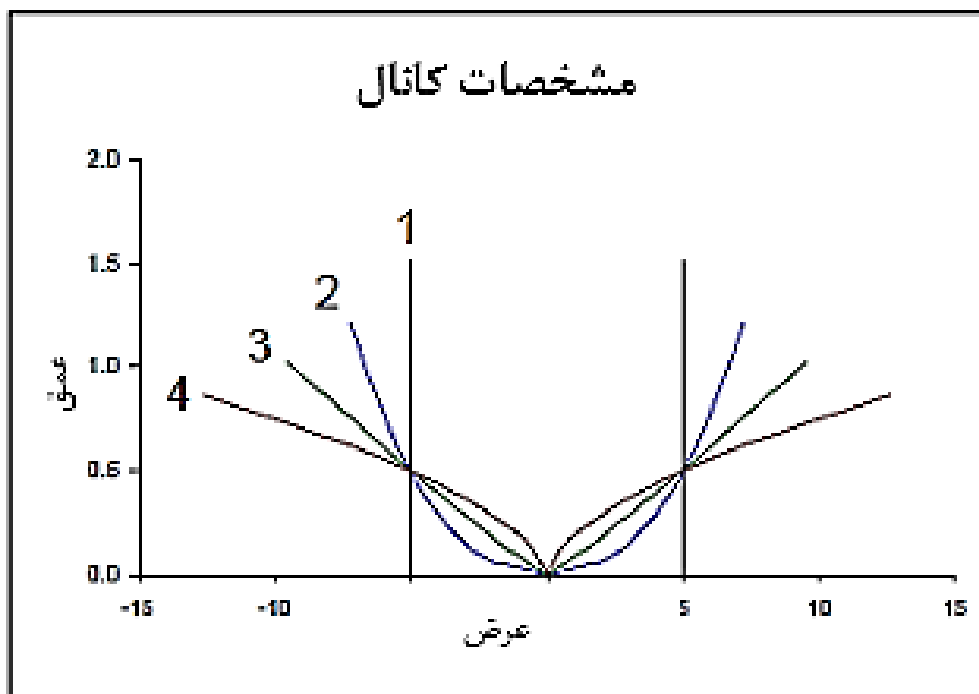
$$d_{mult} = \alpha/b_{mult} \quad (13-13)$$

$$\alpha = \left( \frac{n \cdot b_{mult}^{2/3}}{S_f^{1/2}} \right)^{3/5} \quad (14-13)$$



جدول ۱۳-۲ توان هیدرولیکی برای شکل ۲

ردیف	کانال	سرعت	عرض	عمق
۱	مستطیلی	۰/۴۰	۰/۰۰	۰/۶۰
۲	U-شکل	۰/۳۲	۰/۲۰	۰/۴۸
۳	V-شکل	۰/۲۶	۰/۳۵	۰/۳۹
۴	کم عمق	۰/۲۰	۰/۵۰	۰/۳۰



شکل ۱۳-۲ سطح مقطع هیدرولیکی کانال

سطح مقطع کانال برای ضرایب هندسه‌ی هیدرولیکی در جدول (۲-۱۳) و در شکل (۲-۱۳) نشان داده شده‌است. تحت جریان متوسط، این کانال‌ها ۱۰ متر عرض و ۰/۵ متر عمق دارند. لئوپولد و همکارانش (۱۹۶۴) اشاره کرده‌اند که کانال‌های جریان در مناطق مرطوب به سمت یک مقطع مستطیلی گرایش دارند

، زیرا خاک‌های چسبنده، دامنه‌های با شیب‌تند را افزایش می‌دهد و این درحالی است که خاک‌های غیرچسبنده باعث ایجاد سواحل کم‌عمق و تقریباً نامشخص می‌شوند.

جدول ۱۳-۳ مقایسه توان‌های تجربی هیدرولیکی

عرض	عمق	سرعت	کانال
۰/۰۰	۰/۶۰	۰/۴۰	مستطیلی
۰/۱۲	۰/۴۵	۰/۴۳	میانگین عملکرد ۱۵۸ ایستگاه ایالات متحده
۰/۱۳	۰/۴۱	۰/۴۳	میانگین عملکرد ۱۰ ایستگاه در رودخانه راین
۰/۳۹	۰/۳۶	۰/۳۴	جریان‌های زودگذر در سمیارید ایالات متحده

جدول (۳-۱۳) توان‌های هیدرولیکی برای یک کانال مستطیلی را با داده‌های گزارش‌شده توسط لئوپولد و همکاران (۱۹۶۴) مقایسه می‌کند. توجه داشته‌باشید که توان سرعت متوسط برای تمام مقاطع کانال نسبتاً ثابت است. تغییرات عمده به‌صورت کاهش در توان عمق و افزایش هم‌زمان در توان عرض رخ می‌دهد. به‌طوری که مقاطع عرضی کانال از شیب تند خاک‌های چسبنده به شیب‌های کم‌عمق مناطق خشک با خاک‌های غیرچسبنده تغییر می‌کند.

برای شبیه‌سازی مکانی خاص مانند رودخانه یا نهر، ضرایب و توان‌های هیدرولیکی باید تخمین زده‌شوند. براون و بارنول (۱۹۸۷) تخمین توان‌های (b و d) و سپس تنظیم ضرایب (a و c) را برای سرعت و عمق مشاهده‌شده توصیه کردند. توان‌ها ممکن است براساس مشاهدات شکل کانال که در یک بررسی اکتشافی ذکر شده‌است، انتخاب شوند. اگر سطح‌مقطع تا حد زیادی مستطیلی شکل با کناره‌های عمودی باشد، مجموعه‌ی اول توان‌های نشان داده‌شده مناسب این شرایط می‌باشد. اگر کانال‌ها دارای شیب تند در مناطقی با خاک چسبنده باشند، آن‌گاه مجموعه‌ی دوم توان‌ها مناسب خواهد بود و اگر جریان در یک منطقه‌ی خشک با خاک‌های غیرچسبنده و کناره‌های شیب‌دار کم‌عمق باشد، مجموعه‌ی نهایی توان‌ها توصیه می‌شود.

ویژگی کلیدی کانال که باید در یک بررسی شناسایی موردتوجه قرارگیرد، شامل شرایط شیب‌های ساحل یا میزانی می‌باشد که عرض با افزایش جریان رود افزایش می‌یابد. واضح است که شیب ساحل و مواد در تماس با جریان نهر در نرخ جریان موردنظر جزء ویژگی‌های اصلی هستند که در یک بازدید به

آن‌ها اشاره می‌شود. این توضیح یک راهنمای کلی را ارائه می‌دهد، اما باید توجه داشت که مقادیر برای جریان‌های کناره‌ای توسط مدل به دست می‌آید. حتی در رودخانه‌های دارای کناره‌های عمودی، جریان‌های پایین ممکن است در تماس با یک بستر شنی با شیب کم باشند که تقریباً وجود ندارند و نشان‌دهنده‌ی جریان‌های موقتی در مناطق نیمه‌خشک می‌باشند.

### ۱۳-۴-۲- معادلات جریان حاکم

مدل جریان رودخانه‌ای WASP شامل مجموعه‌ای از معادلات یک‌بعدی می‌باشد که جریان آب و حجم آب را در یک جریان شاخه‌ای یا شبکه‌ی رودخانه‌ای کم‌عمق حل می‌کند. این شبکه می‌تواند شامل بازه‌های جریان آزاد (جریان موج‌جنبشی)، بازه‌های آب‌بندی شده (جریان سرریز)، مرداب و یا بازه‌های تحت‌تأثیر جزر و مد (جریان دینامیکی) باشد. معادله‌ی حرکت براساس بقای مومنتوم، سرعت و جریان آب را پیش‌بینی می‌کند. معادله‌ی پیوستگی، ارتفاع آب (هد) و حجم را براساس بقای حجم پیش‌بینی می‌کند.

معادله‌ی پیوستگی یک‌بعدی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial t} = 0 \quad (13-15)$$

که  $Q$  جریان حجمی (مترمکعب بر ثانیه) و  $A$  سطح مقطع (مترمربع) است. برای کانال‌های مستطیلی، که عرض ثابت است، معادله‌ی ۱۵ به صورت زیر است:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + B \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (13-16)$$

که در آن  $B$  عرض کانال (متر) و  $H$  ارتفاع سطح آب (متر) می‌باشد. همان‌طور که در حال حاضر در WASP اجرا می‌شود، جریان‌های جنبشی اشکالاتی دارند که توسط روابط هندسی شرح داده شده در بخش (۱-۴-۱۳) توضیح داده شده‌اند، در حالی که حوضچه به جریان می‌رسد، جریان‌های پویا به شکل کانال‌های مستطیلی شکل می‌گیرند.

معادلات حرکت اجرا شده در سه نوع دسترسی در بخش‌های زیر توضیح داده شده‌اند.

### ۱۳-۴-۲-۱- جریان موج‌جنبشی

برای جریان‌های یک‌بعدی و جریان آزاد، مسیریابی جریان موج‌جنبشی یک گزینه‌ی ساده، اما واقعی برای هدایت انتقال پراکنده می‌باشد. معادله‌ی موج‌جنبشی انتشار موج را محاسبه کرده و تغییرات در جریان‌ها، سرعت‌ها، عرض‌ها و اعماق در سراسر شبکه‌ی جریان را به صورت خروجی (نتیجه) نمایش

می‌دهد. این معادله‌ی معروف جواب معادله‌ی پیوستگی یک‌بعدی و شکل ساده‌شده‌ی معادله‌ی مومنتوم است که اثرات جاذبه و اصطکاک را در نظر می‌گیرد:

$$g = (S_0 - S_f) = 0 \quad (17-13)$$

در معادله‌ی (۱۷-۱۳)،  $g$  شتاب گرانش ( $m/sec^2$ )،  $S_0$  شیب کف و  $S_f$  شیب اصطکاک می‌باشد. معادله‌ی مانینگ، نیروی اصطکاک را به صورت تابعی از سرعت آب و شعاع هیدرولیکی بیان می‌کند:

$$S_f = \frac{n^2 v^2}{R^{3/4}} \quad (18-13)$$

که در آن  $n$  ضریب اصطکاک مانینگ،  $v$  سرعت آب (متر بر ثانیه) و  $R$  شعاع هیدرولیکی (متر) است که معادل با عمق متوسط مقطع،  $D$  می‌باشد. از معادله‌ی مومنتوم ساده‌شده می‌توان  $S_0$  را برابر با  $S_f$  دانست. شعاع هیدرولیکی را می‌توان به صورت نسبت سطح مقطع به عرض و نماد  $B$  (متر) نشان داد. با جایگزین کردن آن‌ها در معادله‌ی مانینگ و مرتب کردن مجدد جملات جریان را به صورت تابعی از شیب کف، سطح مقطع و عرض به دست می‌دهد:

$$Q = \frac{1}{n} \frac{A^{5/3}}{B^{2/3}} S_0^{1/2} \quad (19-13)$$

با جایگزین کردن این عبارت در معادله‌ی پیوستگی و تفکیک  $A$  نسبت به زمان، معادله‌ی دیفرانسیل

موج جنبشی به دست می‌آید:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + \alpha \beta Q^{\beta-1} \frac{\partial Q}{\partial t} = 0 \quad (20-13)$$

که در آن برای کانال‌های مستطیلی:

$$\beta = \frac{3}{5}, \quad \alpha = \left( \frac{n B^{2/3}}{S_f^{1/2}} \right)^{5/3} \quad (21-13)$$

برای کانال‌هایی که عرض آن‌ها با جریان تغییر می‌کند،  $\alpha$  و  $\beta$  توابعی از ضرایب هیدرولیکی

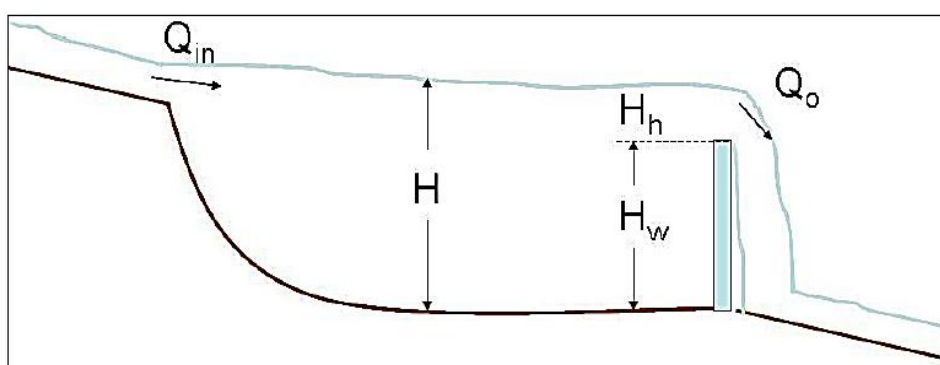
هستند.

$$\beta = 0/6 + 0/4 \cdot dxp, \quad \alpha = \left( \frac{n \cdot bmit^{2/3}}{S_f^{1/2}} \right)^{5/3} \quad (22-13)$$

که در آن ضرایب هیدرولیکی  $dxp$  و  $bmult$  در بخش (۱-۳) تعریف شده‌اند.

### ۱۳-۲-۴-۲- جریان سرریز حوضچه

برای جریان از میان بخش‌های حوضچه‌ای کنترل‌شده توسط یک سد با هدر پایین در پایین دست یا طوفان طبیعی (شکل ۱۳-۳)، معادله‌ی سرریز لبه‌تیز یک راه‌حل ساده برای محاسبه‌ی جریان‌های خروجی و تغییرات حاصل در عمق و حجم می‌باشد.  $H_w$  ارتفاع سرریز (متر) و  $B_w$  عرض (متر) می‌باشد که توسط کاربر مشخص می‌شوند و ارتفاع هیدرولیکی  $H_h$  نشان‌دهنده‌ی تفاوت بین عمق حوضچه  $H$  و  $H_w$  می‌باشد.



شکل ۱۳-۳ طرح تعریف برای جریان حوضچه

برای یک سرریز لبه‌تیز که در آن  $H_h/H_w < 0/4$  است، سرعت و جریان با هدر مرتبط می‌باشند.

$$v_0 = 1.83H_h^{1/2} \quad (۱۳-۲۳)$$

$$Q_0 = v_0 A_h = 1.83B_w H_h^{3/2} = 0$$

که  $H \leq H_w$

در معادله‌ی (۱۳-۲۳)  $v_0$  سرعت جریان بر روی سرریز (متر) و  $A_h$  سطح مقطع جریان بر روی سرریز (متر) می‌باشد که از حاصل ضرب  $H$  و  $B_h$  به دست می‌آید.

### ۱۳-۲-۴-۳- جریان پویا

برای جریان دینامیک در بخش‌های مرداب، معادلات مومنتوم از DYNHYD یک راه‌حل ساده برای محاسبه‌ی جریان‌های خروجی و تغییرات حاصل در سرعت، ارتفاع سطح، عمق و حجم را فراهم می‌کند. ارتفاع پایین؛  $H_b$  (متر)، عرض؛  $B$  (متر)، عمق اولیه؛  $D$  (متر) و سرعت اولیه  $v$  (متر بر ثانیه) توسط کاربر

تعیین می‌شوند. ارتفاع سطح؛  $Y$  برابر مجموع  $D$  و  $H_b$  می‌باشد. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از جریان‌های متغیر بالادست و هد پایین دست، معمولاً در فواصل ۱ تا ۵ دقیقه‌ای انجام می‌شوند.

جریان پویا معادلات یک‌بعدی را زمانی که انتشار یک موج بلند را در یک سیستم آب کم‌عمق توصیف می‌کند، حل می‌کند. درحالی که تکانه و حجم را حفظ می‌کند. معادله‌ی حرکت؛ سرعت آب و جریان‌ها را محاسبه می‌کند. در این روش فرض می‌شود که جریان عمدتاً یک‌بعدی بوده و شتاب‌های نرمال به سمت جریان ناچیز می‌باشند، در این شرایط کانال‌ها می‌توانند به اندازه‌ی کافی با عرض بالای ثابت و عمق هیدرولیکی متغیر نشان داده‌شوند (یعنی مستطیلی). در این حالت طول موج به‌طور قابل توجهی بیش‌تر از عمق است، و شیب‌های کف متوسط هستند. با استفاده از معادلات موج سینماتیک، دامنه‌های با شیب تند به بهترین نحو حل می‌شوند.

معادله‌ی (۱۳-۲۴) معادله‌ی پیوستگی اجراشده برای جریان پویا را ارائه می‌دهد. معادله‌ی حرکت شتاب موضعی، نرخ تغییر سرعت نسبت به زمان را محاسبه می‌کند.

$$\frac{dv}{dx} = -v \frac{dv}{dx} + a_g + a_f \quad (13-24)$$

$$a_g = -g \frac{\partial Y}{\partial x} \quad (13-25)$$

که در آن  $Y$  ارتفاع سطح (متر) و  $g$  شتاب گرانش  $9.81 \text{ (m/sec}^2\text{)}$  می‌باشد. عبارت سوم شتاب اصطکاکی را می‌توان با استفاده از معادله‌ی مانینگ برای جریان یکنواخت بیان کرد.

$$a_f = -g \frac{n^2 v^2}{R^{4/3}} \quad (13-26)$$

که در آن  $n$  ضریب اصطکاک مانینگ،  $v$  سرعت آب (متر بر ثانیه)، و  $R$  شعاع هیدرولیکی (متر) بوده، که معادل با عمق متوسط مقطع  $D$  می‌باشد.

شتاب باد موضعی در این پیاده‌سازی معادلات جریان دینامیک گنجانده نشده‌است.

### ۱۳-۴-۳- پیاده‌سازی معادلات

WASP 8 جریان جنبشی، جریان غرقابی و معادلات جریان پویا مربوط به بخش‌های آب‌سطحی مناسب در شبکه جریان را با استفاده از فرمول‌های تفاضل محدود برای جریان و برای پیوستگی حل می‌کند.

برای هر بخش، حداکثر گام زمانی عددی  $DT_{max}$  از طول قطعه و سرعت مشخصه محاسبه می‌شود که در بخش‌های زیر توضیح داده شده‌است. گام زمانی کلی حاصل ضرب حداقل  $DT_{max}$  در شبکه و یک جزء مشخص شده توسط کاربر، DTF (پیش فرض، ۰/۹) می‌باشد که برای اطمینان از پایداری تنظیم شده‌است:

$$DT = DTF \cdot \min(DT_{max}) \quad (27-13)$$

گام زمانی DT به دو گام زمانی برای موج جنبشی و سرریز پله‌ای تقسیم می‌شود. جریان‌ها به‌طور متوالی برای هر مرحله‌ی زمانی محاسبه می‌شوند و سپس برای استفاده بعدی توسط ماژول کیفیت آب میانگین‌گیری می‌شوند. سرعت‌های نهایی، عمق، حجم و ارتفاع سطح در پایان کامل گام زمانی در طول ماژول کیفیت آب منتقل می‌شوند.

برای جریان پویا، دو مرحله‌ی نیم زمانی در یک طرح پیش‌بینی‌کننده اصلاح؛ همان‌طور که در بخش (۴-۱۳) (جریان پویا) در ادامه شرح داده شده‌است، استفاده می‌شود. جریان‌ها، سرعت‌ها، حجم‌ها، عمق‌ها و ارتفاعات سطح باتوجه به هریک از مراحل عددی به‌روز می‌شوند. جریان‌های نهایی، سرعت، حجم، عمق و ارتفاع سطح در پایان کامل گام زمانی در طول ماژول کیفیت آب منتقل می‌شوند.

### ۱۳-۴-۱- جریان موج جنبشی

معادله‌ی (۱۳-۲۸) برای حل جریان در موج جنبشی به شکل تفاضل محدود بیان می‌شود:

$$\frac{Q_{Dt} - Q_{D0}}{DT} = \frac{Q_{Dt}^{1-\beta}}{\alpha\beta L} (Q_U - Q_{D0}) \quad (28-13)$$

که در آن  $Q_U$  جریان ورودی بالادست،  $Q_{D0}$  جریان خروجی از مرحله‌ی زمانی قبل،  $Q_{Dt}$  جریان خروجی برای این گام زمانی و  $DT$  گام زمانی می‌باشد (روزها). معادله‌ی ۲۸ با استفاده از روش نیوتن-رافسون حل می‌شود:

$$\begin{aligned} f(Q_{Dt}) &= Q_{Dt} + c_1 Q_{Dt}^{1-\beta} + c_2 = 0, c_1 \\ &= -\frac{DT}{\alpha\beta L} (Q_U - Q_{D0}), c_2 = -Q_{D0} \end{aligned} \quad (29-13)$$

$$f'(Q_{Dt}) = 1 + c_1(1-\beta)Q_{Dt}^{-\beta} \quad (30-13)$$

با در نظر گرفتن یک تخمین اولیه از  $Q_{Dt}$ ، یک تخمین به‌روز شده  $Q_{Dt2}$ ، به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$Q_{Dt2} = Q_{Dt} - \frac{f(Q_{Dt})}{f'(Q_{Dt})}, \text{err} = \left| \frac{Q_{Dt2} - Q_{Dt}}{Q_{D0}} \right| \quad (31-13)$$

معادله‌های (۲۹-۱۳)، (۳۰-۱۳) و (۳۱-۱۳) در یک حلقه‌ی تکراری حل می‌شوند که در آن  $Q_{Dt}$  برابر با  $Q_{Dt2}$  تنظیم می‌شود تا زمانی که  $\text{err}$  کمتر از  $10^{-5}$  باشد. با توجه به مجموعه‌ی جدیدی از جریان‌ها برای شبکه‌ی ستون آب  $Q_{Dt,ij}$ ، حجم‌های آب تمام بخش‌های "i" با استفاده از معادله‌ی پیوستگی به‌روز می‌شوند:

$$DV_i = \sum_j Q_{Dt,ij} DT, \quad V_{i,j} = V_{0,i} + DV_i \quad (32-13)$$

عرض قطعه با جریان جدید، با استفاده از معادله‌ی (۳-۱۳) به‌روز می‌شود و مساحت و عمق مقطعی مربوطه محاسبه می‌شوند:

$$DA_i = \frac{DV_i}{L_i}, \quad A_{t,i} = A_{0,i} + DA_i \quad (33-13)$$

$$D_{t,i} = \frac{A_{t,i}}{B_i} \quad (34-13)$$

برای جلوگیری از انحراف عددی آهسته در حجم‌های محاسبه‌شده در طول شبیه‌سازی‌های طولانی، تنظیمات کوچکی برای جریان‌ها براساس تفاوت‌های بین شعاع هیدرولیکی محاسبه‌شده از معادله‌ی (۱۳-۲۹) و عمق متوسط مقطعی محاسبه‌شده از طریق پیوستگی، ایجاد شده‌است. با اعمال معادله (۱۳-۱۹) معادله‌ی (۱۳-۳۵) حاصل می‌شود.

$$Q_{err,i} = Q_{Dt,i} - Q_{R,i} = \frac{B_i}{n_i} S_{0,i}^{1/2} (D_t^{5/3} - R_i^{5/3}) \quad (35-13)$$

$$Q_{Dt,i} = Q_{Dt,i} - Q_{err,i} \quad (36-13)$$

برای هر بخش جریان جنبشی، حداکثر گام زمانی عددی پایدار  $DT_{max}$  (روز)، از طول بخش  $L$  (متر) و سرعت  $c$  (متر برثانیه) محاسبه می‌شود:

$$c = v/\beta \quad (37-13)$$

$$DT_{max} = \frac{0.5}{86400} \cdot (L/c) \quad (38-13)$$



که در آن ۰/۵ یک فاکتور ایمنی می‌باشد.

### ۱۳-۴-۲- جریان سرریز حوضچه

برای رسیدن به "i"، سرریز بند (معادله ۱۳-۲۳) باید همراه با پیوستگی حل شود به طوری که:

$$Q_{Dt,i} = 1/83B_{w,i}H_{ht,i}^{3/2} \quad (۳۹-۱۳)$$

$$H_{ht,i} = H_{h0,i} + \frac{Q_{Ut,i} - Q_{Dt,i}}{B_i L_i} \quad (۴۰-۱۳)$$

که در آن  $Q_{Dt,i}$  و  $Q_{Ut,i}$  ورودی بالادست و خروجی برای این گام زمانی هستند (مترمکعب بر ثانیه)،  $H_{ht,i}$ ، هد برای این گام زمانی (متر)،  $H_{h0,i}$  هدگام زمانی قبلی (متر) و  $DT$  گام زمانی (روز) است. این معادلات با استفاده از روش نیوتن-رافسون حل می‌شوند.

$$f(Q_{Dt}) = Q_{Dt} - 1/83B_{w,i}H_{ht,i}^{\frac{3}{2}} = 0 \quad (۴۱-۱۳)$$

$$f'(Q_{Dt}) = 1 - 1/83B \left( \frac{3}{2} H_{ht,i}^{1/2} \frac{DT}{B_i L_i} \right) \quad (۴۲-۱۳)$$

باتوجه به یک تخمین اولیه از  $Q_{Dt}$  و یک مقدار ثابت برای  $H_{ht,i}$ ، با استفاده از معادله (۴۰-۱۳) یک برآورد به‌روزشده  $Q_{Dt2}$ ، محاسبه می‌شود. سپس موارد زیر محاسبه می‌شوند:

$$Q_{Dt2} = Q_{Dt} - \frac{f(Q_{Dt})}{f'(Q_{Dt})}, \text{err} = \left| \frac{Q_{Dt2} - Q_{Dt}}{Q_{D0}} \right| \quad (۴۳-۱۳)$$

معادله‌های (۴۱-۳)، (۴۲-۱۳)، (۴۳-۱۳)، و (۴۰-۱۳) در یک حلقه‌ی تکراری حل می‌شوند که در آن  $Q_{Dt}$  و  $H_{ht}$  با  $Q_{Dt2}$  و  $H_{ht2}$ ، تا وقتی که  $\text{err}$  کم‌تر از  $10^{-5}$  باشد.

WASP 8 این معادله‌ی سرریز را برای هر بخش در یک شبکه‌ی جریان حل می‌کند. در هر یک از مراحل عددی، مقادیر محاسبه‌شده  $dQ/dT$  و برای  $Q_0$  به‌روز رسانی حجم، عمق و  $H_h$  مورد استفاده قرار می‌گیرد که در گام عددی بعدی برای محاسبه‌ی  $Q_0$  استفاده می‌شوند.

برای هر بخش از سرریز بند، حداکثر گام زمانی عددی پایدار  $Dt_{\max}$  (روز) از طول قطعه و سرعت سرریز  $v_0$  محاسبه می‌شود.

$$Dt_{\max} = \frac{0/5}{86400} 1/1/5v_0 \quad (۴۴-۱۳)$$

### ۱۳-۴-۴- جریان پویا

معادله‌های (۱۳-۱۶) و (۱۳-۲۴) اساس مدل هیدرودینامیک DYNHYD 5 را تشکیل می‌دهند که در این نسخه از WASP اجرا می‌شود. این معادلات به صورت عددی بر روی یک شبکه‌ی "لینک-گره" انعطاف‌پذیر و کارآمد (از نظر محاسباتی) تلفیق شده‌اند که معادلات حرکت و پیوستگی را در نقاط شبکه‌های متناوب حل می‌کند. (فینگر و هریس، ۱۹۷۰) در هر گام زمانی معادله‌ی حرکت در لینک‌ها (یا "کانال‌ها")، با دادن سرعت برای محاسبات انتقال جرم و معادله‌ی پیوستگی در گره‌ها (یا "تقاطع") حل می‌شود که هدها را برای محاسبات غلظت آلاینده ارائه می‌دهد. شبکه‌های لینک-گره می‌توانند با دقت قابل قبولی الگوهای جریان شاخه‌ای نسبتاً پیچیده و خطوط فرعی نامنظم را برای بسیاری از مطالعات حل کنند. آن‌ها نمی‌توانند بدنه‌های آب طبقه‌بندی شده، جویبارهای کوچک یا رودخانه‌های با شیب پایین بزرگ را اداره کنند. اگر جهت‌های جریان اولیه به خوبی تعریف شده‌باشد، شبکه‌های لینک-گره می‌توانند برای بدنه‌های آب کم‌عمق و گسترده راه‌اندازی شوند.

در WASP، گره‌ها متناظر با بخش‌ها و لینک‌ها متناظر با فصل مشترک بخش‌ها می‌باشند. برای هر بخش از جریان پویا در یک شبکه‌ی WASP، یک عدد کانال مجزا "ich" برای هر یک از بخش‌های پایین دست آن تعریف می‌شود. کانال ich توسط بخش بالادست ز و بخش پایین دست i تعریف می‌شود. جریان مثبت در داخل کانال ich خروجی از بخش ز و ورودی به بخش i بوده و جریان منفی در کانال ich شامل خروجی از بخش i به بخش ز می‌باشد.

تفاضل محدود، در معادله‌ی (۱۳-۲۴) به شکل زیر است:

$$\frac{v_{t,ich} - v_{ich}}{DT} = v_{ich} \frac{\Delta v_{ich}}{\Delta x_{ich}} - g \frac{\Delta H_{ich}}{\Delta x_{ich}} - \frac{gn_{ich}^2}{R_{ich}^{4/3}} v_{ich} |v_{ich}| \quad (۱۳-۴۵)$$

در معادله‌ی (۱۳-۴۵)، پارامتر  $v_{t,ich}$  مربوط به سرعت این گام زمانی (متر بر ثانیه)،  $v_{ich}$  سرعت برای گام زمانی قبلی (متر بر ثانیه)،  $\Delta x_{ich}$  طول کانال (متر)،  $\Delta v_{ich}/\Delta x_{ich}$  شیب سرعت در کانال با توجه به فاصله  $(\text{sec}^{-1})$ ،  $\Delta H_{ich}/\Delta x_{ich}$  شیب سطح آب در کانال با توجه به فاصله (متر بر متر) و  $DT$  گام زمانی (روز) است. همه‌ی مقادیر سمت راست معادله‌ی ۲۰ به گام زمانی قبلی ارجاع داده می‌شوند.

شیب سطح آب را می‌توان از هدهای نقطه‌ی اتصال در هر دو انتهای کانال محاسبه کرد:

$$\frac{\Delta H_{ich}}{\Delta x_{ich}} = \frac{H_j - H_i}{(L_i + L_j)/2} \quad (۱۳-۴۶)$$

پارامترهای  $H_j$  و  $L_j$  در معادله‌ی فوق معرف ارتفاع سطح آب و طول قطعه‌ی بالادست (متر) بوده و  $H_i$  و  $L_i$  نیز مربوط به ارتفاع سطح آب و طول قطعه‌ی پایین دست (متر) می‌باشند. به دلیل امکان انشعاب در شبکه، نمی‌توان گرادیان سرعت را به طور مستقیم از سرعت‌های کانال بالادست و پایین دست محاسبه کرد. اگر انشعاب رخ دهد، چندین کانال بالادست و پایین دست وجود خواهد داشت که هرگونه گرادیان سرعت محاسبه‌شده برای آن‌ها مبهم خواهد بود. با اعمال معادله‌ی پیوستگی و جایگزینی  $V \times A$  به جای  $Q$  می‌توان یک عبارت برای گرادیان سرعت در یک کانال به دست آورد.

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{\partial Q}{\partial x} = -v \frac{\partial A}{\partial x} - A \frac{\partial v}{\partial x} \quad (۴۷-۱۳)$$

عبارت‌های به‌روز شده، گرادیان سرعت کانال را نشان می‌دهند.

$$\frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial t} - \frac{v}{A} \frac{\partial A}{\partial x} \quad (۴۸-۱۳)$$

نوشتن این مطلب به صورت تفاضل محدود و جایگزینی  $B \times R$  برای  $A$  و عبارت  $B \times \Delta H$  برای

$MA$  گرادیان سرعت را ارائه می‌دهد:

$$\frac{\Delta v_{ich}}{\Delta x_{ich}} = -\frac{1}{R_{ich}} \frac{\Delta H_{ich}}{\Delta t} - \frac{v_{ich}}{R_{ich}} \frac{\Delta v_{ich}}{\Delta x_{ich}} \quad (۴۹-۱۳)$$

عبارت  $\Delta H_{ich}/\Delta t$  به صورت میانگین تغییر ارتفاع سطح آب بین بخش‌ها در هر انتهای کانال  $ich$  در طول گام زمانی  $t$  محاسبه می‌شود. با جایگزین کردن معادله‌ی (۴۹-۱۳) در معادله‌ی (۴۵-۱۳) و مرتب‌سازی معادله‌ی تفاضل محدود برای بار دوم، تکانه‌ی اعمال شده به هر کانال ارائه می‌شود.

$$v_{t.ich} = v_{ich} + DT \left[ \frac{v_{ich}}{R_{ich}} \frac{\Delta H_{ich}}{\Delta t} + \left( \frac{v_{ich}^2}{R_{ICH}} - g \right) \frac{\Delta v_{ich}}{\Delta x_{ich}} - \frac{gn_{ich}^2}{R_{ich}^{4/3}} v_{ich} |v_{ich}| \right] \quad (۵۰-۱۳)$$

معادله‌ی پیوستگی به صورت تفاضل محدود و به‌روز رسانی عبارات به صورت زیر می‌باشد:

$$H_{t,j} = H_j - DT \frac{\sum_i Q_{ij}}{B_i L_j} \quad (۵۱-۱۳)$$

معادله‌های (۵۰-۱۳) و (۵۱-۱۳) با استفاده از روش پیش‌بینی کننده-تصحیح کننده‌ی دو مرحله‌ای حل می‌شوند. براساس سرعت‌های اولیه، تراز و عمق از یک مرحله‌ی زمانی قبل، سرعت و جریان برای نیمه‌ی گام زمانی بعدی برآورد می‌کند و در کنار آن ارتفاع و عمق جدید به دست می‌آید. با استفاده از این

مقادیر پیش‌بینی شده برای گام زمانی، سرعت و مشتقات جریان برای گام زمانی دوباره محاسبه می‌شوند. با توجه به برآورد این دو فاصله‌ی زمانی مقادیر نهایی گام نهایی به دست می‌آید. این مشتقات تصحیح شده سپس از سرعت‌های اولیه، ارتفاعات عمق و سطح برای محاسبه‌ی سرعت و جریان برای گام زمانی کامل استفاده می‌شوند. در نهایت ارتفاع سطح، عمق و حجم برای گام زمانی کامل محاسبه می‌شوند. برای هر قطعه از جریان پویا، حداکثر گام زمانی عددی ثابت  $DT_{max}$  (روز)،  $L$  طول قطعه (متر) و  $c$  سرعت (متر بر ثانیه) محاسبه می‌شود:

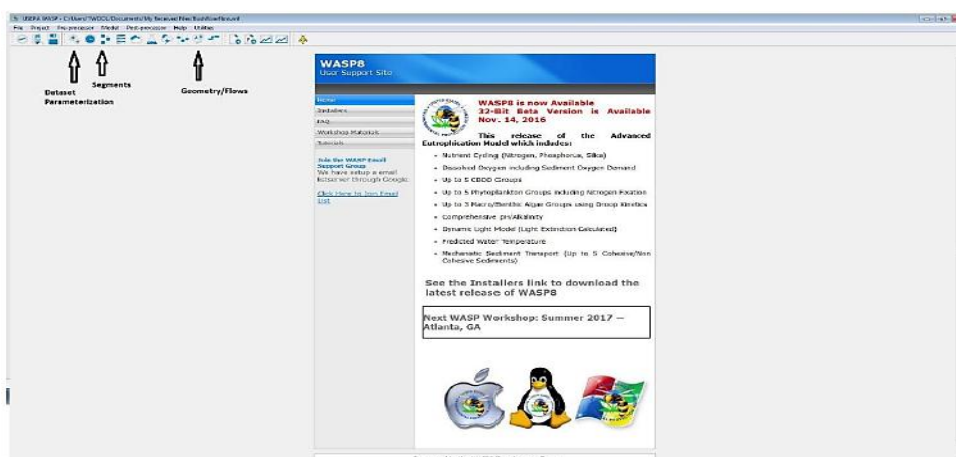
$$c = \sqrt{gD} \quad (۱۳-۵۲)$$

$$DT_{max} = \frac{0.5}{86400} \cdot L/c \quad (۱۳-۵۳)$$

که ۰/۵ یک فاکتور ایمنی است.

### ۱۳-۵- ورودی‌های مدل انتقال جریان آب

برای اجرای مسیریابی جریان، کاربر باید اطلاعاتی را در صفحه‌نمایش مجموعه‌داده، صفحه‌ی Segments و صفحه‌ی Flows در دسترس از gears, cube و faucet در نوار ابزار اصلی WASP مشخص کند (شکل ۱۳-۴). هر یک از این موارد به‌طور خلاصه در بخش‌های زیر توضیح داده شده‌است.



شکل ۱۳-۴ نوار ابزار اصلی صفحه‌نمایش WASP، دکمه‌های ورودی داده

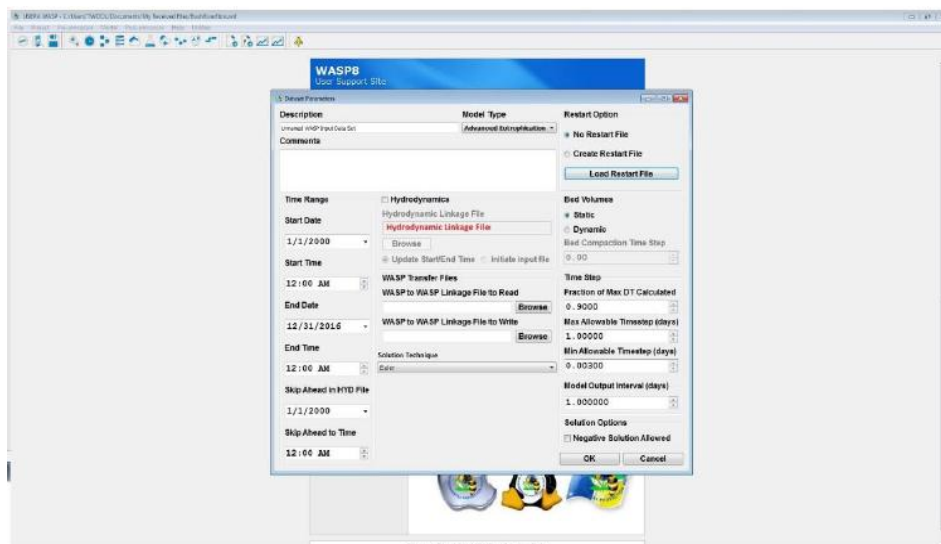
### ۱۳-۵-۱ - صفحه‌نمایش مجموعه‌داده

در صفحه‌نمایش مجموعه‌داده (شکل ۱۳-۵)، کاربر باید نوع مدل را انتخاب کرده و در بخش هیدرودینامیک، گزینه‌ی جریان را انتخاب نماید. در نهایت، اطلاعات گام زمانی باید مشخص شود. مقادیر پیش‌فرض برای کسری از گام زمانی حداکثر (۰/۹)، حداکثر گام زمانی (۱روز) و حداقل گام زمانی (۰/۰۰۱ روز) در نظر گرفته می‌شوند. این مقادیر در بیش‌تر موارد باید به خوبی کار کنند، اما اگر با ناپایداری عددی مواجه شویم، کاهش مقدار گام زمانی بیشینه (به ۰/۵ یا حتی ۰/۱) می‌تواند کمک کند. در برخی موارد، کاربر ممکن‌است بخواهد حداکثر گام زمانی کم‌تر از یک روز را مشخص کند. در این صورت اگر خروجی روزانه مطلوب باشد، گام زمانی حداکثر ۰/۱ یا ۰/۰۵ روز می‌تواند دقت لازم را داشته باشد.

فرم ورودی پارامتری کردن داده‌ها اولین چیزی است که باید در هنگام ایجاد یک مجموعه‌داده ورودی جدید تکمیل شود. این فرم، اطلاعات پایه‌ای را که توسط برنامه برای پارامتری کردن دیگر فرم‌های ورود داده‌ها موردنیاز است، ارائه می‌دهد. این صفحه به برنامه اطلاع می‌دهد که چه نوع فایل WASP را می‌خواهید ایجاد کنید.

### ۱۳-۵-۱ - ۱ - گزینه‌های راه‌اندازی

روش‌های مورداستفاده توسط WASP برای خواندن و ایجاد فایل‌های راه‌اندازی مجدد، به‌طور قابل‌توجهی در این نسخه تغییر کرده‌است. در نسخه‌های قبلی کاربر انتخاب می‌کرد تا با ایجاد فایل راه‌اندازی برای WASP، شرایط نهایی شبیه‌سازی را در یک فایل خروجی بنویسد. این موضوع در نسخه‌ی فعلی نیز صدق می‌کند، و اگر کاربر بخواهد یک شبیه‌سازی را با شرایط نهایی شبیه‌سازی قبلی مجدداً راه‌اندازی کند، این گزینه‌های راه‌اندازی باید تنظیم شوند. در پایان شبیه‌سازی WASP یک فایل راه‌اندازی مجدد با همان نام WIF به جز پسوند RST ذخیره می‌شود. با انتشار نسخه‌ی فعلی WASP، در صورتی که کاربر بخواهد از فایل راه‌اندازی مجدد استفاده کند، به قسمت Load Restart File مراجعه می‌کند، این کار به کاربر این امکان را می‌دهد که به دنبال هر پرونده راه‌اندازی مجدد که می‌خواهد باشد. هنگامی که فایل انتخاب شد و کاربر روی دکمه OK کلیک نمود، فایل راه‌اندازی مجدد باز شده و حجم قطعات و شرایط اولیه‌ی متغیر کیفیت به مقادیر موجود در RST انتخاب‌شده باز می‌شود.



شکل ۱۳-۵ پارامتری کردن مجموعه داده‌ها

### ۱۳-۵-۱-۲- تاریخ و زمان

نسخه‌های قبلی WASP نیاز نداشتند که توابع زمان مدل در قالب تاریخ میلادی نمایش داده شوند. در حالی که WASP به تمام توابع زمانی که به روش گریگورین نمایش داده شوند، نیاز دارد (mm/dd/yearhh:mm:ss).

**تاریخ شروع و زمان شروع** - از فهرست زمان شروع، برای تعریف تاریخ و زمان شروع شبیه‌سازی یا دوره‌ی زمانی در نظر گرفته شده در پرونده‌های ورودی مدل استفاده می‌شود. این تاریخ و زمان مربوط به زمان صفر در مدل است.

**تاریخ پایان و زمان پایان** - از فهرست گفت‌گویی زمان پایان، برای تعیین تاریخ و زمان پایان شبیه‌سازی استفاده می‌شود.

**پرش به جلو تاریخ و زمان** - این ضمیمه‌ی جدید رابط WASP به کاربر این امکان را می‌دهد که به هر بخش از فایل شبیه‌سازی و یا فایل پیوند هیدرودینامیک بارگذاری شده متصل شود. زمانی که کاربر یک فایل پیوند هیدرودینامیک را انتخاب می‌کند زمان شروع و پایان فایل خوانده می‌شود و رابط به‌طور خودکار آغاز و پایان زمان را برای این مقادیر تنظیم می‌کند. بهترین کار این است که کاربر تمام سری‌های زمانی (محیطی، مرزی و پراکندگی) را برای پوشش این محدوده‌ی کامل از زمان تعریف کند. هنگامی که WIF ساخته‌شد، کاربر می‌تواند تاریخ و زمانی را برای صرف نظر کردن از شبیه‌سازی که از

زمان آغاز در فایل هیدرودینامیک تنظیم شده را تعیین کند. این امر برای استفاده از کل فایل پیوند هیدرودینامیک برای واسنجی، تأیید و سپس استفاده از بخش کوچکی از فایل پیوند هیدرودینامیک برای تحلیل سناریو مفید می‌باشد. این موضوع می‌تواند دوره‌ی زمانی بحرانی باشد که برای تخصیص بار زاید یا TMDL مورد استفاده قرارگیرد. زمان شروع شبیه‌سازی باید بر اساس زمان شروع در فایل پیوند هیدرودینامیک تنظیم شود. کاربر می‌تواند زمان پایان شبیه‌سازی را با تغییر آخرین جفت تاریخ/زمان در صفحه‌نمایش گام زمانی تغییر دهد.

### ۱۳-۵-۱-۳- هیدرودینامیک

**پیوند هیدرودینامیک** - با استفاده از پیوند WASP8 به یک شبیه‌ساز هیدرودینامیکی سازگار می‌توان یک شبیه‌سازی واقع‌گرایانه از انتقال ناپایدار در رودخانه‌ها، مخازن و مصب‌ها انجام داد. این اتصال از طریق یک فایل "hyd" خارجی که در زمان شبیه‌سازی توسط کاربر انتخاب شده‌است، انجام می‌پذیرد. WASP 8 از جریان‌های سطحی و حجم برای محاسبه‌ی انتقال جرم و غلظت‌های تشکیل‌دهنده استفاده می‌کند. عمق و سرعت قطعه نیز ممکن است برای محاسبه‌ی نرخ هوادهی مجدد و فراربت در پرونده‌ی هیدرودینامیک گنجانده شود. قبل از استفاده از فایل‌های اتصال هیدرودینامیکی با WASP، باید یک مدل هیدرودینامیک سازگار برای بدنه‌ی آب تنظیم و با موفقیت اجرا شود، و در نتیجه یک فایل اتصال هیدرودینامیکی "hyd" ایجاد شود. این مرحله یک گام مهم در توسعه‌ی فایل ورودی WASP می‌باشد، زیرا فایل پیوند هیدرودینامیک شامل تمام اطلاعات لازم شبکه و جریان می‌باشد. هنگامی که پیوند هیدرودینامیک در صفحه‌ی پارامترهای مجموعه‌داده انتخاب می‌شود، کاربر نمی‌تواند هیچ اطلاعاتی از جریان سطحی اضافی ارائه دهد. هنگامی که کاربر آماده‌ی شروع توسعه‌ی یک بستر ورودی در WASP می‌باشد، به سادگی می‌توان فایل پیوند هیدرودینامیک را از درون پیش‌پردازنده‌ی داده باز نمود. کادر گفت‌گوی پیوند هیدرودینامیک اجازه‌ی مرور و انتخاب فایل پیوند هیدرودینامیک را به کاربر می‌دهد. پیش‌پردازنده، داده‌های فایل پیوند هیدرودینامیک را باز کرده و تعداد بخش‌ها و زمان شروع و پایان را استخراج می‌کند. زمانی که یک فایل پیوند هیدرودینامیکی در پیش‌پردازنده‌ی داده انتخاب شود، کاربر باید سیستم‌های مدل مورد استفاده را اضافه کند و همچنین می‌تواند پایداری عددی پیوند هیدرودینامیک را با بررسی سیستم Mass Check در شبکه زمان اجرا و در خروجی مدل بررسی کند. اگر شبیه‌سازی برای مدت‌زمان کافی اجرا شود، غلظت کنترل جرمی باید به ۱ میلی‌گرم برلیتر در سراسر شبکه برسد. در این مرحله اگر عددی به غیر از ۱ میلی‌گرم برلیتر دارید باید از گام زمانی متفاوتی در مدل هیدرودینامیک استفاده کنید. این امر به‌ویژه در صورتی درست است که غلظت‌ها بین اعداد بزرگ و کوچک در حال نوسان باشند، که نشانه‌ای واضح از ناپایداری عددی می‌باشد. WASP توانایی دریافت اطلاعات هیدرودینامیکی

از گروه مدل‌های هیدرودینامیکی را دارد. اگر یک مدل هیدرودینامیکی از پیوند WASP پشتیبانی نمی‌کند، در این حالت ایجاد یک فایل پیوند هیدرودینامیکی نسبی راهکار ساده‌ای می‌باشد (برای فرمت پرونده به پیوست ۳ مراجعه کنید). مدل‌های هیدرودینامیکی که در حال حاضر از قالب فایل WASP پشتیبانی می‌کنند عبارتند از: EFDC (سه بعد)، DYNHYD (یک بعد انشعاب)، RIVMOD (یک بعد بدون انشعاب)، CE QUAL-RIV1 - (یک بعد انشعاب‌دار)، SWMM / انتقال (یک بعد انشعاب‌دار)، SWMM/Ex (یک بعد انشعاب).

### ۱۳-۵-۱-۴- تکنیک راه‌حل

در حال حاضر کاربر توانایی انتخاب تکنیک حل مدل که باید توسط ماژول کیفیت آب در طول شبیه‌سازی استفاده شود، را دارد. در حال حاضر سه تکنیک حل وجود دارد که می‌توان آن‌ها را انتخاب کرد: (۱) اول: تکنیک حل سنتی است که از زمان راه‌اندازی در WASP بوده است، (۲) محدودیت سیال COSMIC: این تکنیک حل معمولاً زمانی استفاده می‌شود که WASP به مدل‌های هیدرودینامیک چندبعدی مانند EFDC متصل شود، (۳) تکنیک حل مرحله‌ای Kutta-Runge: این تکنیک برای شبیه‌سازی‌های روزانه مورد استفاده قرار می‌گیرد.

### ۱۳-۵-۱-۵- تعریف گام زمانی

با شروع نسخه‌ی WASP 7/3 کاربر کنترل گام زمانی محاسباتی را در دست نداشته و روال‌های بهینه‌سازی گام زمانی تا جایی اصلاح شده‌اند که مدل بتواند مناسب‌ترین گام زمانی را که باید در مرحله بعدی مورد استفاده قرار گیرد، تعیین کند. این امر کارآمدترین زمان برای اجرا و نیز به حداقل رساندن پراکندگی عددی ناشی از یک گام زمانی بسیار کوچک را تضمین می‌نماید. در حالی که کاربر نمی‌تواند به‌طور مستقیم گام زمانی را تنظیم کند، اما می‌تواند کنترلی بر آن چه که یک گام زمانی قابل قبول خواهد داشت، را داشته باشد.

**تابع حداکثر زمان** - این دیالوگ باکس (کادر گفت‌گو) مشخص می‌کند کدام بخش از مدل گام زمانی محاسبه شده برای گام زمانی بعدی استفاده خواهد شد. هدف اصلی این تابع کمک به کاربر برای ثابت نگه داشتن مدل می‌باشد. پیش فرض ۰/۹ (یا ۹۰٪) گام زمانی بهینه است.

**حداکثر گام زمانی** - این بخش، حداکثر گام زمانی که استفاده خواهد شد را مشخص می‌کند. اگر در بهینه‌سازی، گام زمانی یک گام زمانی بزرگ‌تر از این مقدار را محاسبه کند، از تابع حداکثر گام زمانی استفاده خواهد شد. این امر می‌تواند در محدود کردن گام زمانی برای محاسبات روزانه یا روز مهم باشد.



**حداقل گام زمانی** - این بخش، حداقل گام زمانی که استفاده خواهد شد، را مشخص می‌کند. حداقل گام زمانی پیش‌فرض در این مدل به صورت ۰/۰۰۰۱ روز تعریف می‌شود. از این دیالوگ باکس برای بالابردن حداقل گام زمانی استفاده می‌شود.

### ۱۳-۵-۲- صفحه‌نمایش بخش‌ها

در صفحه‌نمایش بخش‌ها، کاربر باید یک ردیف برای هر بخش در شبکه‌ی مدل وارد کند (به‌عنوان مثال، با فشاردادن "Insert"، با فشاردادن فلش پایین‌آمده از ردیف پایین و یا با کپی کردن از صفحه گسترده). ارائه نوع بخش، جهت‌گیری و گزینه‌ی انتقال برای استفاده در بخش از ویژگی‌های این بخش می‌باشد.

### ۱۳-۵-۲-۱- نام بخش

کاربر باید یک نام منحصر به فرد برای هر بخش تعیین کند. این نام بخش‌ها برای شناسایی بخش در پس‌پردازنده استفاده می‌شود. اگر کاربر می‌خواهد توصیف‌ها/ نام‌های بخش که شامل فضا هستند، را جای‌گذاری کند، توصیف بخش باید در نقل قول‌ها قرار گیرد (یعنی "I 20 Bridge").

### ۱۳-۵-۲-۲- نوع بخش

نوع بخش با استفاده از یک لیست انتخاب وارد می‌شود. چهار نوع بخش موجود است: "سطحی، زیرسطحی، بنتیک سطحی و بنتیک زیر سطح. نوع بخش پیش‌فرض، سطحی می‌باشد که بخش‌های ستون آب بالایی را در تماس با جو نشان می‌دهد. "سطح زیرین" بخش‌های ستون آب زیرین را نشان می‌دهد. "بنتیک سطحی" نشان‌دهنده بخش‌های رسوب بنتیک بالایی در تماس با ستون آب است. "بنتیک زیرسطحی" نشان‌دهنده بخش‌های زیرین بنتیک است.

### ۱۳-۵-۲-۳- بخش پایین

بخش پایینی بلافاصله زیربخش فعلی قرار می‌گیرد. بخش پایینی با تایپ کردن در شماره‌ی بخش یا با استفاده از یک فهرست انتخاب وارد می‌شود. اگر هیچ بخشی در زیربخش فعلی نباشد، بخش پایینی "none" نام‌گذاری می‌شود.

### ۱۳-۵-۳- حالت انتقال

در حال حاضر شش گزینه‌ی جریان سطحی برای WASP وجود دارد. کاربر توانایی انتخاب حالت‌های مختلف انتقال را دارد. تنها محدودیت در هنگام استفاده از فایل پیوند هیدرودینامیکی تنها محدودیت این

است که فقط دو گزینه‌ی اول را می‌توان به کار برد، که به چگونگی تبادل جرم میان بخش‌های مجاور در هر دو جهت در طول یک فصل مشترک می‌پردازد. سه گزینه‌ی جریان موجود برای جریان آب سطحی عبارتند از:

۱. مسیر یابی جریان WASP: این گزینه، انتقال خالص از طریق یک رابط بخش با جریان مخالف را محاسبه خواهد کرد. WASP جریان‌ها را خالص خواهد کرد و جرم را از بخشی که دارای خروجی با جریان بالاتر می‌باشد، حرکت خواهد داد. اگر جریان‌های مخالف برابر باشند، هیچ جرمی حرکت نمی‌کند.
۲. جریان یابی: این گزینه مربوط به حرکت جرم و آب بدون توجه به جریان خالص می‌باشد.
۳. موج جنبشی: این گزینه برای جریان‌های یک‌بعدی یا رودخانه‌ها یک گزینه‌ی ساده، اما واقعی برای هدایت انتقال دوگانه می‌باشد. معادله‌ی موج جنبشی انتشار موج جریان، تغییرات حاصل در جریان‌ها، حجم‌ها، عمق‌ها و سرعت‌ها را در سراسر شبکه‌ی جریان محاسبه می‌کند.
۴. جریان دینامیک: این گزینه برای جریان یک‌بعدی که توسط شیب آب سطحی کنترل می‌شود کاربرد داشته و همچنین قابلیت محاسبه‌ی جریان آب برگشتی را نیز دارد.
۵. سرریز حوضچه: از این گزینه برای جریان یک‌بعدی که در آن سطح آب صاف بوده و توسط ارتفاع سرریز کنترل می‌شود، استفاده می‌گردد.
۶. پیوند هیدرودینامیک: از این گزینه برای جریان چندبعدی که در آن تمام اطلاعات انتقال از طریق یک مدل هیدرودینامیک ارائه شده‌است، استفاده می‌شود. این گزینه از رابط برنامه‌ی کاربردی هیدرودینامیک (API) استفاده می‌کند که در ضمیمه ۳ توضیح داده شده‌است (API فایل پیوند هیدرودینامیکی است).



شکل ۱۳-۶ صفحه‌نمایش تعریف بخش

### ۱۳-۵-۴- هندسه‌ی کانال

هندسه‌ی کانال بسته به گزینه‌ی انتقال انتخاب‌شده برای یک بخش مشخص، صفحه‌نمایش ورود داده، ستون‌هایی را که در آن‌ها داده‌ای موردنیاز نیست، برجسته می‌کند. کاربر باید اطلاعاتی را برای ستون‌های بدون سایه فراهم کند. حجم بخش (مترمکعب) باید در هنگام استفاده از مسیریابی جریان و جریان مشخص شود. اطلاعات هندسی کانال در شرایط جریان، متوسط فرض شده‌است و بیش‌تر این اطلاعات هندسی را می‌توان از Dataset هیدروگرافی ملی (NHDPlus) به‌دست آورد. اگر یک حجم بخش وارد نشود (یا صفر باشد)، آن‌گاه WASP آن حجم را از طریق طول، عرض و عمق بخش مشخص محاسبه خواهد نمود.

برای گزینه‌ی موج‌جنبشی شبکه‌ی یک‌بعدی، حجم ورودی تنها برای بخش‌های بتتیک استفاده می‌شود. WASP حجم‌های اولیه‌ی ستون آب را از طریق طول، عرض و عمق تحت شرایط جریان اولیه محاسبه می‌کند.

هنگام استفاده از گزینه‌ی جریان اتصال هیدرودینامیکی، حجم ستون آب اولیه از فایل هیدرودینامیک خارجی خوانده می‌شود. تنها حجم بخش‌های بتتیک باید وارد شود.

Segment Name	Volume	Length	Width	Bottom Elevation	Slope	Maximum Depth	Right bank	Initial Depth	Total Surface Distance	Depth Multiplier	Depth Exponent	Initial Velocity
Bank_Rev1	1389.5	3022	6.76		0.0003	0.002	0			2.24	0	0
UPCSPH40	1209.9	3022	6.76		0.0003	0.002	0			2.24	0	0
Bank_Rev2	2079.2	2485	6.48		0.0007	0.004	0			2.22	0	0
UPCSPH40	2079.2	2485	6.48		0.0007	0.004	0			2.22	0	0
Bank_Rev3	1332.8	3412	4.72		0.0002	0.002	0			2.27	0	0
UPCSPH40	1332.8	3412	4.72		0.0002	0.002	0			2.27	0	0
Bank_Rev4	1279.2	2747	4.7		0.0004	0.002	0			2.32	0	0
UPCSPH40	1279.2	2747	4.7		0.0004	0.002	0			2.32	0	0
Bank_Rev5	1928.4	2284	4.44		0.0006	0.002	0			2.24	0	0
UPCSPH40	1928.4	2284	4.44		0.0006	0.002	0			2.24	0	0
Bank_Rev6	163.87	864	3.82		0.0005	0.002	0			1.87	0	0
UPCSPH40	163.87	864	3.82		0.0005	0.002	0			1.87	0	0
Bank_Rev7	165.87	963	3.85		0.0004	0.002	0			1.87	0	0
UPCSPH40	165.87	963	3.85		0.0004	0.002	0			1.87	0	0
Bank_Rev8	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev9	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev10	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev11	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev12	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev13	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev14	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev15	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev16	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev17	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev18	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev19	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
Bank_Rev20	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0
UPCSPH40	165.87	1249	3.28		0.0026	0.002	0			1.85	0	0

شکل ۱۳-۷ صفحه‌نمایش تعریف بخش WASP

**۱۳-۵-۴-۱-حجم**

حجم بخش (مترمکعب) موردنیاز برای گزینه‌ی جریان و جریان‌یابی برای تمام گزینه‌های دیگر محاسبه خواهد شد.

**۱۳-۵-۴-۲-طول**

طول مقطع (متر)؛ طول کف در امتداد مرکز خط جریان از انتهای بالادست تا انتهای پایین‌دست بخش می‌باشد.

**۱۳-۵-۴-۳-عرض**

عرض بخش (متر)؛ عرض بالایی میانگین در طول بخش است. اگر هیچ حجم ورودی مشخص نباشد، عرض همراه با طول و عمق (ضریب) برای محاسبه‌ی حجم اولیه استفاده می‌شود. برای گزینه‌ی موج‌جنشی شبکه‌ی یک‌بعدی، عرض باید برای شرایط جریان متوسط مشخص شود. عرض متوسط همراه با عمق متوسط، نماهای عمق، شیب و ضرایب زبری برای محاسبه‌ی یک مجموعه‌ی ثابت از ضرایب هیدرولیکی استفاده می‌شود.

**۱۳-۵-۴-۴- ارتفاع**

مقادیر ارتفاعی پایین نشان‌دهنده‌ی فاصله عمودی از کف بخش (میانگین مقطعی) تا کف بخش کنترل پایین دست می‌باشد که هم شامل سرریز و هم مرز می‌باشد.

**۱۳-۵-۴-۵- شیب**

شیب بخش (متر/متر) افت ارتفاع تقسیم‌بر طول متوسط در طول بخش می‌باشد. شیب بخش معمولاً از اختلاف ارتفاع رو به بالا و ارتفاع رو به پایین تقسیم‌بر طول بخش محاسبه می‌شود. شیب تنها در گزینه‌ی موج جنبشی شبکه‌ی یک‌بعدی استفاده می‌شود.

**۱۳-۵-۴-۶- حداقل عمق**

حداقل عمق (متر)، متوسط عمق قطعه تحت شرایط جریان صفر می‌باشد که تنها در گزینه‌ی موج جنبشی شبکه‌ی یک‌بعدی استفاده می‌گردد. اگر این سلول خالی باقی بماند، حداقل عمق پیش‌فرض ۰/۰۱ متر به صورت داخلی اختصاص داده می‌شود. عمق کل برابر عمق هیدرولیکی به علاوه‌ی حداقل عمق می‌باشد.

**۱۳-۵-۴-۷- زبری بخش**

زبری بخش همان ضریب زبری مانینگ می‌باشد. سرعت در گزینه‌ی موج جنبشی شبکه‌ی یک‌بعدی برای جریان موج جنبشی و بخش‌های جریان پویا استفاده می‌شود. ضرایب سختی معمولاً باید بین ۰/۰۱ تا ۰/۱۵ باشند. اگر ضریب صفر ورودی یک بخش آزاد باشد، WASP ضریب را به ۰/۰۵ باز می‌گرداند و پیامی را به صفحه‌نمایش می‌دهد.

**۱۳-۵-۴-۸- عمق اولیه**

عمق اولیه (متر) محدوده‌ی مورد مطالعه را در شرایطی که جریان میانگین از آن گذر می‌کند، نشان می‌دهد.

**۱۳-۵-۴-۹- ارتفاع اولیه سطح**

ارتفاع اولیه سطح بخش برای موج دینامیک را نشان می‌دهد. عمق اولیه و شیب سطح از بالا آمدن سطح پایین و بالا آمدن سطح اولیه محاسبه می‌شود.

### ۱۳-۵-۴-۱۰- عمق (ضریب و توان)

ضرایب هیدرولیکی عمق ( $m/(m^2\text{-sec})$ ) و توان‌ها باید در هنگام استفاده از جریان خالص، جریان ناخالص یا گزینه‌های موج‌جنبشی مشخص شوند. ضرایب‌های عمق برای همه بخش‌ها مورد نیاز هستند. برای بخش‌های کفزی، ضرایب عمق بخش (متر) تفسیر می‌شوند.

در گزینه‌های جریان خالص و جریان ناخالص برای محاسبه‌ی عمق بخش اولیه از ضرایب عمق و توان همراه با جریان‌های بخش اولیه استفاده می‌شود. اگر ضریب عمق در صفر باقی بماند، به‌طور داخلی به یک باز می‌گردد و پیامی به صفحه‌نمایش داده می‌شود. اگر نمای عمق در صفر باقی بماند، ضریب عمق برابر با عمق اولیه‌ی بخش (متر) خواهد بود. در طول شبیه‌سازی‌ها با استفاده از گزینه‌های جریان توصیفی، تغییر جریان‌ها به‌طور مستقیم عمق بخش را تغییر نمی‌دهد، حتی اگر توان هیدرولیکی غیر صفر باشد. عمق‌ها همراه با حجم‌ها براساس تداوم جریان دوباره محاسبه می‌شوند. اگر یک ضریب تداوم جریان خروجی بخش برابر با ضریب تداوم جریان باشد، تغییر جریان نمی‌تواند حجم یا عمق آن بخش را تغییر دهد. برای بخش‌های با جریان آزاد در گزینه‌ی موج‌جنبشی شبکه‌ی یک‌بعدی، ضریب عمق به‌عنوان عمق مقطع متوسط قطعه، تحت شرایط جریان متوسط در نظر گرفته می‌شود. توان عمق یک مقدار بین  $0/3$  و  $0/6$  می‌باشد و اگر توان عمق بخش در صفر باقی می‌ماند، سطح مقطع مستطیلی فرض شده و توان به‌طور داخلی به مقدار  $0/6$  تنظیم می‌شود. برای محاسبه‌ی ضرایب ثابت هیدرولیکی از میانگین عمق، توان عمق، عرض، شیب و عوامل زبری استفاده می‌گردد. در طول شبیه‌سازی‌ها، تغییر دادن جریان‌ها به‌طور مستقیم عمق هیدرولیکی را براساس ضرایب هیدرولیکی تغییر می‌دهد. عمق کل بخش برابر با عمق هیدرولیکی به‌علاوه عمق حداقل جریان ورودی صفر است.

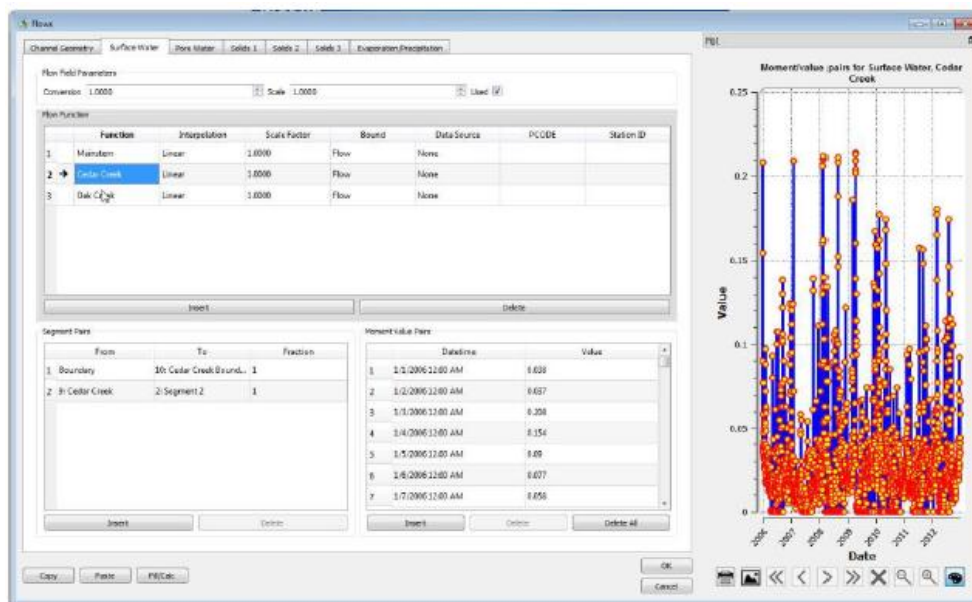
### ۱۳-۵-۴-۱۱- سرعت (ضریب و توان)

ضرایب هیدرولیک سرعت  $[(m/sec)/m^3/sec]$  و توان‌ها، تنها زمانی باید مشخص شوند که از گزینه‌های جریان خالص یا جریان ناخالص استفاده شود. برای گزینه‌ی موج‌جنبشی، ضرایب سرعت و توان به‌طور داخلی از ضرایب عمق ورودی و توان و عرض ورودی محاسبه می‌شوند. در هنگام استفاده از این گزینه هر ضریب سرعت ورودی نادیده گرفته خواهد شد.

### ۱۳-۵-۵- صفحه‌نمایش جریان

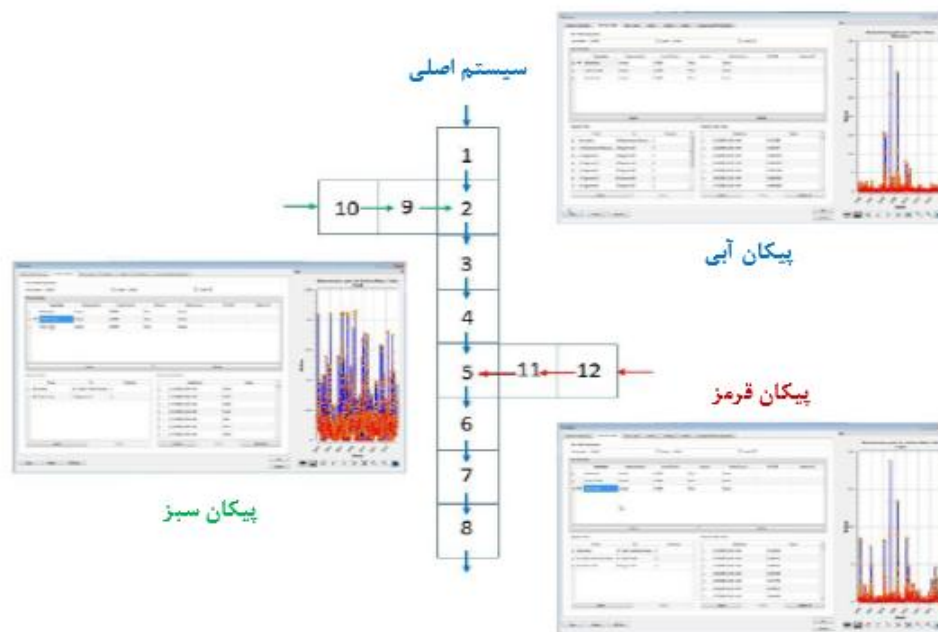
صفحه‌نمایش جریان برای تعریف انتقال همرفتی شامل آب‌سطحی، جریان آب منفذی، ته‌نشینی و تعلیق جامدات، بارش و فراریت می‌باشد. همچنین از صفحه‌نمایش برای تعریف ارتفاع مرز پایین دست و شبکه‌های کانال دوبعدی برای گزینه‌ی جریان پویا، استفاده می‌شود.

صفحه‌ی ورودی جریان یک صفحه‌نمایش پیچیده است که شامل چهار جدول می‌باشد (شکل ۱۳-۸). گوشه‌ی سمت چپ بالا برای انتخاب مجموعه‌ی داده‌های انتقال مانند "سطح آب" استفاده می‌شود. گوشه‌ی سمت راست بالایی برای تعریف مجموعه‌ای از توابع انتقال، از جمله جریان رو به بالا و جریان‌های فرعی، برای هر حوزه‌ی انتقال انتخابی مورد استفاده قرار می‌گیرد. برای هر تابع انتقال، از دو گوشه‌ی پایینی برای تعریف مسیر جریان و تابع زمان جریان استفاده می‌شود.



شکل ۱۳-۸ صفحه‌نمایش جریان‌ها

برای انتقال آب سطحی و آب منفذی، جریان رو به بالا، هر جریان فرعی، جریان آب منفذی و هر نوع عقب‌نشینی جریان باید بر اساس توابع مسیر پیوسته و توابع زمان جریان ورودی توصیف شوند. یک مثال در شکل (۱۳-۹) نشان داده شده است.



شکل ۱۳-۹ مثال ورودی جریان WASP

### ۱۳-۵-۵-۱- میدان جریان

در شرایطی که شش میدان انتقال در دسترس می‌باشد، میدان انتقال باید انتخاب شود.

۱. آب سطحی: این میدان انتقال برای توصیف جریان‌های آب سطحی استفاده می‌شود. این جریان‌ها هم ذرات و هم اجزاء حل‌شده‌ی سازنده را انتقال می‌دهند. اگر کاربر گزینه‌ی اتصال هیدرودینامیک را انتخاب کرده‌باشد، قادر به وارد کردن اطلاعات در این‌جا نخواهد بود.
۲. آب منفذی: این میدان انتقال برای توصیف جریان‌های آب منفذی مورد استفاده قرار می‌گیرد. این جریان تنها بخش حل‌شده از یک جزء تشکیل‌دهنده را حمل می‌کند.
۳. جامد ۱: این میدان انتقال برای توصیف ته‌نشینی و تعلیق مواد جامد نوع ۱ استفاده می‌شود. این جریان‌ها تنها کسری از ذرات بخش را انتقال می‌دهند که در صفحه‌نمایش سیستم‌ها، جامد نوع ۱ نگاشته شده‌است.



۴. جامد ۲: این میدان انتقال برای توصیف ته‌نشینی و تعلیق مواد جامد نوع ۲ استفاده می‌شود. این جریان‌ها تنها کسری از ذرات بخش را انتقال می‌دهند که در صفحه‌نمایش سیستم‌ها، جامد نوع ۲ نگاشت می‌شود.

۵. جامد ۳: این میدان انتقال برای ته‌نشینی، تعلیق و توصیف مواد جامد نوع ۳ استفاده می‌شود. این جریان‌ها تنها کسری از ذرات بخش را انتقال می‌دهند که در صفحه‌نمایش سیستم‌ها، جامد نوع ۳ نگاشت می‌شود.

۶. تبخیر/بارش: این میدان انتقال آب را از شبکه‌ی مدل کم/اضافه می‌کند. در این میدان هیچ جرم واحدی اضافه، حذف یا منتقل نمی‌شود.

**فاکتور مقیاس:** فاکتور مقیاس برای یک میدان انتقال، تمام جریان‌های مرتبط با آن میدان را با مقدار ورودی ضرب می‌کند. این فاکتور به‌طور کلی برای اندازه‌گیری جریان در تست‌های حساسیت به‌کار می‌رود. مقدار پیش‌فرض ۱/۰ می‌باشد.

**فاکتور تبدیل -** فاکتور تبدیل برای یک میدان انتقال تمام جریان‌های مرتبط با آن میدان را با مقدار ورودی ضرب می‌کند. این فاکتور به‌طور کلی برای تنظیم واحدهای جریان ورودی به واحدهای داخلی (مترمکعب بر ثانیه) استفاده می‌شود. اگر جریان‌ها بر حسب  $\text{ft}^3/\text{sec}$  (فوت‌مکعب بر ثانیه) مشخص شوند فاکتور تبدیل برابر  $0.02832$  باشد. مقدار پیش‌فرض ۱/۰ است.

### ۱۳-۵-۲- تابع جریان

کاربر می‌تواند چندین تابع جریان را برای میدان انتقال انتخاب‌شده تعریف کند. هر تابع جریان باید تابع مسیر جریان خود (جدول سمت چپ پایین) و تابع زمان جریان (جدول سمت راست پایین) را داشته باشد. به‌طور معمول یک تابع جریان؛ یک جریان ورودی گسسته مانند جریان رو به بالا، جریان شاخه‌های فرعی و یا جریان آب منفذی را تعریف می‌کند. توابع جریان ویژه نیز در ارتباط با گزینه‌ی جریان پویا، برای تعریف ارتفاعات مرز پایین‌دست یا شبکه‌های کانال دوبعدی (x-y) استفاده می‌شوند.

برای قرار دادن یک تابع جریان، ابتدا میدان جریان آب‌سطحی را در جدول بالایی سمت چپ مشخص کنید، سپس مکان‌نما را به گوشه بالایی سمت راست حرکت داده و بر روی دکمه‌ی "insert" کلیک کنید. در این مرحله سلول تابع جریان حاصل با عنوان "Flow Function"، می‌تواند ویرایش شود تا یک نام توصیفی ارائه دهد.

برای وارد کردن توابع جریان اضافی، روی "insert" کلیک کرده یا آخرین تابع جریان را مشخص کرده و فلش پایین‌آمده را فشار دهید. برای حذف یک تابع جریان، تابع را با مشخص نمودن ردیف، انتخاب کرده

و روی دکمه حذف کلیک کنید. حذف یک تابع جریان، تابع مسیر جریان مربوطه (جدول سمت چپ پایین) و تابع زمان جریان (جدول سمت راست پایین) را حذف خواهد کرد.

**نام تابع:** هنگامی که یک تابع جریان وارد می‌شود، نام پیش‌فرض "Flow Function" داده می‌شود. سلول عملکرد می‌تواند ویرایش شود تا بتواند نام توصیفی مانند "جریان بالادست"، "جریان شاخه‌ای" ارتفاع پایین دست" یا "شبکه‌ی کانال" ارائه دهد.

**گزینه‌ی درون‌یابی:** گزینه‌ی درون‌یابی پیش‌فرض برای تابع زمان جریان مرتبط با یک تابع جریان "خطی" است. برای تغییر گزینه‌ها، در سلول Interpolation کلیک کنید، فلش پایین آمده را فشار دهید و گزینه‌ی درون‌یابی برای این تابع جریان را انتخاب کنید.

**گزینه‌ی مرز:** نوع مرز پیش‌فرض برای تابع زمان، جریان می‌باشد. هم‌چنین کاربر می‌تواند ارتفاع سطح آب مورد استفاده در گزینه‌ی انتقال موج دینامیک را مشخص کند. کاربر هم‌چنین می‌تواند یک مرز جریان داخلی را که آب بین بخش‌های تعریف شده بدون استفاده از گزینه‌ی انتقال در آن جابجا می‌شود، مشخص کند. هنگامی که یک تابع جریان انتخاب و نام‌گذاری شد، کاربر باید تابع مسیر جریان مرتبط و تابع زمان جریان را تعریف کند. مطمئن شوید که میدان جریان صحیح و تابع جریان قبل از ورود به صفحات بعدی مشخص شده‌اند.

### ۱۳-۵-۳- تابع مسیر جریان

تابع مسیر جریان، جریان را از نقطه‌ی ورود به شبکه‌ی مدل به نقطه‌ی خروج از شبکه‌ی مدل یا به یک مسیر جایگزین مرتبط با تابع جریان دیگر، ردیابی می‌کند. مسیر جریان متشکل از مجموعه‌ای از ردیف‌ها و متناظر با فصل مشترک بخش است. هر ردیف دارای مجموعه‌ای از جفت‌های قطعه و کسری از ضرب‌کننده‌ی جریان خواهد بود.

**بخش جفت:** شامل یک بخش "از" و یک بخش "به" می‌باشد و جهت جریان را در طول فصل مشترک بخش تعریف می‌کند. به‌طور معمول، ردیف اول جریان ورودی از "مرز" به بخش بالادست را تعریف می‌کند و ردیف آخر جریان خروجی از بخش پایین دست به "مرز" را تعریف می‌کند.

مقادیر مثبت جریان آب و جرم تشکیل دهنده در جهت بخش اول تا بخش دوم منتقل می‌شوند. جریان‌های منفی آب و جرم تشکیل دهنده از بخش دوم به بخش اول منتقل می‌شوند؛ به‌عنوان مثال، اگر "از" بخش ۱ و "به" بخش ۲ باشد، آن‌گاه مقادیر منفی جریان در تابع زمانی باعث انتقال از ۲ به ۱ خواهد شد. باید توجه داشت که گزینه‌ی موج‌جنبشی بررسی می‌شود تا اطمینان حاصل شود که تمام مسیرهای

جریان در نهایت به جریان‌های خروجی متصل شده‌اند. پیش‌پردازنده و مدل نمی‌توانند تضمین کنند که بخش‌ها به درستی متصل شده‌اند، مسئولیت بررسی اتصال بر عهده‌ی کاربر می‌باشد.

**تابع جریان:** بخش ستون جریان تعیین می‌کند که چه مقداری از جریان کل در این مسیر بین این جفت‌بخش حرکت می‌کند. برای جریان آب‌سطحی، مقدار جریان به‌طور معمول ۱/۰ بوده و به کاربر اجازه می‌دهد تا جریان را از یک بخش به دو یا چند جهت پایین‌دست تقسیم کند. این امر می‌تواند برای تعریف جریان‌های واگرا و هم‌گرا استفاده شود، اما باید به‌دقت مورداستفاده قرار گیرد. مجموع تمام بخش‌های وارد شده به هر بخش باید به‌طور معمول برابر با مجموع تمام بخش‌های باقی‌مانده باشد. اگر مجموع بزرگ‌تر از ۱/۰ باشد، حجم آن بخش به‌طور مداوم افزایش خواهد یافت. اگر مجموع کم‌تر از ۱ باشد، حجم آن قطعه به‌طور مستمر کاهش خواهد یافت، اگر حجم به صفر برسد، شبیه‌سازی به پایان خواهد رسید.

**تبصره‌ی ارتفاع مرزی پایین‌دست:** اگر یک تابع ارتفاع مرز پایین‌دست برای یک شبکه‌ی جریان دینامیک تعریف شود، آن‌گاه مسیر جریان باید شامل یک جفت بخش منفرد از "مرز" به عدد بخش پایین‌دست باشد. مقدار جریان باید روی صفر تنظیم شود.

**تبصره برای شبکه‌ی کانال:** اگر یک شبکه‌ی کانال دوبعدی برای گزینه‌ی جریان پویا تعریف شود، آن‌گاه شبکه کانال باید توسط یک یا چند تابع جریان خاص تعریف شود. در یک تابع جریان شبکه‌ی کانال، هر جفت قطعه یک کانال جریان منحصربه‌فرد را تعریف می‌کند. مقدار ضرایب جریان باید روی صفر تنظیم شوند. طول و عرض کانال در قسمت‌های مقطعی برای هر جفت بخش از صفحه‌نمایش تغییرات (بخش ۴-۵) خوانده می‌شود. شعاع هیدرولیکی کانال به‌طور داخلی میانگین عمق بخش بالادست و پایین‌دست محاسبه می‌شود. عرض کانال نیز به‌طور داخلی به‌صورت تقسیم سطح مقطع بر شعاع هیدرولیکی محاسبه می‌شود. شبکه‌ی کانال نباید هیچ مرزی را شامل شود. در واقع کانال‌ها دو بخش را در شبکه مدل متصل می‌کنند. WASP با نبود مرزها و ضریب مسیر جریان صفر، شبکه‌های کانال را از مسیرهای سنتی جریان متمایز می‌کند. عملکرد زمان جریان در ارتباط با یک شبکه‌ی کانال استفاده نمی‌شود، و مقادیر جریان را می‌توان در صفر باقی گذاشت.

### ۱۳-۵-۶- تابع زمان جریان

تابع زمان جریان جدولی است که شامل تاریخ‌ها، زمان‌ها و مقادیر ورودی (مترمکعب بر ثانیه) می‌باشد. هر ردیف در جدول نشان‌دهنده‌ی یک نقطه در زمان است. در طول یک شبیه‌سازی، جریان‌های ورودی بین این نقاط براساس گزینه‌ی درون‌یابی تابع جریان انتخاب شده، درون‌یابی می‌شوند (به بخش ۲-۵-۵-۱۳ مراجعه کنید). باید حداقل دو ردیف در تابع زمان جریان وارد شود تا امکان درون‌یابی فراهم شود.

**تاریخ:** مانند دیگر توابع زمانی WASP، تاریخ باید با فرم (year/mm/dd) وارد شود (به‌عنوان مثال، ۲۰۰۴/۰۱/۰۱). اولین تاریخ در تابع زمان باید مطابق با تاریخ شروع مشخص شده در صفحه‌نمایش مجموعه‌داده (بخش ۲-۱-۵-۱۳) باشد. آخرین تاریخ در تابع زمان نیز به‌طور معمول با تاریخ پایان متناظر خواهد بود.

**زمان:** زمان باید به‌صورت hh:mm وارد شود (به‌عنوان مثال، ۱۴:۳۰).

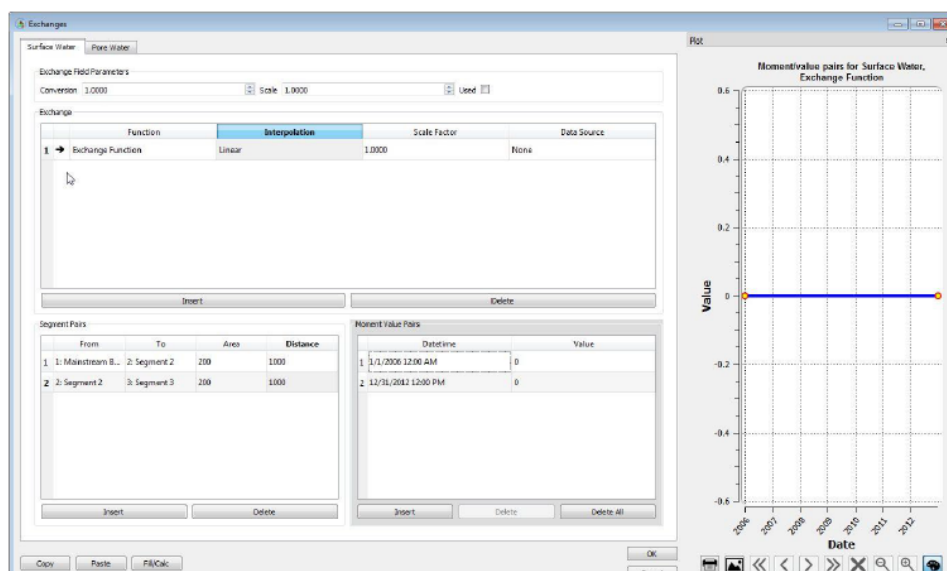
**مقدار:** مقدار ورودی برای تاریخ و زمان در واحدهای (مترمکعب برثانیه) مشخص شده‌است. واحدهای مختلف را می‌توان در صورتی مورد استفاده قرارداد که ضریب تبدیل با میدان جریان (بخش ۱-۵-۱۳) ارائه شود. توجه داشته‌باشید که اگر یک تابع ارتفاع مرزی رو به پایین تعریف شود، آن‌گاه مقدار وارد شده، ارتفاع سطح (متر) خواهد بود.

جدول تابع زمان به کاربر اجازه می‌دهد تا اطلاعات جریان متغیر زمانی را وارد کند. برای جریان‌های ثابت، دو ردیف باید با زمان شروع و پایان شبیه‌سازی و مقدار جریان ثابت مشخص شوند. کاربر می‌تواند اطلاعات را از یک صفحه‌گسترده و یا از پایگاه‌داده/صفحه‌گسترده جستجو کرده و به صورت دستی وارد کند.

### ۱۳-۵-۶- صفحه‌نمایش تبادل

صفحه‌نمایش تبادل برای تعریف انتقال پراکنده استفاده می‌شود که شامل آب‌سطحی و اختلاط آب منفذی می‌باشد. همچنین صفحه‌نمایش تغییرات برای تعریف طول کانال‌ها و سطح‌مقطع اولیه برای شبکه‌های کانال مورد استفاده قرار می‌گیرد.

این صفحه‌ی ورودی یک صفحه‌ی مختلط بوده که شامل چهار جدول می‌باشد (شکل ۱۳-۱۰). گوشه‌ی سمت چپ بالا برای انتخاب مجموعه‌ی داده‌های انتقال مانند جریان "آب سطحی" استفاده می‌شود. گوشه‌ی سمت راست بالا برای تعریف مجموعه‌ای از توابع انتقال، شامل توابع پراکندگی طولی و جانبی که داده‌ها را برای هر شبکه‌ی کانالی که در توابع جریان تعریف شده‌است، استفاده می‌شود (بخش ۳-۵-۱۳). برای هر تبادل برای تعیین مسیر تبدیل و تابع زمان مبادله از دو گوشه‌ی پایینی استفاده شده‌است.



شکل ۱۳-۱۰ صفحه نمایش تغییرات

### ۱۳-۵-۶-۱- میدان تبادل

دو میدان تبادل در دسترس می باشد که باید انتخاب شود.

۱. آب سطحی: این میدان انتقال برای توصیف اختلاط آب سطحی استفاده می شود. این جریان های آشفته هم ذرات و هم اجزا حل شده ی یک سازنده را انتقال می دهند. آب حفره ای این میدان انتقال برای توصیف اختلاط آب منفذی به کار می رود. این جریان ها تنها بخش حل شده ی سازنده را انتقال می دهند.

**فاکتور مقیاس:** فاکتور مقیاس تمام تبدلات مرتبط با یک میدان انتقال را در مقدار ورودی ضرب می کند. این پارامتر به طور کلی برای اندازه گیری تبادل در تست های حساسیت به کار رفته و مقدار پیش فرض ۱/۰ است.

**فاکتور تبدیل -** فاکتور تبدیل تمام تبدلات مرتبط با یک میدان انتقال را در مقدار ورودی ضرب می کند. این پارامتر به طور کلی برای تنظیم ضریب پراکندگی ورودی واحدهای داخلی (مترمربع برثانیه) استفاده می شود. اگر ضرایب پراکندگی بر حسب سانتی متر مکعب برثانیه مشخص شوند، ضریب تبدیل باید برابر با ۰/۰۰۰۱ باشد. مقدار پیش فرض برای این پارامتر ۱ می باشد.

### ۱۳-۵-۶-۲- تابع تبادل

کاربر می‌تواند چندین تابع تبادل را برای حوزه‌ی انتقال انتخاب‌شده، تعریف کند. هر تابع تبادل باید تابع مسیر تبادل خود (جدول سمت چپ پایین‌تر) و تابع زمان پراکندگی (جدول سمت راست پایین‌تر) را داشته باشد. به‌طور معمول تابع تبادل، نوعی تبادل مانند پراکندگی جانبی، طولی و یا تبادل آب و منافذ سطحی را تعریف می‌کند. توابع تبادل نیز همراه با گزینه‌ی جریان پویا استفاده می‌شوند. طول کانال و سطح مقطع اولیه برای شبکه‌های دوبعدی (x-y) تعریف می‌شود.

برای وارد کردن یک تابع تبادل، ابتدا میدان آب‌سطحی را در جدول بالایی سمت چپ مشخص کنید سپس مکان‌نما را به گوشه بالایی سمت راست حرکت داده و بر روی دکمه "insert" کلیک کنید. سلول تابع جریان حاصل با برچسب "Function Exchange"، می‌تواند ویرایش شود تا یک نام توصیفی ارائه دهد.

برای وارد کردن توابع تبادل اضافی، یا روی "insert" کلیک کنید یا آخرین تابع جریان را برجسته کرده و فلش پایین‌آمده را فشار دهید. برای حذف یک تابع تبادل، تابع را با برجسته کردن ردیف انتخاب کرده و روی دکمه حذف کلیک کنید. حذف یک تابع تبادل، تابع مسیر تبادل متناظر (جدول سمت چپ پایین) و تابع زمان قطع (جدول سمت راست پایین) را حذف خواهد کرد.

**نام تابع:** هنگامی که یک تابع تبادل وارد می‌شود، نام پیش‌فرض "Exchange Function" داده می‌شود. می‌توان سلول عملکرد را ویرایش نمود تا نام توصیفی مانند "پراکندگی جانبی"، "پراکندگی طولی"، "تبادل آب منافذ" یا "شبکه کانال" ارائه شود.

**گزینه‌ی درون‌یابی:** گزینه‌ی درون‌یابی پیش‌فرض برای تابع زمان تبادل مرتبط با یک تابع تبادل، "خطی" می‌باشد. برای تغییر گزینه‌ها، روی سلول Interpolation کلیک کنید، فلش پایین‌آمده را فشار دهید، و گزینه‌ی درون‌یابی را برای این تابع تبادل انتخاب کنید.

هنگامی که یک تابع تبادل انتخاب و نام‌گذاری می‌شود، کاربر باید تابع مسیر تبادل مربوطه و تابع زمان تبادل را تعریف کند. مطمئن شوید که میدان تبادل صحیح و عملکرد تبادل قبل از ورود به صفحات بعدی مشخص شده‌اند.

### ۱۳-۵-۶-۳- تابع مسیر

تابع مسیر تبادل مجموعه‌ای از جریان‌های تبادل پراکنده را مشخص می‌کند. این تابع شامل مجموعه‌ای از ردیف‌ها می‌باشد که متناظر با بخش‌های واسط (یا "کانال‌ها" در یک شبکه کانال) هستند. هر ردیف دارای مجموعه‌ای از جفت‌های بخش، مساحت مقطعی و طول ترکیب مشخصه می‌باشد.

**بخش جفت:** هر مسیر تبادل مجزا توسط مجموعه‌ای از دو بخش تعریف می‌شود که جریان تبادل بین آن‌ها رخ می‌دهد. پیش‌پردازنده مدل نمی‌تواند مطمئن‌شوند که بخش‌ها به‌درستی متصل شده‌اند. مسئولیت بررسی اتصال بر عهده‌ی کاربر می‌باشد.

**مناطق مقطعی متقاطع،  $m^2$ :** نواحی مقطع عرضی که برای هر ضریب پراکندگی مشخص شده‌اند، نشان‌دهنده‌ی منطقه‌ای است که اختلاط از طریق آن رخ می‌دهد. این مناطق می‌توانند مناطق سطحی برای تبادل عمودی باشند؛ مثلاً در دریاچه‌ها و یا در کفزیان. لازم به ذکر است نواحی در طول شبیه‌سازی برای بازتاب تغییرات جریان اصلاح نمی‌شوند.

**طول مشخصه، متر:** طول اختلاط یا فاصله که برای هر ضریب پراکندگی مشخص می‌شود، نشان‌دهنده‌ی طول مشخصه‌ای می‌باشد که اختلاط در آن رخ می‌دهد. این طول معمولاً طول بین نقاط مرکزی بخش‌های مجاور هستند. یک بخش ممکن است سه یا چند طول اختلاط برای بخش‌های طولی، جانبی و عمودی مجاور داشته‌باشد. برای بخش‌های بنتیک سطحی که بخش‌های ستون آب را به هم متصل می‌کنند، عمق لایه‌ی بنتیک، طول اختلاط واقع‌گرایانه‌تری نسبت به نصف عمق آب می‌باشد.

**تبصره برای شبکه‌ی جریان:** اگر یک شبکه‌ی کانال دوبعدی برای گزینه‌ی جریان پویا تعریف شود، سپس مناطق مقطعی و طول‌های اختلاط واردشده در این‌جا به کانال‌های مربوطه تعریف‌شده در صفحه‌نمایش مسیر جریان اختصاص داده خواهدشد (بخش ۳-۶-۵-۱۳).

### ۱۳-۵-۶-۴- تابع زمانی تبادل

تابع زمان تبادل جدولی است که شامل تاریخ‌ها، زمان‌ها و مقادیر ضریب پراکندگی (مترمربع بر ثانیه) می‌باشد. هر ردیف در جدول نشان‌دهنده‌ی یک نقطه در زمان است و در طول یک شبیه‌سازی، ضرایب پراکندگی بین این نقاط براساس گزینه‌ی درون‌یابی تابع پراکندگی که انتخاب شده‌است، درون‌یابی می‌شوند (به بخش ۲-۶-۵-۱۳ مراجعه کنید). حداقل دو ردیف باید در تابع زمان جریان واردشود تا امکان درون‌یابی فراهم شود.

**تاریخ:** مانند دیگر توابع زمانی WASP، تاریخ باید به فرمت year/mm/dd وارد شود (به‌عنوان مثال، ۲۰۰۴/۰۱/۰۱). اولین تاریخ در تابع زمان باید مطابق با تاریخ شروع مشخص‌شده در صفحه‌نمایش مجموعه‌داده (بخش ۲-۵-۱۳) باشد. آخرین تاریخ در تابع زمان نیز به‌طور معمول با تاریخ پایان متناظر خواهد بود.

**زمان:** باید به‌صورت hh:mm وارد شود (به‌عنوان مثال، ۱۴:۳۰).

**مقدار:** مقدار ورودی برای این تاریخ و زمان، در واحدهای (مترمربع بر ثانیه) مشخص می‌شود. در صورتی می‌توان از واحدهای مختلف استفاده کرد که ضریب تبدیل با میدان تبادل (بخش ۱-۶-۵-۱۳) ارائه شود. ضرایب اختلاط پراکنده ممکن است نشان‌دهنده‌ی نفوذ آب منفذی در بخش‌های بتیک، نفوذ عمودی در دریاچه‌ها و پراکندگی جانبی و طولی در بدنه‌های بزرگ آب باشد. مقادیر می‌توانند از  $5 \times 10^2$  متر مربع بر ثانیه برای نفوذ مولکولی تا برای اختلاط طولی در برخی خورها متفاوت باشند.

جدول تابع زمان به کاربر اجازه می‌دهد تا اطلاعات تبادل متغیر زمانی را وارد کند. برای تبادلات ثابت، باید دو ردیف با زمان شروع و پایان شبیه‌سازی و مقدار ضریب‌انتشار ثابت مشخص شوند. کاربر می‌تواند اطلاعات را به صورت دستی وارد کرده و یا از یک صفحه گسترده، یا از پایگاه داده/صفحه گسترده جستجو کند.

### ۱۳-۶- منابع

- Ambrose, R. B., J. L. Martin, and T. A. Wool, 2006. Wasp7 Benthic Algae - Model Theory and User's Guide. U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, EPA/600/R-06/106 (NTIS PB2007-100139), 2006.
- Wool T.A., R.B. Ambrose, J.L. Martin, and E.A. Comer, 2001. The Water Quality Analysis Simulation Program, WASP6; Part A: Model Documentation. U.S. Environmental Protection Agency, Center for Exposure Assessment Modeling, Athens, GA.
- Ambrose, R.B., Jr., T.A. Wool, and J.L. Martin, 1993. The Water Quality Analysis Simulation Program, WASP5; Part A: Model Documentation. Internal Report Distributed by USEPA Center for Exposure Assessment Modeling, U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA.
- Ambrose R.B., T.A. Wool, J.P. Connolly, and R.W. Schanz, 1988. WASP4, A Hydrodynamic and Water Quality Model—Model Theory, User's Manual, and Programmer's Guide. EPA/600/3-87-039, U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA.
- Di Toro DM, J.J. Fitzpatrick, and R.V. Thomann, 1983. Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) and Model Verification Program (MVP) - Documentation. Contract No. 68-01-3872, Hydrosience Inc., Westwood, NY, for U.S. EPA, Duluth, MN.
- Chapra, S.C. 1997. Surface Water-Quality Modeling, McGraw-Hill, New York, New York, 844 pp.
- Chapra, S.C. 2003. QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality (Beta Version): Documentation and Users Manual. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA.
- Chapra, S.C. and G.J. Pelletier. 2004. QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality, Version 1.3: Documentation and



- Users Manual. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA.
10. Feigner, K.D. and H.S. Harris, 1970. Documentation Report – FWQA Dynamic Estuary Model. U.S. Department of Interior, Federal Water Quality Administration.
11. Wool, T.A., R.B. Ambrose, and J. L. Martin. 2001. “The Water Analysis Simulation Program, User Documentation for Version 6.0,” Distributed by USEPA Watershed and Water Quality Modeling Technical Support Center, Athens, GA.

### ۱۳-۷- پیوست ۱: استخراج معادلات

#### ۱۳-۷-۱- توان های هیدرولیک برای جریان موج سینماتیک

فرمول مانینگ (معادله ی ۱۹) زمینه ی ایجاد روابط بین توان های هیدرولیک را فراهم می کند. تنظیم مجدد اصطلاحات، سطح مقطعی را به عنوان تابعی از جریان می دهد:

$$A = n^{3/5} S_0^{-3/10} B^{2/5} Q^{3/5} \quad (۱۳-۵۴)$$

عمق متوسط مقطع (شعاع هیدرولیک) توسط رابطه ی زیر:

$$d = \frac{A}{B} = n^{3/5} S_0^{-3/10} B^{2/5} Q^{3/5} \quad (۱۳-۵۵)$$

و سرعت نیز از رابطه ی محاسبه خواهد شد:

$$V = \frac{Q}{A} = n^{3/5} S_0^{-3/10} B^{2/5} Q^{3/5} \quad (۱۳-۵۶)$$

تعویض معادله ی ۱۳-۳ برای عرض به عنوان تابعی از جریان:

$$d = n^{3/5} S_0^{-3/10} b \text{mult}^{2/5} Q^{2/5(1-bexp)} \quad (۱۳-۵۷)$$

$$v = n^{3/5} S_0^{-3/10} b \text{mult}^{2/5} Q^{2/5(1-bexp)} \quad (۱۳-۵۸)$$

معادله های (۱۳-۵۷) و (۱۳-۵۸) هر کدام یک تابع اند که از از توان عرض برای عمق و سرعت ضریب هیدرولیک استفاده می کنند:

$$dxp = 0/6(1 - bexp) \quad v \text{ exp} = 0/4(1 - bexp) \quad (۱۳-۵۹)$$

مقایسه‌ی ضریب جریان تأیید می‌کند که ضریب سرعت  $2/3$  از عمق افقی بوده و معادله‌ی (۹-۱۳) را تأیید می‌کند.

### ۱۳-۸- پیوست ۲: تست‌های تأیید مدل

آزمون‌های تأیید مدل برای اطمینان از درستی اجرای معادلات در کد مدل طراحی شده‌اند. نتایج در پوشه‌های جداگانه در:

▪ QA / WASP7 / انتقال جریان / ۴- جریان موج سینماتیک برای جریان‌ها / آزمایش‌های

تأیید شده در زیر آورده شده‌است. نتایج به تفصیل در یک سند همراه موجود می‌باشد.

#### ۱۳-۸-۱- تست‌های موج سینماتیک

##### ۱۳-۸-۱-۱- تست ۱ انتقال جریان آب

این مجموعه با استفاده از ماژول گرما با شیب کم عمق و تغییرات گام‌به‌گام در جریان، روند جریان موج سینماتیک را در WASP تست می‌کند. نتایج برای هر مرحله از جریان با محاسبات تحلیلی محاسبه شده در یک صفحه‌ی گسترده مقایسه می‌شود.

▪ تست 2a- مقطع مستطیلی

▪ تست 2b- سطح مقطع U

▪ تست 2c- سطح مقطع V

##### ۱۳-۸-۱-۲- تست ۲ انتقال جریان

این مجموعه با استفاده از ماژول گرما با شیب کم عمق و تغییرات گام‌به‌گام در جریان، روند جریان موج سینماتیک را در WASP تست می‌کند. نتایج برای هر مرحله از جریان با محاسبات تحلیلی محاسبه شده در یک صفحه‌ی گسترده مقایسه می‌شود.

▪ تست 2a- مقطع مستطیلی

▪ تست 2b- سطح مقطع U

▪ تست 2c- سطح مقطع V

##### ۱۳-۸-۱-۳- تست ۳ انتقال جریان

این مجموعه با استفاده از ماژول تغذیه‌گرایی با شیب کم عمق، سطح مقطع U شکل، تغییرات مرحله در جریان بالادست و ورود یا خروج در بخش ۳، روند حرکت جریان موج در WASP را تست می‌کند.

♦ تست 3a- ثابت جریان داخلی شاخه‌ای

♦ تست 3b- ثابت جریان برگشتی

**۱۳-۸-۱-۴- تست ۴ انتقال جریان**

این مجموعه با استفاده از ماژول با یک سیستم جریان انشعاب، روند جریان موج سینماتیک را در WASP تست می‌کند. یک جریان متوسط با شیب متوسط به یک شاخه‌ی کوچک با شیب کم عمق متصل است.

▪ تست 4a- گام جریان داخلی

▪ تست 4b- درازمدت، متغیر جریان داخلی

تست 4a تغییرات مرحله در جریان‌های بالادست و شاخه‌های داخلی را مشخص می‌کند. نتایج برای هر مرحله از جریان به صورت گرافیکی و راه‌حل‌های تحلیلی از یک صفحه گسترده مقایسه می‌شود. تست 4b از جریان‌های متغیر بالادست و شاخه‌ای استفاده می‌کند که در یک الگوی ۲ ساله در یک دوره شبیه‌سازی طولانی تکرار می‌شوند. نتایج به صورت گرافیکی برای خروجی ثابت (تکرار) بررسی می‌شوند.

**۱۳-۸-۱-۵- تست ۵ انتقال جریان**

این آزمون روند جریان سینماتیک را در WASP با استفاده از ماژول Heat با یک سیستم جریان واگرا-هم‌گرا تست می‌کند. رودخانه‌ای کوچک با شیب تند در دو شاخه قرار دارد که ۴۰٪ و ۶۰٪ از جریان بالادست را دریافت می‌کنند. این شاخه‌ها در پایین دست هم‌گرا هستند. در این آزمون از تغییرات مرحله‌ای در جریان بالادست استفاده می‌شود. نتایج برای هر مرحله از جریان به صورت گرافیکی و راه‌حل‌های تحلیلی از یک صفحه گسترده مقایسه می‌شود.

**۱۳-۸-۲- تست تأیید سرریز بند**

تست‌های تأیید مدل برای اطمینان از درستی اجرای معادلات در کد مدل طراحی شده‌اند. نتایج در پوشه‌های جداگانه در:

▪ /QA/WASP7/ جریان انتقال / ۴-جریان‌های سرریز حوضچه/

در تست‌های زیر آورده شده‌است.

**۱۳-۸-۲-۱- تست ۱ سرریز بند- جریان ثابت**

این آزمون روند معمول سرریز بند حوضچه در WASP را با استفاده از ماژول Mercury در جریان ورودی ثابت و افزایش پی‌درپی، ارتفاع سرریز را تست می‌کند. نتایج با محاسبات تحلیلی مقایسه می‌شوند.

**۱۳-۸-۲-۲- تست ۲ سرریز بند- جریان متغیر**

این آزمون روند معمول سرریز بند حوضچه در WASP را با استفاده از ماژول Mercury با جریان پیوسته رو به افزایش و افزایش مداوم، ارتفاع سرریز را تست می‌کند. نتایج با محاسبات تحلیلی مقایسه می‌شوند.

**۱۳-۸-۲-۳- تست ۳ سرریز بند- جریان پویا بلندمدت**

این آزمون روند معمول سرریز بند در WASP را برای عملکرد بلندمدت با استفاده از جریان ورودی متغیر که در الگوی ۲ ساله تکرار می‌شود، تست می‌کند. نتایج برای مقایسه‌ی طولانی‌مدت در عمق، حجم و سرعت بررسی می‌شوند.

**۱۳-۸-۳- تست‌های تأیید جریان پویا**

تست‌های تأیید مدل برای اطمینان از اجرای معادلات به‌درستی در کد مدل طراحی شده‌اند. نتایج در پوشه‌های جداگانه در:

▪ 7/WASP/QA/جریان انتقال / ۴- جریان‌های پویا/

در تست‌های زیر آورده شده‌است.

**۱۳-۸-۳-۱- تست ۱ جریان پویا- مرداب ثابت**

این آزمون روند معمول جریان پویا در WASP را با شیب ملایم، جریان پایدار و حوضچه‌ی پایین‌دست بند تست می‌کند. ارتفاع بند عمق برکه‌ی پایین‌دست که برابر با عمق جریان سینماتیک می‌باشد، را تأمین می‌کند. نتایج با خروجی حاصل از شبیه‌سازی موج سینماتیک معادل مقایسه می‌شوند.

**۱۳-۸-۳-۲- تست ۲ جریان پویا- جریان ثابت، ارتفاع**

این آزمون روند معمول جریان پویا در WASP را با استفاده از شیب خفیف، جریان پایدار و ارتفاع مرزی پایین‌دست ثابت تست می‌کند. نتایج با خروجی حاصل از شبیه‌سازی DYNHYD معادل و مرتبط با WASP مقایسه می‌شوند.

**۱۳-۸-۳-۳- تست ۳ جریان پویا- جریان متغیر ثابت**

این آزمون روند معمول جریان پویا در WASP را با استفاده از ماژول Mercury با افزایش جریان پی‌درپی تست می‌کند. نتایج با خروجی حاصل از شبیه‌سازی DYNHYD مرتبط با WASP مقایسه می‌شوند.

**۱۳-۸-۳-۴- تست ۴ جریان پویا- جریان EFDC**

این آزمون روند معمول جریان پویا در WASP را با شیب ملایم، جریان پایدار و ارتفاع مرزی پایین دست ثابت تست می‌کند. نتایج با خروجی حاصل از شبیه‌سازی EFDC معادل با WASP مقایسه می‌شوند.

**۱۳-۸-۳-۵- تست ۵ جریان پویا- جریان جزر و مدی**

این آزمون روند معمول جریان پویا در WASP را با استفاده از شیب مسطح، بدون جریان ورودی و جزر و مد سینوسی ارتفاعی پایین دست مرز تست می‌کند. نتایج با خروجی حاصل از شبیه‌سازی DYNHYD و EFDC معادل و مرتبط با WASP مقایسه می‌شوند.

**۱۳-۸-۳-۶- تست ۶ جریان پویا- جریان جزر و مدی دوبعدی**

این آزمون روند معمول جریان پویا در WASP را در یک شبکه‌ی ۲ بعدی با شیب مسطح، بدون جریان ورودی و جزر و مد سینوسی ارتفاعی پایین دست مرز تست می‌کند. نتایج با خروجی حاصل از شبیه‌سازی EFDC معادل با WASP مقایسه می‌شوند.

**۱۳-۹- پیوست ۳: فایل پیوند هیدرودینامیکی API**

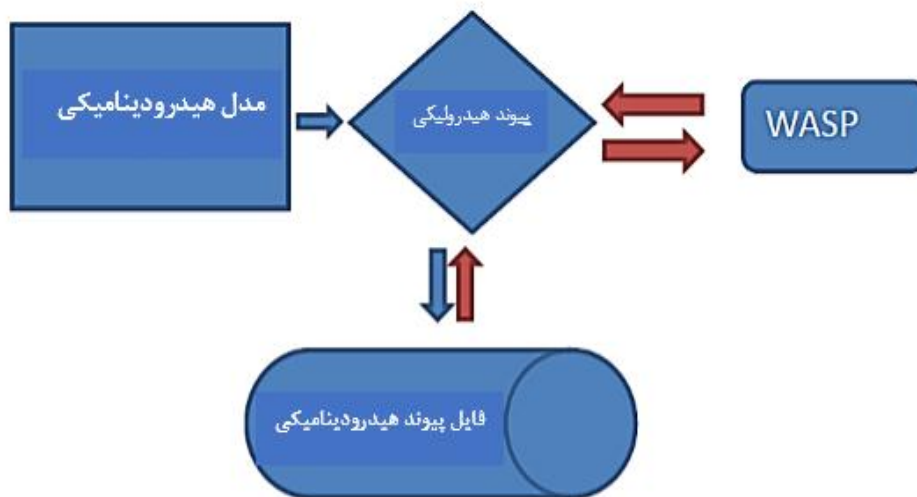
عملکرد نرم‌افزار برنامه کاربردی فایل پیوند هیدرودینامیکی API به گونه‌ای طراحی شد که به طور مؤثر به مدل‌های انتقال رسوب و رسوب چندبعدی اجازه‌ی عبور از اطلاعات شبیه‌سازی شده به WASP را بدهد. توسعه‌دهندگان WASP بر این باورند که بهتر است مدل‌های کیفیت هیدرودینامیک و آب را از هم جدا کرده و اتصال نرم‌الگوریتم‌ها را از طریق این پیوند هیدرودینامیک تسهیل نمایند. این کار به توسعه‌دهندگان مدل هیدرودینامیک یک روش آسان برای اتصال مدل‌ها با فرآیند جنبشی WASP را ارائه می‌دهد. این پیوند به مدل‌های هیدرودینامیک این امکان را می‌دهد تا اطلاعات انتقال را برای تمامی ماژول‌های WASP فراهم کند.

هدف این فصل (راهنمای انتقال جریان آب) ارائه‌ی خلاصه‌ای از API و توصیف توابع مختلف موجود است. جزئیات فرمت و ذخیره‌ی پرونده‌ی اتصال هیدرودینامیک به طور کامل توسط API کنترل می‌شود.

### ۱۳-۹-۱- مفهوم عمومی

شکل (۱۱-۱۳) یک نمودار شماتیک از چگونگی روند مدل هیدرودینامیک با API برای ایجاد یک پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیک و چگونگی تعامل WASP با API مشابه برای خواندن اطلاعات را نشان می‌دهد. دو روش وجود دارد که می‌تواند توسط توسعه‌دهنده‌ی مدل هیدرودینامیک به کار گرفته شود: **کد درون خطی**: فراخوانی به API که مدل هیدرودینامیک را ایجاد می‌کند. این روش به مدل اجازه می‌دهد تا یک فایل اتصال هیدرودینامیک را به صورت مدل هیدرودینامیک در طول زمان شبیه‌سازی کند.

**پس‌پردازنده و فایل خروجی**: اساساً، مدل هیدرودینامیک با استفاده از ساختار خود یک فایل می‌نویسد و سپس یک برنامه‌ی کاربردی مانند HYDROLINK.EXE که با WASP توزیع می‌شود این فایل را خوانده و پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیک را ایجاد می‌کند.

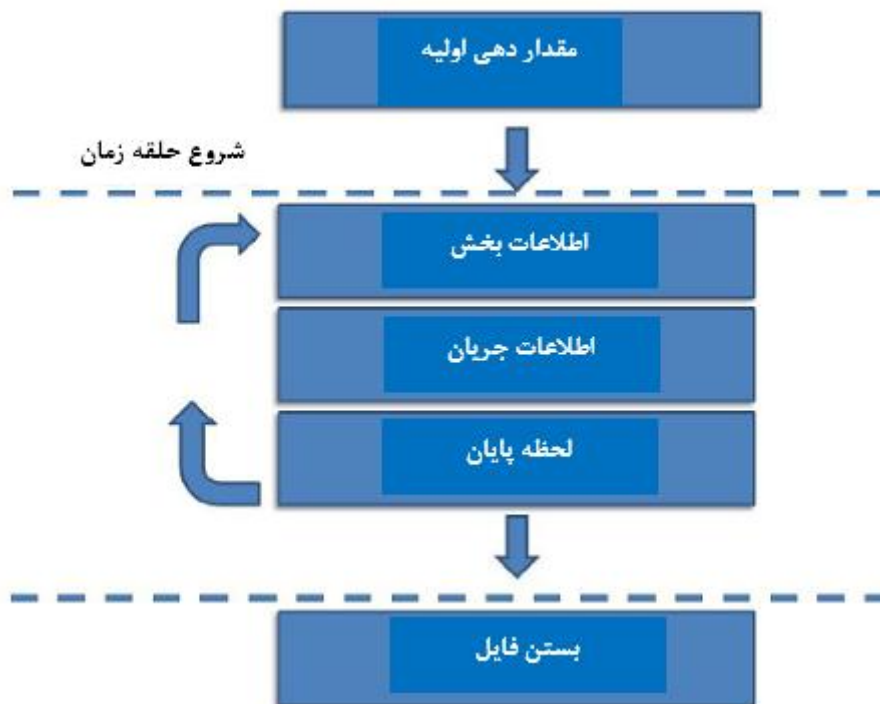


شکل ۱۱-۱۳ بررسی اجمالی HYDROLINK

### ۱۳-۹-۲- بررسی API (Application Program Interface) (رابط برنامه‌ی کاربردی)

API به توسعه‌دهندگان مدل این امکان را می‌دهد تا مدل‌های هیدرودینامیکی خود را بدون این‌که نگرانی درمورد قالب یا تغییرات ایجادشده در چارچوب WASP داشته‌باشند، با WASP پیوند دهند. API هنگام اجرای صحیح، امکان ایجاد یک فایل پیوند با فرمت صحیح را فراهم می‌کند که WASP قادر به خواندن آن می‌باشد.

چندین مرحله برای راه‌اندازی وجود دارد که باید تکمیل شوند تا در نهایت یک فایل درست نوشته شود. شکل (۱۳-۱۲) مراحل مختلف در ساخت فایل را نشان می‌دهد. بلوک مقداردهی اولیه، ایجاد فایل را کنترل کرده و بازه‌ی زمانی، تعداد بخش‌ها، تعداد مسیرها و کلیدهای مرتب‌شده که گزینه‌های فایل را کنترل می‌کنند، مشخص می‌نماید. تمام موارد زیر موردبحث قرار خواهند گرفت. بخش اصلی API نوشتن اطلاعات مربوط به بخش متغیر زمانی (حجم، عمق، سرعت، شوری و دما) از مدل هیدرودینامیکی، جهت استفاده توسط WASP می‌باشد. پس از نوشتن اطلاعات قطعه، پراکندگی و جریان برای هر یک از مسیرهای جریان شبیه‌سازی شده در مدل هیدرودینامیکی نیز نوشته شده‌است.



## شکل ۱۳-۱۲ مؤلفه‌های API

## ۱۳-۹-۳- مقداردهی اولیه و توابع

این بلوک مقداردهی اولیه باید قبل از ذخیره‌ی اطلاعات در حلقه‌ی زمان تکمیل شود. بسیاری از تماس‌های اولیه چگونگی ذخیره‌ی اطلاعات را کنترل خواهند کرد، به‌ویژه اینکه از چه نوع زبانی برای ایجاد یا خواندن اطلاعات استفاده خواهد شد. شاخص‌های آرایه‌ی  $C^{++}$  از صفر تا تعداد مقادیر مورد نظر، متغیر است، درحالی‌که شاخص FORTRAN از ۱ تا تعداد مقادیر مورد نظر متغیر می‌باشد. به دلیل این‌که API برای ذخیره و ارسال داده‌های آرایه از اشاره‌گر استفاده می‌کند، نکته‌ی مورد توجه این است که شاخص‌ها باید بدرستی تنظیم شوند. توصیه می‌شود که از این ترتیب همان‌طور که در زیر توضیح داده شده، استفاده کنید.

**Call Hlopen (Hlfile, Ihl\_mode, Ihl\_handle, Ierror)**

بسته به نحوه‌ی تنظیم `ihl_mode` از این روند برای تنظیم اولیه‌ی فایل پیوند هیدرودینامیکی یا بازکردن پرونده برای خواندن استفاده می‌شود (گزینه‌ی استفاده را ببینید). اگر این ارتباط موفقیت‌آمیز باشد (`Ierror=0`)، پرونده‌ها یا ایجاد شده‌اند (برای نوشتن باز است) و یا برای خواندن یک متغیر مهم باز هستند. Hlopen یک دسته پرونده (`Ihl_handle`) را برمی‌گرداند، این عدد صحیح ذخیره می‌شود.

که:

- `Call Hlopen`: یک رشته کاراکتر است که شامل مسیر و نام پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی می‌باشد.
- `Ihl_mode`: یک عدد صحیح (I4 یا عدد صحیح کوتاه) است که نوشتن (ایجاد) یا خواندن را مشخص می‌کند. ۰ = بخوانید، ۱ = بنویسید.
- `Ihl_handle`: این مقدار پس از موفقیت در تماس با Hlopen اختصاص داده می‌شود و یک عدد صحیح است که برای مرجع پرونده‌ای که در تماس Hl\_open باز یا ایجاد شده، استفاده می‌شود. توجه داشته باشید که می‌توانید بیش از یک پرونده را در API باز کنید.
- `Ierror`: تقریباً همه‌ی تماس‌های API یک کد خطا را نشان می‌دهند. اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌کند، و عدد بیش‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده است. کاربر می‌تواند با فراخوانی Hlgetlasterror (شرح زیر) توضیحی در مورد خطا دریافت کند.

**Call Hlsetlanguage (Ihl\_handle, Ilanguage, Ierror)**



این دستور برای مشخص کردن نوع نوع زبان برنامه‌نویسی در پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی می‌باشد که در حال حاضر کلیدها بین C و FOTRAN قرار دارند.

که:

- `Ihl_handle`: دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده شده توسط `Hlopen` (عدد صحیح)،
- `Ilanguage`: مقدار عدد صحیح که زبان برنامه نوشتن یا خواندن را تعیین می‌کند (  $0 = C$  )
- `++`، `(1 = FORTRAN)`،
- `-Ierror` اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد ۰ را نشان می‌دهد، و عددی بیش‌تر از ۰ بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### Call `Hlgetlasterror (ErrorString)`

این روش برای نشان دادن رشته‌ای که آخرین خطا را با `API` توصیف می‌کند، استفاده می‌شود. پس از تماس با یک تابع `API`، کاربر باید وضعیت خطای ناشی از تابع فراخوانی را بررسی کند. اگر وضعیت خطا عددی بزرگ‌تر از صفر باشد به این معنی می‌باشد که خطایی رخ داده‌است. برای گرفتن یک پیغام خطا با `Hlgetlasterror` ارتباط برقرار کنید.

که:

- `Errstring`: شامل یک رشته کاراکتر می‌باشد که پیام خطا را دریافت می‌کند.

#### call `Hladddescription (Ihl_handle,0 ,Description (I) , Ierror)`

این تابع به کاربر اجازه می‌دهد توضیحات خود را که می‌تواند در زمان اجرا در `WASP` نمایش داده شود، به پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی اضافه کند. هیچ محدودیتی در تعداد خطوط توضیحی که می‌توان اضافه نمود، وجود ندارد.

که:

- `Ihl_handle`: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط `Hlopen` (عدد صحیح) می‌باشد.
- `Iline`: این گزینه به مفهوم شاخص‌های توضیحات ذخیره شده می‌باشد.
- `Description (I)`: به معنی توضیحات (رشته) می‌باشد.
- `Ierror`: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عددی بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### Call `Hlsetcreator (Ihl_handle, Modtype, Ierror)`

از این تابع برای آگاهی WASP از مدل هیدرودینامیکی برای ایجاد پرونده‌ی پیوند استفاده شده‌است. در حال حاضر WASP چهار نوع پیوند را به رسمیت می‌شناسد: (۱) کد دینامیک سیالات محیطی (EFDC)، (۲) مدل جریان پویای ۱ بعدی (DYNHYD)، (۳) مدل EPD-RIV1، (۴) ارتباط WASP به WASP. که:

- **Ihl\_handle**: این گزینه معرف دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- **Modtype**: این گزینه یک عدد صحیح برای نوع مدل هیدرودینامیکی می‌باشد که پرونده‌ی پیوند را ایجاد کرده‌است.
- **Ierror**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

**call hlsetseedmoment(Ihl\_handle, istorymonth, istoryday, istoryyear, istoryhour, istoryminute, istorysecond, ierror)**

این تابع برای تعیین زمان و تاریخ اولیه برای اطلاعات هیدرودینامیکی در پرونده‌ی پیوند استفاده می‌شود. WASP به‌طور خودکار تاریخ شروع و پایان شبیه‌سازی مدل کیفیت آب را تعیین می‌کند. با افزودن اطلاعات به پرونده پیوند هیدرودینامیکی، API از زمان بذر بیش‌تر می‌شود. که:

- **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- **Istartmonth**: این گزینه یک تعیین‌کننده‌ی ماه صحیح می‌باشد.
- **Istartday**: این گزینه یک تعیین‌کننده‌ی روز صحیح می‌باشد.
- **Istartyear**: این گزینه یک تعیین‌کننده‌ی سال صحیح می‌باشد.
- **Istarthour**: این گزینه یک تعیین‌کننده‌ی ساعت صحیح می‌باشد.
- **Istartminute**: این گزینه یک تعیین‌کننده‌ی دقیقه‌ی صحیح می‌باشد.
- **Istartsecond**: این گزینه یک تعیین‌کننده‌ی ثانیه‌ی صحیح می‌باشد.
- **Ierror**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌کند، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

**call hlsetnumlayers(Ihl\_handle, num\_layer, ierror)**

این تابع برای تعیین تعداد لایه‌هایی که در پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی منتقل می‌شوند، استفاده می‌شود. هنگامی که WASP در ابتدا با پرونده‌ی هیدرودینامیکی در ارتباط می‌باشد، اگر مدل هیدرودینامیکی یک شبکه‌ی کششی سیگما (تعداد ثابت لایه‌ها) باشد، WASP می‌تواند به‌طور خودکار جهت‌یابی مسیر را برای مسیر نور تعیین کند و مشخص کند که کدام یک از بخش‌ها رابط هوایی دارند. اگر مدل هیدرودینامیکی تعداد لایه‌های ثابت نداشته‌باشد، باید یک فایل کمکی ایجاد شود (SEE SECTION).

- **Ihl\_handle**: این گزینه شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- **Num\_layer**: یک عدد صحیح است که تعداد لایه‌های موجود در مدل هیدرودینامیکی را مشخص می‌کند.
- **Ierror**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### **call hlsetnumsegments(Ihl\_handle, nose, ierror)**

این تابع تعداد سلول/بخش‌هایی را که از مدل هیدرودینامیکی منتقل می‌شوند، تعریف می‌کند که این تعداد در طول توسعه‌ی ارتباط هیدرودینامیکی ثابت می‌باشد. این عدد تعداد بخش‌هایی را که در عناصر بخش ذخیره می‌شوند، تعیین می‌کنند. WASP از این شماره برای تعیین تعداد بخش‌هایی که در ابتدا با پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی در ارتباط هستند، استفاده می‌کند.

که:

- **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- **Noseg**: این گزینه یک عدد صحیح می‌باشد که تعداد بخش‌های ذخیره‌شده‌ی اطلاعات را مشخص می‌کند.
- **Ierror**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### **call hlsetsegname(ihl\_handle, i, segname, ierror)**

این تابع این امکان را ایجاد می‌کند تا یک نام برای هر سلول اختصاص یابد. این نام اختصاص یافته به بخش در طی فرآیند پیوند اولیه وارد WASP می‌شود. **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.

▪ **Iseg**: این بخش از ۱ تا **noseg** می‌باشد که نام آن تعریف شده‌است.  
 ▪ **Segname**: یک رشته بزرگتر از ۳۰ کاراکتر نیست که می‌تواند نام مربوط به هر سلول را مشخص کند.

▪ **Ierror** - اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را، عدد بزرگتر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

### **call hlsetnumflowpaths(Ihl\_handle, numflow, ierror)**

این تابع تعداد مسیرهای جریان تعریف‌شده در فایل پیوند هیدرودینامیکی را تعیین می‌کند.

که:

▪ **Ihl\_handle**: این گزینه شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط **Hlopen** (عدد صحیح) می‌باشد.

▪ **Numflow**: تعداد مسیرهای جریان که به **WASP** منتقل می‌شوند.

▪ **Ierror**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگتر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

### **call hlsetnumsegconsts(Ihl\_handle, inumsegconsts, ierror)**

از این تابع برای تنظیم تعداد اجزاء بخشی که در فایل پیوند هیدرودینامیکی نوشته خواهد شد، استفاده می‌شود. نسخه‌ی فعلی **API HYDROLINK** در برگرفته‌ی تعداد محدودی از آیت‌هاست. برای رسیدن به یک مؤلفه‌ی خاص باید موارد اولیه را تعریف کنید. اجزای سازنده‌ی قطعه عبارتند از: حجم، عمق، سرعت، دما و شوری.

که:

▪ **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط **Hlopen** (عدد صحیح) می‌باشد.

می‌باشد.

▪ **Inumsegconsts**: این گزینه تعداد اجزای قطعه‌ای که در پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی

(عدد صحیح) نوشته خواهد شد، را تعریف می‌کند.

▪ **Ierror** - اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگتر

از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

### **Hlsetnumfpconsts (Ihl\_handle, NumFlowPathConst, ierror)**

این تابع برای مشخص کردن تعداد اجزای تشکیل‌دهنده‌ی مسیر جریان استفاده می‌شود. تعداد اجزای تشکیل‌دهنده‌ی مسیر جریان که توسط مدل هیدرودینامیکی منتقل می‌شود، معمولاً تابعی از ابعاد مدل می‌باشند و تعداد ترکیبات مسیر جریان برای مدل‌هایی مانند **EFDC**، سه می‌باشد که شامل: (۱) جریان (۲)

پراکندگی/جریان باقیمانده و ۳) جهت جریان می‌شود. برای مدل‌های ۱ بعدی ساده مانند DYNHYD، تعداد ترکیبات مسیر جریان یک می‌باشد، (Flow).  
که:

- **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- **NumFlowPathConst**: این گزینه تعداد اجزای تشکیل‌دهنده‌ی مسیر جریان را مشخص می‌کند.
- **Ierror**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### **Hlsetfpconsttype (Ihl\_handle, IconType, Index, ierror)**

این تابع از ۱ تا تعداد اجزای تشکیل‌دهنده‌ی مسیر جریان است، که مشخصه‌ی تشکیل‌دهنده‌ی مسیر جریان منفرد را تعیین می‌کند.

برای  $Index = 1, NumFlowPathConst$

که:

- **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد،
- **IconType**: این گزینه شامل مقدار صحیح برای تعریف اجزای تشکیل‌دهنده‌ی جریان می‌باشد،
  - 1: جریان،
  - 2: پراکندگی،
  - 3: جهت جریان،
- **Index**: این گزینه شامل تعداد اجزای تشکیل‌دهنده‌ی جریان می‌باشد،
- **Ierror**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### **call hlsetvartimestep(Ihl\_handle, IdtOpt, ierror)**

این تابع برای مشخص کردن گزینه‌ی timestep (گام زمانی) استفاده می‌شود. اگر مدل هیدرودینامیکی توانایی گرفتن زمان سنج پویا را داشته باشد، لازم است اطلاعات اضافی در پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی نوشته‌شود تا WASP بتواند همان زمان را انجام دهد.  
که:

- **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد،
- **IdtOpt**: گزینه‌ی timestep (عدد صحیح) را تنظیم می‌کند (عدد صحیح)،
- **0**: بازه‌ی زمانی ثابت، مدل هیدرودینامیک ثابت اجرا خواهد شد
- **1**: متغیر زمان (timestep)، توجه داشته‌باشید که اطلاعات اضافی باید در پیوند هیدرودینامیک نوشته‌شوند.
- **error**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگتر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### **call hlsetimestep(Ihl\_handle, hdt, ierror)**

این تابع برای تنظیم timestep مورد استفاده قرار می‌گیرد. این مقدار که به‌طور معمول برای timestep تنظیم شده‌است که توسط مدل هیدرودینامیک به کار می‌رود. اگر گزینه‌ی متغیر زمان مورد استفاده قرار نگیرد، این مقدار فقط باید یک‌بار مشخص شود. اگر متغیر زمانی انتخاب شود، باید هر بار یک چارچوب داده از داده‌ها تعیین شود.

که:

- **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- **Hdt**: این گزینه موجب تنظیم timestep در ثانیه (عدد صحیح) می‌گردد.
- **error**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگتر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### **call hlsethydtimestep(Ihl\_handle, hdt, ierror)**

این تابع timestep را که برای شبیه‌سازی مدل هیدرودینامیک به کار می‌رود، مشخص می‌کند. این مقدار تنها یک‌بار باید تنظیم شود.

که:

- **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- **Hdt**: این گزینه موجب تنظیم timestep در ثانیه (عدد صحیح) می‌شود.
- **Ierror** - اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را، عدد بزرگتر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### **call hlsetupdateint(Ihl\_handle, rinterval, ierror)**

این عملکرد، فاصله‌ی زمانی را که در آن داده‌ها به فایل پیوند هیدرودینامیکی نوشته شده‌است، مشخص می‌کند. WASP در هر timestep (گام زمانی) مدل هیدرودینامیکی به اطلاعات نیاز ندارد. فاصله‌ی زمانی که اطلاعات در آن نوشته شده‌است:

$$\text{timestep} * \text{numdht}$$

این فاصله، نشان‌دهنده‌ی زمانی است که WASP مجموعه‌ی جدیدی از داده‌های پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی را می‌خواند.

که:

- `Ihl_handle` - شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط `Hlopen` (عدد صحیح) می‌باشد.

- `rinterval` - این گزینه فاصله‌ی زمانی بین خواندن اطلاعات جدید از فایل پیوند هیدرودینامیکی در ثانیه (عدد صحیح) را مشخص می‌کند.

- `ierror`: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### **call hlsethydtowaspratio(Ihl\_handle,numdht,ierror)**

این تابع تعداد بازه‌های زمانی مدل هیدرودینامیکی را که قبل از ذخیره‌ی اطلاعات در پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی گرفته می‌شود، مشخص می‌کند. این مقدار برای محاسبه‌ی فاصله‌ی زمانی شبیه‌سازی بین نوشتن/خواندن به/از پرونده پیوند هیدرودینامیکی استفاده می‌شود.

که:

- `Ihl_handle`: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط `Hlopen` (عدد صحیح) می‌باشد.

- `numdht`: تعداد زمان‌های مورد استفاده‌ی مدل هیدرودینامیکی بین نوشتن اطلاعات به پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی (عدد صحیح) را مشخص می‌کند.

- `ierror`: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

#### **call hlsetflowpath(Ihl\_handle,k,jq(k),iq(k),iflowdir(k),ierror)**

این تابع مسیرهای جریان فیزیکی را طوری تنظیم می‌کند که می‌توان اطلاعات مربوط به آن را در WASP ترسیم نمود این عمل، یک مرحله‌ی مهم در تنظیم فایل پیوندی برای WASP می‌باشد. ترتیب ورود اطلاعات مربوط به مسیر جریان که در این جا وارد می‌شود، روندی را نشان می‌دهد که در آن باید اطلاعات جریان واقعی بعداً نوشته شود.

که:

DO K=1, NumFlow

- **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- **K**: عدد شاخصی که در مسیر جریان تعریف شده (عدد صحیح) می‌باشد.
- **IQ**: شامل سلول جریان بالادست (از ۱ تا تعداد بخش‌های سیستم‌عامل) می‌باشد.
- **IQ**: شامل سلول جریان پایین دست (از ۱ تا تعداد بخش‌های سیستم‌عامل) می‌باشد.
- **Iflowdir(k)**: نشان‌دهنده‌ی جهت مسیر جریان است.
- **Ierror**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

### ۱۳-۹-۴- اطلاعات بخش و توابع

اطلاعات بخش برای ۳ مؤلفه‌ی بخش موردنیاز WASP به API ارسال می‌شود. تمام داده‌های ارسال شده به WASP باید قبل از تماس API در آرایه بارگیری شوند. همان تماس برای کلیه‌ی اطلاعات مربوط به بخش استفاده می‌شود. متغیر IsegInfo تعیین می‌کند که داده‌ها در حال حاضر ارسال می‌شوند.

**call hlsetseginfo(Ihl\_handle,IsegInfo,SegVolume,ierror)**

که:

- **Ihl\_handle**: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- **IsegInfo1**: حجم بخش (مترمکعب).
- **IsegInfo2**: عمق بخش (متر).
- **IsegInfo3**: سرعت بخش (متر برثانیه).
- **SegVolume**: یک عدد صحیح که تعداد و ابعاد(دو بعدی، سه بعدی) را نشان می‌دهد.
- **Ierror**: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

### ۱۳-۹-۵- اطلاعات جریان و توابع

کاربر توانایی ارسال دو نوع جریان به API را دارد که می‌تواند توسط WASP استفاده شود. نوع اول جریان افقی و جریان پراکندگی است. تمام داده‌های ارسال شده به WASP باید قبل از تماس API در



آرایه بارگیری شوند. از همان تماس برای کلیه‌ی اطلاعات جریان استفاده می‌شود. متغیر دوم در فراخوان کنترل، جریان افقی (۱) یا جریان پراکندگی (۲) را کنترل می‌کند.

**call hlsetflowinfo(Ihl\_handle,1,Flow,ierror)**  
**call hlsetflowinfo(Ihl\_handle,2,brintt,ierror)**

که:

- Ihl\_handle: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح).
- 1 or 2: جریان افقی یا پراکندگی را تعیین می‌کند.
- Flow/Brinntt: یک آرایه‌ی واقعی، ۱ تا تعداد جریان، متناظر با مسیرهای جریان تعریف‌شده در بالا می‌باشد.
- Ierror: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگتر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

### ۱۳-۱۰ - پایان لحظه

- هنگامی که یک فریم کامل داده (اطلاعات مربوط به بخش و جریان) برای زمان کنونی ذخیره‌شود، برای پیشبرد API باید به چهارچوب داده‌ی بعدی اطلاع داده‌شود. این دستورالعمل توسط فراخوانی زیر که در ادامه بیان می‌شود، ارائه می‌شود. هنگامی که این دستورالعمل توسط فراخوانی شکل داده نام‌گذاری می‌شود، از حافظه خارج می‌شود و در پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی فشرده می‌شود.

**call hlmomentcomplete(Ihl\_Handle,ierror)**

که:

- Ihl\_handle: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.
- Ierror: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگتر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

### ۱۳-۱۱ - بستن فایل

قبل از خروج از برنامه‌ای که در آن از API استفاده می‌کند، باید دستورالعمل بسته‌شدن پرونده برای API داده شود. نبود برقراری این تماس باعث می‌شود پرونده‌ی پیوند هیدرودینامیکی غیرقابل استفاده باشد.

call hlclose(Ihl\_handle,error)

▪ Ihl\_handle: شامل دسته‌ی پرونده‌ی اختصاص داده‌شده توسط Hlopen (عدد صحیح) می‌باشد.

▪ error: اگر خطایی رخ ندهد این عدد صحیح یک عدد صفر را نشان می‌دهد، عدد بزرگ‌تر از صفر بدین معنی است که خطایی رخ داده‌است.

### ۱۳-۱۲- راهنمای تدوین

هنگام تهیه‌ی کد برای پیوند با API HYDROLINK، کاربر باید از این امر آگاه باشد که عملکردهای خارجی پیوند داده می‌شوند. بسته به گردآورنده/پیونددهنده، ممکن است شما نیاز به انجام اقدامات اضافی داشته‌باشید. API HYDROLINK با موفقیت از محیط‌های توسعه‌ی زیر فراخوانی می‌شود:

◆ Absoft Fortran

◆ Intel Fortran \*

◆ GNU Fortran

◆ Microsoft Visual C++

◆ Microsoft Visual Basic

Intel compiler مانند سایر فایل‌ها ممکن است برای توابع موجود در API به فایل‌های رابط نیاز داشته‌باشد. پرونده‌های رابط:

### ۱۳-۱۳- فایل رابط

اگر compiler شما برای تماس‌های خارجی به فایل‌های رابط نیاز دارد، در ادامه آورده شده‌است:

```

interface
subroutine hlsetdebug(hl_debug)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetdebug':hlsetdebug
Integer hl_debug
!ms$attributes reference :: hl_debug
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlgetlasterror(message)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlgetlasterror':hlgetlasterror
character*(*) message
!ms$attributes reference :: message
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlopen(FName, hl_mode, hl_handle, ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlopen':hlopen
character*(*) FName
Integer hl_mode, hl_handle, ierror
!ms$attributes reference :: FName, hl_mode, hl_handle, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetlanguage(hl_handle, hl_language, ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetlanguage':hlsetlanguage
Integer hl_handle, hl_language, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle, hl_language, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetcreator(hl_handle, hl_creator, ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetcreator':hlsetcreator
Integer hl_handle, hl_creator, ierror

```

```

!ms$attributes reference :: hl_handle, hl_creator, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hladddescription(hl_handle, id, string, ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hladddescription':hladddescription 47

Integer hl_handle, id, ierror
character *(*) string
!ms$attributes reference :: hl_handle, id, string, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetseedmoment(hl_handle, month, day, year, hour,
minute,second,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetseedmoment':hlsetseedmoment
Integer hl_handle, month, day, year, hour, minute,second,ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle, month, day, year, hour
!ms$attributes reference :: minute,second,ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetnumsegments(hl_handle, numsegs, ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetnumsegments':hlsetnumsegments
Integer hl_handle, numsegs, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle, numsegs,ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetsegname(hl_handle,index, segname, ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetsegname':hlsetsegname
Integer hl_handle, index, ierror
Character *(*) segname

```

```

!ms$attributes reference :: hl_handle, index, segname,ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetnumflowpaths(hl_handle,numfp, ierror)
!ms$attributes
c,dllimport,alias:'__hlsetnumflowpaths':hlsetnumflowpaths
Integer hl_handle, numfp, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle, numfp, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetnumsegconsts(hl_handle,numsc, ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetnumsegconsts':hlsetnumsegconsts
Integer hl_handle, numsc, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle, numsc, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetnumfpconsts(hl_handle,numfpc, ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetnumfpconsts':hlsetnumfpconsts
Integer hl_handle, numfpc, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle, numfpc, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetsegconststype(hl_handle,sc_index, sc_type,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetsegconststype':hlsetsegconststype
Integer hl_handle, sc_index, sc_type, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle, sc_index, sc_type, ierror
end subroutine
end interface

```

```

!-----
-----
interface
subroutine hlsetfpconsttype(hl_handle,fp_index, fp_type,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetfpconsttype':hlsetfpconsttype
Integer hl_handle, fp_index, fp_type, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle, fp_index, fp_type, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetvartimestep(hl_handle,vardt,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetvartimestep':hlsetvartimestep 49
Integer hl_handle, vardt, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle,vardt, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsethydtimestep(hl_handle,timestep,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsethydtimestep':hlsethydtimestep
Integer hl_handle, ierror
Real timestep
!ms$attributes reference :: hl_handle,timestep, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
interface
subroutine hlsetupdateint(hl_handle,updateinterval,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetupdateint':hlsetupdateint
Integer hl_handle, ierror
Real updateinterval
!ms$attributes reference :: hl_handle,updateinterval, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----

```

```

interface
subroutine hlsethydtowaspratio(hl_handle,iratio,ierror)
!ms$attributes
c,dllimport,alias:'__hlsethydtowaspratio':hlsethydtowaspratio
Integer hl_handle, iratio, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle,iratio, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----

interface
subroutine hlsetnumlayers(hl_handle,numlayers,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetnumlayers':hlsetnumlayers
Integer hl_handle, numlayers, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle,numlayers, ierror
end subroutine
end interface 50

!-----
-----

interface
subroutine hlsetflowpath(hl_handle,flow_index,from_seg, to_seg,
direction, ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetflowpath':hlsetflowpath
Integer hl_handle, flow_index,from_seg, to_seg,direction,ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle,flow_index,from_seg
!ms$attributes reference :: to_seg,direction,ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----

interface
subroutine hlsetflowinfo(hl_handle,index,value,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetflowinfo':hlsetflowinfo
Integer hl_handle, index, ierror
Real value
!ms$attributes reference :: hl_handle,index, value, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----

```

```
interface
subroutine hlsetseginfo(hl_handle,index,value,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlsetseginfo':hlsetseginfo
Integer hl_handle, index, ierror
Real value
!ms$attributes reference :: hl_handle,index, value, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----

interface
subroutine hlset timestep(hl_handle,value,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlset timestep':hlset timestep
Integer hl_handle, ierror
Real value
!ms$attributes reference :: hl_handle,value, ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----

interface
subroutine hlmomentcomplete(hl_handle,ierror)
!ms$attributes
c,dllimport,alias:'__hlmomentcomplete':hlmomentcomplete
Integer hl_handle, ierror
!ms$attributes reference :: hl_handle,ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----

interface
subroutine hlclose(hl_handle,ierror)
!ms$attributes c,dllimport,alias:'__hlclose':hlclose
Integer hl_handle, ierror
Real value
!ms$attributes reference :: hl_handle,ierror
end subroutine
end interface
!-----
-----
```



### ۱۳-۵- مثال برنامه

در ادامه یک کد منبع که به یک برنامه کاربردی که با WASP توزیع شده است آورده شده است. این کد خروجی‌های ASCII و binary (جفتی) را از چندین مدل هیدرودینامیک به فرمت مورد نیاز WASP تبدیل می‌کند. این نقطه شروع خوبی برای توسعه شما خواهد بود.

Program HydroLink

!-----  
-----

Integer, Allocatable, Dimension (:): IQ, JQ, IFLOWDIR  
Real, Allocatable, Dimension (:): SegVolume, SegDepth, SegVel, Flow, crnu,  
brintt  
integer\*4 Ihl\_handle  
character\*1 ANS  
character\*30 segname  
character\*256 HLFIL,INFIL,segfile  
character\*256 DESCRIPTION(10)  
character\*256 MODELERNAME  
character\*256 errstring  
logical binary, ConfigFile,EFDC,DYNHYD, EPDRIV1, HECRAS

!-----  
-----

! Opening Message

!-----  
-----

! write(6,6120)  
!6120 format(3(/),62('-'),/  
! 'The purpose of this program is to convert a previously created',/ &  
! 'hydrodynamic linkage file from EFDC, DYNHYD, EPDRIV1 to the ',/ &  
! 'new HYDROLINK method. This is required for the latest version',/ &  
! 'of WASP. The user must specify the path and filename of all ',/ &  
! 'files to be created, must specify the file type and from which',/ &  
! 'hydrodynamic model created the old file. The user must also ',/ &  
! 'specify the start time (Gregorian Format) of the hydrodynamic ',/ &  
! 'linkage file. ',/ &  
! 62('-'),2(/))

!-----  
-----

! hlopen parameters

!-----  
-----

```
Ihl_language = 1
Ihl_creator = 1
Ihl_handle = 0
Ihl_debug = 1
Ihl_mode = 1
inumsegconsts = 3
inumfpconsts = 3
binary = .true.
ConfigFile = .false.
EFDC = .false.
DYNHYD = .false.
EPDRIV1 = .false.
HECRAS = .false.
!-----
! Open the Control File
!-----
open (unit=10,file='hydrolink.ctl',status='old',iostat=istat)
if (istat .eq. 0) then
write(6,*)'Previous Control File Found'

write(6,*)'Do you want to read from File (Y=Yes, N=No)'
read(5,*)ANS
If(ANS .eq. 'Y' .or. ANS .eq. 'y')ConfigFile=.true.
If(ANS .eq. 'A' .or. ANS .eq. 'a')ConfigFile=.false.
if (ConfigFile) then
write(6,*)'Reading Information from HYDROLINK.CTL'
else
close(unit=10)
endif
endif
!-----
if (ConfigFile)then
read(10,*)ANS
If(ANS .eq. 'A' .or. ANS .eq. 'a')binary=.false.
If(ANS .eq. 'B' .or. ANS .eq. 'b')binary=.true.
!-----
read(10,*)ANS
```

```

If(ANS .eq. 'E' .or. ANS .eq. 'e')EFDC=.true.
If(ANS .eq. 'D' .or. ANS .eq. 'd')DYNHYD=.true.
If(ANS .eq. 'R' .or. ANS .eq. 'r')EPDRIV1=.true.
If(ANS .eq. 'H' .or. ANS .eq. 'h')HECRAS=.true.
!-----
-----
read(10,1000)INFILE
if (binary) then
open(unit=1,file=INFILE,form='unformatted',status='old', &
iostat=istat)
if (istat .gt. 0) then
write(6,*)'HYD File not Found: '
stop
endif
else
open(unit=1,file=INFILE,status='old',iostat=istat)
if (istat .gt. 0) then
write(6,*)'HYD File not Found: '
stop
endif
endif
!-----
-----
read(10,1000)HLFILE
HLFILE=trim((HLFILE)//CHAR(0))
read(10,*)istartmonth
read(10,*)istartday
read(10,*)istartyear
read(10,*)istarthour
read(10,*)istartminute
read(10,*)istartsecond
read(10,1000)segfile
READ(10,*)NUM_DESCRIPTIONS
do i=1,NUM_DESCRIPTIONS
READ(10,1111)DESCRIPTION(I)
1111 format(A256)
end do
1000 format(A64)
else
!-----
-----

```

```
open (unit=10,file='hydrolink.ctl',status='unknown')
write(6,*)'Is Old HYD ASCII or Binary (A=ASCII, B=Binary)'
read(5,*)ANS
write(10,1060)ANS
1060 format(A1)
If(ANS .eq. 'A' .or. ANS .eq. 'a')binary=.false.
If(ANS .eq. 'B' .or. ANS .eq. 'b')binary=.true.
!-----
-----
write(6,*)'Enter File Type (E=EFDC, D=DYNHYD, R=EPDRIV1,
H=HECRAS)'
read(5,*)ANS
write(10,1060)ANS
If(ANS .eq. 'E' .or. ANS .eq. 'e')EFDC=.true.
If(ANS .eq. 'D' .or. ANS .eq. 'd')DYNHYD=.true.
If(ANS .eq. 'R' .or. ANS .eq. 'r')EPDRIV1=.true.
If(ANS .eq. 'H' .or. ANS .eq. 'h')HECRAS=.true.
!-----
-----
write(6,*)'Enter Name of Previous Version HYD File to Convert'
read(5,*)INFILE
write(10,1000)INFILE
if (binary) then
open(unit=1,file=INFILE,form='unformatted',status='old', iostat=istat)
if (istat .gt. 0) then
write(6,*)'HYD File not Found: '
stop
endif
else
open(unit=1,file=INFILE,status='old',iostat=istat)
if (istat .gt. 0) then
write(6,*)'HYD File not Found: '
stop
endif
endif
!-----
-----
write(6,*)'Enter Name of HYDROLINK HYD File to Create'
read(5,*)HLFILE
write(10,1000)HLFILE
```

```

!-----
-----
Write(6,6600)
6600 format('Seed Time Information Needed for the Start of ',' Hydrodynamic
Linkage File mm/dd/yyyy hh:mm:ss')
write(6,*)'Enter Start Month (mm)'
read(5,*)istartmonth
write(6,*)'Enter Start Day (dd)'
read(5,*)istartday
write(6,*)'Enter Start Year (yyyy)'
read(5,*)istartyear
write(6,*)'Enter Start Hour (hh)'
read(5,*)istarhour
write(6,*)'Enter Start Minute (mm)'
read(5,*)istartminute
write(6,*)'Enter Start Second (ss)'
read(5,*)istartsecond
write(10,*)istartmonth
write(10,*)istartday
write(10,*)istartyear
write(10,*)istarhour
write(10,*)istartminute
write(10,*)istartsecond
write(6,*)'Enter Name of Segment Name File (Type NONE)'
read(5,1000)segfile
write(10,1000)segfile
write(6,6610)
6610 format('How Many Description Lines would you like to add to the file
(0=None)')
read(5,*)NUM_DESCRIPTIONS
write(10,*) NUM_DESCRIPTIONS
do i=1, NUM_Descriptions
write(6,*)'Enter Description:',I
read(5,1111)description(i)
write(10,1111)description(i)
end do
close(unit=10)
End If
if(EFDC)MODTYPE =1
if(DYNHYD)MODTYPE =2
if(EPDRIV1)MODTYPE =3

```

```
if(HECRAS)MODTYPE =2
!-----
!-----
HLFILE=(TRIM(HLFILE)//CHAR(0))
write(6,*)'About to Create Hydrolink File'
call hlopen(HLFILE, Ihl_mode, Ihl_handle, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
write(6,*)'Hydrolink File Created'
!-----
!-----
! Set the language to FORTRAN
!-----
!-----
call hlsetlanguage(Ihl_handle, 1, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
!-----
!-----
! Store a description string
!-----
!-----
write(6,*)'Storing Descriptions'
do i =1,NUM_DESCRIPTIONS
call hladddescription(Ihl_handle,0,DESCRIPTION(I),ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
end do
!-----
!-----
! Store the modeler name
```

```

!-----
!-----
! call hladddescription(Ihl_handle,1,MODELERNAME,ierror)
! if(ierror .gt. 0)then
! call hlgetlasterror(errstring)
! write(6,6000) ierror, errstring
! stop
! end if
!-----
!-----
! Set the creator
!-----
!-----
write(6,*)'Setting Creator'
call hlsetcreator(Ihl_handle, MODTYPE, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
!-----
!-----
! Set the seed moment
!-----
!-----
write(6,*)'Setting Seed Moment'
IF (.not. HECRAS) THEN
call hlsetseedmoment(Ihl_handle, istartmonth, istartday,istartyear, istarthour,
istartminute, istartsecond, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
ENDIF
!-----
!-----
! Read the Header from Hydrodynamic Linkage File
!-----
!-----
write(6,*)'Starting to Process Hydrodynamic File'

```

```

IF(BINARY)THEN
IF (EFDC)READ(1)NOSEG,NUMFLOW, NUMDHT,HDT,
START,END,NUM_LAYER
IF (DYNHYD)READ(1)NOSEG,NUMFLOW, HDT,
START,END,NUM_LAYER
ELSE
IF(EFDC)READ(1,*)NOSEG,NUMFLOW, NUMDHT, HDT, START,END,
NUM_LAYER
IF(DYNHYD)READ(1,*)NOSEG,NUMFLOW, HDT,
START,END,NUM_LAYER
IF(HECRAS)Then
READ(1,*)NOSEG,NUMFLOW, HDT, IMON, IDAY, IYEAR, IHour,
Imin,NUM_LAYER
call hlsetseedmoment(Ihl_handle, IMON, IDAY, IYEAR, IHour,Imin, 0,
ierror)
NUMDHT = 1
Endif
END IF
!-----
-----
Allocate (IQ(NUMFLOW))
Allocate (JQ(NUMFLOW))
Allocate (IFLOWDIR(NUMFLOW))
Allocate (SEGVOLUME(NOSEG))
Allocate (SEGDEPTH(NOSEG))
Allocate (SEGVEL(NOSEG))
Allocate (Flow(NUMFLOW))
Allocate (CRNU(NUMFLOW))
Allocate (BRINTT(NUMFLOW))
!-----
-----
if (num_layer .lt. 1) then
num_layer=1
numdht=1
endif
if (numdht .lt. 1)numdht=1
!-----
-----
call hlsetnumlayers(Ihl_handle,num_layer,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)

```



```

write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
!-----
! Set the number of segments
!-----
call hlsetnumsegments(Ihl_handle, noseg, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
!-----
! Get Segment Name Map File if exists
!-----
open(unit=15,file=segfile,status='old', iostat=istat)
write(6,*)'Opening segment map file; iostat = ',istat '!3/11/08,rba !
if (istat.eq.0) then
write(6,*)'Segment Map Text file is: ',segfile !
do i=1, NOSEG
read(15,4000)SEGNAME
SEGNAME =(TRIM(SEGNAME)//CHAR(0)) !
call hlsetsegname(ihl_handle,i,segname,ierror)
write(6,*)'Segment ',i,' name: ',segname,' err code ',ierror !
4000 format(A30)
end do
Else
do i=1, NOSEG
call hlsetsegname(ihl_handle,i,'WASP-Seg',ierror)
end do
endif
!-----
! Set the number of flow paths
!-----
call hlsetnumflowpaths(Ihl_handle, numflow, ierror)

```

```
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
!-----
!-----
! Set the number of segment constituents
!-----
!-----
call hlsetnumsegconsts(Ihl_handle, inumsegconsts, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
!-----
!-----
! Set the number of flow path constituents
!-----
!-----
if(EFDC)call hlsetnumfpconsts (Ihl_handle, 3, ierror)
! if(DYNHYD)call hlsetnumfpconsts (Ihl_handle, 1, ierror)
if(DYNHYD)call hlsetnumfpconsts (Ihl_handle, 2, ierror) !6/10/08,rba
if(HECRAS)call hlsetnumfpconsts (Ihl_handle, 2, ierror) !6/10/08,rba
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
!-----
!-----
! Now we will set all the constituent types
!-----
!-----
call hlsetsegconststype(Ihl_handle, 1, 0, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
```

```

!-----
-----
if(EFDC)then
call hlsetsegconsttype(Ihl_handle, 2, 1, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
call hlsetsegconsttype(Ihl_handle, 3, 2, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
endif
!-----
-----
call hlsetfpconsttype(Ihl_handle, 1, 0, ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
if (DYNHYD)then !6/10/08,rba
call hlsetfpconsttype(Ihl_handle, 2, 0, ierror) !
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
endif
end if
if (HECRAS)then !6/10/08,rba
call hlsetfpconsttype(Ihl_handle, 1, 0, ierror) !
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
endif
end if
if (EFDC)then

```

```
call hlsetfpconsttype(Ihl_handle, 1, 1, ierror) !shouldn't this be 2,1
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
endif
call hlsetfpconsttype(Ihl_handle, 1, 2, ierror) !shouldn't this be 3,1
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
end if
```

!-----

```
call hlsetvartimestep(Ihl_handle,0,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
timestep=(hdt/86400.)
```

!-----

```
IF (HECRAS)then
call hlset timestep(Ihl_handle,timestep,ierror)
Else If (DYNHYD) then
call hlset timestep(Ihl_handle,timestep,ierror)
Else
call hlset timestep(Ihl_handle,hdt,ierror)
End If
```

!-----

```
call hlsethdtimestep(Ihl_handle,hdt,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
rinterval=(hdt*numdht)/86400.
IF (DYNHYD) THEN
```

```

rinterval=(hdt*numdht)
ENDIF
!-----
-----
call hlsetupdateint(Ihl_handle,rinterval,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
!-----
-----
call hlsethydtowaspratio(Ihl_handle,numdht,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
idt=1
!-----
-----
do i=1,numflow
if (binary) then
read(1)JQ(I), IQ(I)
else
IF(EFDC)read(1,1001)JQ(I), IQ(I)
IF(DYNHYD)read(1,1001)JQ(I), IQ(I)
IF(HECRAS)read(1,*)JQ(I), IQ(I)
1001 format(2(I5))
endif
end do
!-----
-----
NOCYCLES= END-START
NOCYCLES=NOCYCLES/(HDT*numdht)
IF(HECRAS)nocycles=1000000
Do itime=1,nocycles
do k=1,Noseg
if (itime .eq. 1) then
if (binary) then
if(EFDC)Read(1,end=999)SegVolume(k),SegDepth(k), SegVel(k)

```

```

if(DYNHYD)read(1,end=999)SegVolume(k),rjunk, SegDepth(k),SegVel(k)
else
if(EFDC)read(1,*,end=999)SegVolume(k),SegDepth(k),SegVel(k)
if(DYNHYD)read(1,*,end=999)SegVolume(k),rjunk, SegDepth(k),SegVel(k)
if(HECRAS)read(1,*,end=999)SegVolume(k),SegDepth(k), SegVel(k)
endif
1020 Format(5x,F15.0,5x,F15.0,5x,F15.0)
else
if (binary) then
if(EFDC)Read(1,end=999)SegVolume(k),SegDepth(k), SegVel(k)
if(DYNHYD)read(1,end=999)SegVolume(k),rjunk,SegDepth(k),SegVel(k)
else
if(EFDC)read(1,*,end=999)SegVolume(k),SegDepth(k), SegVel(k)
if(DYNHYD)read(1,*,end=999)SegVolume(k),rjunk, SegDepth(k),SegVel(k)
if(HECRAS)read(1,*,end=999)SegVolume(k),SegDepth(k),SegVel(k)
Write(6,*)'Segment = ',k
endif
1011 format(4(F17.0))
endif
end do
!-----
-----

do k=1,numflow
if (binary) then
if(EFDC)read(1)Flow(k),crnu(k),iflowdir(k)
IF(DYNHYD)READ(1)Flow(k),brintt(k) !6/10/08,rba
else
if (EFDC)read(1,*)Flow(k),crnu(k),brintt(k),iflowdir(k)
IF (DYNHYD)read(1,1012)Flow(k),brintt(k) !6/10/08,rba
IF (HECRAS)read(1,*)Flow(k)
endif
1012 format(2F20.0) !6/10/08,rba
1010 format(3(F17.0),I5)
end do
!-----
-----

if(itime .eq. 1)then
do k=1,numflow
if(EFDC)call hlsetflowpath(Ihl_handle,k,jq(k),iq(k),iflowdir(k),ierror)
if(DYNHYD)call hlsetflowpath(Ihl_handle,k,jq(k),iq(k),1,ierror)
if(HECRAS)call hlsetflowpath(Ihl_handle,k,jq(k),iq(k),1,ierror)

```

```

if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
end do
end if

```

!-----

```

-----
call hlsetseginfo(Ihl_handle,1,SegVolume,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
call hlsetseginfo(Ihl_handle,2,SegDepth,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
call hlsetseginfo(Ihl_handle,3,SegVel,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if

```

!-----

```

-----
call hlsetflowinfo(Ihl_handle,1,Flow,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
if(DYNHYD)Then !6/10/08,rba
call hlsetflowinfo(Ihl_handle,2,brintt,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop

```

```
end if
end if
if(HECRAS)Then
DO Itemp=1,numflow
brintt(Itemp)=0.00
End Do !6/10/08,rba
call hlsetflowinfo(Ihl_handle,2,brintt,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
end if
if(EFDC)Then
call hlsetflowinfo(Ihl_handle,2,crnu,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
call hlsetflowinfo(Ihl_handle,3,brintt,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
end if
time=RINTERVAL*itime
write(6,*)"Time is: ',itime,time
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
call hlmomentcomplete(Ihl_Handle,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
end do
```



```
999 continue
6000 format('Error ',I10, ' : ', A)
call hlgetcompact(Ihl_handle,compact,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
compact=compact*100
write(6,6040)compact
6040 format('Compaction Ratio is: ',F8.4)
call hlclose(Ihl_handle,ierror)
if(ierror .gt. 0)then
call hlgetlasterror(errstring)
write(6,6000) ierror, errstring
stop
end if
stop
end
```



فصل چہاردهم  
ماژول جامدات

## ۱-۱۴- مقدمه

جامدات معلق و بنتیک اجزای مهم کیفیت آب هستند. غلظت مواد جامد معلق اضافی می‌تواند مستقیماً از طریق مرگ‌ومیر و یا با کاهش نرخ‌رشد و مقاومت آن‌ها در برابر بیماری به ماهیان آسیب برساند. غلظت‌های بالا باعث کاهش نور و افزایش دمای سطح می‌شوند. کاهش تدریجی نور نرخ رشد جلبک و فراوانی غذای موجود برای ماهیان را تحت‌تأثیر قرار می‌دهد. همچنین ضایعات می‌توانند مناطق تخم‌ریزی کفزیان را تحت‌تأثیر قرار داده و به بی‌مهرگان آسیب برسانند. رسوبات آلی می‌توانند سطح اکسیژن محلول را کاهش دهند و باعث نبود تعادل در محیط زیست شوند.

جامدات از طریق جذب موادمغذی بر کیفیت آب معمولی تأثیر می‌گذارند. جذب موجب کاهش بخش‌های محلول  $\text{NH}_4$  و  $\text{PO}_4$ ، کاهش نیتروژن‌زایی و رشد جلبک‌ها می‌شود. درصدی از ذرات موادمغذی با رسوب از ستون آب خارج شده و با فرسایش و احیاء باز می‌گردند.

به‌همین ترتیب، پتانسیل مواد جامد بر میزان سموم، از جمله مواد شیمیایی آلی و مواد شیمیایی نانو تأثیر می‌گذارند. جذب باعث کاهش رسوب و فعالیت‌های زیستی شده و همچنین نشست در داخل ستون آب و برخی دیگر از شرایط پیک را کاهش می‌دهد. رسوب خالص، مواد شیمیایی را برای مدت طولانی در رسوبات ذخیره می‌کند. در میان رویدادهای بارگذاری، انتشار آب و احیاء مواد شیمیایی به ستون آب برمی‌گردند. وقایع سیلابی بزرگ، مقادیر قابل‌توجهی از رسوب و مواد شیمیایی را از رسوبات بالایی تا پایین‌دست را شستشو می‌دهد. دفن در زیر عمق‌زیستی به‌طور بالقوه مواد شیمیایی را از موجودات زنده جدا می‌کند.

سیستم مدل‌سازی WASP 8 از دو مدل جداگانه‌ی تغذیه‌گرایی پیشرفته و سموم پیشرفته پشتیبانی می‌کند که مدل مناسب در بخش مجموعه‌داده توسط کاربر انتخاب می‌شود. ماژول جامدات یک مجموعه‌ی مستقل از زیر روال به همراه ثابت‌ها، پارامترها و توابع زمان مربوطه می‌باشد. این مدل که بخشی از دو مدل بالایی است، قابل اجرا می‌شود.

جامدات نیز همانند سایر متغیرهای حالت، از طریق همرفتی و پراکندگی بین بخش‌ها منتقل می‌شوند. علاوه‌بر این، جامدات می‌توانند از طریق ستون آب ته‌نشین شده و در لایه‌ی کفزی سطحی (به‌عنوان مثال رسوب) رسوب کنند، از طرفی می‌توانند فرسایش‌یافته و دوباره به ستون آب بازگردند و در لایه‌های انتهایی پایینی دفن شوند. این فرآیندهای انتقال در ادامه توضیح‌ داده شده‌اند. با استفاده از گزینه‌ی حالت جامد در گروه انتقال، می‌توانید گزینه‌ی توصیفی (+) و یا یکی از گزینه‌های انتقال حالت جامد (۱ یا ۲) را برای هر سیستم حالت جامد انتخاب کنید. این گزینه‌ها نیز در بخش‌های زیر توضیح داده شده‌اند.

## ۱۴-۲- سیستم‌های جامدات

WASP 8 می‌تواند تا ۱۰ سیستم مختلف از جامدات را شبیه‌سازی کند که هر کدام یک محدوده از اندازه و جرم مخصوص مجزا را نشان می‌دهند. شما باید تعداد انواع جامدها را برای شبیه‌سازی انتخاب کنید و سپس اندازه و جرم مخصوص مشخصه‌ی آن‌ها را مشخص کنید. جدول (۱-۱۴) محدوده‌ی اندازه مشخصه برای کلاس‌های مختلف جامدات و جدول (۲-۱۴) جرم‌های مخصوص معمول را نشان می‌دهد.

جدول ۱-۱۴ طبقه‌بندی اندازه ذرات

نام معمولی	نام دانه‌بندی	محدوده‌ی اندازه
گل و لای	کلوئیدی	$< 1 \mu\text{m}$
گل و لای	رس	$1/0 - 3/9 \mu\text{m}$
گل و لای	سیلت	$3/9 - 62/5 \mu\text{m}$
شن	شن بسیار ریز	$62/5 - 125 \mu\text{m}$
شن	شن ریز	$125 - 250 \mu\text{m}$
شن	شن متوسط	$0/25 - 0/5 \text{ mm}$
شن	شن درشت	$0/5 - 1 \text{ mm}$
شن	شن بسیار درشت	$1 - 2 \text{ mm}$
ماسه	گرانول	$2 - 4 \text{ mm}$
ماسه	سنگ‌ریزه	$4 - 64 \text{ mm}$
ماسه	سنگ‌فرش	$64 - 256 \text{ mm}$
ماسه	تخته‌سنگ	$> 256 \text{ mm}$

جدول ۲-۱۴ تراکم ذرات

جرم مخصوص (g/mL)	ماده
۱/۲۷	ماده آلی (وزن خشک)
۲/۶۵	مواد معدنی سیلیس
۴/۰	ماسه‌های گارنت

جامداتی که باید شبیه‌سازی شوند در بخش سیستم‌ها مشخص می‌شوند، هر ردیف از یک سیستم مدلی مستقل است. شما می‌توانید با کلیک روی دکمه "Insert" و یا با تنظیم کرسر به ردیف پایین و فشار دادن فلش پایین بر روی کلیپ‌بورد، ردیف‌های جدید را وارد کنید. برای مشخص کردن یک متغیر از جامدات، روی یک سلول در ستون System Type دوبار کلیک کرده و سپس "SOLID" را انتخاب کنید. نام پیش‌فرض در ستون نام سیستم ارائه شده است. شما می‌توانید با دوبار کلیک کردن روی یک سلول در آن ستون نام توصیفی بیش‌تری را مشخص کنید.

جرم‌مخصوص ذرات نیز در بخش سیستم‌ها مشخص شده است. ستون جرم‌مخصوص از پیش تنظیم شده و برابر با یک گرم بر میلی‌لیتر جرم‌مخصوص اسمی آب است. اگر جرم‌مخصوص متناوب را برای سیستم جامد مشخص نکنید، WASP 8 جرم‌مخصوص ذرات را به ۲/۶۵ گرم بر میلی‌لیتر باز می‌گرداند. قطر مشخصه‌ی ذره برای هر جامد در بخش ثابت‌ها و در گروه انتقال جامد مشخص می‌شود. اگر قطر ذرات را برای سیستم جامدات مشخص نکنید، WASP 8 مقدار پیش‌فرض ۰/۰۲۵ میلی‌متر را تعیین خواهد کرد که مشخصه گل و لای می‌باشد.

### ۱۴-۳- بخش‌های بدنه‌ی آب

شبکه‌های مدل WASP 8 از بخش‌های گسسته‌ی فضایی یا محفظه‌هایی تشکیل شده‌اند. تقسیم‌بندی دقیق شبکه بهترین مورد استفاده از نرم‌افزار سازنده‌ی ویژه‌ی WASP می‌باشد که به سیستم عامل‌های GIS مانند BASINS مرتبط است. از طرفی شبکه‌های ساده می‌توانند مستقیماً در رابط کاربر WASP 8 مشخص شوند.

هر بخش با استفاده از یک ردیف در قسمت بخش‌های رابط نمایش داده می‌شود. تقسیم‌بندی این بخش‌ها می‌تواند به چهار نوع انجام شود:

- آب سطحی،
- آب زیرسطحی،
- اعماق سطحی،
- اعماق زیرسطحی،

این موارد در ستون Segment Type مشخص شده‌اند.

حالت انتقال تعیین می‌کند که انتقال دوگانه در هر بخش چگونه محاسبه می‌شود. این موضوع در

سند جریان پراکنده WASP 8 پوشش داده شده است.

برای شبکه‌هایی که به صورت عمودی گسترش می‌یابند، شما باید بخش‌های را با استفاده از تفکیک زیر ستون، به صورت عمودی ارائه کنید. تنظیمات پیش فرض بر روی گزینه‌ی "None" قرار دارد که نشان می‌دهد هیچ بخش از مدل مستقیماً زیر بخش فعلی وجود ندارد. برای مشخص کردن یک زیربخش، روی سلول دو بار کلیک کرده و بخش مناسب را از یک فهرست انتخاب کنید. WASP 8 بخش‌های مرتب شده در ستون‌های عمودی را به صورت داخلی ترسیم می‌کند.

**ستون آب** - ستون آب از بخش‌های آب‌سطحی و زیرسطحی تشکیل شده که با مسیرهای جریان دوگانه و تبادلات پراکنده به هم متصل شده‌اند.

**بستر رسوبی** - بسترهای رسوبی لایه‌هایی هستند که از بخش‌های سطحی و زیرسطحی مرتب شده تشکیل شده‌اند که در پشته‌های عمودی در زیر یک قطعه از ستون آب قرار دارند. هر بخش با استفاده از جرم مخصوص حجم، تخلخل، پیوستگی و محتوای آلی آن تعریف می‌شود. این ویژگی‌ها به طور مستقیم در WASP 8 مشخص نشده‌اند، اما محصولی از سیستم‌های جامدات منفرد می‌باشند که همراه با ویژگی‌های آن‌ها شبیه‌سازی شده‌اند.

تعیین غلظت‌های اولیه و واقع‌بینانه در بخش‌های کفزی برای جامدات مهم است. از غلظت اولیه‌ی کل جامدات در یک بخش از بستر که بر اساس میلی گرم بر لیتر یا گرم بر مترمکعب می‌باشد، برای تنظیم جرم مخصوص حجم مرجع (گرم بر میلی لیتر) و تخلخل ( $L_w/L$ ) استفاده می‌شود. همان‌طور که در بخش ۸ توضیح داده شده است، تعادل جرم مخصوص، جرم جامد از جرم مخصوص و تخلخل توده‌ای برای بخش‌های کفزی را که مواد جامد مجزا می‌باشد، اضافه یا حذف می‌کند. غلظت‌های اولیه در قسمت بخش‌ها، در گروه شرایط اولیه مشخص شده است.

بسته به این که آیا بخشی از خاک رس و اندازه‌ی سیلت (آن‌هایی که کم‌تر از  $0.10$  میلی متر هستند) از بخش بحرانی مشخص شده تجاوز می‌کند، یک بخش از بستر چسبنده یا غیرچسبنده در نظر گرفته می‌شود. شما می‌توانید بخشی از رسوبات چسبنده‌ی بحرانی را مشخص کنید که در بالای آن در بخش ثابت‌ها از گروه انتقال جامد، بستر به طور منسجم عمل می‌کند. مقدار پیش فرض برای این مقدار  $0.2$  می‌باشد. در بسترهای چسبنده، ذرات رس و لای به عنوان یک واحد با یکدیگر فرسایش می‌یابند. در بسترهای غیرچسبنده، هر گروه‌ی از ذرات به طور جداگانه فرسایش می‌یابد.

## ۱۴-۴- رژیم‌های رسوب‌گذاری جریان

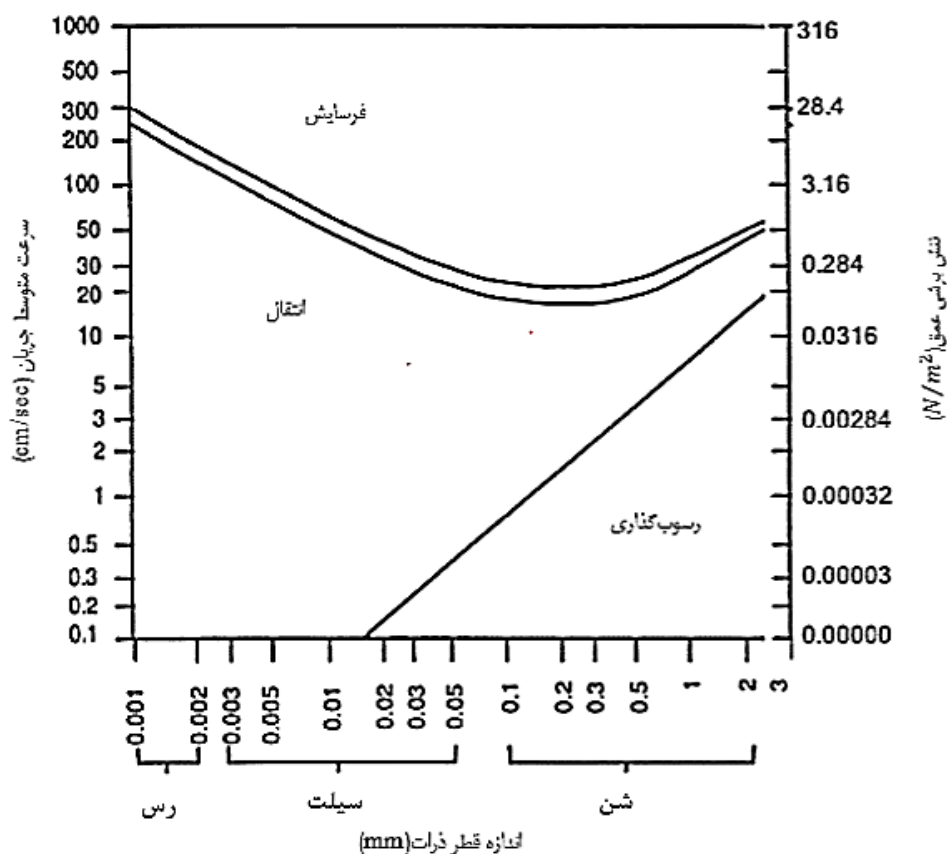
انتقال جامدات در آب‌های سطحی تا درجه‌ی زیادی توسط اندازه‌ی ذرات و سرعت جریان (یا تنش برشی کف) کنترل می‌شود. شکل (۱۴-۱) بخشی از نمودار کلاسیک هولستروم-ساندبورگ می‌باشد که دستورالعمل تقریبی را در رژیم‌های انتقال خالص برای اندازه‌های مختلف ذرات و با توجه به محدوده‌ی

سرعت‌های جریان ارائه می‌دهد (نمودار اصلی فراتر از شن و ماسه، سنگریزه‌ها، قلوه‌سنگ و سنگ می‌باشد). این نمودار توسط فیلیپ هولستروم در پایان‌نامه‌ی او با عنوان "رودخانه فیریس" در سال ۱۹۳۵ ساخته شد و سپس توسط آکه ساندبورگ در سال ۱۹۵۶ اصلاح شد.

منحنی قرارگرفته در قسمت بالای نمودار، حداقل سرعت لازم برای فرسایش یک ذره از بستر رسوبی را نشان می‌دهد. در حالتی که سرعت فرسایش در زیر این سرعت بحرانی باشد، تنش برشی کف برای حرکت یک ذره از بستر رسوبی کافی نیست و تمایل دارد که در جای خود باقی بماند، اما در بالای این سرعت بحرانی، یک ذره شروع به حرکت می‌کند و به حالت تعلیق در می‌آید.

منحنی پایین در نمودار، حداقل سرعت موردنیاز برای باقی‌ماندن یک ذره در حالت تعلیق و بدون رسوب‌گذاری را نشان می‌دهد. تنش برشی کف در بالای این سرعت بحرانی، مانع از انتقال یک ذره‌ی ته‌نشینی به بستر رسوبی زیرین می‌شود. در زیر این سرعت بحرانی، زمانی که یک ذره‌ی ته‌نشینی که با بستر برخورد می‌کند تمایل دارد، در بستر باقی بماند.





شکل ۱۴-۱ رژیم های رسوب گذاری جریان

### ۱۴-۵- انتقال جامدات توصیفی

اگر گزینه‌ی ۰ به صورت پیش فرض برای یک سیستم Solid انتخاب شده باشد، WASP 8 سرعت ته نشینی و تعلیق مخصوص بخش را همان طور که در بخش پارامتر داده‌ها در گروه Solids مشخص شده است، اعمال می‌کند. ته نشینی شامل انتقال یک جامد از یک قطعه در ستون آب به بخش آب زیرسطحی در همان ستون می‌باشد. رسوب گذاری عبارت است از: انتقال جامدات از یک قطعه در ستون آب به قسمت اعماق کف. دفن جامدات به طور داخلی براساس محاسبات تعادل جرم و برای کل مواد جامد درون بخش‌های کفزی محاسبه می‌شود. این موضوع در بخش ۸ توضیح داده شده است. توجه داشته باشید که سرعت رسوب برای یک جامد عموماً جزئی از سرعت ته نشینی مشخص برای آن جامد محسوب

می‌شود، این مورد در زیربخش انباشت در بخش ۶ نیز توضیح داده شده‌است. مقادیر پیش‌فرض ثابت‌های رسوبی برای گزینه‌ی Solids 0، به گونه‌ای تنظیم شده‌است که از سرعت‌های ته‌نشینی مشخص برای رسوب‌گذاری استفاده می‌شود.

**ته‌نشینی و انباشت** - سرعت ته‌نشینی جامدات  $w_s$  (متر بر روز) باید برای ته‌نشینی و انباشت هر بخش از ستون آب مشخص شود. WASP برای به‌دست آوردن  $w_s$ ، شار جامدات ( $\text{g/m}^3\text{-day}$ ) را در غلظت مواد جامد قطعه ( $\text{g/m}^3$ ) ضرب می‌کند. توجه داشته‌باشید که سرعت رسوب برای یک جامد عموماً کسری از سرعت ته‌نشینی مشخص برای آن جامد می‌باشد. این مورد در زیربخش انباشت در بخش ۶ نیز توضیح داده شده‌است. در WASP 8، ثابت انتقال جامد می‌تواند مشخص شود تا رسوب را به تنش‌برشی وابسته کند. مقادیر پیش‌فرض ثابت‌های رسوبی برای گزینه‌ی Solids 0، به گونه‌ای تنظیم شده‌است که از سرعت‌های ته‌نشینی مشخص برای رسوب استفاده می‌شود.

توجه داشته‌باشید که سرعت ته‌نشینی و رسوب می‌تواند برای کلاس‌های اندازه‌ی ذرات اعم از سیلت درشت و بالاتر، زیاد باشد و باعث بارهای شدید عددی شود. در مواردی که ته‌نشینی بیش از ۰/۱٪ باشد مواد جامد را از یک قطعه در ستون آب خارج می‌کند؛ WASP 8 از یک راه‌حل تحلیلی در گام زمانی محاسبه که در ضمیمه‌ی ۱ تشریح شده‌است، استفاده می‌کند. این راه‌حل،  $C^*$  (گرم بر مترمکعب) را محاسبه می‌کند و از میانگین غلظت جامد نیز در طول گام زمانی از راه‌حل WASP 8 برای ته‌نشینی و جذب خارج از قطعه در طی گام زمانی استفاده می‌شود.

**تعلیق** - سرعت تعلیق رسوبات  $w_T$  (متر بر روز) باید برای تعلیق از هر قطعه‌ی کفزی سطحی مشخص شود. WASP برای به‌دست آوردن  $w_T$ ، شار جامدات ( $\text{g/m}^3\text{-day}$ ) را در غلظت مواد جامد قطعه ( $\text{g/m}^3$ ) ضرب می‌کند.

#### ۱۴-۶- انتقال جامد مبتنی بر فرآیند

اگر گزینه‌ی ۱ یا ۲ برای سیستم جامد انتخاب شود، آن‌گاه WASP 8 از مجموعه‌ای از ثابت‌ها به همراه معادلات مبتنی بر فرآیند؛ برای محاسبه‌ی ته‌نشینی پویا، انباشت، فرسایش و سرعت تعلیق استفاده خواهد کرد. درحالی که ته‌نشینی تنها تابعی از اندازه و جرم‌مخصوص ذرات می‌باشد، سایر پارامترهای فرسایش، رسوب و تعلیق تابعی از تنش‌برشی کف هستند. عمل فرسایش و تعلیق نیز به این بستگی دارد که آیا بستر رسوب به‌طور منسجم و یا غیرمنسجم عمل می‌کند. دفن جامدات براساس محاسبات تعادل جرم و برای کل مواد جامد درون بخش‌های کفزی محاسبه می‌شود. این موضوع در بخش ۸ توضیح داده شده‌است.

**تنش برشی کف آب** - آب در حال جریان، تنش برشی ( $N/m^2$ )  $\tau_b$  را بر روی لایه‌ی سطحی اعماق اعمال می‌کند. WASP8 از عبارت دارسی-ویسباخ برای تنش برشی پایین مربوط به زبری (اصطکاک دیواره) استفاده می‌کند که تابعی از سرعت متوسط آب  $U$  (متر بر ثانیه) و جرم مخصوص آب  $\rho_w$  (کیلوگرم بر مترمکعب) می‌باشد:

$$\tau_b = \frac{\rho_w f u^2}{8} \quad (1-14)$$

$f$  فاکتور اصطکاک دارسی-ویسباخ است، که توسط فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$f = \frac{0/24}{\log^2(12H/k_s)} \quad (2-14)$$

که در آن  $H$  عمق آب (متر)،  $D_{50}$  اندازه‌ی دانه‌ی رسوبات متوسط (متر) و  $k_s$  ارتفاع معادل زبری (متر) می‌باشد، که به صورت  $3D_{50}$  یا  $0/01 H$ ، هر کدام که بزرگ‌تر باشد، محاسبه می‌شود. که مقدار آن برای یک بستر با ماسه‌ی متوسط ( $0/5$ ) و یا اندازه‌ی ریزتر در جوی‌هایی با عمق بزرگ‌تر از  $5$  سانتی‌متر، مقدار ثابت  $0/025$  فرض می‌شود. برای مقادیر  $\rho_w$  نزدیک به  $998$ ، تنش برشی پایین به روش زیر محاسبه می‌شود:

$$\tau_b = 3/16u^2 \quad (3-14)$$

**ته‌نشینی** - ته‌نشینی شامل حرکت جامدها در طول ستون آب می‌باشد. WASP 8 سرعت ته‌نشینی را با استفاده از روش ون ریجن ( $1984$ ) برای هر جامد محاسبه می‌کند. این یک سری از معادلات بر اساس میانگین قطر ذره  $D$  (متر)، جرم مخصوص ذره  $\rho_s$  (کیلوگرم بر مترمکعب)، جرم مخصوص آب  $\rho_s$  (کیلوگرم بر مترمکعب) و  $\mu$  ویسکوزیته‌ی مطلق می‌باشد:

$$\frac{W_s}{\sqrt{g'D}} = \begin{cases} \frac{R_d}{18} & D \leq 100 \times mm \\ \frac{10}{R_d} \left( \sqrt{1 + \frac{0}{01R_d^2}} - 1 \right) & D \leq 100 \times mm \leq 1000 \times mm \\ 1/1 & D \leq 1000 \times mm \end{cases} \quad (4-14)$$

که در آن  $R_d$  عدد رینولدز ذرات رسوبی است:

$$R_d = \frac{D_s \sqrt{g' D_s}}{\mu / \rho_w} \quad (5-14)$$

جایی که شتاب گرانش (g) برابر  $9.807 / m/sec^2$  می‌باشد، برای  $D_s < 100 \mu m$  (ماسه‌های بسیار ریز و کوچک‌تر)، عبارت ون ریجن به قانون استوکس ساده می‌شود:

$$g' = g \left( \frac{\rho_s}{\rho_w} - 1 \right) \quad (6-14)$$

زمانی که  $D_s < 1000 \mu m$  (ماسه‌های بسیار درشت و بزرگ‌تر) و جرم‌مخصوص ذرات  $2650$  کیلوگرم بر مترمکعب می‌باشد، عبارت ون ریجن به صورت زیر ساده می‌شود:

$$w_s = \frac{D_s^2}{18\mu} g (\rho_s - \rho_w) \quad (7-14)$$

در فاز مقداردهی اولیه، مدل WASP 8 سرعت ته‌نشینی ویژه را با استفاده از جرم‌مخصوص و قطر ذرات ورودی همراه با مقادیر اسمی ویسکوزیته‌ی آب ( $0.001 \text{ kg/m-sec}$ ) و جرم‌مخصوص آب ( $1000$  کیلوگرم بر مترمکعب) برای هر جامد شبیه‌سازی شده، محاسبه می‌کند.

**انباشت** - شامل حرکت مواد جامد از ستون آب به بستر اعماق سطحی (یا رسوب) می‌باشد. در رسوب گیرچسبنده، ته‌نشینی ذرات جامد به وسیله‌ی تنش‌برشی جریان آب کاهش می‌یابد. WASP 8 سرعت ته‌نشینی  $w_D$  را به صورت حاصل ضرب سرعت ته‌نشینی  $w_s$  در احتمال رسوب در تماس با بستر ( $\alpha_D$ )، برای هر جامد محاسبه می‌کند.

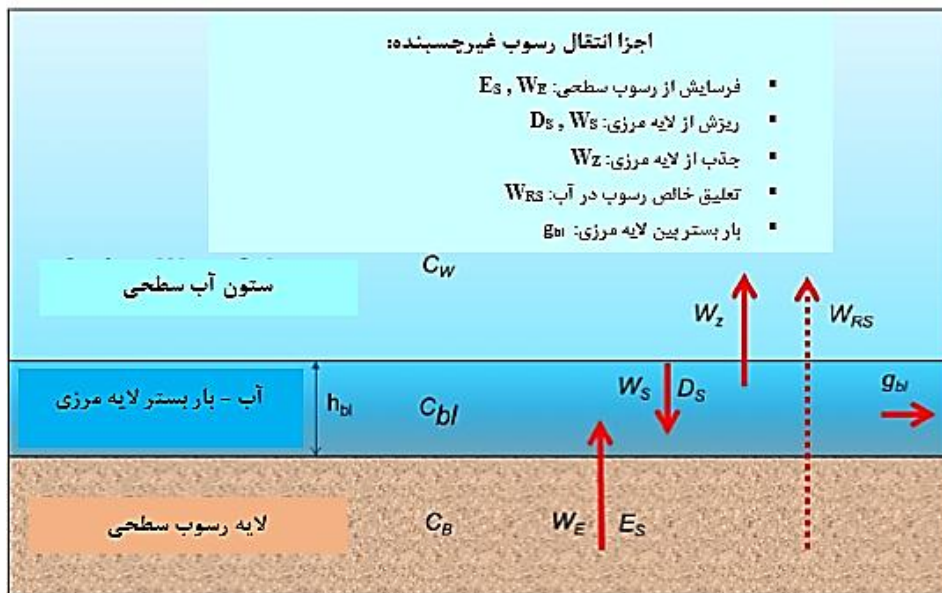
$$w_D = w_s \times \alpha_D \quad (8-14)$$

که در آن  $\alpha_D$  تابعی از تنش‌برشی کف  $\tau_b$  و همچنین  $\tau_{CD1}$  و  $\tau_{CD2}$  آستانه‌های تنش‌برشی بحرانی پایین و بالا می‌باشند، است. با استفاده از یک رابطه توسط کرونه (۱۹۶۳)، برای  $\alpha_D$  برابر با یک  $\tau_b >$   $\tau_{CD1}$  و برای  $\alpha_D$  برابر با صفر  $\tau_b > \tau_{CD2}$  در محدوده تنش‌برشی بحرانی،  $\alpha_D$  ۱ تا ۰ تغییر می‌کند وقتی که تنش‌برشی پایین از  $\tau_{CD1}$  تا  $\tau_{CD2}$  به روش تقریباً خطی بالا می‌رود:

$$\alpha_D = \left( \frac{\tau_{CD1} - \tau_b}{\tau_{CD2} - \tau_{CD1}} \right)^{\gamma_D} \quad (9-14)$$

که در آن  $\tau_{CD1}$  و  $\tau_{CD2}$  ( $N/m^2$ ) هستند و  $\gamma_D$  نمای بدون بعد می‌باشد. برای پیش‌فرض  $\gamma_D$ ، تابع درون‌یابی خطی است. این سه ثابت ورودی برای هر جامد در بخش ثابت‌ها، گروه انتقال جامد هستند. تنش‌برشی بحرانی پایین‌تر برای رسوب به‌طور کلی نزدیک به صفر ( $N/m^2$ ) در نظر گرفته می‌شود، درحالی که تنش‌برشی بحرانی بالاتر برای رسوب در محدوده‌ی  $0.1-0.2$  ( $N/m^2$ ) است، بسته به اندازه ذرات (همان‌طور که با منحنی پایین‌تر نشان داده می‌شود، ذرات کوچک‌تر مقادیر  $\tau_{CD2}$  پایین‌تری دارند).

در شکل ۱ برای گزینه‌های جامد ۱ و ۲، مقادیر پیش‌فرض برای  $\tau_{CD1}$  و  $\tau_{CD2}$  روی ۰ و  $0.2$  تنظیم شده‌اند. برای گزینه‌ی جامدات ۰، مقادیر پیش‌فرض بر روی ۱۰ و  $20 (N/m^2)$  تنظیم شده‌اند، به طوری که تحت تمام شرایط معقول، انباشت بر روی سرعت ته‌نشینی مشخص تنظیم شده‌است. **فرسایش غیرچسبنده** - فرسایش غیرچسبنده، جدا شدن ذرات جامد از رسوبات کف به لایه مرزی بوده و تعلیق، شامل انتقال ذرات جامد از لایه مرزی به ستون آب می‌باشد (شکل ۱۴-۲). در بخش‌های غیرچسبنده کفزی، تمام ذرات جامد در معرض فرسایش غیرچسبنده و تعلیق قرار دارند، درحالی که در بخش‌های بستر چسبنده، تنها شن و ماسه و ذرات بزرگ‌تر (قطر بیش‌تر از  $0.1$  میلی‌متر) در معرض فرسایش غیرچسبنده و تعلیق می‌گیرند.



شکل ۱۴-۲ فرسایش غیرچسبنده و تعلیق

در WASP 8، سرعت و شار فرسایش برای هر کلاس از اندازه‌ی ذرات با استفاده از رابطه ون ریجن یا رابرتز محاسبه می‌گردد (گزینه‌ی ۱ یا ۲ جامد). این‌ها براساس قطر و جرم‌مخصوص ذره، تنش برشی کف و تنش برشی بحرانی برای فرسایش هستند.

الگوریتم فرسایش ون ریجن (گزینه‌ی جامد۱) مقدار بدون بعد E را محاسبه می‌کند که نسبت فرسایش ناخالص به نرخ رسوب ناخالص می‌باشد. بنابراین سرعت فرسایش حاصل ضرب E و سرعت ته‌نشینی می‌باشد:

$$w_E = E \times w_s \quad (10-14)$$

محاسبه‌ی E در ون ریجن بدون بعد، به‌صورت زیر است:

$$E = 0/015 \gamma_E \frac{D_s}{k_s} R_d^{-0/2} \tau_*^\uparrow \quad (11-14)$$

که در آن  $\gamma_E$  یک ضریب مشخص برای کاربر می‌باشد که به‌صورت پیش‌فرض ۱/۰ است،  $D_s$  اندازه‌ی ذره‌ی میانه (متر)،  $k_s$  ارتفاع زبری (متر)،  $R_d$  عدد داسیمتری ذرات رسوبی رینولدز (تعریف‌شده در بالا) و  $\tau_*^\uparrow$  یک نمای مشخص برای کاربر بوده که مقدار پیش‌فرض آن ۱/۵ می‌باشد و در آخر  $\tau_*^\uparrow$  تنش‌برشی می‌باشد که بدون بعد است:

$$\tau_* = \frac{\tau_b - \tau_{CE}}{\tau_{CE}} \quad \tau_b \geq \tau_{CE} \quad (12-14)$$

$$\tau_* = 0 \quad \tau_b < \tau_{CE}$$

در این فرمول  $\tau_b$  تنش‌برشی کف ( $N/m^2$ )، و  $\tau_{CE}$  تنش‌برشی بحرانی برای فرسایش می‌باشد.

$$\tau_{CE} = \gamma_{CE} (\rho_s - \rho_w) g D_s \theta_c \quad (13-14)$$

که در آن  $\gamma_{CE}$  یک ضریب مشخص‌شده توسط کاربر می‌باشد که مقدار آن به‌صورت پیش‌فرض ۱/۰ است و  $\theta_c$  پارامتر نشان‌دهنده‌ی میدان‌های بدون بعد بوده که توسط براونلی (۱۹۸۱) متناسب با منحنی شیلد محاسبه می‌شود:

$$\theta_{CE} = 0/22 R_d^{-0/6} + 0/06 \times 10^{-7/7} R_d^{-0/6} \quad (14-14)$$

سرعت بحرانی برای فرسایش  $u_{CE}$  (متر برثانیه)،  $\tau_{CE}$  سرعتی است که تولید می‌شود.

با تعیین مقادیر ثابت‌های:  $\tau_*^\uparrow$  توان تنش‌برشی برای تعلیق غیرچسبنده (پیش‌فرض ۱/۵)؛  $\gamma_{CE}$  ضریب تنش‌برشی بحرانی برای تعلیق غیرچسبنده (پیش‌فرض ۱/۰) و  $\gamma_E$  ضریب تنش‌برشی برای تعلیق غیرچسبنده (پیش‌فرض ۱/۰) در WASP 8، شما می‌توانید فرسایش غیرچسبنده‌ی ون ریجن را در گروه انتقال جامدات تنظیم کنید:

جامدات شناور در لایه مرزی ممکن است در طول بستر رسوب با بار بستر و یا با تعلیق به ستون آب منتقل شوند.

الگوریتم فرسایش رابرتز (گزینه‌ی جامدات ۲) سرعت فرسایش  $w_E$  (متر برثانیه) را برای هر کلاس از اندازه‌ی ذرات به‌صورت تابعی از تنش‌برشی کف  $\tau_b$  و جرم‌مخصوص حجمی  $\rho_b$  محاسبه می‌کند.

$$w_E = \gamma_E A \rho_b^m \tau_b^n \quad (15-14)$$

ضرایب برازش  $A$ ،  $m$  و  $n$  به صورت تجربی برای اندازه‌های مختلف ذرات از سیلت ریز (کم‌تر از ۵/۷ نانومتر) تا ماسه درشت (بزرگ‌تر از ۱/۲۵ میلی‌متر) تعیین شدند. در WASP 8، شما می‌توانید نرخ فرسایش رابرتز را با تعیین مقداری برای ضریب تنش‌برشی و برای تعلیق غیرچسبنده  $\gamma_E$  (پیش فرض ۱) در گروه انتقال جامد تنظیم کنید.

**تعلیق غیرچسبنده** - تعلیق غیرچسبنده، شامل انتقال ذرات جامد از لایه‌ی متحرک یا از بخش کف دریا به ستون آب می‌باشد (شکل ۲). ذرات فرسایش‌یافته در لایه مرزی که بار بستر و تحت تنش‌برشی بحرانی تعلیق  $\tau_{CRS}$  می‌باشند، حرکت می‌کنند.

$$\tau_{CRS} = 0/1 \frac{(4w_s 100/D_*)^2}{\rho_w/1000} \quad (16-14)$$

که در آن  $w_s$  سرعت ته‌نشینی (متر بر ثانیه)،  $\rho_w$  جرم‌مخصوص آب (کیلوگرم بر مترمکعب) و  $D_*$  قطر ذره می‌باشد که بدون بعد بوده که توسط فرمول زیر محاسبه می‌شود؛

$$D_* = \left[ \frac{(\rho_s - \rho_w)}{\rho_w} \frac{g}{\nu^2} \right]^{1/3} \quad (17-14)$$

هنگامی که تنش‌برشی کف  $\tau_{CRS}$  بیش‌تر می‌شود، ذرات از لایه‌ی مرزی متحرک وارد می‌شوند و ته‌نشینی آغاز می‌شود. تعیین سرعت خالص تعلیق  $w_R$  به صورت زیر می‌باشد:

$$w_R = f_{RS} \times w_E \quad (18-14)$$

که در آن  $f_{RS}$  کسری از فرسایش غیرچسبنده می‌باشد که به تعلیق درآمده است.

$$f_{RS} = 0 \quad \tau_b < \tau_{CRS} \quad (19-14)$$

$$f_{RS} = \frac{\ln(u_*/w_s) - \ln(u_{*CRS}/w_s)}{\ln(4) - \ln(u_{*CRS}/w_s)} \quad \tau_b \geq \tau_{CRS} \quad (20-14)$$

$$f_{RS} = 1 \quad \tau_b \geq \tau_{CRS} \quad (21-14)$$

که در آن  $u_*$  سرعت برشی (متر بر ثانیه)،  $u_{*CRS}$  سرعت برشی بحرانی برای تعلیق (متر بر ثانیه) و  $w_s$  سرعت ته‌نشینی ذرات (متر بر ثانیه) می‌باشد. سرعت برشی و سرعت برشی بحرانی به صورت زیر است:

$$u_* = \sqrt{\tau_b / \rho_w} \quad (22-14)$$

$$u_{*CRS} = \sqrt{\tau_{CRS}/\rho_w} \quad (۲۳-۱۴)$$

**بار بستر غیرچسبنده** - انتقال ذرات جامد غیرچسبنده به پایین دست از طریق لایه‌ی متحرک می‌باشد (شکل ۲). بار بستر زمانی آغاز می‌شود که تنش برشی کف از تنش برشی بحرانی برای فرسایش  $\tau_{CE}$  بیشتر شود. بیش تر ذرات فرسایش یافته دوباره به لایه رسوب سطحی بر می‌گردند. شار بار بستر در واحد عرض،  $g_{bl}$  توسط عبارت ون ریجن داده می‌شود:

$$g_{bl} = \alpha_{bl} \rho_s u h \left( \frac{D_{50}}{h} \right)^{1/2} M_e^\uparrow \quad (۲۴-۱۴)$$

که در آن  $\alpha_{bl}$  یک ضریب برازش شده،  $u$  سرعت جریان (متر بر ثانیه)،  $h$  عمق (متر)،  $\uparrow$  توان و  $M_e$  به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$M_e = \frac{u - u_{CE}}{\sqrt{\left( \frac{\rho_s - \rho_w}{\rho_w} \right) g D_{50}}} \quad (۲۵-۱۴)$$

که در آن  $u_{CE}$  سرعت بحرانی برای فرسایش می‌باشد که در بخش قبلی ارائه شده است. ون ریجن معادله‌ی شار بار بستر را برای داده‌های اندازه‌گیری شده انتقال واسنجی نمود (ون ریجن، ۲۰۰۷) و با به دست آوردن،

$$\alpha_{bl} = 1, \quad \uparrow = 1/5 \quad \text{در WASP8 و } \alpha_{bl} \text{ را ارائه می‌دهد:}$$

$$\alpha_{bl} = 15 \times vBLmult \quad (۲۶-۱۴)$$

که در آن  $vBLmult$  نشان دهنده‌ی ضریب واسنجی برای شار بار بستر (پیش فرض ۱) بوده و  $\uparrow$  بر روی VRNCohExp تنظیم شده است، توان پیش فرض تنش برشی برای تعلیق غیرچسبنده ۱/۵ می‌باشد. هر دوی آن‌ها در بخش ثابت‌ها در گروه انتقال جامدات مشخص شده‌اند.

**تعلیق چسبنده** - فرسایش چسبنده شامل جداسازی و انتقال لایه‌ی نازکی از رسوبات چسبنده از رسوبات کف دریا به ستون آب می‌باشد. تمام جامدات چسبنده در لایه‌ی فرسایش در سرعت فرسایش،  $w_E$  (متر بر ثانیه) منتقل می‌شوند.

فرمول قانون تنش برشی بیش از حد برای شار فرسایش چسبنده، یک عبارت رایج به صورت زیر است: (لیک و همکاران، ۱۹۹۴).

$$E_{coh} = f_{coh} M \tau_*^n \quad (۲۷-۱۴)$$

که در آن  $M$  ضریب تنش برشی ( $g/m^3 \cdot sec$ )،  $n$  توان تنش برشی،  $f_{coh}$  کسری از بستر سطحی می‌باشد که چسبنده است و  $\tau_*$  نیز تنش برشی بیش از حد ( $N/m^2$ ) می‌باشد.



$$\tau_* = \frac{\tau_b - \tau_{cE}}{\tau_{cE}} \quad \tau_b \geq \tau_{cE} \quad (28-14)$$

$$\tau_* = \frac{\tau_b - \tau_{cE}}{\tau_{cE}} \quad \tau_b \geq \tau_{cE}$$

$$\tau_* = 0 \quad \tau_b < \tau_{cE} \quad (29-14)$$

که در آن  $\tau_b$  تنش برشی کف ( $N/m^2$ ) و  $\tau_{cE}$  نیز تنش برشی بحرانی برای فرسایش می‌باشد. مجموعه‌ی ثابت‌های چسبنده را می‌توان برای هر جامد در بخش ثابت‌ها در گروه انتقال جامد، مشخص نمود. مقدار ضریب تنش برشی بین  $1/100-0/1$  ( $g/m^3\text{-sec}$ ) متغیر بوده و مقدار پیش‌فرض آن برابر با ۵ می‌باشد. مقدار شار تنش برشی نیز بین  $1/6$  تا ۴ متغیر بوده و مقدار پیش‌فرض آن برابر با ۳ می‌باشد و همچنین تنش برشی بحرانی برای فرسایش بین  $0/5$  تا ۸ متغیر بوده و مقدار پیش‌فرض آن ۲ می‌باشد. ضریب تنش برشی، توان و تنش برشی بحرانی برای فرسایش می‌تواند به‌طور مکانی در بدنه‌ی آب تغییر کند. شما می‌توانید مقادیر مختلف را برای هر بخش از سطح کفزی در بخش داده‌ی پارامتر در گروه جامد وارد کنید. اگر یک مقدار غیرصفر برای یک بخش مشخص شود، از آن مقدار به جای ثابت استفاده می‌شود.

#### ۱۴-۷- تولید و انحلال جامدات زیستی

جامدات زیستی شامل جلبک زنده و ضایعات غیرزنده می‌باشند. مدل تغذیه‌گرایی WASP 8 رشد، ته‌نشینی و مرگ فیتوپلانکتون‌ها و جلبک‌های ماکرو را با تولید، ته‌نشینی و انحلال دتریتوس شبیه‌سازی می‌کند. وزن خشک کل این اجزای جامد زنده به غلظت مواد جامد غیرآلی اضافه می‌شود تا کل مواد جامد معلق در بخش‌های ستون آب تولید شود.

در مدل سمی WASP 8، یک یا چند متغیر جامدات را می‌توان به صورت زنده توصیف نمود. برای جامد "i" نرخ تولید خالص  $R_{prod,i}$   $g/m^3\text{-day}$  را ارائه می‌دهد.

$$R_{prod,i} = (R_{p,seg} - R_{p,t})\theta_{prod}^{T-20} \quad (30-14)$$

که در آن،  $R_{p,seg}$  متغیر فضایی نرخ تولید خالص جامد زیستی ( $g/m^3 - day$ ) مشخص شده در بخش پارامترها، جامدات؛ نرخ تولید خالص جامد زیستی  $R_{p,t}$  که در بخش متغیر زمانی مشخص شده است و  $\theta_{prod}^{T-20}$  روند ضریب تصحیح دما می‌باشد که در بخش ثابت‌ها در گروه انتقال جامدات مشخص شده است. به‌طور مشابه، ثابت نرخ انحلال  $k_{diss,i}$  ( $1/day$ ) نیز به‌صورت زیر است:

$$k_{diss,i} = (k_{dseg} + k_{d,t})\theta_{dis}^{T-20} \quad (31-14)$$

که در آن،  $k_{dseg}$  ثابت نرخ متغیر مکانی انحلال جامد زیستی (1/day) که در بخش پارامترهای گروه جامد مشخص شده است؛  $k_{d,t}$  ثابت نرخ متغیر زمان انحلال جامد زیستی (1/day) مشخص شده در بخش توابع زمان و  $\theta_{diss}^{T-20}$  ضریب تصحیح دما، که در بخش ثابت‌ها در گروه انتقال جامدات مشخص شده است.

نرخ انحلال  $R_{diss}$  (1/day) از حاصل ضرب ثابت نرخ انحلال آن  $k_{diss,i}$  (1/day) و غلظت آن (گرم بر مترمکعب) به دست می‌آید.

$$R_{diss,i} = k_{diss,i} \times S_i \quad (۱۴-۳۲)$$

اگر کاربر محل وزن خشک Ash Dry و شماره‌ی شناسایی جامد در فصل مشترک در گروه انتقال جامد را مشخص کند، باقی‌مانده‌ی غیرآلی جامد زیستی "i" انحلال به جامد "j" اضافه خواهد شد. کسر کربن آلی جامد زیستی "i" در صورتی به "k" DOC اضافه خواهد شد که کاربر شماره‌ی شناسایی DOC کربن آلی را که در بخش ثابت‌ها در گروه انتقال جامد قرار دارد، مشخص کند.

#### ۱۴-۸- دفن جامدات

همان‌طور که در بخش (۱۴-۳) توضیح داده شد، رسوبات کف دریا در زیر هر ستون آب را می‌توان به یک یا چند لایه تقسیم نمود. غلظت کل جامدات اولیه در هر بخش کفزی (میلی‌گرم بر لیتر یا گرم بر مترمکعب) برای تنظیم جرم‌مخصوص حجم مرجع (گرم بر لیتر) و تخلخل ( $L_w/L$ ) استفاده می‌شود. WASP 8 با در نظر گرفتن رسوب، فرسایش (از جمله تعلیق و بار بستر)، رشد و شار انحلال موادی که خارج می‌شوند، تعادل جرم جامد را در لایه‌های مختلف انجام می‌دهد. در صفحه Dataset دو گزینه وجود دارد- Static (حجم ثابت) و Dynamic (جرم‌مخصوص ثابت). ما اکیداً توصیه می‌کنیم از گزینه‌ی Dynamic استفاده کنید، که در ادامه شرح داده شده است. در این گزینه، شما باید benthic time مرحله DTB را نیز در صفحه Dataset تنظیم کنید. مقدار پیش‌فرض ۱ روز می‌باشد.

**لایه‌ی اعماق سطحی** - لایه‌ی اعماق سطحی فعال می‌باشد. وقتی مواد جامد رسوب می‌کنند، حجم و عمق را جمع می‌کنند در صورتی که وقتی جامدها فرسایش می‌یابند، حجم و عمق خود را از دست می‌دهند. به جز آنچه در ادامه ذکر شده است، جرم‌مخصوص حجم و تخلخل مرجع اولیه حفظ می‌شود. اگر هیچ لایه‌ی اعماق زیرسطحی وجود نداشته باشد، لایه‌ی سطحی به‌طور نامحدود باعث تجمع عمق و حجم می‌شود. هیچ دفن خالصی وجود ندارد. فرسایش، عمق و حجم را تا زمانی که به ۵٪ مقادیر اولیه برسد، کاهش می‌دهد. هیچ گونه فرسایش دیگری مجاز نیست.

اگر لایه‌های اساسی بنتیک زیرسطحی وجود داشته‌باشد، آن‌گاه حجم و عمق لایه‌ی سطحی به مقادیر مرجع اولیه خود در هر گام زمانی کفزی برمی‌گردد. مقادیر تنظیم مجدد با دفن خالص ( $V_{B1}$  و  $d_{B1}$ ) یا فرسایش خالص ( $V_{E1}$  و  $d_{E1}$ ) متناظر است.

تحت شرایط رسوبی، بخش اعماق سطحی  $V_{B1}$  و  $d_{B1}$  را به اولین بخش زیرسطحی در گام زمانی اول تقسیم می‌شود. غلظت مواد جامد و آلاینده در حجم مدفون نیز به سمت پایین منتقل می‌شود. سرعت دفن  $w_{B1}$  (متر بر ثانیه) از بخش اعماق سطحی به صورت زیر است:

$$w_{B1} = d_{B1}/DT_B \quad (۱۴-۳۳)$$

توجه داشته‌باشید که سرعت دفن در خروجی مدل در واحدهای (سانتی‌متر بر سال) گزارش شده‌است. شار دفن از لایه‌ی سطحی برای جامدات و آلاینده‌ها عبارتند از:

$$F_{B1,k} = C_{k,1} \times w_{B1} \quad (۱۴-۳۴)$$

که در آن  $C_{k,1}$  غلظت سازنده‌ی "k" در لایه‌ی کفزی سطحی (گرم بر مترمکعب)، و  $F_{B1,k}$  شار دفن ( $\text{g/m}^2\text{-sec}$ ) از لایه‌ی بنتیک سطحی است.

تحت شرایط فرسایشی، بخش اعماق سطحی، از اولین بخش اعماق زیرسطحی هر مرحله‌ی زمانی از کفزیان،  $V_{E1}$  و  $d_{E1}$  را جذب می‌کند. مواد جامد و غلظت آلاینده در حجم زیرسطحی  $C_{k,B2}$  نیز به سمت بالا منتقل می‌شوند " (درواقع، بخش اعماق سطحی در حال حرکت به سمت پایین است). در لایه‌های اعماق زیرسطحی، کل مواد جامد معمولاً محکم بسته‌بندی می‌شوند و بنابراین جرم‌مخصوص حجمی بالاتر و تخلخل‌های کم‌تر دارند. به منظور حفظ تعادل جرم و حجم، جرم‌مخصوص حجمی لایه‌ی سطحی و تخلخل هر مرحله‌ی زمانی از کفزیان دوباره محاسبه می‌شوند. اگر فرسایش در طول زمان ادامه یابد، جرم‌مخصوص حجمی و تخلخل به مقادیر آن در لایه‌ی زیرسطحی نزدیک می‌شوند.

**لایه‌های اعماق زیرسطحی** - لایه‌های اعماق زیرسطحی غیرفعال می‌باشند. در هر گام زمانی اعماق، بسته به این که آیا بخش اعماق سطحی شرایط رسوبی و یا فرسایشی را تجربه می‌کند یا خیر، جرم از طریق لایه‌های زیرسطحی به سمت پایین و یا به سمت بالا منتقل می‌شود.

تحت شرایط رسوبی، اولین بخش زیرسطحی، مواد جامد را از لایه‌ی سطحی در هر مرحله زمانی از انتها دریافت می‌کند. اگر بخش زیرسطحی جرم‌مخصوص حجمی بالاتری داشته‌باشد، آن‌گاه حجم و عمق مدفون ( $V_{B1}$  و  $d_{B1}$ ) به  $V_{B2}$  و  $d_{B2}$  فشرده می‌شوند و آب منفذی به سمت بالا فشرده می‌شود. حجم فشرده‌ی  $V_{B2}$  به سمت لایه‌ی اعماق بعدی در قسمت پایین و یا خارج از سیستم منتقل می‌شود. جامدات و غلظت آلاینده در حجم زیرسطحی  $C_{k,B2}$  نیز از طریق بستر به سمت پایین و به بخش پایینی بستر منتقل می‌شوند و جرم‌مخصوص حجمی اولیه و تخلخل را حفظ می‌کنند.

تحت شرایط فرسایشی، بخش سطحی، حجم  $V_{E1}$  را از اولین لایه‌ی زیرسطحی در هر مرحله‌ی زمانی از کف دریافت می‌کند. بخش جامد درون این حجم نیز به سمت بالا منتقل می‌شود. در عوض، لایه‌های اعماق زیرین، حجم فرسایش یافته و غلظت مواد جامد را به لایه‌های اعماق پوشاننده‌ی خود منتقل می‌کنند. فرسایش عمق و حجم لایه‌ی پایینی را تا زمانی که به ۵٪ مقدار اولیه‌ی خود برسد، کاهش می‌دهد. هیچ‌گونه فرسایشی بیش‌تر از این لایه مجاز نمی‌باشد. زیرا فرسایش بیش‌تر، عمق و حجم پایین‌ترین لایه از اعماق بعدی را تا زمانی که به ۵٪ از مقدار اولیه خود برسد، کاهش می‌دهد. اگر فرسایش ادامه یابد، در نهایت تمام لایه‌های عمق به ۵٪ از مقادیر اولیه‌ی آن‌ها می‌رسند. در این مرحله، فرسایش دیگر مجاز نمی‌باشد.

### ۹-۱۴- ضمیمه‌ی ۱: راه‌حل تحلیلی برای ته‌نشینی

WASP 8 معمولاً از تکنیک حل عددی تفاضل روبه عقب استفاده می‌کند. در ابتدای هر گام زمانی برای هر متغیر کیفیت، از غلظت  $C_0$ ، در معادلات انتقال و تبدیل استفاده می‌شود. گام زمانی  $D_T$  برای حفظ پایداری تنظیم شده‌است.

با این حال، برای سیلت‌ها و ماسه‌های درشت، سرعت‌های بالای ته‌نشینی می‌توانند باعث شوند که WASP 8 از گام‌های زمانی بسیار کوچک استفاده کند. در مواردی که ته‌نشینی بیش‌از ۰/۱٪ جامد را از بخش ستون آب در طول گام زمانی نرمال محاسبه حذف می‌کند، WASP 8 از راه‌حل تحلیلی جایگزین توضیح داده‌شده در این جا استفاده می‌کند. این راه‌حل مقدار  $C^*$  را به‌گونه‌ای محاسبه می‌کند که میانگین غلظت جامد در طول گام زمانی، در ته‌نشینی جامد و ازدست دادن همرفتی برای گام زمانی اعمال می‌شود. راه‌حل تحلیلی برای بارگذاری متعادل، فرارفت و ته‌نشینی در حالت پایدار و تحت شرایط غالب برای یک جامد به‌صورت زیر می‌باشد:

$$C_{SS} = \frac{L}{Q + V w_s / d} \quad (۱۴-۳۵)$$

که در آن  $L$  بار کل جامد "i" (گرم بر روز) شامل بارگذاری‌های خارجی، پراکنده، و تعلیق می‌باشد؛  $Q$  جریان پراکنده (مترمکعب بر روز)،  $V$  حجم قطعه (مترمکعب)  $d$  عمق قطعه (متر) و  $w_s$  نیز سرعت رسوب یا ته‌نشینی (متر بر روز) می‌باشد. در طول گام زمانی، غلظت از  $C_0$  به  $C_{SS}$  میل خواهد کرد. برای راحتی، این معادله می‌تواند دوباره مرتب شود:

$$C_{SS} = \frac{L/V}{X_{KS}} \quad (۱۴-۳۶)$$

که در آن  $C_{SS}$  ثابت نرخ تلفات کلی ناشی از خروجی به‌علاوه ته‌نشینی (1/day) می‌باشد:

$$X_{ks} = \frac{Q}{d} + \frac{w_s}{d} \quad (37-14)$$

معادله‌ی کاهش مرتبه‌ی اول به صورت زیر است:

$$\frac{Vdc}{dt} = L - \left(Q + \frac{w_s}{d}\right) C \quad (38-14)$$

راه حل C نیز به عنوان تابعی از زمان به صورت زیر می‌باشد:

$$C = C_0 + \frac{L/V}{X_{ks}} (1 - e^{-X_{ks}T}) \quad (39-14)$$

$$C = C_0 + C_{SS}(1 - e^{-X_{ks}T}) \quad (40-14)$$

ادغام این معادله روی DT نشان می‌دهد:

$$\int_0^{DT} C dt = \left[ -\frac{1}{X_{ks}} (C_0 - C_{SS}) e^{-X_{ks}T} C_{SS} \right]_0^{DT} \quad (41-14)$$

ارزیابی سمت راست در  $DT-t = 0$  و به روز رسانی آیت‌ها، فرمول زیر را به دست می‌دهد عبارات:

$$C_{SS}DT + \frac{1}{X_{ks}} (C_0 - C_{SS})(1 - e^{-X_{ks}T}) \quad (42-14)$$

میانگین غلظت در طول DT به صورت زیر است:

$$C^* = \frac{\int_0^{DT} C dt}{DT} = C_{SS} + \frac{1}{X_{ks}DT} (C_0 - C_{SS})(1 - e^{-X_{ks}T}) \quad (43-14)$$

تعریف عبارت  $X_{term}$  مناسب است، که از عددی نزدیک به ۱ (برای DT کوچک یا  $X_{ks}$ ) تا ۰ (برای DT بزرگ یا  $X_{ks}$ ) تغییر می‌کند:

$$X_{term} = \frac{1 - e^{-X_{ks}T}}{X_{ks}DT} \quad (44-14)$$

بنابراین:

$$C^* = C_0 X_{term} + C_{SS}(1 - X_{term}) \quad (45-14)$$

غلظت متوسط  $C^*$  از  $C_0$  در مراحل زمانی کوچک و یا نرخ تلفات برای مراحل زمانی بزرگ به  $C_{SS}$  تغییر می‌کند.



## فصل پانزدهم

تئوری مدل و راهنمای کاربر جلبک چندگانه

WASP 8

### ۱-۱۵- توجه

تحقیقی که در این جا توضیح داده شده است توسط دفتر تحقیقات و توسعه‌ی (ORD) آژانس حفاظت از محیط‌زیست آمریکا (EPA) تأمین و مدیریت شد. این گزارش تحت بررسی اداری و قضایی این آژانس قرار گرفته و برای انتشار به صورت سند EPA تأیید شده است. ذکر نام تجاری یا محصولات تجاری به معنی تأیید یا توصیه برای استفاده نمی‌باشد.

### ۱۵-۲- مقدمه

جلبک‌های پلانکتونی به چند دلیل از اجزای مهم مدل‌های کیفیت آب، از جمله:

- به دلیل این که جذب موادمغذی در طول رشد جلبکی فرآیند اصلی بوده که موادمغذی حل شده را از آب حذف می‌کند و موجب تنفس و مرگ جلبکی اجزای اصلی باز یافت موادمغذی می‌شود، دینامیک جلبک و دینامیک موادمغذی به طور نزدیکی با یکدیگر مرتبط هستند.
- فرآیندهای جلبک به خاطر تولید اکسیژن فتوسنتزی در طول روز همراه با مصرف اکسیژن به خاطر تنفس جلبک در طول شب می‌توانند باعث تغییرات روزانه در اکسیژن حل شده شود. دینامیک اکسیژن فصلی ممکن است ارتباط نزدیکی با دینامیک جلبکی، به خصوص در سیستم‌های طبقه‌بندی با بازده بالا داشته باشد، زیرا تنفس و تجزیه‌ی جلبک‌ها که زیر منطقه‌ی فوتیک (وابسته به تولید نور) ساکن می‌شوند اغلب منبع اصلی تخلیه اکسیژن می‌باشد.
- جلبک می‌تواند از طریق جذب  $CO_2$  حل شده در طول فرآیند فتوسنتز و باز یافت  $CO_2$  در طول تنفس بر pH تأثیر بگذارد.
- جلبک‌ها به دلیل این که پایه‌ی زنجیره‌ی غذایی را تشکیل می‌دهند و جزء اصلی تولیدکنندگان اولیه در بسیاری از سیستم‌ها به‌ویژه در دریاچه‌ها و خورها می‌باشند، نقش مهمی در دینامیک تمام سطوح تغذیه‌ای متوالی ایفا می‌کنند.
- جلبک‌های معلق اغلب جزء اصلی راکد شدن آب هستند.
- شکوفه‌های جلبک می‌توانند استفاده‌های تفریحی از آب را محدود کرده و گاهی اوقات منجر به مرگ ماهی‌ها در شرایط سخت شوند.
- جلبک می‌تواند باعث مشکلات طعم و بو در منابع آبی و مشکلات گرفتگی و صافی در تأسیسات تصفیه آب شود.

جلبک‌های پلانکتونی فیتوپلانکتون نیز شناخته می‌شوند که از فیتون یونانی گرفته تا گیاه و پلانکتون‌ها به معنی سرگردان و یا خشک‌کننده هستند. واژه‌ی فیتوپلانکتون‌ها معمولاً به تمام میکروارگانیسم‌های فتواتوتروفیک پلانکتونیک اشاره دارد. با این که اهمیت جلبک‌های پلانکتونیک یا



فیتوپلانکتون به خوبی تثبیت شده‌است، اما این نکته باید به رسمیت شناخته‌شود که فیتوپلانکتون‌ها به طور تقریبی شامل مجموعه‌ی متنوعی از تمام گروه‌های طبقه‌بندی اصلی می‌باشند (وتسل ۲۰۰۱). این تنوع را می‌توان با استفاده از طبقه‌بندی گروه‌های عمده‌ی فیتوپلانکتون (شکل ۱) در مقایسه با گیاهان و حیوانات نشان داد. فیتوپلانکتون‌ها گیاهان واقعی نیستند و گروه‌های مشترک فیتوپلانکتون‌ها (دیاتومه‌ها، جلبک‌های سبز و غیره) در واقع نشان‌دهنده‌ی شاخه‌ی مجزا از قلمرو پروتیستا می‌باشند که هر کدام تنوع زیادی از موجودات زنده را شامل می‌شوند؛ برای مثال، گیاه کلروفیت (جلبک سبز) تقریباً ۱۶۰۰۰ گونه دارد که بیش‌تر آن‌ها در آب شیرین یافت می‌شوند. علت رایج مشکلات کیفی آب، جلبک‌های سبز آبی هستند. با این‌که جلبک‌های سبز-آبی جلبک نیستند، اما در حوزه و قلمرو جداگانه‌ای (باکتری‌ها) قرار دارند و به سیانوباکتری نیز شناخته می‌شوند.



شکل ۱-۱۵ طبقه‌بندی تاکسونومیک گروه‌های عمده فیتوپلانکتونی در مقایسه با سایر گروه‌ها

اگرچه فیتوپلانکتون‌ها مجموعه‌ی بسیار متنوعی از موجودات زنده را نشان می‌دهند، اما هر گروه عملکردی، ویژگی‌های کافی را به اشتراک می‌گذارند که یک روش توده‌ای، اغلب در مدل‌سازی کیفیت

آب مورد استفاده قرار می‌گیرد. دو رویکرد کلی برای شبیه‌سازی جلبک در مدل‌های کیفیت آب مورد استفاده قرار گرفته‌اند (بویی و همکاران ۱۹۸۵) که شامل موارد زیر می‌شوند:

- ۱) جمع کردن تمام جلبک‌ها به یک ماده‌ی تشکیل‌دهنده‌ی واحد (برای مثال، تمام جلبک‌ها یا کلروفیل a)، یا؛
- ۲) جمع کردن جلبک‌ها به چند گروه عملکردی غالب (برای مثال، جلبک سبز، دیاتومه‌ها، سبزه آبی، داینوفلاژله‌ها و غیره).

اولین رویکرد این است که در نسخه‌های قبلی مدل WASP، از طریق نسخه‌ی ۷/۲ مورد استفاده قرار می‌گرفت. با این حال، مدل‌های دریاچه‌ها، مخازن، و خورها که تغییرات فصلی در آنها مهم بوده و تمرکز بر شبیه‌سازی‌های بلندمدت می‌باشد، اغلب به قابلیت‌های ارائه‌شده توسط رویکرد دوم نیاز دارند. تشخیص تفاوت‌ها در بین گروه‌های جلبکی، اغلب به منظور مدل‌سازی واقعی دینامیک عناصر غذایی، پویایی فیتوپلانکتون‌ها و پیش‌بینی وقوع مسایل خاص از جمله شکوفایی جلبک‌های سبز-آبی، مهم می‌باشد. یک مدل ریاضی نیز برای این منظور ارائه شده است.

این گزارش رویکردهای مورد استفاده در مدل‌سازی چند گروه جلبکی را همان‌طور که در برنامه‌ی تحلیل و شبیه‌سازی آب (WASP) اجرا شده و منجر به مدل فیتوپلانکتون‌های کلاس چندگانه (MPM) می‌شود، خلاصه می‌کند. مدل WASP اصلاح شد تا قابلیت شبیه‌سازی سه کلاس جلبکی (مانند دیاتومه‌ها، سبزه‌ها و سبزه آبی) را داشته باشد. از آن‌جا که دیاتومه‌ها اغلب با دردسترس بودن سیلیس محدود می‌شوند و این مسئله در مدل قبلی WASP گنجانده نشده بود، مدل اصلاح شد تا شامل سیلیس آلی (ذرات معلق و حل شده) و غیرآلی حل شده متغیرهای حالت در نظر گرفته شود. از آن‌جا که الگوریتم‌های اضافه‌شده برای سه گروه جلبکی در ساختار، کلی بودند (مختص به یک گروه جلبکی خاص نبود)، الگوریتم برای تمام گروه‌های جلبکی شامل اثرات تثبیت نیتروژن موجود در هوا بود، بنابراین انتخاب متغیر کیفیت، بر عهده‌ی کاربر می‌باشد. توسعه روندهای چندجلبکی WASP براساس بررسی پنج مدل زیر می‌باشد که قابلیت شبیه‌سازی چند گروه جلبکی را دارند:

- مدل فیتوپلانکتون چند کلاس (بیرمن و همکاران ۱۹۸۰)،
- FLWASP (آسکی، ۱۹۹۵)،
- LAKE2K (چاپا و مارتین ۲۰۰۴)،
- CE - QUAL - W2 (کول و ولز ۲۰۰۶) و
- CE - QUAL - ICM (تیلمن و همکاران ۲۰۰۴).

تا حدی براساس بررسی مدل‌های موجود، الگوریتم‌های خاصی برای مدل WASP ایجاد و اجرا شدند. WASP تغییر یافته یا MPM شامل متغیرهای حالت زیر می‌باشد:

جدول ۱-۱۵ متغیرهای حالت MPM

متغیر حالت	شرح
۱	نیتروژن آمونیاک (mg-N/L)
۲	نیترات نیتروژن (mg-N/L)
۳	نیتروژن آلی محلول (mg-N/L)
۴	فسفات غیرآلی (mg-P/L)
۵	فسفر آلی محلول (mg-P/L)
۶	سیلیس غیرآلی (mg-Si/L)
۷	سیلیس آلی محلول (mg-Si/L)
۸	CBOD1 (نهایی) (mg-O2/L)
۹	CBOD2 (نهایی) (mg-O2/L)
۱۰	CBOD3 (نهایی) (mg-O2/L)
۱۱	اکسیژن محلول (mg/L)
۱۲	کربن فرسایشی (mg-C/L)
۱۳	نیتروژن فرسایشی (mg-N/L)
۱۴	فسفر فرسایشی (mg-P/L)
۱۵	سیلیس فرسایشی (mg-Si/L)
۱۶	فرسایشی کل (mg-DW/L)
۱۷	شوری (ppt)
۱۸	جلیک کفزی (g-DW/m <sup>2</sup> )
۱۹	سهم نیتروژن سلولی پرفیتون (mg-N/gDW)
۲۰	سهم فسفر سلولی پرفیتون (mg-P/gDW)
۲۱	جامدات غیرآلی ۱ (mg-DW/L)
۲۲	جامدات غیرآلی ۲ (mg-DW/L)
۲۳	جامدات غیرآلی ۳ (mg-DW/L)

فیتوپلانکتون ۱ (ug-Chla/L)	۲۴
فیتوپلانکتون ۲ (ug-Chla/L)	۲۵
فیتوپلانکتون ۳ (ug-Chla/L)	۲۶

با این حال، این مدل به منظور امکان اضافه شدن بیش از سه گروه جلبکی مشخص ساخته شده است، اگر در کاربردهای مدل آینده ضروری باشد.

### ۱۵-۳- مروری بر ثابت‌های مدل و فرآیند جنبشی تغذیه‌گرایی MPM

در این بخش، رابطه‌های جنبشی مربوطه ارائه شده‌اند که در آن بر روی مسایل مربوط به فرآیند جلبک، سیلیس و رابطه‌ی بین این فرآیندهای جنبشی و دیگر متغیرهای مدل‌سازی تمرکز خواهد شد. همچنین ارائه‌ی فرآیندهای دیگر در مدل WASP و پیاده‌سازی آن‌ها را می‌توان در کتابچه‌ی راهنمای عمومی کاربر WASP یافت.

### ۱۵-۳-۱- واحدهای زیست‌توده و استوکیومتری

باتوجه به واحدهای متغیرهای حالت جلبکی و روابط استوکیومتری میان فرآیندهای جنبشی جلبکی و فرآیندهایی که منجر به تولید یا مصرف دیگر متغیرهای کیفیت مانند کربن، نیتروژن، سیلیس و فسفر می‌شوند، توجه به فرضیات ضروری می‌باشد. همانند نسخه‌های قبلی WASP، واحدهای ورودی برای همه‌ی گروه‌های جلبکی  $\mu\text{g-Chla/L}$  می‌باشد که براساس  $C/\text{Chla}$  (C = کربن، Chla = کلروفیل a) به واحدهای مدل داخلی  $\text{gC}/\text{m}^3$  تبدیل می‌شوند.

الف) نسبت استوکیومتری ورودی برای هر گروه جلبکی توسط کاربر مشخص می‌شود. ورودی‌های دیگر شامل نسبت‌های استوکیومتری برای  $\text{N/C}$ ،  $\text{Si/C}$ ،  $\text{P/C}$  و  $\text{D/C}$  می‌باشند. همان‌طور که در زیر لیست شده است، ممکن است ثابت استوکیومتری میان گروه‌های جلبکی متفاوت باشد.

جدول ۱۵-۲- ثابت‌های استوکیومتری MPM برای گروه فیتوپلانکتون  $i$  ( $i=1-3$ )

نسبت فیتوپلانکتون فرسایشی به کربن برای گروه $i$ ( $\text{mg D}/\text{mg C}$ )
نسبت فیتوپلانکتون نیتروژن به کربن برای گروه $i$ ( $\text{mg N}/\text{mg C}$ )
نسبت فیتوپلانکتون فسفر به کربن برای گروه $i$ ( $\text{mg P}/\text{mg C}$ )
نسبت فیتوپلانکتون سیلیس به کربن برای گروه $i$ ( $\text{mg Si}/\text{mg C}$ )
نسبت فیتوپلانکتون کربن به کلروفیل برای گروه $i$ ( $\text{mg C}/\text{mg Chl}$ )

### ۱۵-۳-۲- فرآیند جنبشی فیتوپلانکتون‌ها

منابع و مخازن جلیک (Sk) با تفاوت بین نرخ رشد فیتوپلانکتون‌ها و مرگ‌ومیر آن‌ها و نرخ ته‌نشینی، برای تمام گروه‌های فیتوپلانکتون‌ها به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$S_{kj} = (G_{pj} - D_{pj} - k_{sj})P_j \quad (۱-۱۵)$$

$S_{kj}$  = اصطلاح واکنش برای گروه جلیک i mg carbon/L-day

$P_j$  = جمعیت فیتوپلانکتون i mg carbon/L

$G_j$  = ثابت نرخ رشد،  $\text{day}^{-1}$

$D_{pj}$  = ثابت نرخ مرگ بعلاوه تنفس،

$k_{sj}$  = ثابت نرخ ته‌نشینی،  $\text{day}^{-1}$

i = نوع فیتوپلانکتون.

توجه داشته باشید که منبع و مخزن نیز میان بخش‌های مدل متفاوت خواهند بود.

### ۱۵-۳-۱- رشد فیتوپلانکتون‌ها

نرخ رشد ویژه  $G_{pj}$ ، برای گروه جلیکی j، از طریق معادله زیر به  $k_{ic}$  حداکثر نرخ رشد 20EC در نور و مواد مغذی بهینه، مرتبط می‌باشد.

$$G_{pj} = k_{ic} X_{RTij} X_{RIij} X_{RNij} \quad (۲-۱۵)$$

$X_{RTij}$  = فاکتور تنظیم دما، بدون بعد،

$X_{RIij}$  = فاکتور محدودیت نور، بدون بعد،

$X_{RNij}$  = عامل محدودکننده مواد مغذی به‌عنوان تابعی از فسفر معدنی محلول، نیتروژن (DIP) و (DIN) و سیلیس موجود، بی بعد.

### ۱۵-۳-۲- دما

دمای آب به‌طور مستقیم بر نرخ رشد فیتوپلانکتون‌ها تأثیر می‌گذارد. حداکثر نرخ رشد انتخاب شده برای تصحیح دما از طریق دماهای ستون آب متغیر مکانی و زمانی تعیین می‌شود. دو رابطه اصلاح دما نیز در این مستند آورده شده‌است. مورد اول یک مدل تتا می‌باشد که در آن تصحیح دما با استفاده از فرمول زیر انجام می‌شود:

$$X_{RTij} = \Theta_{ic}^{T-20} \quad (۳-۱۵)$$

$\Theta_{ic}$  = ضریب دما برای گروه جلیک i، بی‌واحد،

$T$  = دمای آب محیط، EC.

ضریب تتا در بین گروه‌های جلبکی متفاوت می‌باشد. در نسخه‌های قبلی مدل WASP از روش تتا برای تنظیم دما استفاده می‌شد که اساساً همه‌ی نرخ‌های جنبشی را تنظیم می‌کرد. برخلاف دیگر رابطه‌های جایگزین که امکان کاهش نرخ‌های پیش‌بینی شده هم در بالا و هم زیر مقدار بهینه را فراهم می‌کند، یک محدودیت در ارتباط با مدل تتا این است که مقادیر نرخ تولید می‌کند که به‌طور مداوم با دما افزایش می‌یابد ("هرچه بیشتر هرچه بهتر"). یک رابطه جایگزین ارائه شده در مدل MPM فرمول زیر است (سرکو و کول ۱۹۹۴)،

$$X_{RTi} = k_{gp,opt} e^{\kappa_1(T-T_{opt})^2} \quad T \leq T_{opt} \quad (۴-۱۵)$$

$$X_{RTi} = k_{gp,opt} e^{-\kappa_2(T-T_{opt})^2} \quad T > T_{opt} \quad (۵-۱۵)$$

که در آن  $T_{opt}$  دمای بهینه می‌باشد؛  $\kappa_1$  و  $\kappa_2$  پارامترهایی هستند که شکل رابطه‌ی رشد با دما را به‌ترتیب زیر و بالای دمای بهینه تعیین می‌کنند. Lake2K و CE - QUAL - ICM نیز از همان رابطه استفاده می‌کنند.

در مدل MPM، تصحیح دمای پیش‌فرض در مدل MPM، مدل تتا بوده و در جایی استفاده می‌شود که کاربر مقدار تتا را بزرگ‌تر از یک وارد می‌کند. در غیر این صورت، اگر ورودی‌ها ارائه شوند، از مدل بازدارنده استفاده می‌شود یا نرخ رشد با دما اصلاح نمی‌شود. ثابت‌های ورودی در زیر ارائه شده‌اند:

جدول ۱۵-۳ ثابت دما MPM برای گروه فیتوپلانکتون  $i$  ( $i=1-3$ )

ضریب درجه حرارت رشد فیتوپلانکتون برای گروه $i$
درجه حرارت بهینه برای رشد برای گروه $i$ ( $^{\circ}\text{C}$ )
پارامتر شکل برای دمای پایین بهینه برای گروه $i$
پارامتر شکل برای دمای بالای بهینه برای گروه $i$

۱۵-۳-۲-۳- نور

مدل MPM، چارچوب توسعه یافته توسط دی‌تورو (۱۹۷۱) و اسمیت (۱۹۸۰) را با استفاده از تحلیل منحنی نور توسط استیل (۱۹۶۲)، برای فرموله کردن تأثیر نور بر رشد فیتوپلانکتون‌ها، ترکیب می‌کند. این رابطه‌ها برای شدت نور بیش از حد و همچنین برای کاهش نور در ستون آب محاسبه می‌شوند. کاهش نرخ رشد لحظه‌ای عمق متوسط توسعه یافته و از طریق یکپارچه‌سازی نرخ رشد ویژه در عمق به دست می‌آید که توسط دی‌تورو ارائه شده است:

$$\bar{X}_{RI} = \frac{ef}{K_e D} \left[ \exp \left\{ -\frac{I_a}{I_{si}} \exp(K_e D) \right\} - \exp \left( -\frac{I_a}{I_{si}} \right) \right] \quad (۶-۱۵)$$

$2/718 = e$   
 $I_a$  = میانگین شدت نور رویداد در ساعات روشنایی روز که درست زیر سطح، فرض می‌شود و به‌طور متوسط،  $0/9 I/f$ , ly/day می‌باشد،  
 $I_{si}$  = شدت نور اشباع از گروه فیتوپلانکتون  $i$ th ly/day،  
 $K_e$  = ضریب کاهش نور، محاسبه‌شده از کاهش نور غیرجلیکی،  $K_e$  و ضعف خودسایشی فیتوپلانکتون،  $K_{eshd}$ ،  $m^{-1}$ ،  
 $I$  = رویداد تابش خورشیدی، ly/day،  
 $f$  = کسری از نور که روشنایی روز است، بدون واحد،  
 $D$  = عمق ستون آب یا بخش مدل، متر،  
 $K_e$  = ضریب کاهش کل نور،  $m^{-1}$ .

که در آن کاهش کل نور از یک مقدار پایه محاسبه می‌شود و اثرات سایه‌اندازی جلیکی و کاهش نور غیرجلیکی به آن اضافه می‌شود. ممکن است وارد کردن داده‌ها به دو روش در اختیار کاربر قرارگیرد. به گونه‌ای که می‌تواند به صورت ساعات آفتابی ( $f=1$ ) یا متوسط نور روزانه ( $f$  = کسری از نور روز) داده‌ها را وارد کند. ضریب خود سایه‌اندازی جلیکی در FLWASP از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود:

$$K_{ESH D} = K_{ESH D Mult} T_{CHLA}^{K_{ESH D Exp}} \quad (۷-۱۵)$$

که:

$$K_{ESH D} = \text{ضریب خود سایه‌زنی،}$$

$$K_{ESH D Mult} = \text{ضریب افزایشی}$$

$$K_{ESH D Exp} = \text{توان خود سایه‌زنی،}$$

$$T_{CHLA} = \text{غلظت کلروفیل کل (خلاصه در سه گروه).}$$

جدول ۱۵-۴ ثابت نور MPM

گزینه‌ی نور (۱ از نور ورودی و ۲ از نور روزانه‌ی محاسبه‌شده استفاده می‌کند)
ضریب برای خود سایه‌زنی ( $Mult * T_{CHLA}^{Exp}$ )
توان برای خود سایه‌زنی ( $Mult * T_{CHLA}^{Exp}$ )
قراردادن کاهش نور خود سایه‌زنی جلیک در Steele (0=Yes, 1=No)
ضریب کاهش نور زمینه ( $m/1$ )
ضریب کاهش نور مواد جامد و فرسایشی
ضریب کاهش نور DOC

## ۱۵-۳-۲-۴-مواد مغذی

در مدل MPM با توجه به مواد مغذی مهم، فرض بر این است که جمعیت فیتوپلانکتون‌های مورد نظر از فرآیند جنبشی رشد مونود که ضریب نرخ رشد از آن محاسبه می‌شود، تبعیت می‌کند.

$$X_N = \min \left( \frac{DIN}{K_{MN} + DIP}, \frac{DIP}{K_{MP} + DIP}, \frac{DISi}{K_{MSi} + DIP} \right) \quad (۸-۱۵)$$

که در آن DIN نیتروژن معدنی محلول، DIP فسفر معدنی محلول، DISi سیلیس معدنی محلول، KMN غلظت نیتروژن نیمه‌اشباع، KMP غلظت فسفر نیمه‌اشباع و KMSi غلظت سیلیس نیمه‌اشباع می‌باشد (که نرخ غلظت ضرب‌کننده در آن ۰/۵ است).

در این فرمول، DIN شامل آمونیاک و نیتروژن نیترات (مجموع دو غلظت) می‌باشد. از آنجایی که معمولاً آمونیاک معمولاً جلبک‌ها به نیترات منتقل می‌شود، ضریب اولویت برای تخمین کسری از جذب آمونیاک ( $P_{NH3}$ ) و نیترات ( $1 - P_{NH3}$ ) محاسبه می‌شود.

$$P_{NH3} = C_{NH3} \left( \frac{C_{NO3}}{(K_{mN} + C_{NH3})(K_{mN} + C_{NO3})} \right) + C_{NH3} \left( \frac{K_{mN}}{(C_{NH3} + C_{NO3})(K_{mN} + C_{NO3})} \right) \quad (۹-۱۵)$$

برای موردی که مانند برخی از جلبک‌های سبز-آبی N تثبیت وجود دارد، فرض بر این می‌باشد که ضریب مواد مغذی  $DIN=1$  است. با این حال، مهم است که بین تثبیت N و استفاده از N تمایز قائل شویم؛ زیرا این امر بر جذب گونه‌های نیتروژن تأثیر می‌گذارد. بنابراین، برای تثبیت N، ضریب با استفاده از فرمول‌های زیر محاسبه می‌شود:

$$X_{DIN,1} = \frac{DIN}{K_{MN} + DIP} \quad (۱۰-۱۵)$$

$$X_{DIN,2} = \frac{K_{MN}}{K_{MN} + DIP}$$

$$\text{و } X_{DIN,1} + X_{DIN,2} = 1$$

در این فرمول، مقدار  $X_{DIN,1}$  کسری از رشد می‌باشد که در آن از N استفاده شده (N مصرف می‌شود) و  $X_{DIN,2}$  نیز کسری از رشد می‌باشد که در آن N ثابت است. ثابت‌های مورد استفاده برای محدودیت مواد مغذی در زیر فهرست شده‌اند.



جدول ۱۵-۵ ثابت مربوط به رشد مواد مغذی MPM برای گروه فیتوپلانکتون  $i$  ( $i=1-3$ )

ثابت حداکثر نرخ رشد فیتوپلانکتون در $20^\circ\text{C}$ درجه‌ی سانتی‌گراد برای گروه $i$ (day/1)
ضریب درجه‌ی حرارت رشد فیتوپلانکتون برای گروه $i$
دمای بهینه‌ی رشد برای گروه $i$ ( $^\circ\text{C}$ )
پارامتر شکل برای دماییین تر از حد بهینه برای گروه $i$
پارامتر شکل برای دمای بالاتر از حد بهینه برای گروه $i$
دمای بهینه‌ی رشد برای گروه $i$ ( $^\circ\text{C}$ )
پارامتر شکل برای دمای پایین بهینه برای گروه $i$
پارامتر شکل برای دمای بالای بهینه برای گروه $i$
ثابت نیمه‌اشباع فیتوپلانکتون برای جذب P گروه $i$ (mg P/L)
ثابت نیمه‌اشباع فیتوپلانکتون برای جذب Si در گروه $i$ (mg N/L)
گزینه‌ی تثبیت نیتروژن (0=no, 1=yes) برای گروه $i$

### ۱۵-۳-۲-۵- تلفات فیتوپلانکتون‌ها

مکانیسم‌های موجود در MPM که در کاهش زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتون‌ها نقش دارند، شامل تنفس درونی، مرگ‌ومیر غیرشکارچی، چرا توسط ژئوپلانکتون‌های گیاه‌خوار، سمیت آب‌شور و ته‌نشینی می‌شوند. نرخ تنفس درونی فیتوپلانکتون‌ها، شامل نرخ اکسیدشدن کربن آلی آن‌ها به کربن دی‌اکسید در واحد وزن کربن آلی فیتوپلانکتون می‌باشد. عمل تنفس عکس فرآیند فتوسنتز بوده و در کاهش زیست‌توده‌ی جمعیت فیتوپلانکتون‌ها نقش دارد. اگر نرخ تنفس فیتوپلانکتون به‌طور کلی بیش‌تر از نرخ رشد باشد، کاهش کربن خالص یا زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتون وجود دارد. نرخ تنفس درونی وابسته به دما است و از طریق فرمول زیر محاسبه می‌شود (ریلی، ۱۹۴۲).

$$K_{iR}(T) = K_{iR}(20^\circ\text{C})\theta_{iR}^{(T-20)} \quad (11-15)$$

که:

$K_{iR}(20^\circ\text{C})$  = نرخ نفس درون‌زا در  $20^\circ\text{C}$  درجه سانتی‌گراد برای گونه‌های جلبک I،  $\text{day}^{-1}$

$K_{iR}(T)$  = نرخ دمای اصلاح شده،  $\text{day}^{-1}$

و  $\theta_{iR}$  = ضریب دما، بدون بعد می‌باشد.

دومین مکانیسم ازدست دادن برای هر گروه، مرگ می‌باشد. مرگ در MPM به‌صورت مجموع سه فرآیند: مرگ طبیعی یا مرگ‌ومیر، سمیت شوری و چریدن می‌باشد. عبارت مرگ طبیعی با ثابت نرخ مرتبه‌ی

اول (ki,D) نشان داده می‌شود که دما در آن تصحیح نشده‌است؛ برای مثال میزان مرگ و میر جلبک‌های آب شیرین که به یک محیط شور معرفی شده‌اند در این جا به‌عنوان سمیت شوری شناخته شده و با استفاده از موارد زیر مدل‌سازی شده‌است:

$$S_{TOX}(i) = S_{TF(i)} \frac{Sal}{Sal + K_{sal}(i)} \quad (12-15)$$

که:

$$S_{TF(i)} = \text{نرخ مرگ‌ومیر با افزایش شوری برای جلبک گروه } i \text{ day}^{-1}$$

$$Sal = \text{شوری (ppt), و}$$

$$K_{sal}(i) = \text{ثابت نیمه‌اشباع برای مرگ‌ومیر شوری.}$$

همانند نسخه‌های قبلی WASP، نرخ تلفات ناشی از چرای زئوپلانکتون مدل‌سازی شده‌است. با این حال، از آن جایی که گروه‌های متعدد جلبک در دسترس هستند، فاکتور اولویت تغذیه نیز در MPM در نظر گرفته‌شد. توجه داشته باشید که پویایی جمعیت زئوپلانکتون‌ها در این و نسخه‌های قبلی WASP شبیه‌سازی نشده، بلکه توسط کاربر توصیف شده‌است.

نرخ تلفات نهایی، به دلیل ته‌نشینی بوده و برخلاف نسخه‌های قبلی WASP در MPM، برای هر گروه جلبکی، نرخ ته‌نشینی خاصی که پارامتر مدل در واحدهای m/day می باشد، مشخص شده‌است. نرخ کل تلفات ( $\text{day}^{-1}$ ) مجموع نرخ‌های تلفات فردی است:

$$D_i = k_{iR}(T) + k_{iD} + k_{iGZ}(t)Z(t) + S_{TOX}(i) + v_{s,i}/H \quad (13-15)$$

ثابت‌های مربوط به فرآیندهای رشد و حذف جلبک در جدول زیر آورده شده‌اند. یک سری از ثابت‌های اضافی برای نشان دادن این که چه کسری از مرگ به موادغذایی آلی (برخلاف اشکال حل شده) بازیافت می‌شود، ارائه شده‌است.

جدول ۱۵-۶ ثابت‌های روند تلفات برای فیتوپلانکتون گروه i

ثابت نرخ تنفس فیتوپلانکتون در دمای ۲۰ درجه‌ی سانتی‌گراد برای گروه i (1/day)
ضریب دمای تنفس فیتوپلانکتون برای گروه i
ثابت نرخ مرگ فیتوپلانکتون (پیش‌بینی غیر باغ وحش) برای گروه i (1/day)
نرخ مرگ‌ومیر فیتوپلانکتون به دلیل سمیت شوری برای گروه i (1/day)
شوری که در آن نرخ مرگ‌ومیر جلبک نصف بیش‌ترین مقدار برای گروه i (g/L)

ثابت تغذیه‌ی فیتوپلانکتون زئوپلانکتون برای گروه i (1/day)
جاذبه (۰ تا ۱) برای گروه i
دمای بهینه برای رشد برای گروه i (C°)
پارامتر شکل برای دمای پایین بهینه برای گروه i
پارامتر شکل برای دمای بالای بهینه برای گروه i
کسری از مرگ‌ومیر فیتوپلانکتون بازیافت شده به Si آلی برای گروه i

### ۱۵-۳-۳- تعادل سیلیس

نسخه‌های قبلی WASP شامل متغیرهای حالت سیلیس نبودند، از آنجایی که سیلیس ماده‌ی مغذی مهمی برای برخی از جلیک‌ها مانند دیتارام می‌باشد، این متغیرها به مدل MPM اضافه شدند. چهار متغیر سیلیس در مدل اصلاح‌شده، مدل شده‌اند: فیتوپلانکتون سیلیس (ذرات زنده‌ی سیلیس، به‌عنوان بخش استوکیومتری زیست‌توده‌ی جلیکی)، سیلیس فرسایشی (ذرات بیوتیک سیلیس آلی)، سیلیس موجود (مواد غیرآلی حل‌شده و جاذب) و سیلیس بیوژنیک (موادآلی حل‌شده‌ی غیرزنده). سیلیس موجود توسط شکل‌های متغیر فضایی حل‌شده به ذرات و غلظت‌های حل‌شده تقسیم می‌شود، و از طریق غلظت‌های پیش‌بینی شده‌ی جامدات و ضریب تقسیم محاسبه می‌شود.

### ۱۵-۳-۳-۱- سیلیس پلانکتونی

سیلیس به‌عنوان یک متغیر کیفیت مجزا مدل‌سازی نشده‌است، بلکه با استفاده از زیست‌توده‌ی جلیکی ( $gC/m^3$ ) و نسبت استوکیومتری مشخص شده توسط کاربر برای Si/C محاسبه می‌شود.

### ۱۵-۳-۳-۲- سیلیس فرسایشی

سیلیس فرسایشی یک متغیر کیفیت مدل است (جدول ۱۵-۱). منابع و مخازن متغیر کیفیت سیلیس غیرفرسایشی (متغیر ۱۵، جدول ۱) به‌صورت زیر می‌باشد:

$$S_{15} = \left( \sum_{i=1}^3 k_{iD} C_{P,i} a_{SiC} f_{Si,i} \right) - k_{SUA} C_{DSi} \quad (14-15)$$

که:

$S_{15}$  = ترم مخزن منبع برای سیلیس فرسایشی ( $g/m^3$ -day)

$k_{iD}$  = نرخ مرگ‌ومیر گروه فیتوپلانکتون i ( $day^{-1}$ )

$C_{p,i}$  = غلظت فیتوپلانکتون گروه  $i$  ( $\text{gC/m}^3$ )،

$a_{SiC}$  = نسبت سیلیس/کربن استوکیومتری،

$f_{Si,i}$  = کسری از مرگ‌ومیر فیتوپلانکتون بازیافت‌شده به  $\text{Si}$  آلی برای گروه  $i$ ،

$k_{SUA}$  = نرخ انحلال ذرات آلی (فرسایشی)  $\text{Si}$  ( $\text{day}^{-1}$ )،

$C_{DSi}$  = غلظت سیلیس فرسایشی ( $\text{gSi/m}^3$ )،

به طوری که فرآیندهای ارائه‌شده به دلیل انحلال ذرات آلی  $\text{Si}$ ، دارای یک مخزن بوده و شامل یک منبع ناشی از مرگ جلبک نیز می‌باشند.

### ۱۵-۳-۳-۳-سیلیس آلی محلول

سیلیس یک متغیر کیفی مدل است (جدول ۱). میزان سیلیس وابسته به مقدار در منبع و مخزن می‌باشد، وضعیت متغیر کیفیت سیلیس (متغیر ۱۵، جدول ۱) از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید.

$$S_7 = \left( \sum_{i=1}^3 k_{iR}(T) C_{p,i} a_{SiC} f_{Si,i} \right) + k_{SUA} C_{DSi} - K_{m,DSi} C_{DSi} \quad (15-15)$$

که:

$S_7$  = اصطلاح مخزن منبع برای سیلیس آلی محلول ( $\text{g/m}^3\text{-day}$ )،

$k_{iR}(T)$  = تنفس گروه فیتوپلانکتون  $i$ ، درجه‌ی حرارت اصلاح‌شده ( $\text{day}^{-1}$ )،

$C_{p,i}$  = غلظت فیتوپلانکتون گروه  $i$  ( $\text{gC/m}^3$ )،

$a_{SiC}$  = نسبت سیلیس/کربن استوکیومتری،

$f_{Si,i}$  = کسری از مرگ‌ومیر فیتوپلانکتون بازیافت‌شده به  $\text{Si}$  آلی برای گروه  $i$ ،

$k_{SUA}$  = نرخ انحلال ذرات آلی (فرسایشی)  $\text{Si}$  ( $\text{day}^{-1}$ )،

$C_{DSi}$  = غلظت سیلیس فرسایشی ( $\text{gSi/m}^3$ )،

$K_{m,DSi}$  = نرخ انحلال  $\text{Si}$  آلی محلول ( $\text{day}^{-1}$ )،

$C_{DSi}$  = غلظت سیلیس محلول ( $\text{gSi/m}^3$ )،

### ۱۵-۳-۳-۴-سیلیس غیرآلی و حل‌نشده

سیلیس غیرآلی حل‌نشده ( $\text{SiO}_2$ ) ۶ متغیر کیفیت در جدول (۱) نشان‌دهنده فرم موجود برای رشد جلبک است. منبع و مخزن برای سیلیس غیرآلی محلول و جذب‌شده عبارتند از:

$$S_6 = \left( \sum_{i=1}^3 [k_{iR}(T)(1 - f_{Si,i}) + k_{iD}(1 - f_{Si,i}) - G_{P,i}] a_{SiC} C_{p,i} \right) \quad (15-16)$$

$$+ k_{m,DiSi} C_{DiSi} - \sum_{j=1}^3 f_{D,ISi,j} \frac{V_{S,j}}{H} C_{ISi}$$

که:

$S_6$  = اصطلاح مخزن منبع برای سیلیس غیرآلی محلول،

$k_{iR}(T)$  = تنفس گروه فیتوپلانکتون  $i$ ، درجه حرارت اصلاح شده ( $\text{day}^{-1}$ )،

$k_{iD}$  = نرخ مرگومیر گروه فیتوپلانکتون  $i$  ( $\text{day}^{-1}$ )،

$G_{P,i}$  = نرخ رشد فیتوپلانکتون گروه  $i$  ( $\text{day}^{-1}$ )،

$a_{SiC}$  = نسبت سیلیس/کربن استوکیومتری،

$f_{Si,i}$  = کسری از مرگومیر فیتوپلانکتون بازیافت شده به  $\text{Si}$  آلی برای گروه  $i$ ،

$C_{p,i}$  = غلظت فیتوپلانکتون گروه  $i$  ( $\text{gC/m}^2$ )،

$k_{m,DiSi}$  = نرخ انحلال  $\text{Si}$  آلی محلول ( $\text{day}^{-1}$ )،

$C_{DiSi}$  = غلظت سیلیس محلول ( $\text{gSi/m}^3$ )،

$f_{D,ISi,j}$  = کسری از ذرات سیلیس غیرآلی جذب شده بر روی نوع جامد  $j$  (سه نوع جامد و محاسبه شده با استفاده از روابط تقسیم بندی)

$V_{S,j}$  = سرعت ته نشینی جامد نوع  $j$  ( $\text{m/day}$ )،

$H$  = عمق قطعه‌ی مدل، متر،

$C_{ISi}$  = غلظت سیلیس غیرآلی محلول ( $\text{gSi/m}^3$ )،

این فرآیندها شامل منابع تنفس جلیکی، مرگومیر جلیکی، انحلال سیلیس آلی و ته نشینی آن (بر

روی یک یا چند نوع ماده جامد) می‌باشد.

ثابت‌های مدل برای سیلیس در زیر فهرست شده‌اند.

جدول ۷-۱۵ ثابت‌های سیلیس MPM

ضریب تقسیم سیلیس به جامدات ۱ ستون آب (L/kg)
ضریب تقسیم سیلیس به جامدات ۲ ستون آب (L/kg)
ضریب تقسیم سیلیس به جامدات ۳ ستون آب (L/kg)
ثابت نرخ معدنی‌شدن سیلیس آلی محلول در دمای ۲۰ درجه‌ی سانتی‌گراد (1/day)
ضریب درجه‌ی حرارت معدنی‌شدن سیلیس آلی محلول
فیتوپلانکتون نیمه‌اشباع، برای نرخ معدنی‌شدن (mg Phyt C/L)

### ۱۵-۴- پارامترهای MPM و تابع زمان

پارامترهای مدل MPM از نسخه‌های قبلی WASP اصلاح شده‌اند و در جدول (۸-۱۵) لیست شده‌اند. این پارامترها مخصوص بخش هستند (که ممکن است توسط بخش تغییر داده شوند) و برخی از پارامترها نیز ممکن است با استفاده از توابع زمانی که در زیر لیست شده‌اند، تغییر کنند. پارامترهای محیطی و توابع زمانی اجازه‌ی تعیین ویژگی‌های محیطی (مانند دما) را می‌دهند، به صورتی که محاسبات MPM را تحت تأثیر قرار می‌دهند، اما توسط MPM پیش‌بینی نمی‌شوند. برای جزئیات بیشتر به دفترچه‌ی راهنمای کاربر WASP مراجعه کنید (بحث در مورد نقش و روابط بین پارامترهای مدل و توابع زمانی).

جدول ۸-۱۵ پارامترهای مدل MPM

۱	تابع سرعت آب برای قطعه (۴-۱)
۲	دمای قطعه (درجه‌های C یا چند برابر)
۳	تابع زمانی دما برای دمای قطعه (۴-۱)
۴	انقراض نور برای قطعه (در هر متر یا چندبرابر)
۵	تابع زمانی پوشش یخ برای استفاده برای قطعه (۳-۱)
۶	شار آمونیاک کفزی ( $\text{mg/m}^2\text{-day}$ )
۷	شار فسفات کفزی ( $\text{mg/m}^2\text{-day}$ )
۸	تقاضای اکسیژن رسوب ( $\text{mg/m}^2\text{-day}$ )
۹	ضریب تابش خورشیدی ورودی (بدون بعد)
۱۰	اندازه‌گیری نرخ هوادهی مجدد قطعه (هر روز)
۱۱	جمعیت زئوپلانکتون

تابع کسر نور توسط سایبان	۱۲
تابع بخش زیرین پوشیده شده توسط جلیک کفزی	۱۳
ارتفاع قطعه از سطح دریا، متر	۱۴
ارتفاع سد (متر)	۱۵
ضریب WQ استخر سد	۱۶
ضریب نوع سد	۱۷
ضریب فرار Tsvigolo	۱۸
فاکتور مقیاس نرخ فروپاشی (۱)(BOD)	۱۹
فاکتور مقیاس نرخ فروپاشی (۲)(BOD)	۲۰
فاکتور مقیاس نرخ فروپاشی (۳)(BOD)	۲۱
فاکتور مقیاس قطعه برای باد	۲۲
تابع زمانی سرعت باد برای استفاده‌ی قطعه‌ی (۱ یا ۲)	۲۳
نرخ ته‌نشینی جامدات نوع ۱ قطعه (m/day)	۲۴
نرخ ته‌نشینی جامدات نوع ۲ قطعه (m/day)	۲۵
نرخ ته‌نشینی جامدات نوع ۳ قطعه (m/day)	۲۶
نرخ ته‌نشینی از قطعه‌ی فیتوپلانکتون گروه ۱ (m/day)	۲۷
نرخ ته‌نشینی از قطعه‌ی فیتوپلانکتون گروه ۲ (m/day)	۲۸
نرخ ته‌نشینی از قطعه‌ی فیتوپلانکتون گروه ۳ (m/day)	۲۹

جدول ۱۵-۹ توابع زمان مدل MPM

تابع دمای آب ۱ (C°)	۱
تابع دمای آب ۲ (C°)	۲
تابع دمای آب ۳ (C°)	۳
تابع دمای آب ۴ (C°)	۴
تابش خورشیدی (Langleys/day)	۵
کسر نور روزانه (تابع)	۶
تابع زمانی سرعت باد ۱ (m/sec)	۷
تابع زمانی سرعت باد ۲ (m/sec)	۸

تابع انقراض نور (در هر متر)	۹
دمای هوا (C °)	۱۰
تابع سرعت ۱ (m/sec)	۱۱
تابع سرعت ۲ (m/sec)	۱۲
تابع سرعت ۳ (m/sec)	۱۳
شار آمونیاک کفزی (mg/m <sup>2</sup> -day)	۱۴
شار فسفات کفزی (mg/m <sup>2</sup> -day)	۱۵
تابع پوشش یخ ۱ (کسری از یخ آزاد)	۱۶
تابع پوشش یخ ۲ (کسری از یخ آزاد)	۱۷
تابع پوشش یخ ۳ (کسری از یخ آزاد)	۱۸
تابع سایه (کسر بدون سایه)	۱۹
جمعیت زئوپلانکتون (شمارش)	۲۰
تابع هوادهی مجدد (هر روز)	۲۱
نرخ ته‌نشینی برای جلبک گروه ۱ (m/day)	۲۲
نرخ ته‌نشینی برای جلبک گروه ۲ (m/day)	۲۳
نرخ ته‌نشینی برای جلبک گروه ۳ (m/day)	۲۴

### ۱۵-۵-منابع

1. AScl. 1995. "Final Project Report, Lake Okeechobee Wasp Enhancement Project South Florida Water Management District (SFWMD) Contract C-5236 , Project Manager Dr. R. T. James, AScl Corporation, Athens, Georgia, May 10, 1995.
2. Bierman, V.J., Jr., D.M. Dolan, E.F. Stoermer, J.E. Gannon, and V.E. Smith. 1980. The Development and Calibration of a Multi-Class Phytoplankton Model for Saginaw Bay, Lake Huron. Great Lakes Environmental Planning Study. Contribution No. 33. Great Lakes Basin Commission, Ann Arbor, Michigan.
3. Bowie, G.L., Mills, W.B., Porcella, D.B., Campbell, C.L., Pagenkopf, J.R., Rupp, G.L., Johnson, K.M., Chan, P.W.H., Gherini, S.A. and Chamberlin, C.E. 1985. Rates, Constants, and Kinetic Formulations in



- Surface Water Quality Modeling. U.S. Envir. Prot. Agency, ORD, Athens, GA, ERL, EPA/600/3-85/040.
4. Chapra, S.C. and Martin, J.L. 2004. LAKE2K: A Modeling Framework for Simulating Lake Water Quality (Version 1.2): Documentation and Users Manual. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA., Steven.Chapra@tufts.edu
  5. Cole, T.M., and S. A. Wells (2006). "CE-QUAL-W2: A two-dimensional, laterally averaged, Hydrodynamic and Water Quality Model, Version 3.5," Instruction Report EL-06-1, US Army Engineering and Research Development Center, Vicksburg, MS.
  6. Tillman, Dottie H. , Carl F. Cerco, Mark R. Noel, James L. Martin, and John Hamrick. 2004. "Three-Dimensional Eutrophication Model of the Lower St. Johns River, Florida. Final report" USACE Engineering Research and Development Center, WEaterways Experiment Station, Vicksburg, MS Prepared for St. Johns River Water Management District, Palatka, FL, ERDC/EL TR-04-13, August 2004 .
  7. Wetzel, R.G. Limnology: Third Edition. Academic Press, New York.
  8. Wool, Tim A., Robert B. Ambrose, James L. Martin, and Edward A.
  9. Comer. 2006. "Water Quality Analysis Simulation Program (WASP), Version 6.0 DRAFT: User's Manual," US Environmental Protection Agency, Environmental Research Laboratory, Athens



## فصل شانزدهم

تکمیل کتابچه‌ی کاربری برنامه‌ی  
شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل کیفیت آب  
(WASP)

فرآیند دیاژنز (تغییرات فیزیکی، شیمیایی و  
زیست‌شناختی) رسوبات WASP: تئوری مدل  
و راهنمای کاربر

## ۱-۱۶- مقدمه

یکی از فرآیندهایی که از دیرباز بر کیفیت آب‌های سطحی مؤثر شناخته شده‌است، نیاز به اکسیژن (اکسیژن‌خواهی) رسوبات و ترشح موادمغذی می‌باشد. به دلیل معدنی‌شدن (دیازنوز) موادآلی در رسوبات کف، نیاز اکسیژن رسوبی (اکسیژن‌خواهی رسوبات) (SOD) و ترشح موادمغذی می‌تواند در ایجاد اوتریفیکاسیون (خوردگی) کم‌اکسیژنی یا هیپوکسی (کمبود اکسیژن در بافت‌های زنده) و یا آزادسازی اکسیژن مضر جلبکی نقش داشته‌باشد. مناطق هیپوکسی یا مرده در محیط‌های رودخانه‌ای و ساحلی شایع‌تر بوده و همان‌طور که در منابع (دیاز و روزنبرگ، ۲۰۰۸) موجود است، از دهه‌ی ۱۹۶۰ به‌طور نمایی افزایش- یافته و منجر به پیامدهای جدی در زمینه‌ی عملکرد اکوسیستم شده‌است. تا سال ۲۰۰۸ (دیاز و روزنبرگ، ۲۰۰۸)، بیش از ۴۰۰ سیستم از مناطق مرده گزارش شده‌اند که به‌طور کلی، بر مساحت بیش از ۲۴۵۰۰۰ کیلومتر مربع تأثیر می‌گذارند. هیپوکسی فصلی (و/یا آنوکسیا (کمبود اکسیژن) اغلب در لایه هیپلیمنیون بسیاری از دریاچه‌ها و مخازن رخ می‌دهد.

بر همین اساس، ترشح SOD و موادمغذی رسوبات، اساساً در تمام مدل‌های کیفیت عددی آب از جمله برنامه‌ی شبیه‌سازی تحلیل آب (WASP) موردتوجه قرار گرفته‌است. با این حال نسخه‌ی قبلی WASP مانند اکثر مدل‌های موجود، به جای پیش‌بینی انتشار SOD و موادمغذی رسوبات، تنها بر قابلیت توصیفی آن متمرکز است. انتشار SOD و موادمغذی رسوبات مشتمل بر نرخ مرتبه‌ی صفر تصحیح‌شده‌ی دما (در واحدهای  $\text{gm}^2\text{day}^{-1}$  یا  $\text{mg m}^2\text{day}^{-1}$ ) در نظر گرفته می‌شود، به‌طوری‌که میزان تغییر در غلظت‌های مختلف لایه‌های هم‌پوشانی آب مطابق با رابطه‌ی زیر برآورد می‌شود.

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{R}{H} \Theta^{T-20} \quad (1-16)$$

که:

H = عمق آب،

R = نرخ (از SOD یا ترشح موادمغذی)،

t = زمان،

C = غلظت در آب‌های پوشاننده،

T = دما،

$\Theta$  = ضریب دمایی.

که نشان‌دهنده‌ی آن است که میزان SOD و انتشار موادمغذی تنها با دما تغییر می‌کند و این نرخ‌ها تحت تأثیر غلظت مواد در رسوبات و یا ستون آب قرار نمی‌گیرند. این گزینه هنوز هم در نسخه‌ی فعلی WASP و همچنین زیرمدل پیش‌بینی شده در بخش تکمیلی قابل دسترس است.

غالباً نرخ‌های صفر SOD و انتشار موادمغذی توسط واسنجی مدل تخمین زده می‌شوند؛ یعنی نرخ‌ها تا زمانی تنظیم می‌شوند که غلظت اکسیژن و موادمغذی مشاهده‌شده نزدیک به هم باشد. اگرچه این روش غالباً مورد استفاده قرار می‌گیرد، با این حال این روش ناقص به حساب می‌آید. این رویکرد فرض می‌کند که تمامی فرآیندهای مدل‌سازی‌های دیگر بر اکسیژن حل‌شده تأثیر می‌گذارند. همچنین فرض دیگر این رویکرد بر این مبنا می‌باشد که سایر فرآیندهای شبیه‌سازی مؤثر بر اکسیژن حل‌شده و غلظت‌های موادمغذی، اگرچه با درجه‌ی اطمینان کافی در نظر گرفته می‌شوند، اما مشتمل بر پدیده‌هایی می‌باشند که به ندرت مورد توجه قرار گرفته‌اند (دارای قطعیت کافی نیست)؛ برای نمونه نبود پیش‌بینی مناسب (پیش‌بینی نامناسب) هیدرودینامیکی تنها می‌تواند نرخ‌های را تعیین نمایند که نتایج کالیبره‌ی پارامترهایی از مدل است که عدم قطعیت بالایی دارد.

دومین روش رایج و از جمله روش‌های برتر در تعیین نرخ‌ها، اندازه‌گیری مستقیم است. روش‌های توسعه یافته‌ای نظیر محفظه و روش‌های هسته برای اندازه‌گیری SOD و انتشار موادمغذی، در مطالعات گسترده‌ای مورد استفاده قرار گرفته است. هزینه‌های ناشی از استخراج اطلاعات از روش‌های اندازه‌گیری مستقیم از یک سو و پیچیدگی این روش‌ها از سوی دیگر اغلب تعداد این اندازه‌گیری‌ها را برای استفاده محدود می‌کند. دومین محدودیت عمده‌ی آن نیز اغلب ناشی از نبود همبستگی بین نسبت‌های اندازه‌گیری شده نسبت به سایر خصوصیات قابل اندازه‌گیری رسوبات است که موجب می‌شود درون‌یابی بین نمونه‌هایی با تعداد محدود بر سطح آب (پیکره آب) با مشکل مواجه شود.

استفاده از یک مرتبه‌ی صفر یا جزء (عبارت) ثابت در مدل کیفیت آب، محدودیت عمده‌ی دیگری دارد، بدین معنا که ارتباطی مکانیکی بین موادالی رسوبی و تبدیل آن به اکسیژن مورد نیاز (اکسیژن خواهی) و انتشار موادمغذی فراهم نمی‌شود. در صورت نبود این پیوند، معمولاً یکی از دو رویکرد جایگزین به کار گرفته شده است. اولین و رایج‌ترین روش مورد استفاده این بوده است که فرض کنیم نرخ‌های SOD و انتشار موادمغذی به دنبال کاهش بار پسماند یا اجرای سایر جایگزین‌های مدیریت کیفیت آب بدون تغییر هستند. واضح است که این امر در مورد این که کاهش بار موادالی به یک بدنه‌ی آبی باید بر بار آلی رسوبات و در نتیجه تقاضای اکسیژن (اکسیژن خواهی) و موادمغذی رسوب تأثیر بگذارد، صادق نیست. با این حال، رویکرد "هیچ تغییری" اغلب به یک فرض "محافظه کارانه" توجیه شده است. رویکرد جایگزین دیگر، فرض خطی بودن و کاهش SOD به نسبت مستقیم با کاهش بار می‌باشد (چاپرا، ۱۹۹۷). با این حال، به ندرت، داده‌های کافی برای تخمین بزرگی و نرخ کاهش وجود دارد.

در میان چندین رویکردی که در نظر گرفته شده است، رویکرد برتر، استفاده از مدل‌های مکانیکی می‌باشد که ارتباط بین تأثیر موادالی بر رسوبات و فرآیندهای فیزیکی، بیولوژیکی و شیمیایی که در رسوبات

رخ می‌دهد و در نتیجه، اکسیژن‌خواهی رسوب و انتشار موادمغذی را فراهم می‌کند. همان‌طور که چاپرا (۱۹۹۷) توضیح داد، یک محدودیت این‌چنین بود که برخی از روش‌های ساده‌شده‌ی اولیه، تمایل به پیش‌تخمینی اکسیژن‌خواهی رسوب و ناتوانایی در به دست آوردن رابطه‌ی غیرخطی (به‌عنوان مثال، فیر و همکاران ۱۹۶۴) یا "ریشه‌ی دوم" بین بارها و تقاضای اکسیژن مشاهده‌شده در آب‌های با جریان طبیعی، داشته‌اند.

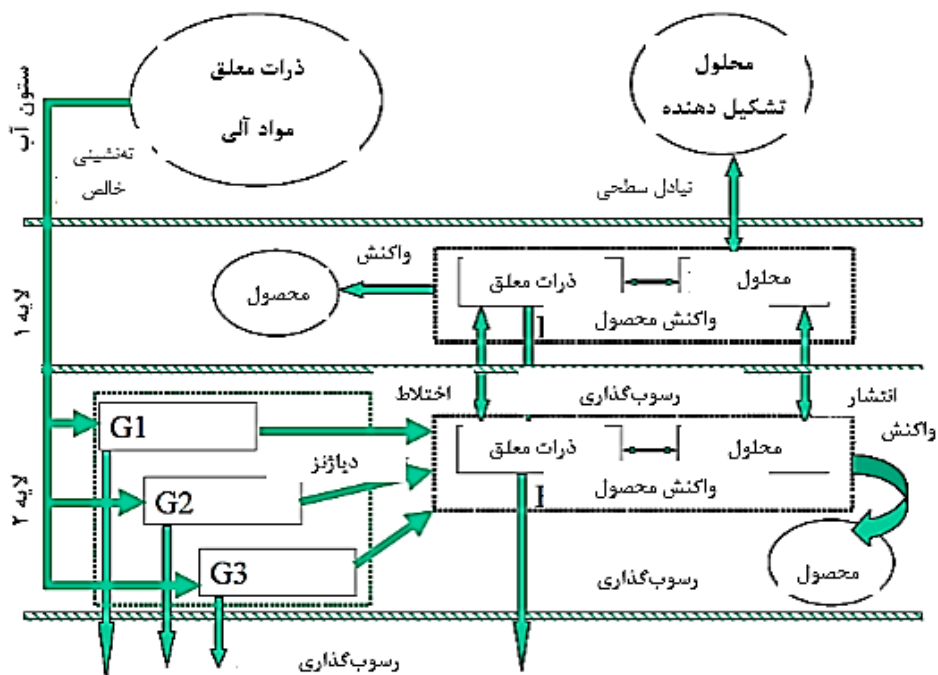
در یک مقاله مهم، دی‌تورو و همکاران (۱۹۹۰) یک مدل SOD را توسعه‌دادند که به طور مکانیکی به روابط غیرخطی مشاهده‌شده می‌پردازد (چاپرا ۱۹۹۷). همان‌طور که دی‌تورو در کتاب خود در مورد مدل‌سازی سیالات رسوبی (دی‌تورو ۲۰۰۱) توضیح داده‌است، اکسیژن‌خواهی رسوب و انتشار فسفر و نیتروژن را تابعی از جریان کربن، نیتروژن و فسفر از ستون آب محاسبه می‌کند. این رویکرد، که در نظریه‌ی دیاژنز به‌خوبی بنیان نهاده‌شده و با اندازه‌گیری‌های میدانی و آزمایشگاهی پشتیبانی می‌شود، پیشرفت مهمی در زمینه‌ی تعاملات آب-رسوب می‌باشد.

کتابچه‌ی کاربری حاضر، تلفیق مدل دیاژنز رسوبات را در چارچوب مدل‌سازی WASP توصیف می‌کند. مدل دیاژنز مبتنی بر چارچوب دی‌تورو (۲۰۰۱) بوده که تحت یک کد مدل توسعه‌یافته، توسط آنالیز کمی محیط‌زیست (QEA) LLC اجرا و برای سازمان حفاظت محیط‌زیست آمریکا ارائه شد (منطقه ۴ (۲۰۰۲)). سپس کد مدل اصلاح و ارتقاء یافت و با WASP تلفیق شد که در این کتابچه آورده شده‌است. ساختار نظری مدل دیاژنز ابتدا در یک کتاب راهنمای کاربر به‌طور خلاصه ارائه شده‌است.

## ۱۶-۲- بررسی اجمالی تئوری

چارچوب اصلی مدل دیاژنز شامل دو لایه‌ی رسوب می‌باشد که به خوبی مخلوط‌شده و هر بخش از ستون آب‌سطحی را پوشش می‌دهد به این صورت که لایه‌ی رسوبی بالایی نازک بوده (لایه هوازی، به ضخامت ۰/۱ سانتی‌متر، دی‌تورو ۲۰۰۱) و لایه‌ی فعال دیگر ضخیم‌تر (بی‌هوازی، به ضخامت ۱۰ سانتی‌متر، دی‌تورو ۲۰۰۱، شکل ۱۶-۱) می‌باشد. سه فرآیند اصلی در مدل رسوب عبارتند از:

- جریان ذرات موادآلی از ستون آب تا رسوبات (توجه داشته‌باشید، از آن‌جا که فرض می‌شود لایه‌ی رسوب بالایی ضخامت ناچیزی دارد، جریان به‌طور مستقیم در لایه‌ی دوم، یا بی‌هوازی رسوب می‌کند)،
- معدنی‌شدن (یا دیاژنز) ذرات ماده آلی،
- واکنش‌ها و انتقال‌ها (بین لایه‌های رسوب، به ستون آب و رسوبات عمیق غیرفعال) از محصولات واکنش.



شکل ۱-۱۶ ساختار اصلی مدل دیاژنز

رسوبات، جریان‌هایی از ستون آب را که شامل ذرات کربن آلی (POC)، نیتروژن (PON) و فسفر (POP) می‌باشند، دریافت می‌کنند که در مجموع به‌عنوان ذرات ماده‌ی آلی (POM) شناخته می‌شوند. جریان‌های POC در WASP، در تعادلات با اکسیژن می‌باشند. جریان از ستون آب به رسوب، به‌عنوان فرآورده‌ی نرخ ته‌نشینی مشخص شده توسط کاربر و غلظت ذرات ماده‌ی آلی ستون آب محاسبه می‌شود. ماده‌ی آلی در ابتدا به سرعت در رسوبات معدنی شده، اما بعد از مدتی این روند کند می‌شود. به‌منظور جذب این فرآیند، POM ته‌نشین شده به یکی از سه "کلاس G" تقسیم می‌شود (شکل ۱، دی‌تورو ۲۰۰۱). سه کلاس G نشان‌دهنده‌ی یک کلاس چربی که نسبتاً سریع معدنی شده (G1)، یک نوع مقاوم‌تر (G2) و یک فرم نسبتاً بی‌اثر (G3) می‌باشد.

واکنش‌های دیاژنزی (معدنی‌شدن) در لایه‌ی رسوبی دوم (بی‌هوایی) رخ می‌دهد. معادلات دیاژنز در هر شکل از ذرات ماده‌ی آلی (C، P، N) حل می‌شوند و برای هر کلاس G (۱-۳) مشابه هستند. به‌منظور

محاسبه‌ی دیاژنز متغیر با زمان، برای هر متغیر مدل شده، یک معادله‌ی موازنه‌ی جرم برای هر فرم و نوع POM نوشته می‌شود (به‌عنوان مثال POC، PON و POP در هر کلاس G).

معادلات بیلان جرم به‌طور جبری برای غلظت در گام زمانی حاضر حل می‌شوند. هنگامی که غلظت در گام فعلی محاسبه می‌شود، شرایط منبع دیاژنز برای واکنش‌ها و انتقال‌ها سنجیده می‌شود. عبارات منبع دیاژن‌زاسیون برای C، N و P از مجموع محصول سرعت‌های واکنش خاص شیمیایی و غلظت‌های محاسبه‌شده در هر یک از سه کلاس G محاسبه می‌شوند.

هنگامی که غلظت ذرات ماده‌ی آلی رسوب (C، N و P) و شرایط منبع برای مرحله‌ی زمانی حاضر محاسبه می‌شوند، واکنش‌ها و انتقال‌ها محاسبه می‌شوند. از یک سو غلظت و از سوی دیگر میزان آمونیاک، نیترات، متان، سولفات، سولفید، سیلیس و فسفر نیز محاسبه می‌شوند و سپس برای محاسبه‌ی جریان بر روی ستون آب (از جمله میزان اکسیژن‌خواهی رسوب) به‌کار می‌روند.

غلظت شیمیایی کل از روابط موازنه‌ی جرم (معادلات بیلان جرمی) برای هریک از دو لایه‌ی رسوب محاسبه می‌شود. از آنجایی که لایه‌ی سطحی در مقایسه با لایه‌ی بی‌هوازی فعال، نازک است، می‌توان فرض نمود که لایه‌ی ۱ در مقایسه با فرآیندهای کندتر که در لایه‌ی ۲ رخ داده در حالت پایدار است و فرض می‌شود که ضخامت لایه‌ها در آن ثابت می‌باشد. معادلات به‌راحتی با استفاده از یک راه‌حل ماتریسی، برای غلظت‌های جدید حل می‌شوند. هنگامی که غلظت به‌روز شد، جریان مواد به ستون آب روی سطح محاسبه می‌شود. با توجه به غلظت‌های شیمیایی در لایه‌ی ۱، SOD و نرخ‌های انتشار محاسبه می‌شوند، اما به استثنای فسفات و سیلیس، هریک از این مواد بر SOD تأثیر می‌گذارند که به‌نوبه‌ی خود بر نرخ انتقال سطح تأثیر می‌گذارند. بنابراین، یک راه‌حل تکراری موردنیاز است. روش به‌کار گرفته‌شده در مدل دیاژنز رسوب به شرح زیر است:

۱. با یک تخمین اولیه از SOD شروع کنید.

۲. معادلات لایه‌ی جامد ۱ و ۲ (برای آمونیاک، نیترات، سولفات، سولفید و متان).

۳. برآورد اولیه‌ی SOD را اصلاح کنید. از الگوریتم پیداکردن ریشه برای ایجاد تخمین جدید استفاده

می‌شود.

۴. اگر هم‌گرایی وجود ندارد به مرحله‌ی (۲) بروید.

پس از تعیین SOD، معادلات لایه‌ی ۱ و ۲ برای فسفات و سیلیس حل می‌شوند و میزان جریان

تعیین می‌شود.



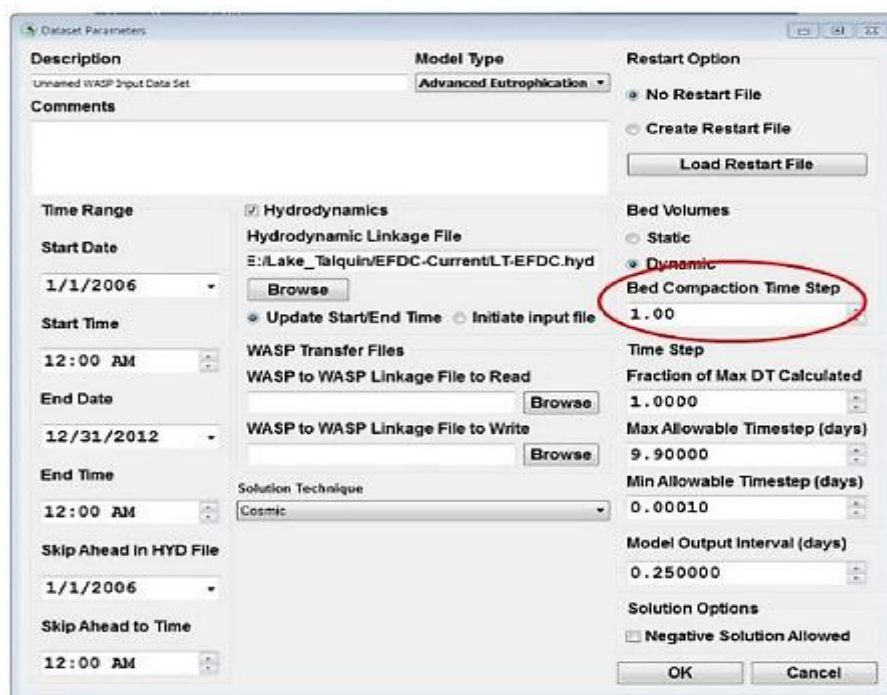
## ۱۶-۳- ورودی مدل

### گام زمانی و ملاحظات کلی زمان اجرای اطلاعات

اطلاعات کلی موردنیاز برای اجرای مدل دیاژنز رسوب شامل انتخاب کاربردهایش و گام زمانی محاسبات آن است. استفاده از مدل دیاژنز رسوب اختیاری می‌باشد. برای استفاده از مدل دیاژنز رسوب، کاربر باید به بخش ثابت‌های جنبشی رفته، گروه ثابت اکسیژن‌خواهی رسوبی را انتخاب کند (به بخش زیر مراجعه کنید)، کلید SOD را تنظیم کند و داده‌های مناسب را وارد کند. داده‌های ورودی خاص مدل دیاژنز در زیر توضیح داده شده‌اند. در حال حاضر، مدل دیاژنز تنها زمانی عمل می‌کند که از مدل پیشرفته‌ی یوتریفیکاسیون (خوردگی) استفاده شود.

### صفحه‌نمایش تنظیم پارامتر مجموعه‌داده: تنظیم گام زمانی مدل دیاژنزی

مدل دیاژنز تنها زمانی کاربردی است که از مدل خوردگی پیشرفته استفاده شود، بنابراین اولین گام انتخاب مدل می‌باشد. در مرحله‌ی دوم، مدل دیاژنز می‌تواند با استفاده از یک گام زمانی محاسباتی بزرگ‌تر نسبت به گام زمانی پیش‌فرض مدل اجرا شود. از آن‌جا که فرآیندهای موجود در رسوبات بی‌هوازی یا زمان‌های واکنش کندتر از فرآیندهای موجود در ستون آب هستند، به‌طور معمول، مرحله‌ی زمانی دیاژنز رسوب بیش‌تر از مرحله‌ی زمانی محاسباتی مدل خواهد بود. همان‌طور که در بالا نشان داده‌شد، POM در مدل دیاژنز به "کلاس‌های G" تفکیک می‌شود که نرخ‌های مختلف واکنش‌پذیری را منعکس می‌کند. درحالی‌که اجزای ناپایدار ممکن است نسبتاً سریع پاسخ دهند (ماه-گام زمانی ماهانه)، اجزای پایدار (مقاوم) ممکن است سال‌ها طول بکشد تا با ستون آب به تعادل برسند. وقتی که مرحله‌ی زمانی دیاژنز رسوب بزرگ‌تر از مرحله‌ی زمانی مدل است، جریان ذرات موادالی با رسوب جمع می‌شوند و غلظت ستون‌های آب در طول بازه زمانی دیاژنز میانگین‌گیری می‌شود. در صورتی‌که این فرآیند توسط کاربر مشخص نشود، مرحله‌ی زمانی دیاژنز رسوب به ۱ روز تنظیم می‌شود.



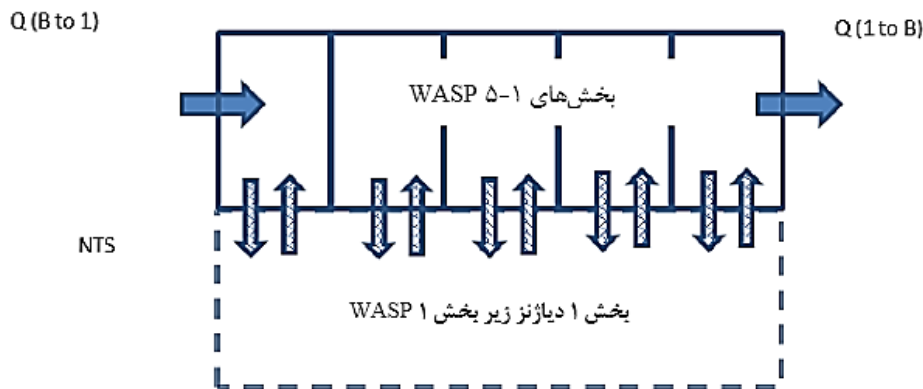
شکل ۱۶-۲ گام زمانی زیر مدل SOD

### بخش پارامتر ورودی

هنگامی که قطعه‌ای برای شبیه‌سازی ایجاد شد از پارامترهای مدل برای تعیین قطعات دیاژنز و شرایط اولیه استفاده می‌شوند. اگر از مدل دیاژنز استفاده نشود، کاربر می‌تواند مقادیر پارامتر ورودی برای جریان رسوب را با استفاده از پارامترهای زیر تعیین کند:

- جریان آمونیاک بنتیک ( $\text{mg/m}^2 - \text{day}$ )
- جریان فسفات بنتیک ( $\text{mg/m}^2 - \text{day}$ )
- اکسیژن‌خواهی رسوب ( $\text{g/m}^2 - \text{day}$ )

اگر قرار باشد مدل دیاژنز مورد استفاده قرار گیرد؛ تعیین این که چه تعداد از قطعات دیاژنز موجود است و این که کدام قطعه در ستون آب بالای آن‌ها قرار می‌گیرد، مبنای پارامترهای ورودی کاربر انتخاب می‌شوند؛ به‌عنوان مثال، در تصویر زیر تعداد پنج قطعه ستون آب WASP وجود دارد که روی یک قطعه دیاژنز منفرد را پوشانده‌است. قطعه‌ی دیاژنز با استفاده از پارامتر "تفکیک دیاژنز رسوبات وابسته به این قطعه" در زیر یک قطعه‌ی خاص WASP، مشخص شده‌است.



شکل ۱۶-۳ انتخاب مبنای پارامترهای ورودی کاربر

Parameter	System	Used	Scale Factor	I=14 K=2	I=14 J=2 K=1	I=7 J=3 K=1	I=14 J=3 K=1	I=05 J=3 K=1	I=05 J=3 K=1	I=07 J=3 K=1	I=08 J=3 K=1	I=09 J=3 K=1	I=70 J=3 K=1
1 Benthic Ammonia Flux [mg/m <sup>2</sup> -day]	Ammonia	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2 Benthic Phosphate Flux [mg/m <sup>2</sup> -day]	Inorganic P	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
3 Sediment Oxygen Demand [g/m <sup>2</sup> -day]	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1.3	1.5000	1.5000	1.5000	1.5000	1.5000	1.5000	1.5000	1.5000	1.5000	1.5000
4 Sediment Diagenesis Segment Attached to this Segment	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	2.0000	1.0000	1.0000	4.0000	5.0000	0.0000	7.0000	0.0000	9.0000
5 PON Initial Condition for Sediment Diagenesis Segment	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000
6 POP Initial Condition for Sediment Diagenesis Segment	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
7 POC Initial Condition for Sediment Diagenesis Segment	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	20.0000	20.0000	20.0000	20.0000	20.0000	20.0000	20.0000	20.0000	20.0000	20.0000
8 POG Initial Condition for Sediment Diagenesis Segment	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
9 Fraction of (PO-N/P/C) in Class 1	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	0.0100	0.0100	0.0100	0.0100	0.0100	0.0100	0.0100	0.0100	0.0100	0.0100
10 Fraction of (PO-N/P/C) in Class 2	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	0.0300	0.0300	0.0300	0.0300	0.0300	0.0300	0.0300	0.0300	0.0300	0.0300
11 Fraction of (PO-N/P/C) in Class 3	Dissolved Oxygen	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

شکل ۱۶-۴ انتخاب شرایط اولیه برای ذرات ماده‌ی آلی در لایه‌ی دیازنز و قطعات کلاس G

- همچنین کاربر باید شرایط اولیه برای ذرات ماده‌ی آلی در لایه‌ی دیازنز و قطعات کلاس G (نشان‌دهنده میزان واکنش‌پذیری، G1-G3) برای POM را با استفاده از پارامترهای زیر وارد کند:
- شرایط اولیه‌ی PON برای تفکیک دیازن‌زاسیون رسوبات (میلی گرم نیتروژن بر گرم رسوب)،
  - شرایط اولیه‌ی POP برای تفکیک دیازن‌زاسیون رسوبات (میلی گرم فسفر بر گرم رسوب)،
  - شرایط اولیه‌ی POC برای تفکیک دیازن‌زاسیون رسوبات (میلی گرم کربن بر گرم رسوب در برابر اکسیژن)،
  - شرایط اولیه‌ی برای تفکیک رسوبات رسوبی (میلی گرم سیلیس بر گرم رسوب)،

- کسر (PO - N/P/C) در کلاس ۱،
- کسر (PO - N/P/C) در کلاس ۲،

همانند تمامی پارامترهای WASP، پارامترهایی که باید استفاده شوند، در صفحه‌نمایش بخش پارامتر (در مدل) چک می‌شوند، درحالی که مقادیر خاص تحت صفحه‌نمایش بخش قطعه تنظیم می‌شوند. توجه داشته‌باشید که در حال حاضر هیچ مقرراتی برای تنظیم غلظت‌های اولیه‌ی حل شده در آب منفذی رسوب وجود ندارد.

### ورود جریان‌ها به رسوبات

دیاژنز توسط ورود جریان‌ها به رسوبات هدایت می‌شود. شارها توسط سیستم‌های مدل انتخابی کاربر، ورودی‌های مرتبط و نرخ‌های مشخص ته‌نشینی کنترل می‌شوند. نرخ‌های ته‌نشینی با استفاده از میدان‌های جریان "old way" را مشخص می‌کند و از قطعه به مرز تنظیم می‌شود و پس از آن WASP تشخیص خواهد داد که کدام بخش دیاژنز جریان را از پارامتر "diagenesis segment below" دریافت می‌کند.

### ثابت‌های دیاژنز

گزینه‌های دیاژنز و ثابت‌های تحت صفحه‌ی مربوط به ثابت<sup>۱</sup> در مدل تنظیم می‌شوند و با انتخاب گزینه نیز همچنان حفظ می‌شوند تا به کاربر اجازه دهند (به‌جای پیش‌بینی) تا میزان تقاضای اکسیژن رسوب و انتشار فسفر و آمونیاک را مشخص کند (پارامترهای مدل، اگر گزینه‌ی  $SOD = 0$  باشد). اگر کاربر در وضعیت  $SOD > 0$  باشد، باید به هشدارهای مدل توجه کند، زیرا همان‌طور که بعداً توضیح داده خواهد شد، پارامتر مدل برای  $SOD$  معنای متفاوتی دارد. در این حالت، پارامتر لایه‌ی دیاژنز رسوب را در زیر قطعه‌ی مدل مشخص می‌کند، درحالی که برای گزینه‌ی  $SOD = 0$  پارامتر نرخ  $SOD$  ( $gm^2day^{-1}$ ) را مشخص می‌کند.

<sup>1</sup> Constant

Constant	System	Used	Value	Default	Minimum
1 Activate Sediment Diagenesis Model (I=On, 0=Off)	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	0	0
2 1=Read/Create Dynamic SOD Restart File (SOD.RST) Automatically Created	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	0	0
3 1=Static SOD Restart File (SOD.IC) Needs to be created by user	Dissolved Oxygen	<input type="checkbox"/>	0	0	0
4 Determines if a steady-state calculation sets initial conditions (I=No, 0=Yes)	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1	0
5 Maximum error for testing convergence of the steady-state solut	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.001	0.001	0.001
6 Maximum number of iterations of steady-state solution	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1000	1000	1
7 Salinity con. (ppt) for determining whether methane or Sulfide SOD	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1	1
8 Determines whether fresh or saltwater nitrification/denitrification rates	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1	1
9 Solids concentration in Layer 1 kg/L	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.5	0.5	0
10 Thickness of active sediment layer cm	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.1	0.1	0
11 Solids concentration in Layer 2 kg/L	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.5	0.5	0
12 Diffusion coefficient between layers 1 and 2 (m <sup>2</sup> /day)	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0025	0.0025	0
13 Temperature coefficient for Dd	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1.08	1.08	0
14 Burial velocity for layer 2 to inactive sediments (m/day)(0.00000665)	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	6.65e-06	6.65e-06	6.35e-06
15 Diffusion coefficient for particle mixing (m <sup>2</sup> /day)	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	6e-05	0.0036	6e-05
16 Temperature coefficient for Dp	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1.117	1.117	1.117
17 Reference POC (O2 EQ=0.767) measurement for particle mixing	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.2667	0.2667	0.2667
18 Decay constant for benthic stress (1/day)	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.03	0.03	0.03
19 Particle mixing half-saturation constant for oxygen (gO2/m <sup>3</sup> )	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	4	4	4
20 Nitrogen Constants: Fraction PON to G1	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.65	0.65	0.65
21 Diagenesis rate for PON G1	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.035	0.035	0.035
22 Diagenesis rate for PON G2	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0018	0.0018	0.0018
23 Fraction PON to G2	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0.25	0.25	0.25
24 Temperature coefficient for diagenesis of PON G1	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1.1	1.1	1.1
25 Temperature coefficient for diagenesis of PON G2	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1.15	1.15	1.15
26 Diagenesis rate for PON G3	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	0	0	0
27 Temperature coefficient for diagenesis of PON G3	Dissolved Oxygen	<input checked="" type="checkbox"/>	1.17	1.17	1.17

شکل ۱۶-۵ انتخاب شرایط اولیه با فرض حالت پایدار برای رسوب

ثابت‌های دیاژنزی و مقادیر معمول در زیر آورده شده‌اند. گزینه‌ی اول تعیین می‌کند که آیا مدل دیاژنز باید در شبیه‌سازی گنجانده شود یا خیر. گزینه‌ی دوم نیز بر چگونگی تعیین شرایط اولیه تأثیر می‌گذارد. در این شرایط ثابت‌ها ممکن است پارامترهای مدل وارد شده و یا از فایل راه‌اندازی مجدد خوانده شوند. متناوباً، ممکن است کاربر انتخاب کند که مدل، شرایط اولیه را با فرض این که رسوب در حالت پایدار با جریان اولیه بر روی لایه‌ی رسوب می‌باشد، محاسبه کند (براساس شرایط اولیه و جریانات رسوب‌گذاری). حالت پایدار با استفاده از یک راه‌حل تکراری محاسبه می‌شود، بنابراین علاوه بر انتخاب این گزینه، کاربر حداکثر تعداد تکرارکننده‌ها و معیار خطا (هم‌گرایی) را نیز مشخص می‌کند.

جدول ۱۶-۱ انتخاب شرایط اولیه با فرض حالت پایدار برای رسوب (توضیح تصویر بالا)

Use	مقدار	ثابت دیاژنز
Y	۱	فعال کردن مدل دیاژنز رسوب (1=on , 2=off)
Y	۱	1= خواندن / ایجاد فایل راه‌اندازی مجدد Dynamic SOD (Wif _ File name.SOD _ rst) ایجاد خودکار
N	۱	1= فایل راه‌اندازی مجدد Static SOD (Filename. _IC) (Wif _ SOD) باید توسط کاربر ایجاد شود.
Y	۱	محاسبه‌ی دیاژنز حالت پایدار را تعیین می‌کند ( , 1=on 2=off)
Y	۰/۰۰۱	حداکثر خطا برای آزمایش هم‌گرایی اصلاح حالت پایدار
Y	۱۰۰۰	حداکثر تعداد تکرار محلول حالت پایدار (new)
Y	۱	شوری مخروط (ppt) برای تعیین میزان متان یا سولفید SOD
Y	۱	میزان نیتروژن‌زایی / نیتروژن‌زدایی آب شیرین یا شور را تعیین می‌کند.
Y	۰/۵	غلظت جامدات در لایه ۱ کیلوگرم در لیتر
Y	۰/۵	غلظت جامدات در لایه‌ی ۲ کیلوگرم در لیتر
Y	۰/۰۰۲۵	ضریب انتشار بین لایه‌های ۱ و ۲ ( $m^2/day$ )
Y	۱/۰۸	ضریب دما برای Dd
Y	۰/۱	ضخامت لایه‌ی رسوب فعال، سانتی‌متر
Y	۶/۸۵E- ۰/۶	سرعت دفن لایه ۲ به رسوبات غیرفعال ( $m/day$ )(0/00000685)
Y	۶/۰۰E- ۰/۶	ضریب انتشار برای مخلوط کردن ذرات ( $m^2/day$ )
Y	۱/۱۱۷	ضریب دما برای Dp
Y	۰/۲۶۶۷	مرجع POC ( $O_2 EQ. = 0. * 2.67$ ) اندازه‌گیری برای مخلوط کردن ذرات
Y	۰/۰۳	ثابت فروپاشی برای فشار کفزی ( $1/day$ )

Y	۴	ثابت مخلوط نیمه‌اشباع ذرات برای اکسیژن ( $\text{gO}_2/\text{m}^3$ )
Y	۰/۶۵	ثابت نیتروژن: کسر PON به G1
Y	۰/۲۵	کسر PON به G2
Y	۰/۰۳۵	نرخ دیاژنز برای PON G1
Y	۱/۱	ضریب دما برای دیاژنز PON G1
Y	۰/۰۰۱۸	نرخ دیاژنز برای PON G2
Y	۱/۱۵	ضریب دما برای دیاژنز PON G 2
Y	۰	نرخ دیاژنز برای PON G 3
Y	۱/۱۷	ضریب دما برای دیاژنز PON G 3
Y	۰/۱۳۱۳	سرعت واکنش نیتروژن‌زایی آب شیرین (m/day) (new)
Y	۰/۱۳۱۳	سرعت واکنش نیتروژن‌زایی آب شور (m/day) (new)
Y	۱/۱۲۳	ضریب دما برای نیتروژن‌زایی
Y	۰/۷۲۸	ضریب نیمه‌اشباع آمونیاک در واکنش نیتروژن‌زایی (mg/L)
Y	۰/۳۷	ضریب نیمه‌اشباع برای اکسیژن در واکنش نیتروژن‌زایی (mg/L)
Y	۱۰۰	سرعت واکنش واکنش مرحله‌ی ۲ برای نیتروژن‌زایی ( $\text{m/day}$ ) ( $\text{NO}_2$ به $\text{NO}_3$ )
Y	۱/۱۲۳	ضریب دما برای سرعت واکنش مرحله‌ی ۲
Y	۰/۳۷	ضریب نیمه‌اشباع اکسیژن در واکنش مرحله‌ی ۲ ( $\text{mgO}_2/\text{L}$ )
Y	۰/۱	سرعت واکنش نیتروژن‌زدایی آب شیرین در لایه‌ی ۱ ( $\text{m/day}$ )
Y	۰/۱	سرعت واکنش نیتروژن‌زدایی آب شور در لایه‌ی ۱ ( $\text{m/day}$ )
Y	۱/۰۸	ضریب دما برای نیتروژن‌زدایی
Y	۰/۲۵	سرعت واکنش نیتروژن‌زدایی در لایه‌ی ۲ ( $\text{m/day}$ )
Y	۱	ضریب تقسیم نیتروژن (L/kg)
Y	۰/۶۵	فسفر: کسر POP به G1
Y	۰/۲	کسر POP به G2
Y	۰/۰۳۵	نرخ دیاژنز برای POP G1

Y	۱/۱	ضریب دما برای دیاژنز POP G1
Y	۰/۰۰۱۸	نرخ دیاژنز برای POP G2
Y	۱/۱۵	ضریب دما برای دیاژنز POP G2
Y	۰	نرخ دیاژنز برای POP G3
Y	۱/۱۷	ضریب دما برای دیاژنز POP G3
Y	۲۰	ضریب تقسیم فسفر در لایه ۲ (L/kg)
Y	۲۰	ضریب افزایشی تقسیم آب شیرین در لایه ۱ (new)
Y	۲۰	ضریب افزایشی تقسیم آب شور در لایه ۱
Y	۲	غلظت اکسیژن بحرانی در جذب فسفات افزایشی لایه ۱ (mgO <sub>2</sub> /L)
Y	۰/۶۵	ثابت‌های کربن: کسر CBODu به G1
Y	۰/۲	کسر CBODu به G2
Y	۰/۰۳۵	نرخ دیاژنز برای CBODu G1
Y	۱/۱	ضریب دما برای دیاژنز CBODu G1
Y	۰/۰۰۱۸	نرخ دیاژنز برای CBODu G2
Y	۱/۱۵	ضریب دما برای دیاژنز CBODu G2
Y	۰	نرخ دیاژنز برای CBODu G3
Y	۱/۱۷	ضریب دما برای دیاژنز CBODu G3
Y	۰/۷	سرعت واکنش اکسیداسیون متان (m/day)
Y	۱/۰۷۹	ضریب دما برای اکسیداسیون متان
Y	۰/۳۷	ضریب نیمه‌اشباع اکسیژن در اکسیداسیون متان (mg/L)
Y	۰/۲	سرعت واکنش برای اکسیداسیون سولفید محلول در لایه ۱ (m/day)
Y	۰/۴	سرعت واکنش برای اکسیداسیون ذرات سولفید ذرات در لایه ۱ (m/day)
Y	۱/۰۷۹	ضریب دما برای اکسیداسیون سولفید (new)
Y	۴	ثابت نرمال‌سازی اکسیداسیون سولفید (mg/L) (new)
Y	۱۰۰	ضریب تقسیم سولفید در لایه ۱ (L/kg) (new)



Y	۱۰۰	ضریب تقسیم سولفید در لایه ۲ (L/kg) (new)
Y	۰/۶۵	ثابت جلبک: جلبک ته‌نشین شده به G1 (new)
Y	۰/۲	کسر جلبک ته‌نشین شده به G2 (new)
Y	۰/۵	میزان انحلال ذرات سیلیس بیوژنیک در ۲۰ درجه سانتی‌گراد (1/day)
Y	۱/۱	اثر دما بر روی تجزیه‌ی سیلیس
Y	۴۰۰۰	غلظت اشباع سیلیس در آب منفذی (mg si/m**3)
Y	۱۰	تغییر افزایشی (Mult) برای آب شیرین در ضریب تقسیم Si مانند DO
Y	۱۰۰	ضریب تقسیم بین محلول/جامد سیلیس در لایه ۲
Y	۵۰۰۰۰۰۰	ثابت نیمه‌اشباع از محلول سیلیس در واکنش تجزیه
Y	۱	غلظت بحرانی اکسیژن برای جذب سیلیس

## ۱۶-۴- اجرای مدل دیاژنز

### پس از راه‌اندازی مدل دیاژنز

#### شرایط اولیه

همان‌طور که در بالا توضیح داده‌شد، شرایط اولیه برای شبیه‌سازی دینامیک، برای هر بخش دیاژنز که تحت پارامتر ورودی مدل مشخص شده، موردنیاز است. شرایط اولیه برای هر نوع ماده‌ی آلی (N، P، C و Si) در هر سه کلاس G موردنیاز است. توجه - داشته‌باشید که کربن آلی در تعادلات (معادلات) اکسیژن مشخص شده‌است. به این نکته نیز توجه داشته‌باشید که درحال حاضر هیچ‌گونه مقرراتی برای ارائه‌ی غلظت‌های اولیه‌ی آب منفذی آمونیاک حل‌شده، نیتريت، نیترات و غلظت‌های فسفات وجود ندارد. به‌طور ایده‌آل، شرایط اولیه از اندازه‌گیری‌های میدانی مانند غلظت آب منافذ و غلظت ذرات ماده‌ی آلی (POM) حاصل می‌شود و بیش‌تر به کلاس‌های G تقسیم می‌شود که درعمل، نبود داده‌های میدانی و/یا روش‌های تحلیلی پذیرفته‌شده از تقسیم کلاس‌های G باعث بروز این مشکل می‌شود؛ به‌عنوان مثال، ممکن است رسوبات قدیمی‌تر با نرخ پایین ته‌نشینی ستون آب، عمدتاً از کلاس ۳ تشکیل شده‌باشند، درحالی‌که در سیستم‌های مؤثرتر بالا ممکن است یک مؤلفه‌ی کلاس ۲ بزرگ‌تر نیز وجود داشته‌باشد. نسبت‌های مرتبط (نزدیک بهم) مستقیماً بر زمان‌های واکنش تأثیر می‌گذارند، چون سرعت دیاژنز بسیار متفاوت می‌باشد.

یکی از روش‌های متداول، تخمین شرایط اولیه در حین مدل‌سازی می‌باشد. برآوردهای مدل‌سازی معمولاً براساس پیش‌بینی‌های حالت پایدار یا شبه‌پویا انجام می‌گیرد. گزینه‌ی "steady-state" (انتخاب‌شده تحت منوی ثابت‌های انرژی جنبشی دیاژنز) به مدل اجازه می‌دهد تا شرایط اولیه را با فرض حالت پایدار، براساس غلظت اولیه‌ی ستون آب و شارهای ته‌نشینی، محاسبه کند (برای توصیف محاسبات حالت پایدار به ضمیمه‌ی A مراجعه کنید). توصیه می‌شود در استفاده از این گزینه به‌ویژه برای فسفر و سیلیس دقت کافی صورت گیرد. همان‌طور که توسط دی‌تورو (۲۰۰۱) نشان داده‌شد، یک مدل در حالت پایدار نمی‌تواند برای پیش‌بینی محدوده‌ی جریان فسفر رسوبات، به‌ویژه تحت شرایط ستون آب غیرسمی، موفقیت‌آمیز عمل کند. در نتیجه، گزینه‌ی حالت پایدار برای محاسبه‌ی شرایط اولیه بخش‌های دیاژنز در جایی که غلظت اولیه‌ی اکسیژن حل‌شده در ستون آب نزدیک به صفر می‌باشد، نباید مورد استفاده قرار گیرد.

یک روش بسیار رایج برای تخمین شرایط اولیه، استفاده از یک روش شبه اسمی می‌باشد. در این روش، مدل برای یک دوره‌ی یک ساله و یا بیش‌تر از آن، با تکرار منطقی شرایط ستون آب و غلظت‌های پیش‌بینی شده‌ی بخش‌های دیاژنز در پایان آن دوره برای اصلاح و جایگزینی شرایط اولیه مشخص شده، اجرا می‌شود. این فرآیند تا زمانی تکرار می‌شود که پیش‌بینی‌های حاصل به حالت شبه‌پایدار نزدیک شوند. همچنین گزینه‌ای برای نوشتن فایل راه‌اندازی مجدد در پایان دوره‌ی شبیه‌سازی و سپس خواندن و فراهم کردن شرایط اولیه در شبیه‌سازی‌های بعدی ارائه شده‌است.

### جریان‌های ته‌نشینی

دیاژنز رسوب ناشی از جریان‌های رسوبی از ستون آب می‌باشد. جریان مواد آلی (POP، PON) و POC) در بخش‌های دیاژنز براساس غلظت‌های ستون آب و نرخ‌های ته‌نشینی مشخص محاسبه می‌شود. جریان‌ات رسوب که عمل ورودی برای دیاژنز را انجام می‌دهند، شامل رسوباتی هستند که خارج از بخش ستون آب استفاده می‌شوند. به عبارت دیگر، جریان‌ات رسوب به‌صورت بخش‌های ستون آب تا مرز مدل مشخص می‌شوند.

رابطه با متغیرها و پارامترهای کیفیت WASP؛ متغیرهای کیفیت در مدل دیاژنز عبارتند از:

- نیتروژن آلی (کلاس‌های 3G)،
  - فسفر آلی (کلاس‌های 3G)،
  - ذرات کربن آلی (کلاس‌های 3G)،
  - محصولات واکنش و ترکیبات محلول،
- آمونیاک،

-نیتريت-نیتروژن،

-نیترات-نیتروژن،

-فسفات،

-سولفیدها،

-متان،

-سیلیس،

مدل دیاژنز POC در تعادلات اکسیژنی محاسبه می‌شود. جریانات رسوب ذرات موادآلی از ستون آب تا بخش دیاژنز براساس متغیرهای حالت مدل و استوکیومتری مدل؛ به موادآلی C، P، N و Si تقسیم می‌شوند. این جریانات بعداً براساس این که کاربر ثابت‌های ورودی را بر چه اساسی فراهم می‌کند، به دسته‌های G تقسیم می‌شوند. غلظت آمونیاک محلول در ستون آب، نیترات و فسفات بر انتقال این ترکیبات بین بخش‌های دیاژنز و بخش بالای ستون آب تأثیر می‌گذارد. در نسخه‌ی فعلی مدل WASP، غلظت نیتريت ستون آب صفر فرض می‌شود. با استفاده از غلظت اکسیژن حل‌شده که در ستون آب محاسبه شده‌است، سرعت انتقال و واکنش‌ها تغییر می‌کند.

تعدادی از واکنش‌ها نیز بین سیستم‌های آب شور و شیرین متفاوت می‌باشند، به‌طوری که شوری پیش‌بینی شده نیز بر پیش‌بینی‌های مدل دیاژنز تأثیر می‌گذارد. علاوه‌بر این، واکنش‌های متان در سیستم‌های آب شیرین محاسبه می‌شوند، درحالی که سولفیدها برای سیستم‌های آب شور محاسبه می‌شوند. درحال حاضر هیچ قانونی در مدل WASP برای انتقال تدریجی میان متان یا واکنش‌های سولفیدی وجود ندارد. بنابراین، کاربران باید هنگام استفاده از مدل برای سیستم‌های دهانه‌ی ورودی دریا که ممکن‌است به سرعت شرایط آب شیرین و آب شور جایگزین شود، دقت نمایند.

در حالی که سرعت واکنش با دما تغییر می‌کند، در مدل دیاژنز فرض می‌شود که دمای قطعه برابر با دمای ستون آبی است که آن‌را پوشانده است. دمای قطعه با استفاده از پارامترهای مدل WASP و توابع زمانی مشخص می‌شود. کاربر باید توجه داشته‌باشد، در شرایطی که واحد دما مشخص نشود، مدل به‌طور پیش‌فرض °C را لحاظ می‌نماید.

### ضرایب مدل و ثابت

شبیه‌سازی دیاژنز رسوب و پیش‌بینی جریان‌های حاصل از رسوبات تا ستون آب نیازمند تعیین تعدادی از ثابت‌ها و ضرایب مربوط به دیاژنز، ویژگی‌های رسوب، اختلاط و انرژی جنبشی می‌باشد. ضرایب و ثابت‌های مربوط به مدل دیاژنز را می‌توان به چهار گروه تقسیم نمود که در جداول زیر فهرست شده‌اند.

گروه اول شامل گزینه‌های مدل و همچنین ثابت‌ها مورد استفاده برای تعریف هندسه‌ی لایه‌های دیاژنز، غلظت جامدات و شوری (آب شیرین یا شور) واکنش‌ها می‌باشد. گروه دوم ثابت‌ها هستند که برای تفکیک مواد آلی تثبیت شده در میان انواع (POC, POP, PON) و کلاس‌های G استفاده می‌شود. گروه سوم شامل شرایط مربوط به دیاژنز مواد آلی بوده و گروه نهایی شامل عبارات مربوط به واکنش‌های جنبشی می‌باشد. مقادیر معمول مشخص شده در جداول زیر براساس مطالعات MERL هستند و کاربر برای مقادیر ثابت‌ها و ضرایب حاصل از مطالعات دیگر به دی‌تورو (۲۰۰۱، جداول ۴/۱۵ - ۵/۱۵) ارجاع داده می‌شود. یک نمایش دقیق از استفاده‌ی این ثابت‌ها و ضرایب در معادلات مدل، در ضمیمه‌ی A ارائه شده‌است.

جدول ۱۶-۲ ثابت‌های عمومی و خواص دیاژنز رسوب

مقدار معمولی	شرح
۰/۰۰۱	حداکثر خطا (کسری از تغییر) برای آزمایش هم‌گرایی محلول پایدار برای شرایط اولیه
۱۰۰۰	حداکثر تعداد تکرار محلول حالت پایدار
۱	غلظت شوری (ppt) برای تعیین رابطه SOD متان یا سولفید
۱	غلظت شوری (ppt) که تعیین می‌کند میزان نیتروژن‌زایی / نیتروژن‌زدایی آب شیرین یا شور مورد استفاده قرار می‌گیرد.
۰/۵	غلظت جامدات در لایه‌ی ۱ (kg/L)
۰/۵	غلظت جامدات در لایه‌ی ۲ (kg/L)
۰/۱	ضخامت لایه‌ی رسوب فعال (cm)

جدول ۱۶-۳ ضرایب مدل دیاژنز و ثابت‌های مربوط به اختلاط و انتقال

مقدار معمولی	شرح
۰/۰۰۲۵	ضریب انتشار بین لایه‌های ۱ و ۲ ( $m^2/day$ )
۱/۰۸	ضریب دما برای Dd
۶/۸۵E- ۰۶	سرعت دفن لایه‌ی ۲ به رسوبات غیرفعال (m/day)
۰/۰۰۰۰۶	ضریب انتشار برای ترکیب ذرات ( $m^2/day$ )
۱/۱۱۷	ضریب دما برای Dp
۰/۲۶۶۷	اندازه‌گیری POC مرجع ( $O_2 EQ = 0. * 2/67$ ) برای ترکیب ذرات (mg/g)

۰/۰۳	ثابت فروپاشی برای فشار کفزی ( $\text{day}^{-1}$ )
۴	ثابت ترکیب ذرات نیمه‌اشباع برای اکسیژن ( $\text{g O}_2/\text{m}^3$ )

جدول ۴-۱۶ ضرایب مدل دیاژنزی و ثابت‌های مربوط به تفکیک موادالی در ستون آب (برای جریان به رسوبات)

مقدار معمولی	شرح
۰/۶۵	کسر PON به کلاس G1
۰/۲۵	کسر PON به کلاس G2
۰/۶۵	کسر POP به کلاس G1
۰/۲	کسر POP به کلاس G2
۰/۶۵	کسر CBODu به کلاس G1
۰/۲	کسر CBODu به کلاس G2

جدول ۵-۱۶ ضرایب مدل دیاژنز و ثابت‌های مربوط به دیاژنز ماده آلی

مقدار معمولی	شرح
۰/۰۳۵	نرخ دیاژنز برای PON G1
۱/۱	ضریب دما برای دیاژنز PON G1
۰/۰۰۱۸	نرخ دیاژنز برای PON G2
۱/۱۵	ضریب دما برای دیاژنز PON G2
۰	نرخ دیاژنز برای PON G3
۱/۱۷	ضریب دما برای دیاژنز PON G3
۰/۰۳۵	نرخ دیاژنز برای POP G1
۱/۱	ضریب دما برای دیاژنز POP G1
۰/۰۰۱۸	نرخ دیاژنز برای POP G2
۱/۱۵	ضریب دما برای دیاژنز POP G2
۰	نرخ دیاژنز برای POP G3
۱/۱۷	ضریب دما برای دیاژنز POP G3
۰/۰۳۵	نرخ دیاژنز برای POC G1

۱/۱	ضریب دما برای دیاژنز POC G1
۰/۰۰۱۸	نرخ دیاژنز برای POC G2
۱/۱۵	ضریب دما برای دیاژنز POC G2
۰	نرخ دیاژنز برای POC G3
۱/۱۷	ضریب دما برای دیاژنز POC BODu G3

جدول ۱۶-۶ ضرایب مدل دیاژنزی و ثابت‌های مربوط به واکنش‌ها

مقدار معمولی	شرح
۰/۱۳۱۳	سرعت واکنش نیتروژن‌زایی آب شیرین (new) (m/day)
۰/۱۳۱۳	سرعت واکنش نیتروژن‌زایی آب شور (new) (m/day)
۱/۱۲۳	ضریب دما برای نیتروژن‌زایی
۰/۷۲۸	ضریب نیمه‌اشباع آمونیاک در واکنش نیتروژن‌زایی (mg/L)
۰/۳۷	ضریب نیمه‌اشباع برای اکسیژن در واکنش نیتروژن‌زایی (mg/L)
۱۰۰	سرعت واکنش مرحله‌ی ۲ برای نیتروژن‌زایی (NO <sub>2</sub> به NO <sub>3</sub> ) (m/day)
۱/۱۲۳	ضریب دما برای سرعت واکنش مرحله‌ی ۲
۰/۳۷	ضریب نیمه‌اشباع اکسیژن در واکنش مرحله‌ی ۲ (mgO <sub>2</sub> /L)
۰/۱	سرعت واکنش نیتروژن‌زدایی آب شیرین در لایه‌ی ۱ (m/day)
۰/۱	سرعت واکنش نیتروژن‌زدایی آب شور در لایه‌ی ۱ (m/day)
۱/۰۸	ضریب دما برای نیتروژن‌زدایی
۰/۲۵	سرعت واکنش نیتروژن‌زدایی در لایه‌ی ۲ (m/day)
۱	ضریب تقسیم نیتروژن (L/kg)
۰/۶۵	فسفر: کسر POP به G1
۰/۲	کسر POP به G2
۰/۰۳۵	نرخ دیاژنز برای POP G1
۱/۱	ضریب دما برای دیاژنز POP G1
۰/۰۰۱۸	نرخ دیاژنز برای POP G2
۱/۱۵	ضریب دما برای دیاژنز POP G2

۰	نرخ دیاژنز برای POP G3
۱/۱۷	ضریب دما برای دیاژنز POP G3
۲۰	ضریب تقسیم فسفر در لایه ۲ (L/kg)
۲۰	ضریب افزایشی تقسیم آب شیرین در لایه ۱ (new)
۲۰	ضریب افزایشی تقسیم آب شور در لایه ۱
۲	غلظت اکسیژن بحرانی در جذب فسفات افزایشی لایه ۱ (mgO <sub>2</sub> /L)
۰/۶۵	ثابت‌های کربن: کسر CBODu به G1
۰/۲	کسر CBODu به G2
۰/۰۳۵	نرخ دیاژنز برای CBODu G1
۱/۱	ضریب دما برای دیاژنز CBODu G1
۰/۰۰۱۸	نرخ دیاژنز برای CBODu G2
۱/۱۵	ضریب دما برای دیاژنز CBODu G2
۰	نرخ دیاژنز برای CBODu G3
۱/۱۷	ضریب دما برای دیاژنز CBODu G3
۰/۷	سرعت واکنش اکسیداسیون متان (m/day)
۱/۰۷۹	ضریب دما برای اکسیداسیون متان
۰/۳۷	ضریب نیمه‌اشباع اکسیژن در اکسیداسیون متان (mg/L)
۰/۲	سرعت واکنش برای اکسیداسیون سولفید محلول در لایه ۱ (m/day)
۰/۴	سرعت واکنش برای اکسیداسیون ذرات سولفید ذرات در لایه ۱ (m/day)
۱/۰۷۹	ضریب دما برای اکسیداسیون سولفید (new)
۴	ثابت نرمال بهسازی اکسیداسیون سولفید (mg/L) (new)
۱۰۰	ضریب تقسیم سولفید در لایه ۱ (L/kg) (new)
۱۰۰	ضریب تقسیم سولفید در لایه ۲ (L/kg) (new)

### ۱۶-۵-گزین‌های راه‌اندازی مدل SOD

دو نوع فایل راه‌اندازی مجدد وجود دارد که می‌تواند در تنظیم غلظت‌های اولیه‌ی اجزای اصلی مازول SOD استفاده شود.

۱. فایل بازیابی دینامیک این فایل در پایان دوره‌ی شبیه‌سازی به‌طور خودکار توسط مازول SOD ایجاد خواهد شد. شرایط نهایی محاسبات مازول SOD ذخیره می‌شوند و می‌توانند به‌طور خودکار در اجرای بعدی مدل WASP خوانده شوند. در فایل راه‌اندازی مجدد دینامیک، هر فایل WIF به‌طور خودکار با پسوند SOD\_RST نام‌گذاری خواهد شد.

۲. فایل راه‌اندازی ثابت این پرونده باید توسط کاربر ایجاد/ویرایش شود. شما می‌توانید در ابتدا از گزینه‌ی بالا برای ایجاد فایل استفاده کنید. این فایل توسط مازول SOD در ابتدای شبیه‌سازی خوانده می‌شود. فایل راه‌اندازی مجدد استاتیک باید با هر فایل WIF که پسوند SOD\_IC دارد، فراخوانی شود.

### ۱۶-۶- خروجی مدل دیاژنز

خروجی معمول کیفیت آب از مدل دیاژنز که در داده‌های مدل دودویی (BMD) یا فایل‌های CSV گنجانده شده، شامل موارد زیر می‌باشد:

- تقاضای اکسیژن رسوب،
- جریان آمونیاک،
- جریان نیترات،
- جریان فسفات.

این متغیرهای خروجی برای هر دو رویکرد توصیفی (جریان‌ات مشخص) یا پیش‌بینی شده (حالت دیاژنز) گنجانده شده‌اند. علاوه بر خروجی مدل WASP، یک فایل خروجی و یا متغیرهای اضافی محاسبه شده‌ای وجود دارد که در حال حاضر توسط مدل WASP استفاده نمی‌شود.

جدول ۱۶-۷ خروجی رسوب دیاژنز

mg N/L	TPON WC	غلظت کل PON در آب پوشاننده
mg N/g	PON(1) 2	غلظت PON G کلاس ۱ در لایه‌ی ۲
mg N/g	PON(2) 2	غلظت PON G کلاس ۲ در لایه‌ی ۲
mg N/g	PON(3) 2	غلظت PON G کلاس ۳ در لایه‌ی ۲
mg N/L	NH3 WC	غلظت NH3 در آب پوشاننده
mg N/L	NH3 1	غلظت NH3 در لایه‌ی ۱
mg N/L	NH3 2	غلظت NH3 در لایه‌ی ۲



mg N/L	NO2 WC	غلظت NO2 در آب‌های پوشاننده (استفاده نمی‌شود = ۰)
mg N/L	NO2 1	غلظت NO2 در لایه‌ی ۱ (استفاده نمی‌شود = ۰)
mg N/L	NO2 2	غلظت NO2 در لایه‌ی ۲ (استفاده نمی‌شود = ۰)
mg N/L	NO3 WC	غلظت NO3 در آب پوشاننده
mg N/L	NO3 1	غلظت NO3 در لایه‌ی ۱
mg N/L	NO3 2	غلظت NO3 در لایه‌ی ۲
mg P/L	TPOP WC	غلظت کل POP در آب پوشاننده
mg P/g	POP(1) 2	غلظت POP G کلاس ۱ در لایه‌ی ۲
mg P/g	POP(2) 2	غلظت POP G کلاس ۱ در لایه‌ی ۲
mg P/g	POP(3) 2	غلظت POP G کلاس ۱ در لایه‌ی ۲
mg P/L	PO4 WC	غلظت PO4 در آب پوشاننده
mg P/L	PO4 1	غلظت PO4 در لایه‌ی ۱
mg P/L	PO4 2	غلظت PO4 در لایه‌ی ۲
mg O <sub>2</sub> /L	TPOC WC	غلظت کل POC در ستون آب
mg O <sub>2</sub> /L	POC(1) 2	غلظت POC G کلاس ۱ در لایه‌ی ۲
mg O <sub>2</sub> /L	POC(2) 2	غلظت POC G کلاس ۱ در لایه‌ی ۲
mg O <sub>2</sub> /L	POC(3) 2	غلظت POC G کلاس ۱ در لایه‌ی ۲
mg O <sub>2</sub> /L	CH4 WC	غلظت متان در آب‌های پوشاننده (استفاده نمی‌شود = ۰)
mg O <sub>2</sub> /L	DO WC	غلظت اکسیژن محلول در آب‌های پوشاننده
mg Nm <sup>-2</sup> d <sup>-1</sup>	JPON WC->Sed	شار PON محاسبه‌شده به رسوبات
mg Nm <sup>-2</sup> d <sup>-1</sup>	JNH3 Sed->WC	شار NH3 محاسبه‌شده برای آب پوشاننده
mg Nm <sup>-2</sup> d <sup>-1</sup>	JNO2 Sed->WC	شار NO2 محاسبه‌شده برای آب پوشاننده
mg Nm <sup>-2</sup> d <sup>-1</sup>	JNO3 Sed->WC	شار NO3 محاسبه‌شده برای آب پوشاننده
mg Nm <sup>-2</sup> d <sup>-1</sup>	JDenit Sed->WC	شار نیتروژن‌زدایی محاسبه‌شده
mg Pm <sup>-2</sup> d <sup>-1</sup>	JPOP WC->Sed	شار محاسبه‌شده POP به رسوبات

$\text{mg Pm}^{-2}\text{d}^{-1}$	JPO4 Sed- >WC	شار PO4 محاسبه‌شده به آب‌های پوشاننده
$\text{mgO}_2\text{m}^{-2}\text{d}^{-1}$	JPOC WC- >Sed	شار POC محاسبه‌شده به رسوبات
$\text{mgO}_2\text{m}^{-2}\text{d}^{-1}$	JCH4aq Sed- >WC	شار متان مایع محاسبه‌شده به آب پوشاننده
$\text{mgO}_2\text{m}^{-2}\text{d}^{-1}$	JCH4g Sed- >WC	شار متان گازی محاسبه‌شده به آب پوشاننده
$\text{mgO}_2\text{m}^{-2}\text{d}^{-1}$	JHS Sed- >WC	شار سولفید محاسبه‌شده برای پوشاندن آب
$\text{g O}_2\text{m}^{-2}\text{d}^{-1}$	SOD WC- >Sed	تقاضای اکسیژن رسوب محاسبه‌شده
m/d	s	سرعت انتقال سطح محاسبه‌شده بین آب و رسوب

### ۱۶-۷-منابع

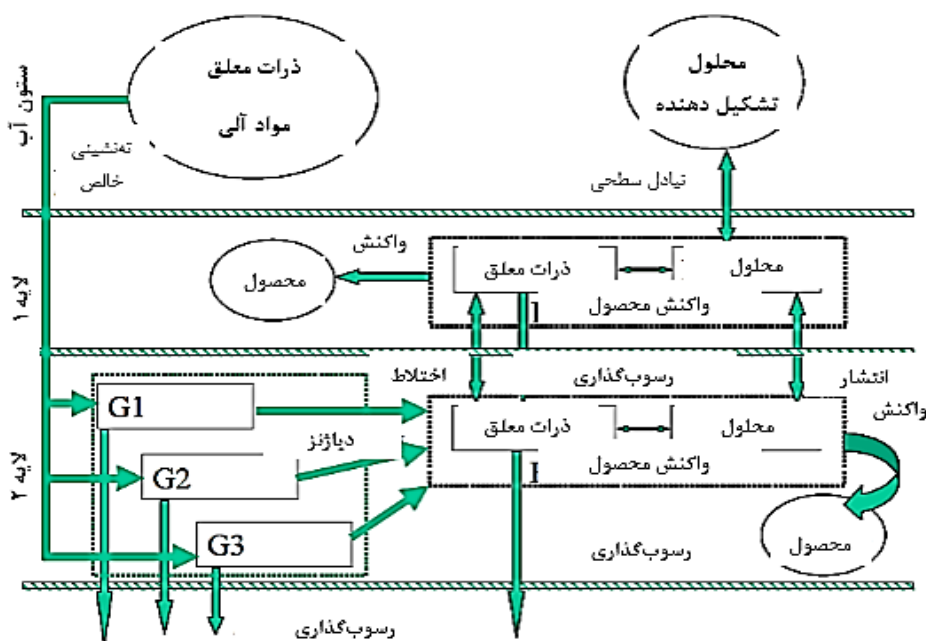
1. Ambrose, B, Jr., T.A. Wool, and J.L. Martin, "The Water Quality Analysis Simulation Program, WASP5; Part A: Model Documentation," Internal Report Distributed by USEPA Center for Exposure Assessment Modeling, U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA, June 1993.
2. Chapra, S.C. 1997. Surface Water-Quality Modeling, McGraw-Hill, New York, New York, 844 pp.
3. Di Toro, D. M. 2001. Sediment Flux Modeling, Wiley-Interscience, New York, New York. 624 pp.
4. Di Toro, D. M., Paquin, P. R., Subburamu, K. and Gruber, D.A. 1990. Sediment oxygen demand model: methane and ammonia oxidation. J. Environ. Engr. ASCE, 116: 945-986.
5. Fair, G.M., Moore, E.W., and Thomas, H. A., Jr. 1941. The natural purification of river muds and pollutional sediments. Sewage Works J. 13(6):1209-1228.
6. Martin, J. L., "A Review and Evaluation of Sediment Diagenesis Routines for Potential Incorporation into the Water Analysis Simulation Program (WASP), "Contract report prepared for Tetra Tech, Inc., Atlanta, GA, 2002.
7. Wool, T., R. Ambrose and J. L. Martin. "The Water Analysis Simulation Program, User Documentation for Version 6.0," Distributed by USEPA Region 4, Atlanta, GA, 2001

## ۱۶-۸-ضمیمه‌ی A: توصیف تفصیلی مدل رسوب دیاژنز

## مقدمه

چارچوب اصلی مدل رسوب متشکل از دو لایه‌ی رسوب می‌باشد که به خوبی مخلوط شده و هر بخش از ستون آب‌سطحی را پوشش می‌دهد: لایه‌ی رسوب بالایی نازک (لایه‌ی هوازی) و لایه‌ی فعال (بی‌هوازی) ضخیم‌تر می‌باشد (شکل ۱۶-۶). در مدل WASP ضخامت لایه‌ی فعال توسط کاربر (با استفاده از داده‌های ورودی) مشخص می‌شود و جزء ثابت‌ها فرض می‌شود. سه فرآیند اصلی در مدل رسوب عبارتند از:

- جریان ذرات موادآلی از ستون آب تا رسوبات (توجه داشته‌باشید که از آن‌جا که فرض می‌شود لایه رسوب بالایی ضخامت ناچیزی دارد، جریان به‌طور مستقیم در لایه دوم، یا بی‌هوازی رسوب می‌کند)
- معدنی‌شدن (یا دیاژنز) ذرات ماده‌ی آلی
- واکنش‌ها و تبادلات (بین لایه‌های رسوب به ستون آب و رسوبات عمیق غیرفعال) محصولات واکنش.



شکل ۱۶-۶ چارچوب مدل دیاژنز

### شار ذرات ماده‌ی آلی (ته‌نشینی)

جریان ذرات موادآلی (POM) از ستون آب نشان‌دهنده‌ی شرایط یک منبع برای رسوبات می‌باشد. جریان موادآلی ذره‌ای به دو دسته تقسیم می‌شوند. ذرات کربن آلی (C، در تعادلات اکسیژن)، نیتروژن (N) و اشکال مختلف فسفر (POC، PON، POP) که پس از آن براساس واکنش‌پذیری‌شان به فرم‌های جداگانه (کلاس‌های G) تبدیل می‌شوند.

جریان POM از ستون آب به رسوبات با استفاده از قراردادهای انتقال WASP استاندارد محاسبه می‌شود که برای متغیرهای حالت مشتمل بر موارد زیر می‌باشد: CBOD، جلبک، نیتروژن آلی و فسفر آلی. در WASP، جریانات ته‌نشینی این متغیرهای حالت براساس کسر مشخص‌شده‌ی محلول (که می‌تواند با متغیر بخش و حالت تغییر کند)، میدان انتقال ذرات مشخص (برای متغیر کیفیت) و نرخ‌های مشخص‌شده‌ی انتقال جامدات (میدان جریان ۱ تا ۳) محاسبه می‌شوند. واحدهای تعادلات اکسیژن (CBOD) و ذرات کربن آلی در مدل دیاژنز، از واحدهای کربن در مدل‌های مشابه دیگر، متفاوت و بعضاً متناقض است. جریان جلبک‌ها نیز با استفاده از ثابت‌های احتمالی که با کربن (تعادل اکسیژن) نیتروژن و فسفر مشخص‌شده، به مدل رسوبی تقسیم می‌شوند.

متغیرهای حالت رسوب داخلی برای دیاژنز براساس مدل چندطبقه‌ای G هستند که در آن اشکال آلی براساس واکنش‌پذیری‌شان در اشکال واکنشی (G1)، مقاوم (G2) و خنثی (G3) تقسیم‌بندی می‌شوند (شکل ۳). بنابراین، جریان ذرات کربن آلی (معادل اکسیژن)، نیتروژن و فسفر براساس نسبت‌های تعیین‌شده توسط کاربر، به کلاس‌های G تقسیم می‌شوند. به دلیل ضخامت ناچیز لایه‌ی بالایی، رسوب (همان‌طور که بعداً شرح داده خواهد شد) مستقیماً از ستون آب به لایه‌ی رسوبی پایینی (آنوکسیک) ادامه می‌یابد.

### دیاژنز

فرض بر این است که واکنش‌های دیاژنتیکی در لایه‌ی رسوبی دوم (بی‌هوایی) رخ می‌دهد. معادلات دیاژنز برای هر شکل از ذرات ماده‌ی آلی (POM؛ اشکال برای N، P و C که در آن C معادل اکسیژن است) و برای هر کلاس G (۱-۳) با استفاده از همان رابطه اولیه حل می‌شوند. به‌منظور محاسبه‌ی دیاژنز متغیر با زمان برای هر متغیر مدل شده، یک معادله‌ی موازنه‌ی جرم به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{\partial C_{T2}}{\partial t} = \frac{J_2}{H_2} - \frac{W_2}{H_2} C_{T2}^{t+\Delta t} - K_2 C_{T2}^{t+\Delta t} \approx \frac{C_{T2}^{t+\Delta t} - C_{T2}^t}{\Delta t} \quad (2-16)$$

$$C_{T2}^{t+\Delta t} = \text{غلظت کل در لایه‌ی ۲ در زمان } t+\Delta t$$

$$C_{T2}^t = \text{غلظت کل در لایه‌ی ۲ در زمان } t \text{ (از شرایط اولیه یا مقدار محاسبه‌شده از مرحله‌ی زمانی قبلی)،}$$

$$\Delta t = \text{مرحله‌ی زمان (از مدل کیفیت آب تبدیل به واحدهای داخلی)،}$$

$J_2 =$  شار از ستون آب،

$H_2 =$  ضخامت لایه‌ی رسوب فعال (متغیر ورودی)،

$K_2 =$  سرعت واکنش (خاص برای شیمیایی و کلاس G، درجه‌ی حرارت اصلاح شده) و

$W_2 =$  سرعت رسوب‌گذاری خالص (متغیر ورودی)،

معادله‌ی موازنه‌ی جرم به صورت جبری برای غلظت در گام زمانی حاضر حل شده است.

$$C_{T_2}^{t+\Delta t} = \frac{J_2 \frac{\Delta t}{H_2} + C_{T_2}^t}{1 + K_2 H_2 \frac{\Delta t}{H_2} + W_2 \frac{\Delta t}{H_2}} \quad (3-16)$$

هنگامی که غلظت در گام زمانی حاضر محاسبه می‌شود، عبارات منبع دیاژنز برای واکنش‌ها و انتقال‌ها ( $J_{T_2}^{t+\Delta t}$ ) محاسبه می‌شوند. عبارات منبع دیاژنزاسیون برای C، N و P از مجموع محصول سرعت واکنش خاص شیمیایی ( $K_2$ ) و غلظت‌های محاسبه شده در هر یک از سه کلاس G محاسبه می‌شوند؛ برای مثال،

$$J_{T_2}^{t+\Delta t} = \sum_{i=1}^3 K_{2,i} C_{T_2}^{t+\Delta t} \quad (4-16)$$

$J_{T_2}^{t+\Delta t} =$  شرایط منبع برای مواد شیمیایی کل در لایه‌ی ۲ در زمان  $t + \Delta t$ ،

$K_{2,i} =$  سرعت واکنش کل مواد شیمیایی برای G در کلاس i،

$C_{T_2}^{t+\Delta t} =$  غلظت کل مواد شیمیایی برای G در کلاس i،

از سوی دیگر، مدل دیاژنز WASP مشتمل بر گزینه‌ای می‌باشد که برای محاسبات حالت پایدار و شرایط اولیه‌ی مدل مورد استفاده قرار می‌گیرد. محاسبات حالت پایدار شامل یک راه‌حل تکراری برای واکنش‌های جنبشی بوده که در بخش بعدی توضیح داده خواهد شد. این به این معناست که یک حدس اولیه برای حل مشخص می‌شود (شرایط اولیه) و محاسبات تا زمانی که جواب هم‌گرا شود تکرار می‌شوند. حداکثر تعداد تکرارهای مجاز و معیارهای هم‌گرایی نیز در ورودی مشخص می‌شوند. برای دیاژنز POM، راه‌حل حالت پایدار برای معادله‌ی ۲ به شکل زیر است:

$$C_{T_2} = \frac{J_2}{K_2 + \frac{W_2}{H_2}} \quad (5-16)$$

## واکنش‌ها و انتقال‌ها

### بررسی اجمالی

همان‌طور که در بالا توضیح داده شد، هنگامی که غلظت ذرات ماده‌ی آلی رسوب (C، N و P) و عبارات منبع برای مرحله‌ی زمانی حاضر محاسبه می‌شوند، واکنش‌ها و تبدلات نیز محاسبه می‌شوند.

غلظت آمونیاک، نیترات‌ها، متان، سولفیدها، سیلیس و فسفر محاسبه می‌شوند و سپس برای محاسبه‌ی جریان‌ها به ستون پوشش‌دهنده‌ی آب استفاده می‌شوند.

غلظت شیمیایی کل با استفاده از روابط بیلان جرمی هر یک از دو لایه‌ی رسوب محاسبه می‌شود. از آنجایی که لایه‌ی سطحی نسبت به لایه‌ی بی‌هوازی فعال (به ترتیب ۱۰ سانتی متر) نازک‌تر است، فرض می‌شود که لایه‌ی ۱ در مقایسه با فرآیندهای کندتری که در لایه‌ی ۲ رخ می‌دهد، می‌تواند در حالت پایدار در نظر گرفته شود.

### لایه‌ی ۱

$$0 = -s(f_{d1}C_{T1}^{t+\Delta t} - C_{d0}^{t+\Delta t}) + \omega_{12}(f_{p2}C_{T2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{T1}^{t+\Delta t}) \quad (6-16)$$

$$+ K_{L12}(f_{d2}C_{T2}^{t+\Delta t} - f_{d1}C_{T1}^{t+\Delta t}) - \omega_2 C_{T1}^{t+\Delta t}$$

$$- \frac{K_1^2}{S} C_{T1}^{t+\Delta t} + J_{T1}^{t+\Delta t} + C_{T2}^{t+\Delta t} H_1^+$$

$$- C_{T1}^{t+\Delta t} (H_1 + H_1^-)$$

### لایه‌ی ۲

$$0 = -\omega_{12}(f_{p2}C_{T2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{T1}^{t+\Delta t}) \quad (7-16)$$

$$+ K_{L12}(f_{d2}C_{T2}^{t+\Delta t} - f_{d1}C_{T1}^{t+\Delta t}) - K_2 C_{T1}^{t+\Delta t}$$

$$+ \omega_2(C_{T1}^{t+\Delta t} - C_{T2}^{t+\Delta t}) - \frac{H_2 C_{T2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} + J_{T2}^{t+\Delta t}$$

$$+ \frac{H_2 C_{T2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} + C_{T2}^{t+\Delta t} H_1^+ - C_{T2}^{t+\Delta t} (H_2 + H_1^-)$$

$s =$  میزان انتقال سطح؛  $[O_2(0)]/SOD$ ، که در آن نرخ  $SOD = SOD$  و  $O_2(0)$  غلظت بالای آب است.

$$f_{d1} = \text{کسر محلول در لایه‌ی ۱}$$

$$f_{d2} = \text{کسر محلول در لایه‌ی ۲}$$

$$f_{p1} = \text{کسر ذرات در لایه‌ی ۱}$$

$$f_{p2} = \text{کسر ذرات در لایه‌ی ۲}$$

$$C_{T1}^{t+\Delta t} = \text{غلظت کل در لایه‌ی ۱ در زمان } t + \Delta t$$

$$C_{T2}^{t+\Delta t} = \text{غلظت کل در لایه‌ی ۲ در زمان } t + \Delta t$$

$$C_{T2}^t = \text{غلظت کل در لایه‌ی ۲ در زمان } t$$

$$C_{d0}^{t+\Delta t} = \text{غلظت در ستون آب پوشاننده}$$

$$K_{L12} = \text{ضریب انتقال جرم از طریق انتشار،}$$

$$\omega_{12} = \text{ضریب اختلاط ذرات بین لایه‌های ۱ و ۲،}$$

$$\omega_2 = \text{سرعت رسوب لایه ۲،}$$

$$J_{T1}^{t+\Delta t} = \text{اصطلاح منبع کل مواد شیمیایی در لایه ۱ در زمان } t + \Delta t,$$

$$J_{T2}^{t+\Delta t} = \text{اصطلاح منبع کل مواد شیمیایی در لایه ۲ در زمان } t + \Delta t,$$

$$K_1^2 = \text{مربع سرعت واکنش در لایه ۱،}$$

$$K_2 = \text{سرعت واکنش در لایه ۲،}$$

$$\dot{H}_1^- = \text{مشتق زمان برای H در لایه ۱ (not used)،}$$

$$\dot{H}_1^+ = \text{مشتق زمان برای H در لایه ۱ (not used)،}$$

$$\dot{H}_1 = \text{مشتق زمان برای H در لایه ۱ (not used)،}$$

$$\dot{H}_2 = \text{مشتق زمان برای H در لایه ۲ (not used)،}$$

$$H_2 = \text{ضخامت لایه ۲،}$$

$$\Delta t = \text{گام زمانی.}$$

دو معادله و دو مجهول می‌توانند به شکل زیر نوشته شوند:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \quad (۸-۱۶)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \quad (۹-۱۶)$$

معادلات برای غلظت‌های جدید ( $C_{T1}^{t+\Delta t}$  و  $C_{T2}^{t+\Delta t}$ ) با استفاده از یک ماتریس حل شده‌اند. راه‌حل این سیستم از معادلات (چاپرا و کاناله، ۱۹۹۸) به صورت زیر است:

$$x_1 = \frac{a_{22}b_1 + a_{12}b_2}{a_{11}a_{22} + a_{12}a_{21}}$$

$$x_2 = \frac{a_{22}b_2 + a_{12}b_1}{a_{11}a_{22} + a_{12}a_{21}}$$

جایی که عناصر ماتریس عبارتند از:

$$a_{11} = -S(f_{d1}) - \omega_{12}(f_{p1}) - K_{L12}(f_{d1}) - \omega_2 \frac{K_1^2}{S} \quad (۱۰-۱۶)$$

$$a_{21} = +\omega_{12}(f_{p1}) + K_{L12}(f_{d1}) + \omega_2 \quad (11-16)$$

$$a_{12} = +\omega_{12}(f_{p2}) + K_{L12}(f_{d2}) \quad (12-16)$$

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) - K_{L12}(f_{d2}) - K_2 - \omega_2 - \frac{H_2}{\Delta t} \quad (13-16)$$

$$b_1 = -J_{T1}^{t+\Delta t} \quad (14-16)$$

$$b_2 = -J_{T2}^{t+\Delta t} - \frac{H_2 C_{T2}^t}{\Delta t} \quad (15-16)$$

گزینه‌ای که در WASP برای محاسبه‌ی شرایط اولیه به کار می‌رود، برای راه‌حل حالت پایدار، عناصر ماتریس به صورت زیر تغییر می‌کنند:

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) - K_{L12}(f_{d2}) - K_2 - \omega_2 \quad (16-16)$$

$$b_2 = -J_{T2}^{t+\Delta t} \quad (17-16)$$

کسری که در این دو لایه حل شده و ذرات از هم محاسبه می‌شوند:

$$f_{d,1} = \frac{1}{1 + \pi_{c1}S_1}; f_{p,1} = \frac{\pi_{c1}S_1}{1 + \pi_{c1}S_1} \quad (18-16)$$

$$f_{d,2} = \frac{1}{1 + \pi_{c2}S_2}; f_{p,2} = \frac{\pi_{c2}S_2}{1 + \pi_{c2}S_2}$$

که:

$\pi_{c1}$  = ضریب تقسیم برای مواد شیمیایی کل در لایه‌ی ۱،

$\pi_{c2}$  = ضریب تقسیم برای مواد شیمیایی کل در لایه‌ی ۲،

$S_1$  = غلظت مواد جامد در لایه‌ی ۱،

$S_2$  = غلظت مواد جامد در لایه‌ی ۲.



برای غلظت‌های جدید ( $C_{T1}^{t+\Delta t}$  و  $C_{T2}^{t+\Delta t}$ )، معادلات به راحتی با استفاده از راه‌حل ماتریس حل می‌شوند. هنگامی که غلظت‌ها به‌روز شدند، شار مواد به ستون آب (J) را می‌توان از موارد زیر محاسبه نمود:

$$J = S(f_{d1}C_{T1}^{t+\Delta t} - C_{d0}^{t+\Delta t}) \quad (19-16)$$

نرخ انتقال سطح (S) مخلوط‌کردن بین لایه‌ی ۱ و ستون آب پوشاننده را تعیین می‌کند، که می‌تواند مربوط به نیاز اکسیژن رسوب باشد (دی تر، ۲۰۰۱).

$$SOD = D \left. \frac{d[O_2]}{dz} \right|_{z=0} \approx D \frac{[O_2(0) - O_2(H_2)]}{H_1} = \frac{D}{H_1} [O_2(0)] \quad (20-16)$$

که:

$D$  = میزان انتشار اکسیژن،

$O_2(0)$  = غلظت اکسیژن آب پوشاننده و

$O_2(H_2)$  = غلظت اکسیژن در عمق  $H_1$ .

با فرض یک تقریب خطی مستقیم از مشتق؛ به‌طوری که ضریب انتقال جرم ( $K_{L,O_2}$ ) از (دی‌تورو، ۲۰۰۱) تخمین زده شود.

$$K_{L,O_2} = \frac{D}{H_1} = \frac{SOD}{[O_2(0)]} = S \quad (21-16)$$

سرعت واکنش در لایه‌ی هوازی به‌صورت یک نرخ مرتبه‌ی اول ( $K_1$ ) فرمول‌بندی می‌شود که جمله‌ی آن در معادله‌ی لایه‌ی ۱ برابر است با  $K_1 H_1$ . عمق منطقه‌ی هوازی از تعریف ضریب انتقال جرم سطح ( $S = D/H_1$ ) پیروی می‌کند به‌طوری که  $K_1 H_1 = K_1 D_1/S$ :

$$K_1 = \sqrt{DK_1} \quad (22-16)$$

$$K_1 H_1 = \frac{K_1^2}{S} \quad (23-16)$$

که این عبارت از انرژی شیمیایی کل معادله برای لایه‌ی ۱ محاسبه می‌شود (معادله‌ی ۶). نرخ اختلاط رسوب توسط ماکروبن‌توزها (آشفستگی زیستی،  $w_{12}$ ) با ضریب انتشار ظاهری ذره ( $D_p$ ) و دمای تصحیح‌شده که با زیست‌توده‌ی کف تغییر می‌کند، تخمین زده می‌شود. فرض می‌شود که جرم کف، متناسب با کربن ناپایدار در رسوب می‌باشد ( $C_{POC,1}^t$ ، یا POC، در تعادلات اکسیژن در لایه‌ی ۲ در Gکلاس ۱)،

$$w_{12}^* = D_p \frac{\Theta^{(T-20)} C_{POC,1}^t}{H_2/2 C_{POC,R}} \quad (24-16)$$

که در آن  $w_{12}^*$  یک ضریب اختلاط ذره می‌باشد، همان‌طور که در ادامه توضیح داده خواهد شد، اصلاح می‌شود و  $C_{POC,R}$  یک غلظت POC مرجع است. توجه داشته‌باشید که در معادله‌ی بالا و یا هر معادله‌ی دیگر، POC در کد WASP در واحدهای تعادلات اکسیژن می‌باشد. هم‌چنین توجه داشته‌باشید که کد ICM و معادله‌ی ۱-۱۳ دی‌تورو (۲۰۰۱) از  $H_2$  در مخرج، به جای  $H_2/2$  استفاده می‌کنند، بنابراین کاربر باید در ارائه‌ی مقدار مناسب برای  $D_p$  در هنگام مقایسه‌ی کدها و یا ورودی‌های مدل احتیاط کند. تأثیر دیگر این است که اگر آنوکسیا برای دوره‌های زمانی رخ دهد، جمعیت کفزیان در نهایت کاهش یافته و یا حذف می‌شود، به‌طوری که آشفستگی زیستی پس از آن، کاهش یافته و یا حذف می‌شود. دی‌تورو (۲۰۰۱) برای این که اثر این پدیده را لحاظ نماید، فشاری را که شرایط اکسیژن کم‌محلول (فشارکف،  $S$ ) بر جمعیت تحمیل می‌کند، را محاسبه می‌نماید. (شرایط بر این فرض استوار است که فشار متراکم است)

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -k_S S^{t+\Delta t} + \frac{K_{M,D_p}}{K_{M,D_p} + [O_2(0)]} \approx \frac{S^{t+\Delta t} - S^t}{\Delta T} \quad (25-16)$$

که:

$k_S$  = ثابت فروپاشی برای فشار کفزی،

$K_{M,D_p}$  = غلظت نیمه‌اشباع ذره برای اکسیژن،

که می‌تواند برای آن حل شود:

$$S^{t+\Delta t} = \frac{S^t + \frac{K_{M,D_p}}{K_{M,D_p} + [O_2(0)]} \Delta t}{1 + k_S \Delta t} \quad (26-16)$$

همان‌طور که  $[O_2(0)]$  به صفر نزدیک می‌شود، سپس  $(1 - k_S)$  نیز به صفر می‌رسد، به‌طوری که ضریب اختلاط ذره نیز کاهش می‌یابد، همان‌طور که؛

$$w_{12} = w_{12}^* (1 - k_S S^{t+\Delta t}) \quad (27-16)$$

این روند تا زمانی که فشار به حداقل مقدار برای سال آینده برسد، ادامه خواهد داشت که در آن حالت جمعیت کف بخاطر اکسیژن نامحلول کم، کاهش می‌یابد که در این صورت ممکن است چنین کاهش‌ی تا سال آینده بهبود نیابد (دی‌تورو ۲۰۰۱).

ضریب اختلاط فاز حل‌شده بین لایه‌های ۱ و ۲ ( $K_{L12}$ ) به دلیل نفوذ مولکولی غیرفعال است و با فعالیت موجودات زنده (آبیاری بیولوژیکی) افزایش می‌یابد. ضریب اختلاط از (معادله‌ی ۵-۱۳، دی‌تورو ۲۰۰۱) محاسبه می‌شود.

$$K_{L12} = \frac{D_D}{H_2/2} \Theta^{(T-20)} \quad (28-16)$$

$D_D$  = ضریب انتشار آب منفذی،

$K_{L12}$  = نسبت آبیاری بیولوژیکی به اختلاط ذره‌ی بیولوژیکی.

توجه داشته‌باشید که کد ICM از  $H_2$  در مخرج، به جای  $H_2/2$  استفاده می‌کند، بنابراین کاربر باید در ارائه‌ی مقدار مناسب برای  $D_D$  در هنگام مقایسه‌ی کدها یا ورودی‌های مدل احتیاط کند. فرض می‌شود که دمای رسوب برابر با دمای ستون پوشش‌دهنده‌ی آب است. راه‌حل معادلات واکنش و انتقال، شامل حجم محاسبات مدل دیاژنز می‌باشد. بخشی از پیچیدگی ناشی از رابطه‌ی ضریب انتقال سطح (S) با تقاضای اکسیژن رسوب (SOD) و غلظت اکسیژن حل‌شده در ستون پوشش‌دهنده‌ی آب  $\{O_2(0); s = SOD/[O_2(0)]\}$  می‌باشد. از آن‌جا که SOD تابعی از آمونیاک محاسبه‌شده، نیترات (نیتروژن‌زدایی)، سولفید (آب شور) یا متان (آب شیرین) است، یک راه‌حل تکراری برای آن اجزا موردنیاز می‌باشد که روش آن راه‌حل به شرح زیر است:

(۱) با یک تخمین اولیه از SOD شروع کنید.

(۲) حل معادلات لایه‌ی ۱ و ۲ برای آمونیاک، نیترات، سولفید و متان.

(a) برای حل جریان آمونیاک شرایط خاص شیمیایی ایجاد کنید.

(b) اکسیژن مصرف‌شده توسط نیتروژن‌زدایی (NCOD) را محاسبه کنید.

(c) برای حل شار نیترات شرایط خاص شیمیایی ایجاد کنید.

(d) اکسیداسیون متان (آب شیرین) یا سولفید (آب شور).

i. برای آب شور، عبارات واکنش سولفید را محاسبه کرده و SOD ناشی از سولفید هیدروژن را محاسبه کنید.

ii. محاسبه‌ی شار متان با ایجاد شرایط خاص شیمیایی برای آب شیرین.

۱. غلظت‌های محاسبه‌شده و اشباع را با هم مقایسه و تصحیح کنید.

۲. CSOD ناشی از متان را محاسبه کنید.

(a) CSOD کل ناشی از سولفیدها یا متان را مقایسه کنید.

(b) عبارت جریان محاسباتی.

(c) کل SOD ناشی از سولفید یا متان را محاسبه کرده و

ترم NCOD را اضافه کنید.

(d) برآورد SOD را اصلاح کنید. برای ساختن تخمین

جدید، از یک روش یافتن ریشه استفاده می‌شود.

۳) اگر هم‌گرایی وجود ندارد به مرحله (۲) بروید.

پس از تعیین SOD، معادلات لایه‌ی ۱ و ۲ برای فسفات و سیلیس را می‌توان حل کرد و نرخ جریان تعیین می‌شود.

محاسبه‌ی SOD و واکنش‌های مرتبط؛

همان‌طور که در بالا بحث شد، SOD به‌صورت تکراری با استفاده از دستورالعمل‌های عددی یک تابع Zbrent عددی از پرس و همکاران (۱۹۹۲) محاسبه می‌شود که ریشه‌ی یک تابع را بدون دانستن مشتق می‌یابد. تا زمانی که هم‌گرایی حاصل شود، عبارات مرتبط با SOD برای هر تکرار حل می‌شوند. محاسبات نیازمند حل معادلات برای واکنش‌های آمونیاک، نیترات، نیتريت، سولفید (آب شور) یا متان (آب شیرین) همراه با SOD کربناته و نیتروژن‌دار است. محاسبه‌ی هر یک از این عبارات به‌طور خلاصه در زیر آورده شده‌است.

### آمونیاک

معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه برای آمونیاک عبارتند از:

#### لایه‌ی ۱

$$0 = -S(f_{d1}C_{NH4T,1}^{t+\Delta t} - C_{NH4T,0}^{t+\Delta t}) + \omega_{12}(f_{p2}C_{NH4T,2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{NH4T,1}^{t+\Delta t}) + K_{L12}(f_{d2}C_{NH4T,2}^{t+\Delta t} - f_{d1}C_{NH4T,1}^{t+\Delta t}) - \omega_2C_{NH4T,1}^{t+\Delta t} - \frac{K_{NH4T,1}^2\theta^{T-20}}{s}f_0f_{NH4}f_{d1}C_{NH4T,1}^{t+\Delta t} \quad (29-16)$$

#### لایه‌ی ۲

$$0 = -\omega_{12}(f_{p2}C_{NH4T,2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{NH4T,1}^{t+\Delta t}) - K_{L12}(f_{d2}C_{NH4T,2}^{t+\Delta t} - f_{d1}C_{NH4T,1}^{t+\Delta t}) + \omega_2(C_{NH4T,1}^{t+\Delta t} - C_{NH4T,2}^{t+\Delta t}) - \frac{H_2C_{NH4T,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t}J_{NH4T,2}^{t+\Delta t} + \frac{H_2C_{NH4T,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} \quad (30-16)$$

که در آن همه‌ی عبارات به استثنای دو ترم برای لایه‌ی سطحی ( $f_{NH4}$ ,  $f_0$ ) قبلاً تعریف شده‌اند. توجه داشته‌باشید که تفاوت اصلی بین معادلات کلی ارائه‌شده‌ی قبلی و معادلات آمونیاک این است که مربع سرعت واکنش در لایه‌ی ۱ (نیتروژن‌زایی) تنها به‌جزء محلول اعمال می‌شود و توسط توابع مبتنی بر غلظت اکسیژن و آمونیاک اصلاح می‌شود. هم‌چنین توجه داشته‌باشید که دو سرعت واکنش مجزا وجود دارد که ممکن است با سرعت مورد استفاده و براساس شوری ستون آب (SAL)، برای لایه‌ی ۱ در کد دیاژنز ( $K_{NH4,1}$ ) و برای آب‌های شیرین و شور، در مقایسه با یک شوری (ورودی) مشخص شوند. علاوه‌بر

این، سرعت واکنش برای لایه‌ی ۲ صفر است. ترم منبع آمونیاک در لایه‌ی ۲ برابر با جریان دیاژنز PON است.

بر اساس معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه‌ی بالا، عناصر موجود در ماتریس حل به صورت زیر هستند:

$$a_{11} = -(f_{d1})K_{L12} - (f_{p1})\omega_2 - \frac{K_{NH4T,1}^2 \theta^{T-20}}{s} f_o f_{NH4} f_{d1} - (f_{d1})s - \omega_2 \quad (31-16)$$

$$a_{21} = +\omega_{12}(f_{p1}) + K_{L12}(f_{d1}) + \omega_2 \quad (32-16)$$

$$a_{12} = +\omega_{12}(f_{p2}) + K_{L12}(f_{d2}) \quad (33-16)$$

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) - K_{L12}(f_{d2}) - \omega_2 - \frac{H_2}{\Delta t} \quad (34-16)$$

$$b_1 = -sC_{NH4,0}^{t+\Delta t} \quad (35-16)$$

$$b_2 = -J_{NH4,2}^{t+\Delta t} - \frac{H_2 C_{NH4,2}^t}{\Delta t} \quad (36-16)$$

برای حل حالت پایدار، گزینه‌ای در WASP مورد استفاده قرار می‌گیرد که برای محاسبه‌ی شرایط اولیه، عناصر ماتریس را به صورت زیر اصلاح می‌کند:

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) - K_{L12}(f_{d2}) - \omega_2 \quad (37-16)$$

$$b_2 = -J_{NH4,2}^{t+\Delta t} \quad (38-16)$$

کسر حل شده و ذرات موجود در دو لایه از قرار زیر محاسبه می‌شوند:

$$f_{d1} = \frac{1}{1 + \pi_{NH4} S_1}; f_{p1} = \frac{\pi_{NH4} S_1}{1 + \pi_{NH4} S_1} \quad (39-16)$$

$$f_{d2} = \frac{1}{1 + \pi_{NH4} S_2}; f_{p2} = \frac{\pi_{NH4} S_2}{1 + \pi_{NH4} S_2}$$

$\pi_{NH4}$  = ضریب تقسیم برای آمونیاک،

$S_1$  = غلظت مواد جامد در لایه‌ی ۱،

$S_2$  = غلظت مواد جامد در لایه ی ۲،

اصلاح واکنش نیتروژن زایی برای اکسیژن محلول از؛

$$f_o = \frac{O_{2,0}}{O_{2,0} + K_{NH_4, O_2}} \quad (۴۰-۱۶)$$

که:

$O_{2,0}$  = غلظت اکسیژن محلول در ستون آب پوشاننده و

$K_{NH_4, O_2}$  = غلظت نیمه اشباع اکسیژن محلول در واکنش نیتروژن زایی.

اصلاح غلظت آمونیاک با رابطه ی زیر محاسبه می شود:

$$f_{NH_4} = \frac{K_{NH_4}}{C_{NH_4,1}^t + K_{NH_4}} \quad (۴۱-۱۶)$$

که:

$C_{NH_4,1}^t$  = غلظت آمونیاک از مرحله ی زمانی قبل،

$K_{NH_4}$  = غلظت نیمه اشباع آمونیاک در واکنش نیتروژن زایی.

توجه داشته باشید که اگر  $K_{NH_4}$  در ورودی مشخص شود،  $f_{NH_4}$  نیز مانند مراحل بالا محاسبه

می شود. در غیر این صورت  $f_{NH_4} = 1$  می باشد.

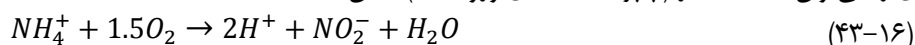
که غلظت آمونیاک به روز شده و جریان به ستون آب به صورت زیر محاسبه می شود:

$$J_{NH_4} = s(C_{NH_4,1}^{t+\Delta t} - C_{NH_4,0}) \quad (۴۲-۱۶)$$

که در آن  $J_{NH_4}$  شار به ستون آب است.

به منظور محاسبه ی مصرف اکسیژن ناشی از اکسیداسیون آمونیاک در لایه ی هوازی، واکنش دو

مرحله ای را می توان با استفاده از (چاپرا ۱۹۹۷، دی تورو ۲۰۰۱) نشان داد.



به طوری که مصرف اکسیژن در طول فرآیند را می توان به وسیله ی (چاپرا ۱۹۹۷، معادله ۳.۲۳) نشان داد.

$$a_{no} = \frac{1.5(32)}{14} = 3.34 \text{ gO gN}^{-1} \quad (۴۴-۱۶)$$

بنابراین می توان سهم اکسیداسیون آمونیاک به SOD را تخمین زد.

$$NSOD_{NH_4} = a_{no} \frac{K_{NH_4,1}^2 \theta^{T-20}}{S} f_o f_{NH_4} f_{d1} C_{NH_4,1}^{t+\Delta t} \quad (۴۵-۱۶)$$

## نیتريت

معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه برای نیتريت عبارتند از:

### لایه ۱

$$0 = -s(C_{NO_2,1}^{t+\Delta t} - C_{NO_2,0}^{t+\Delta t}) + K_{L12}(C_{NO_2,2}^{t+\Delta t} - C_{NO_2,1}^{t+\Delta t}) - \omega_2 C_{NO_2,1}^{t+\Delta t} - \frac{K_{NO_2,1}^2 \theta^{T-20}}{S} f_O C_{NO_2,1}^{t+\Delta t} + \frac{K_{NO_2,1}^2 \theta^{T-20}}{S} f_O f_{NH_4} f_{d1} C_{NH_4,1}^{t+\Delta t} \quad (۴۶-۱۶)$$

### لایه ۲

$$0 = -K_{L12}(C_{NO_2,2}^{t+\Delta t} - C_{NO_2,1}^{t+\Delta t}) + \omega_2(C_{NO_2,1}^{t+\Delta t} - C_{NO_2,2}^{t+\Delta t}) - \frac{H_2 C_{NO_2,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} + \frac{H_2 C_{NO_2,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} \quad (۴۷-۱۶)$$

که در آن همه‌ی شرایط قبلاً تعریف شده‌اند. توجه داشته‌باشید که تفاوت اصلی بین معادلات کلی ارائه‌شده‌ی قبلی و معادلات نیتريت این است که:

- سرعت واکنش برای نیتريت با غلظت اکسیژن حل‌شده در ستون آب (فاکتور  $f_O$ ) تغییر می‌کند.
- فرض بر این است که تمام نیتريت حل‌شود، بنابراین نسبت ذرات صفر و نرخ اختلاط ذرات صفر می‌باشد.
- فقدان (هدررفت) نیتروژن‌زایی مرحله‌ی اول از لایه‌ی یک که به منبع نیتريت تبدیل می‌شود.
- سرعت واکنش برای لایه‌ی ۲ صفر است.

به این نکته توجه داشته‌باشید که بر خلاف سرعت واکنش برای آمونیاک و نیترات-نیتروژن، سرعت واکنش برای نیتريت بین سیستم‌های آب شیرین و شور تغییر نمی‌کند. هم‌چنین توجه داشته‌باشید که این مدل فرض می‌کند که تنها واکنش  $NO_2$  نیتروژن‌زایی به  $NO_3$  است و این درحالی است که وتزل (۲۰۰۱، صفحه ۲۱۷-۵۱۳) نشان می‌دهد نیتروژن‌زایی از طریق  $NO_2$  رخ می‌دهد و به خاطر غلظت بسیار کم  $NO_2$ ، هر خطایی کوچک فرض می‌شود.

براساس معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه‌ی بالا، عناصر موجود در ماتریس راه‌حل به‌صورت زیر هستند:

$$a_{11} = -K_{L12} - \frac{K_{NO_2,1}^2 \theta^{T-20}}{S} f_O - S - \omega_2 \quad (۴۸-۱۶)$$

$$a_{21} = K_{L12} + \omega_2 \quad (۴۹-۱۶)$$

$$a_{12} = K_{L12} \quad (۵۰-۱۶)$$

$$a_{22} = -K_{L12} - \omega_2 - \frac{H_2}{\Delta t} \quad (۵۱-۱۶)$$

$$b_1 = -s C_{NO2,0}^{t+\Delta t} - \frac{K_{NH4,1}^2 \theta^{T-20}}{S} f_o f_{NH4} f_{d1} C_{NH4,1}^{t+\Delta t} \quad (۵۲-۱۶)$$

$$b_2 = -\frac{H_2 C_{NO2,2}^t}{\Delta t} \quad (۵۳-۱۶)$$

برای حل حالت پایدار، گزینه‌ای در WASP مورد استفاده قرار می‌گیرد که برای محاسبه‌ی شرایط اولیه، عناصر ماتریس را به صورت زیر اصلاح می‌کند:

$$a_{22} = -K_{L12} - \omega_2 \quad (۵۴-۱۶)$$

$$b_2 = 0 \quad (۵۵-۱۶)$$

اصلاح واکنش نیترات‌زایی مرحله‌ی دوم توسط اکسیژن حل شده به صورت محاسبه می‌شود.

$$f_o = \frac{O_{2,0}}{O_{2,0} + K_{NO2,O2}} \quad (۵۶-۱۶)$$

که:

$O_{2,0}$  = غلظت اکسیژن محلول در آب پوشاننده و

$K_{NO2,O2}$  = غلظت نیمه‌اشباع اکسیژن محلول در واکنش نیتروژن‌زایی مرحله‌ی دوم.

هنگامی که غلظت نیتريت به روز شد، شار وارد شده به ستون آب از موارد زیر محاسبه می‌شود:

$$J_{NO2} = s(C_{NO2,1}^{t+\Delta t} - C_{NO2,0}) \quad (۵۷-۱۶)$$

که در آن  $J_{NO2}$  جریان نیتريت به ستون آب است. توجه داشته‌باشید که در WASP، نیتريت یک

متغیر حالت نیست و غلظت ستون آب در آن برابر صفر فرض می‌شود.



به منظور محاسبه‌ی مصرف اکسیژن ناشی از اکسیداسیون آمونیاک در لایه‌ی هوازی، حالت دوم واکنش نیتروژن‌زایی را می‌توان توسط (چاپرا، ۱۹۹۷) نشان داد.



به طوری که مصرف اکسیژن در طول فرآیند را می‌توان به وسیله‌ی (چاپرا ۱۹۹۷، معادله ۴.۲۳) نشان داد.

$$a_{no2} = \frac{0/5(32)}{14} 1.4 \text{ gO gN}^{-1} \quad (59-16)$$

سهام اکسیداسیون آمونیاک به SOD را می‌توان از رابطه زیر تخمین زد:

$$NSOD_{NO2} = a_{no2} \frac{K_{NO2,1}^2 \theta^{T-20}}{S} f_0 C_{NO2,1}^{t+\Delta t} \quad (60-16)$$

## نیترات

معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه برای نیترات عبارتند از:

### لایه‌ی ۱

$$0 = -s(C_{NO3,1}^{t+\Delta t} - C_{NO3,0}^{t+\Delta t}) + K_{L12}(C_{NO3,2}^{t+\Delta t} - C_{NO3,1}^{t+\Delta t}) - \omega_2 C_{NO3,1}^{t+\Delta t} \quad (61-16)$$

$$- \frac{K_{NO3,1}^2 \theta^{T-20}}{S} f_0 C_{NO3,1}^{t+\Delta t}$$

$$+ \frac{K_{NO3,1}^2 \theta^{T-20}}{S} f_0 C_{NO3,1}^{t+\Delta t}$$

### لایه‌ی ۲

$$0 = -K_{L12}(C_{NO3,2}^{t+\Delta t} - C_{NO3,1}^{t+\Delta t}) + \omega_2(C_{NO3,1}^{t+\Delta t} - C_{NO3,2}^{t+\Delta t}) \quad (62-16)$$

$$- \frac{H_2 C_{NO3,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} - K_{NO3,2} C_{NO3,2}^{t+\Delta t} + \frac{H_2 C_{NO3,2}^t}{\Delta t}$$

که در آن همه‌ی عبارات قبلاً تعریف شده‌اند. توجه داشته‌باشید که تفاوت اصلی بین معادلات کلی و معادلات نیترات این است که هیچ جذبی در آن وجود نداشته بنابراین غلظت‌های کل و محلول برابر خواهند بود. به دلیل نیتروژن‌زدایی در هر دو لایه‌ی ۱ و ۲ یک سرعت واکنش برای نیترات وجود دارد. نرخ نیتروژن‌زایی مرحله‌ی دوم به یک عبارت منبع برای لایه‌ی ۱ تبدیل می‌شود. توجه داشته‌باشید که برای

هر لایه ( $K_{NO3,1}$  و  $K_{NO3,2}$ ) و برای آب‌های شیرین و آب‌های شوری که هر کدام براساس میزان شوری، به مصرف می‌رسند دو سرعت واکنش نیتروژن‌زدایی جداگانه مشخص شده‌است.

براساس معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه‌ی بالا، عناصر موجود در ماتریس حل به‌صورت زیر هستند:

$$a_{11} = -K_{L12} - \frac{K_{NO3,1}^2 \theta^{T-20}}{S} - S - \omega_2 \quad (۶۳-۱۶)$$

$$a_{21} = K_{L12} + \omega_2 \quad (۶۴-۱۶)$$

$$a_{12} = K_{L12} \quad (۶۵-۱۶)$$

$$a_{22} = -K_{L12} - \omega_2 - \frac{H_2}{\Delta t} \quad (۶۶-۱۶)$$

$$b_1 = -s C_{NO3,0}^{t+\Delta t} - \frac{K_{NO3,1}^2 \theta^{T-20}}{S} f_0 C_{NO2,1}^{t+\Delta t} \quad (۶۷-۱۶)$$

$$b_2 = -\frac{H_2 C_{NO3,2}^t}{\Delta t} \quad (۶۸-۱۶)$$

برای حل حالت پایدار، گزینه‌ای در WASP برای محاسبه‌ی شرایط اولیه مورد استفاده قرار گرفته‌است که در آن عناصر ماتریس به‌صورت زیر اصلاح می‌شوند:

$$a_{22} = -K_{L12} - K_{NO3,2} \theta^{T-20} - \omega_2 \quad (۶۹-۱۶)$$

$$b_2 = 0 \quad (۷۰-۱۶)$$

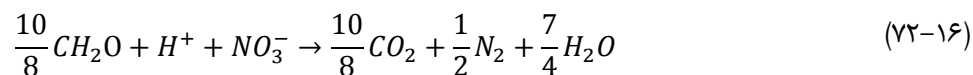
وقتی غلظت نیترات به‌روز شد، شار به ستون آب از فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$J_{NO3} = s(C_{NO3,1}^{t+\Delta t} - C_{NO3,0}) \quad (۷۱-۱۶)$$

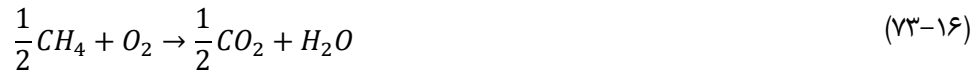
که در آن  $J_{NO3}$  شار به ستون آب است.

فرآیند نیتروژن‌زدایی نیازمند یک منبع کربن است که توسط دی‌توروی ۲۰۰۱، (معادله ۹-۱۶) نشان

داده‌شد.



به طوری که ضریب احتمال (کاتوره‌ای) کربن به نیتروژن ( $a_{cn}$ ) برابر با  $1/071 \text{ gC } gN^{-1}$  است. اکسیداسیون متان در منطقه‌ی هوازی ممکن است به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر برقرار گردد:



بنابراین ضریب کاتوره‌ای اکسیژن به کربن ( $a_{oc}$ )  $2/67 \text{ gC } gC^{-1}$  است. اگر تمام کربن تولید شده توسط واکنش دیاژنز به متان تبدیل شود و به طور کامل اکسیده شود، حداکثر مقدار SOD که می‌تواند تولید شود، به صورت زیر خواهد بود.

$$J_{O_2,c} = J_{C,2}^{t+\Delta t} \quad (۷۴-۱۶)$$

که در WASP،  $J_c$  معادل اکسیژن است.

با این حال، این ماکزیمم با کربن به کار رفته در طول نیتروژن‌زدایی کاهش می‌یابد، به طوری که حداکثر مصرف اکسیژن به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$J_{O_2,c} = J_{C,2}^{t+\Delta t} - a_{oc}a_{cn} \left[ \frac{K_{NO_3,2}\theta^{T-20}}{S} + K_{NO_3,2}\theta^{T-20}C_{NO_3,2}^{t+\Delta t} \right] \quad (۷۵-۱۶)$$

که در آن  $a_{oc}a_{cn}$  برابر با  $2/857$  است.

## سولفید

توجه داشته‌باشید که واکنش‌های سولفیدی تنها در مدل WASP برای سیستم‌های آب شور (شوری بیش‌تر از یک، SALTSW) محاسبه می‌شوند. معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه برای سولفید عبارتند از:

### لایه‌ی ۱

$$0 = -s(f_{d1}C_{H_2S,0}^{t+\Delta t} - C_{H_2S,1}^{t+\Delta t}) + \omega_{12}(f_{p2}C_{H_2S,2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{H_2S,1}^{t+\Delta t}) \quad (۷۶-۱۶)$$

$$+ K_{L12}(f_{d2}C_{H_2S,2}^{t+\Delta t} - f_{d1}C_{H_2S,1}^{t+\Delta t}) - \omega_2 C_{H_2S,1}^{t+\Delta t}$$

$$- f_o \left[ \frac{K_{D,H_2S,1}^2}{S} f_{d1} + \frac{K_{P,H_2S,1}^2}{S} f_{p1} \right] C_{H_2S,1}^{t+\Delta t}$$

### لایه‌ی ۲

$$0 = -\omega_{12}(f_{p2}C_{H_2S,2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{H_2S,1}^{t+\Delta t}) \quad (۷۷-۱۶)$$

$$- K_{L12}(f_{d2}C_{H_2S,2}^{t+\Delta t} - f_{d1}C_{H_2S,1}^{t+\Delta t})$$

$$+ \omega_2(C_{H_2S,1}^{t+\Delta t} - C_{H_2S,2}^{t+\Delta t}) - \frac{H_2C_{HS,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} + J_{HS,2}^{t+\Delta t}$$

$$+ \frac{H_2C_{HS,2}^t}{\Delta t}$$

که در آن همه‌ی عبارات قبلاً تعریف شده‌اند. توجه داشته‌باشید که تفاوت اصلی میان تعادلات آمونیاک و سولفید این است که سرعت‌های واکنش جداگانه در لایه‌ی ۱ برای انواع محلول و ذرات وجود دارد. براساس معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه‌ی بالا، عناصر موجود در ماتریس حل به‌صورت زیر هستند:

$$a_{11} = -(f_{d1})K_{L12} - (f_{p1})\omega_{12} - \frac{(K_{HS,D,fD,1}^2 + K_{HS,P,fP,1}^2)\theta^{T-20}}{S} f_0 - (f_{d1})s - \omega_2 \quad (78-16)$$

$$a_{21} = +\omega_{12}(f_{p1}) + K_{L12}(f_{d1}) + \omega_2 \quad (79-16)$$

$$a_{12} = +\omega_{12}(f_{p2}) + K_{L12}(f_{d2}) \quad (80-16)$$

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) + K_{L12}(f_{d2}) - \omega_2 - \frac{H_2}{\Delta t} \quad (81-16)$$

$$b_1 = 0 \quad (82-16)$$

$$b_2 = -J_{OC} - \frac{H_2 C_{HS,2}^t}{\Delta t} \quad (83-16)$$

که در آن جریان  $J_{HS,2}$  (معادله‌ی ۷۷) به‌صورت جریان تعادلات اکسیژن ( $J_{OC}$ ) که از معادله‌ی ۷۵ محاسبه‌شده‌است، بیان می‌شود. برای حل حالت پایدار، در WASP گزینه‌ای برای محاسبه شرایط اولیه، مورد استفاده قرار گرفته‌است که در آن عناصر ماتریس به‌صورت زیر اصلاح می‌شوند:

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) + K_{L12}(f_{d2}) - \omega_2 \quad (84-16)$$

$$b_2 = -J_{OC} \quad (85-16)$$

کسر حل شده و ذرات موجود در دو لایه از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شوند:

$$f_{d1} = \frac{1}{1 + \pi_{HS,1}S_1}; f_{p1} = \frac{\pi_{HS,1}S_1}{1 + \pi_{HS,1}S_1} \quad (86-16)$$

$$f_{d2} = \frac{1}{1 + \pi_{HS,2}S_2}; f_{p2} = \frac{\pi_{HS,2}S_2}{1 + \pi_{HS,2}S_2}$$

که:

$$\pi_{HS,1} = \text{ضریب تقسیم سولفیدها در لایه ۱،}$$

$$\pi_{HS,2} = \text{ضریب تقسیم سولفیدها در لایه ۲،}$$

$$S_1 = \text{غلظت مواد جامد در لایه ۱،}$$

$$S_2 = \text{غلظت مواد جامد در لایه ۲.}$$

تصحیح اکسیژن محلول در برابر واکنش سطح محاسبه می‌شود (با  $K_{MHSO_2}$  ثابت اشباع نیمه

واکنش سولفید)،

$$f_o = \frac{O_{2,0}}{K_{MHS,02}}$$

(۱۶-۸۷)

تفاوت اصلی دیگر این است که ضرایب تقسیم به‌طور جداگانه برای دو لایه مشخص شده‌اند،

به‌طوری‌که:

$$f_{d1} = \frac{1}{1 + \pi_{H_2S,1}S_1}; f_{p1} = \frac{\pi_{H_2S,1}S_1}{1 + \pi_{H_2S,1}S_1}$$

(۱۶-۸۸)

$$f_{d2} = \frac{1}{1 + \pi_{H_2S,2}S_2}; f_{p2} = \frac{\pi_{H_2S,2}S_2}{1 + \pi_{H_2S,2}S_2}$$

(۱۶-۸۹)

که:

$$\pi_{H_2S,1} = \text{ضریب تقسیم سولفید در لایه ۱،}$$

$$\pi_{H_2S,2} = \text{ضریب تقسیم سولفید در لایه ۲،}$$

$$S_1 = \text{غلظت مواد جامد در لایه ۱،}$$

$$S_2 = \text{غلظت مواد جامد در لایه ۲.}$$

برای سولفیدها در لایه ۱ هیچ عبارت منبع خارجی وجود ندارد. در صورتی که عبارت منبع برای

لایه ۲ از اصطلاح دیاژنز کربن (معادله ۷۵)، در تعادلات اکسیژن محاسبه شده‌است و برای

نیترژن زدایی اصلاح می‌شود، زیرا نیترژن زدایی به منبع کربن نیاز دارد و برای کربن یک مخزن محسوب

می‌شود. هنگامی که غلظت‌های سولفید به‌روز شدند، جریان به ستون آب از طریق فرمول زیر محاسبه

می‌شود:

$$J_{H_2S} = S f_{D1} C_{H_2S,1}^{t+\Delta t}$$

(۱۶-۹۰)

که  $J_{H_2S}$  شار به ستون آب است. SOD ناشی از تقاضای کربن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$CSOD_{HS} = \frac{(K_{HS,D}^2 f_{D,1} + K_{HS,P}^2 f_{P,1}) \theta^{T-20}}{S} f_0 C_{HS,1}^{t+\Delta t} \quad (91-16)$$

### متان

در WASP، جریان متان فقط برای سیستم‌های آب شیرین محاسبه می‌شود (جایی که شوری (SAL) کمتر از یک مقدار مشخص (SALTSW) است). جریان متان زمانی که حداکثر تولید را دارد، طبق معادله‌ی اکسیژن به دیاژنز کربن وابسته است. این دیاژنز کربن به وسیله‌ی معادله‌ی (۱۶-۷۵) اصلاح می‌شود. با فرض اکسیداسیون کامل، حداکثر SOD کربنی که اعمال می‌شود، مربوط به (چاپرا، ۲۰۰۰، دی‌تورو، ۲۰۰۱) می‌باشد.

$$CSOD_{max} = \sqrt{2K_{L12} C_S J_{OC}} \quad (92-16)$$

یا (برای محاسبه‌ی  $CSOD_{max} > J_{OC}$ )

$$CSOD_{max} = J_{OC} \quad (93-16)$$

که در آن  $K_{L12}$  قبلاً تعریف شده بود و  $C_S$  پارامتر محاسبه‌شده از (دی‌تورو ۲۰۰۱، معادله ۱۰-۵۱) می‌باشد.

$$C_{CH_4,SAT} = 100 \left( 1 + \frac{H_0}{10} \right) 1/024^{20-T} \quad (94-16)$$

که در آن  $H_0$  عمق ستون آب روی رسوب است. همان‌طور که نشان داده‌شد، اگر  $CSOD_{max}$  محاسبه‌شده بیش‌تر از جریان کربن موجود ( $J_{OC}$  در معادله‌های اکسیژن و تصحیح‌شده برای نیتروژن‌زدایی) باشد، آن‌گاه  $CSOD_{max}$  برابر با آن جریان تنظیم می‌شود ( $CSOD_{max} = J_{OC}$ ).  
جریان متان حل‌شده در مرز مشترک آب و رسوب را می‌توان از (چاپرا ۲۰۰۰، معادله ۲۵-۴۳؛ دی‌تورو ۲۰۰۱، معادله ۱۰-۳۲) محاسبه نمود.

$$J_{out} = CSOD_{max} Sech(\lambda_c H_1) \quad (95-16)$$

$$\lambda_c H_1 = \frac{H_{CH_4,1} \theta^{T-20/2}}{S} \quad (96-16)$$

توجه داشته‌باشید که تصحیح دما در معادله‌ی بالا در کد ICM (کرکو و کوله، ۱۹۹۵) و جاهای دیگر نشان‌داده شده‌است. رابطه‌ی هذلولی مستقل ( $Sech$ ) به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$Sech(x) = \frac{2}{e^x + e^{-x}} \quad (97-16)$$

متان ممکن‌است اکسید شده و اکسیژن موردنیاز رسوب را تولید کند و یا با ستون آب به دو شکل گازی و یا محلول مبادله شود. SOD کربنی را می‌توان از رابطه زیر محاسبه نمود.

$$CSOD_{CH_4} = CSOD_{max}(1 - Sech(\lambda_c H_1)) \quad (98-16)$$

و شارهای متان حل شده و گازی را می‌توان از روی آن محاسبه نمود.

$$J[CH_4(aq)] = CSOD_{max} - CSOD_{CH_4}; J[CH_4(g)] = J_{OC} - J[CH_4(aq)] - CSOD_{CH_4}SOD \quad (99-16)$$

هنگامی که غلظت‌های مواد مؤثر بر اکسیژن محاسبه شدند و براساس روابط استوکیومتری که در بالا توضیح داده شد، SOD محاسبه می‌شود.

$$SOD = CSOD_{HS} + CSOD_{NH_4} + CSOD_{NO_2} \quad (100-16)$$

برای سیستم‌های آب شور یا؛

$$SOD = CSOD_{CH_4} + CSOD_{NH_4} + CSOD_{NO_2} \quad (101-16)$$

برای سیستم‌های آب شیرین، که اکسیژن موردنیاز آن ناشی از سولفید (معادله‌ی ۹۱)، متان (معادله‌ی ۹۸) و نیتروژن‌زایی (معادله‌های ۴۵ و ۶۰) بوده، قبلاً تعریف شده بودند. توجه داشته‌باشید که در حل تکراری برای SOD، s محاسبه‌شده‌ی این مرحله محاسباتی باید با s تکرار مرحله‌ی قبل مقایسه‌شود و همان‌طور که در بالا بیان شد، اگر با مقدار مشخصی از آن متفاوت باشد، مقدار جدیدی از s محاسبه شده و راه‌حل تکرار می‌شود.

### محاسبه‌ی فسفات و سیلیس

همان‌طور که در بالا بحث شد، SOD به‌صورت تکراری و به‌منظور تعیین مقدار s (نرخ انتقال رسوب سطحی) محاسبه می‌شود. پس از تکمیل این مرحله، غلظت فسفات و آمونیاک که بر SOD تأثیر نمی‌گذارد، محاسبه می‌شود. محاسبات فسفات و سیلیس مشابه محاسبات بالا بوده و به‌طور خلاصه در زیر ارائه شده‌اند.

### سیلیس

معادلات بیلان جرم دو لایه برای سیلیس عبارتند از:

#### لایه‌ی ۱

$$0 = -s(f_{a1}C_{Si,1}^{t+\Delta t} - C_{Si,0}^{t+\Delta t}) + \omega_{12}(f_{p2}C_{Si,2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{Si,1}^{t+\Delta t}) + K_{L12}(f_{a2}C_{Si,2}^{t+\Delta t} - f_{a1}C_{Si,1}^{t+\Delta t}) - \omega_2 C_{Si,1}^{t+\Delta t} \quad (102-16)$$

#### لایه‌ی ۲

$$\begin{aligned}
0 = & -\omega_{12}(f_{p2}C_{Si,2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{Si,1}^{t+\Delta t}) \\
& - K_{L12}(f_{d2}C_{Si,2}^{t+\Delta t} - f_{d1}C_{Si,1}^{t+\Delta t}) \\
& + \omega_2(C_{Si,1}^{t+\Delta t} - C_{Si,4}^{t+\Delta t}) - K_3C_{Si,2}^{t+\Delta t} - \frac{H_2C_{Si,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} \\
& + J_{Si,2}^{t+\Delta t} + \frac{H_2C_{Si,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t}
\end{aligned} \quad (103-16)$$

که تمامی عبارات قبلاً در آن تعریف شده‌اند. توجه داشته باشید که تفاوت اصلی میان معادلات کلی ارائه‌شده‌ی قبلی و معادلات سیلیس، نبود عبارات منبع سیلیس یا واکنش در لایه‌ی هوزی می‌باشد. در لایه‌ی بی‌هوزی (لایه‌ی ۲)، سرعت واکنش تنها به بخش محلول اعمال می‌شود. براساس معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه‌ی بالا، عناصر موجود در ماتریس حل به‌صورت زیر هستند:

$$a_{11} = -(f_{d1})K_{L12} - (f_{p1})\omega_{12} - \omega_2 \quad (104-16)$$

$$a_{21} = +\omega_{12}(f_{p1}) + K_{L12}(f_{d1}) + \omega_2 \quad (105-16)$$

$$a_{12} = +\omega_{12}(f_{p2}) + K_{L12}(f_{d2}) \quad (106-16)$$

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) - K_{L12}(f_{d2}) - \omega_2 - K_3 - \frac{H_2}{\Delta t} \quad (107-16)$$

$$b_1 = -SC_{Si,0}^{t+\Delta t} \quad (108-16)$$

$$b_2 = -J_{Si}^{t+\Delta t} - \frac{H_2C_{Si,2}^t}{\Delta t} \quad (109-16)$$

برای حل حالت پایدار، گزینه‌ی WASP برای محاسبه‌ی شرایط اولیه مورد استفاده قرار گرفته‌است، که عناصر ماتریس در آن به‌صورت زیر اصلاح می‌شوند:

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) - K_{L12}(f_{d2}) - \omega_2 - K_3 - \frac{H_2}{\Delta t} \quad (110-16)$$

$$b_2 = -J_{Si}^{t+\Delta t} \quad (111-16)$$



کسر حل شده و ذرات موجود در دو لایه، از قرار زیر محاسبه می‌شوند:

$$f_{d1} = \frac{1}{1 + \pi_{Si,1}S_1}; f_{p1} = \frac{\pi_{Si,1}S_1}{1 + \pi_{Si,1}S_1} \quad (112-16)$$

$$f_{d2} = \frac{1}{1 + \pi_{Si,2}S_2}; f_{p2} = \frac{\pi_{Si,2}S_2}{1 + \pi_{Si,2}S_2}$$

که:

$$\pi_{Si,1} = \text{ضریب تقسیم برای سیلیس در لایه ۱،}$$

$$\pi_{Si,2} = \text{ضریب تقسیم برای سیلیس در لایه ۲،}$$

$$S_1 = \text{غلظت مواد جامد در لایه ۱،}$$

$$S_2 = \text{غلظت مواد جامد در لایه ۲،}$$

ضریب توزیع در لایه بی‌هوازی روی یک مقدار ورودی مشخص تنظیم می‌شود. برای لایه ۱ و یا لایه بی‌هوازی، اگر غلظت اکسیژن در ستون پوشش‌دهنده آب از غلظت بحرانی (مشخص شده در ورودی) تجاوز کند، پس از آن ضریب توزیع افزایش می‌یابد که نشان‌دهنده به دام انداختن سیلیس و یا جذب آن بر روی اکسی هیدروکسید آهن است. اگر مقدار اکسیژن حل شده کمتر از مقدار بحرانی باشد، آن‌گاه ضریب جذب در لایه ۱ به صفر می‌رسد (دی‌تورو ۲۰۰۱، معادله ۷-۱۸).

$$\pi_{Si,1} = \pi_{Si,2}(\Delta\pi_{Si,1}) \quad \text{برای} \quad [O_2(0)] > [O_2(0)]_{crit,Si} \quad (113-16)$$

$$\pi_{Si,1} = \pi_{Si,2}(\Delta\pi_{Si,1})^{\beta_{Si}} \quad \text{برای} \quad [O_2(0)] \leq [O_2(0)]_{crit,Si} \quad (114-16)$$

که:

$$\beta_{Si} = \frac{[O_2(0)]}{[O_2(0)]_{crit,Si}}$$

$\Delta\pi_{Si}$  یک تغییر افزایشی مشخص شده است.

میزان حل شده سیلیس در لایه بی‌هوازی، که به نرخ انحلال ذرات سیلیس وابسته است، توسط رابطه میکانالیس-منتون اصلاح شده است، به وسیله معادله ۷-۱۶ به دست می‌آید.

$$S_{Si} = k_{Si} \Theta^{(T-20)} \frac{P_{Si}}{P_{Si} + K_{m,PSi}} (C_{Si,sat} - f_{d,2} C_{Si}^{t+\Delta t}) \quad (115-16)$$

که:

$P_{Si}$  = شار دیاژنز بیوژنیک سیلیس که به آن سیلیس آفتی (مضر) اضافه شد.

$K_{m,PSi}$  = ثابت نیمه‌اشباع (KMPSI)،

$k_{Si}$  = میزان انحلال سیلیس (KADSA از مدل کیفیت آب)،

$C_{Si,sat}$  = غلظت اشباع سیلیس ( $C_{Si,sat}$ ، مقدار ورودی).

بر اساس معادله‌ی ۱۱۵، ترم مضر ( $K_3$ ) و ترم منبع برای رسوبات ( $J_{Si,2}^{t+\Delta t}$ ) بعداً مشخص می‌شوند.

$$K_3 = k_{Si} \theta^{(T-20)} f_{d,2} \frac{P_{Si}}{P_{Si} + K_{m,PSi}} \quad (116-16)$$

و

$$J_{Si,2}^{t+\Delta t} = k_{Si} \theta^{(T-20)} \frac{P_{Si}}{P_{Si} + K_{m,PSi}} C_{Si,sat} \quad (117-16)$$

هنگامی که غلظت سیلیس به‌روز شد، شار ورودی به ستون آب از موارد زیر محاسبه می‌شود:

$$J_{Si} = s(C_{Si,1}^{t+\Delta t} - C_{Si,0}) \quad (118-16)$$

که در آن  $J_{Si}$  شار ستون آب می‌باشد.

## فسفات

معادلات موازنه‌ی جرم دو لایه برای فسفات عبارتند از:

### لایه‌ی ۱

$$0 = -s(f_{d1}C_{PO4,1}^{t+\Delta t} - C_{PO4,0}^{t+\Delta t}) + \omega_{12}(f_{p2}C_{PO4,2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{PO4,1}^{t+\Delta t}) + K_{L12}(f_{d2}C_{PO4,2}^{t+\Delta t} - f_{d1}C_{PO4,1}^{t+\Delta t}) - \omega_2 C_{PO4,1}^{t+\Delta t} \quad (119-16)$$

$$0 = -\omega_{12}(f_{p2}C_{PO4,2}^{t+\Delta t} - f_{p1}C_{PO4,1}^{t+\Delta t}) - K_{L12}(f_{d2}C_{PO4,2}^{t+\Delta t} - f_{d1}C_{PO4,1}^{t+\Delta t}) + \omega_2(C_{PO4,1}^{t+\Delta t} - C_{PO4,2}^{t+\Delta t}) - \frac{H_2 C_{PO4,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} + J_{PO4,2}^{t+\Delta t} + \frac{H_2 C_{PO4,2}^{t+\Delta t}}{\Delta t} \quad (120-16)$$

که همه‌ی عبارات این معادله قبلاً تعریف شده‌اند. توجه داشته‌باشید که تفاوت اصلی میان معادلات کلی ارائه‌شده‌ی قبلی و معادلات فسفات، در این است که هیچ واکنشی در هیچ یک از لایه‌ها مشاهده نمی‌شود.

براساس معادلات بیلان جرم دو لایه، که در بالا به آن اشاره شد، عناصر موجود در ماتریس حل

به‌صورت زیر هستند:

$$a_{11} = -(f_{d1})K_{L12} - (f_{p1})\omega_{12} - (f_{d1})s - \omega_2 \quad (121-16)$$

$$a_{21} = +\omega_{12}(f_{p1}) + K_{L12}(f_{d1}) + \omega_2 \quad (122-16)$$

$$a_{12} = +\omega_{12}(f_{p2}) + K_{L12}(f_{d2}) \quad (123-16)$$

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) - K_{L12}(f_{d2}) - \omega_2 - \frac{H_2}{\Delta t} \quad (124-16)$$

$$b_1 = -S C_{pO4,0}^{t+\Delta t} \quad (125-16)$$

$$b_2 = -J_{PO4}^{t+\Delta t} - \frac{H_2 C_{pO4,2}^t}{\Delta t} \quad (126-16)$$

برای حل حالت پایدار، در WASP گزینه‌ای برای محاسبه شرایط اولیه، مورد استفاده قرار گرفته است که عناصر ماتریس در آن به صورت زیر اصلاح می‌شوند:

$$a_{22} = -\omega_{12}(f_{p2}) - K_{L12}(f_{d2}) - \omega_2 \quad (127-16)$$

$$b_2 = -J_{PO4}^{t+\Delta t} \quad (128-16)$$

کسر محلول و ذرات موجود در دو لایه از قرار زیر محاسبه می‌شوند:

$$f_{d1} = \frac{1}{1 + \pi_{PO4,1} S_1}; f_{p1} = \frac{\pi_{PO4,1} S_1}{1 + \pi_{PO4,1} S_1} \quad (129-16)$$

$$f_{d1} = \frac{1}{1 + \pi_{PO4,2} S_2}; f_{p1} = \frac{\pi_{PO4,2} S_2}{1 + \pi_{PO4,2} S_2}$$

که:

$\pi_{PO4,i}$  = ضریب تقسیم فسفات در لایه‌ی i (PIE2)،

$S_1$  = غلظت جامدات در لایه‌ی ۱ (M1)،

$S_2$  = غلظت جامدات در لایه‌ی ۲ (M2).

ضریب توزیع در لایه‌ی بی‌هوازی روی یک مقدار ورودی مشخص تنظیم می‌شود. برای لایه‌ی ۱ و یا لایه‌ی هوازی، اگر غلظت اکسیژن در ستون پوشش‌دهنده‌ی آب از یک غلظت بحرانی (O2CRIT)، مشخص شده در ورودی) تجاوز کند، آن‌گاه ضریب توزیع افزایش می‌یابد که نشان‌دهنده‌ی به‌دام انداختن فسفات و یا

جذب بر روی هیدروکسید آهن باشد. اگر اکسیژن حل شده کمتر از مقدار بحرانی باشد، آن‌گاه ضریب جذب در لایه‌ی ۱ به صفر می‌رسد (دی‌تورو ۲۰۰۱، معادله‌ی ۶-۱۹).

$$\pi_{PO4,1} = \pi_{PO4,2}(\Delta\pi_{PO4,1}) \quad \text{برای} \quad [O_2(0)] > [O_2(0)]_{crit} \quad (۱۳۰-۱۶)$$

و

$$\pi_{PO4,1} = \pi_{PO4,2}(\Delta\pi_{PO4,1})^{\beta_{PO4}} \quad \text{برای} \quad [O_2(0)] \leq [O_2(0)]_{crit,PO4}$$

که:

$$\beta_{PO4} = \frac{[O_2(0)]}{[O_2(0)]_{crit,PO4}}$$

$\Delta\pi_{PO4}$  یک تغییر افزایشی مشخص می‌باشد (که برای یک مقدار ورودی آب شیرین یا آب شور تنظیم شده‌است).

عبارت منبع برای لایه‌ی ۲ نتیجه‌ی فسفات تولیدشده توسط دیاژنز رسوب است که جریان فسفر معدنی از طریق ستون آب به آن اضافه می‌شود. هنگامی که غلظت فسفات به‌روز شد، جریان به ستون آب از موارد زیر محاسبه می‌شود:

$$J_{PO4} = s(C_{PO4,1}^{t+\Delta t} - C_{PO4,0}) \quad (۱۳۱-۱۶)$$

## منابع ضمیمه‌ی A

1. Cerco, C.F., and T. Cole. 1993. Three-dimensional eutrophication model of Chesapeake Bay. *Journal of Environmental Engineering*. 119:1006-1025.
2. Cerco, C.F. and T. M. Cole. 1991. "Thirty year simulation of Chesapeake Bay Dissolved Oxygen," in *Environmental Hydraulics*, J. H. Lee and Y. K. Cheung, eds. Balkema, Rotterdam, 771-776.
3. Cerco, C.F. and T. M. Cole. 1992. "Thirty year simulation of Chesapeake Bay eutrophication," In *Estuarine and Coastal Modeling*, M. L. Spaulding, K. Bedford, A. Blumberg, R. Chen, and C. Swanson, eds. ASCE, 116-126.
4. Cerco, C.F. 1995. "Response of Chesapeake Bay to nutrient load reductions," *ASCE J. Environmental Engineering Div.* 121(8), 549-557.
5. Cerco, C.F. and T. M. Cole. 1995. "User documentation for Release Version 1.0 of the CE-QUAL-ICM Three Dimensional Eutrophication Model," Technical Report EL- 95-1, U.S. Army Corps of Engineers, Waterways Experiment Station, Vicksburg, MS.

6. Chapra, S.C. 1997. Surface Water-Quality Modeling, McGraw-Hill, New York, New York, 844 pp.
7. Di Toro, D. M. 2001. Sediment Flux Modeling, Wiley-Interscience, New York, New York. 624 pp.
8. Di Toro, D. M., Paquin, P. R., Subburamu, K. and Gruber, D.A. 1990. Sediment oxygen demand model: methane and ammonia oxidation. J. Environ. Engr. ASCE, 116: 945-986.
9. 945-986.
10. Di Toro, D. M. and J. F. Fitzpatrick. 1993. Chesapeake Bay sediment flux model. Tech. Report EL-93-2, U.S. Army Corps of Engineers, Waterways Experiment Station, Vicksburg, Mississippi, 316 pp.
11. Di Toro, D. M., J. F. Fitzpatrick and T. R. Isleib. 1994. "A model of manganese and iron fluxes from sediments," Contract Report W-94-1, U.S. Army Corps of Engineers, Waterways Experiment Station, Vicksburg, Mississippi, 76 pp.
12. USACE. 2001. "Development of a Suspension Feeding and Deposit Feeding Benthos Model for Chesapeake Bay," Developed by the USACE Waterways Experiment Station for the Chesapeake Bay Program (contract report DACW39-96-D-0001), 177 pp.



## فصل هفدهم

WASP8 ماکرو جلبک-تئوری مدل و

راهنمای کاربر

ضمیمه‌ی مستندات کاربر برنامه

شبیه‌سازی تحلیل آب (WASP)

## ۱۷-۱- مقدمه

فیتوپلانکتون‌ها (گیاهان شناور) معمولاً به دو دلیل که در ادامه بیان می‌شوند، متغیرهای حالت در مدل‌های تعیین کیفیت آب مانند WASP در نظر گرفته می‌شوند؛ اولاً این که اکسیژن حل شده و چرخه‌ی مواد در جریان‌های آبی را تحت تأثیر قرار می‌دهند و دوماً به دلیل این که جمعیت زیاد فیتوپلانکتون‌ها و جلبک‌های کفزی از نگرانی‌های محیطی محسوب می‌شوند، اما در بسیاری از جریان‌های آبی دیگر شکل‌های جلبک‌ها و یا گیاهان واقعی از اهمیت مساوی یا بیش‌تر برخوردارند. ممکن است این جریان‌ها شامل جلبک‌های کفزی (ماکروسکوپی یا میکروسکوپی)، جلبک‌های ماکروسکوپی شناور و یا شناور (ماکروجلبک)، گیاهان واقعی و یا گونه‌های ماکروفیت‌ها (از ماکوس به معنای بزرگ و فیتون، گیاه) باشند. تأثیر این موجودات زنده با فراوانی و بهره‌وری آن‌ها متناسب بوده که به نوبه‌ی خود تحت تأثیر ویژگی‌های جریان آب قرار دارد و قابلیت برآورد تغییرات در فراوانی و بهره‌وری آن‌ها، با استفاده از مدل‌هایی مانند WASP برای مدیریت محیط‌زیست مهم می‌باشد.

جلبک و گیاهان آبی، مجموعه‌ی بزرگ و متنوعی از موجودات زنده، همانند فیتوپلانکتون را نشان می‌دهند. اگرچه این گروه‌ها اغلب می‌توانند براساس ویژگی‌های فیزیولوژیکی و اکولوژیکی مشترک خود در مدل‌های ریاضی، طبقه‌بندی آن‌ها را مشخص نمایند؛ به عنوان مثال، این موجودات زنده می‌توانند توسط مناطقی از سطح آب که در آن‌ها زندگی می‌کنند، اندازه، شکل و دیگر ویژگی‌های خود را چه در ارتباط با سطح و چه در حالت شناور آزاد مشخص کنند. رشد این فتوتروف‌ها تحت تأثیر دما، نور و مواد مغذی می‌باشد به صورتی که رشد آن‌ها مواد غذایی مصرف کرده و اکسیژن تولید می‌کند و همچنین محتوای سلول را دفع کرده و می‌میرد، و مواد آلی محلول و ذره‌ای را برای کربن جریان‌های آبی و حوضچه‌های مواد مغذی، بازیافت می‌کند.

هدف از این زیر مدل گسترش در مدل جلبکی کفزی که قبلاً توسعه یافته، می‌باشد (مارتین، امبروس و والول ۲۰۰۶) تا قابلیت شبیه‌سازی سطح شناور و زیرسطحی و ماکروجلبک‌های شناور و برخی اشکال ماکروفیت‌ها را که مواد مغذی را از ستون آب به دست می‌آورند و در رسوبات ریشه ندارند، اضافه کند. اگرچه این مدل برای برخی از جلبک‌های میکروسکوپی و ماکروفیت‌ها کاربرد دارد، اما پس از آن برای راحتی به عنوان مدل ماکروجلبک اشاره خواهد شد. همان‌طور که در بالا گفته شد، به‌طور کلی، مدل ماکرو آگال برای شبیه‌سازی گروهی از موجودات فتوتروفیک با ویژگی‌های زیر طراحی شده است:

- قادر به جذب مواد مغذی بوده و نیازمند شبیه‌سازی غلظت مواد مغذی درونی می‌باشند.
- معمولاً دارای رشد بهینه در شرایط خاص نور، دما و شوری است.
- ممکن است حداکثر چگالی یا ظرفیت حمل را داشته باشد.



➤ برای اشکال غوطه‌ور (بدون ریشه)

▪ به جز زمانی که تحت شرایط شدید (شستشو) می‌باشد، با جریان آب حرکت نکنند

▪ درحالی که به کفزیان متصل هستند، ممکن است در طول ستون آب رشد کنند، بنابراین نور رسیده به آن‌ها توسط بستر یا ارتفاع تاج پوشش تحت‌تأثیر قرار می‌گیرد.

▪ آن‌ها خود سایه هستند، بنابراین بر رشد خود، داخل و پایین تخت‌خواب یا سایبان تأثیر دارند.

➤ برای اشکال شناور آزاد،

▪ به شدت تحت‌تأثیر هیدرودینامیک قرار دارند، اما انتظار نمی‌رود که با سرعت فعلی ناشی از کشیدن منتقل شوند.

▪ خودسایه هستند که بر رشد آن‌ها و دیگر فتوتروف‌ها تأثیر می‌گذارد.

### ۱۷-۲- پیشینه‌ی WASP

WASP مبتنی بر روش مدل شبکه یا مجموعه‌ای بدون ساختار است و ممکن است درحالت ۱، ۲ و یا ۳ بعدی به کار رود. اطلاعات انتقال هیدرولیکی معمولاً با استفاده از یک مدل هیدرودینامیک تولید می‌شود که در یک فایل پیوند هیدرودینامیک به WASP منتقل می‌شود. برای برخی از متغیرهای حالت (مانند جلبک‌های کفزی و در این مدل، ماکرو جلبک زیردریایی) هیچ انتقال ستونی آب وجود ندارد. بخش‌های زیر بر روی عبارت منبع/مخزن متمرکز می‌گردند. عبارت مبدأ و مقصد با بحث درمورد چگونگی اصلاح آن‌ها، برای متغیرهای کیفیت مدل موجود در صورت لزوم، برای تطبیق متغیرهای حالت ماکرو جلبکی ارائه خواهد شد.

توجه داشته باشید، از آن‌جا که یک اتصال خارجی بین هیدرودینامیک و کیفیت آب مورد استفاده قرار می‌گیرد، هیچ مکانیزم مستقیمی برای بازخورد بین ماکرو جلبک شناور یا غوطه‌ور و یا مدل هیدرودینامیک در WASP وجود ندارد. بنابراین، روش پیشنهادی تنها شامل اثرات رو به جلوی هیدرودینامیک بر روی SAVها می‌باشد. تغییرات بالقوه در مدل هیدرودینامیک برای مکانیسم‌های بازخورد در گروبر و کمپ (۲۰۱۰) شرح داده شده‌اند.

### ۱۷-۳- مواد محلول و معلق

معادله انتقال سه‌بعدی برای مواد محلول یا معلق، به صورت زیر می‌باشد:

$$\frac{\partial(C)}{\partial t} = -\frac{\partial(uC)}{\partial x} - \frac{\partial(vC)}{\partial y} - \frac{\partial(wC)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{(D_x C)}{\partial x} \right] \quad (1-17)$$

$$+ \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{(D_y C)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{(D_z C)}{\partial z} \right] \pm \frac{W}{V} + \frac{S_o}{V}$$

که در آن پارامتر C نشان‌دهنده‌ی غلظت ( $g m^{-3}$ )؛ سرعت‌های u، v و w به ترتیب در جهت x، y و z ( $m day^{-1}$ )؛  $D_x$ ،  $D_y$  و  $D_z$  نیز ضرایب انتشار آشفته ( $m^2 day^{-1}$ ) هستند؛ W بار خارجی ( $g day^{-1}$ ) بوده، بنابراین  $S_o$  عبارت منبع/مخزن ( $g m^{-3} day^{-1}$ ) و V حجم ( $m^3$ ) می‌باشد.

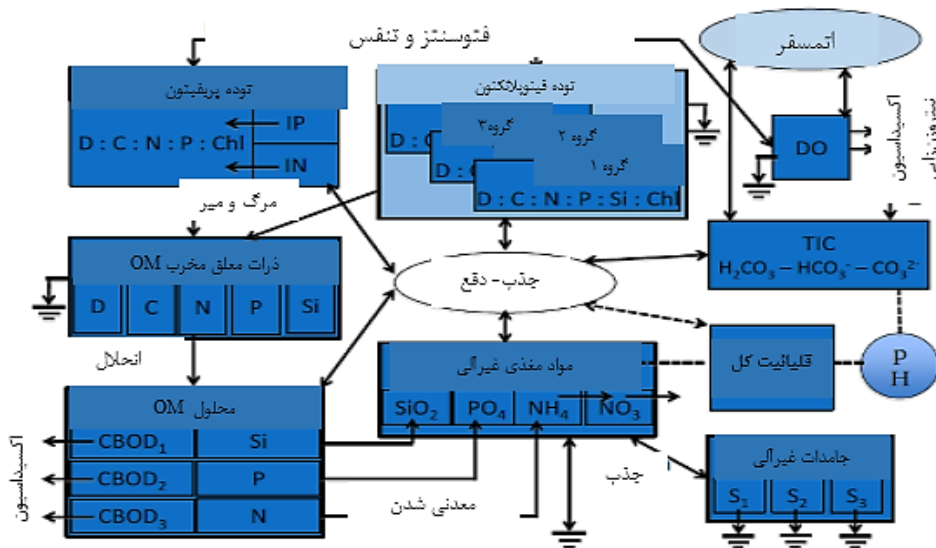
### ۱۷-۴- متغیرهای کیفیت WASP 8

ماژول تغذیه‌گرایی WASP 8 در حال حاضر شامل متغیرهای کیفیت زیر است، که برخی از آن‌ها می‌توانند اشکال چندگانه داشته باشند.

- دمای آب،
- نیتروژن آمونیاکی،
- نیتروژن نیتراتی،
- نیتروژن آلی محلول،
- فسفات غیرآلی،
- فسفات آلی محلول،
- سیلیس غیرآلی،
- سیلیس آلی محلول،
- CBOD (حداکثر ۵ فرم)،
- کربن فرسایشی،
- نیتروژن فرسایشی،
- فسفر فرسایشی،
- سیلیس فرسایشی،
- کل پوده،
- شوری یا TDS،
- جامدات غیرآلی (حداکثر ۱۰ فرم)،

- فیتوپلانکتون‌ها (حداکثر ۵ فرم)،
- pH،
- قلیائی،
- ماکرو جلبک (حداکثر ۳ فرم)،
- ماکرو جلبک-N (حداکثر ۳ فرم)،
- ماکرو جلبک-P (حداکثر ۳ فرم)،
- باکتری‌ها (حداکثر ۵ فرم)،

یک رابطه‌ی تعمیم‌یافته بین این متغیرهای حالت در شکل ۱ نشان‌داده شده‌است.



شکل ۱۷-۱ مدل تغذیه‌گرایی WASP8

### ۱۷-۵- نور و گرما

WASP دارای مکانیسم‌های متعددی از اثرات نور و گرما می‌باشد که از مشخصات مستقیم گرفته تا پیش‌بینی و همچنین به‌دست آوردن اطلاعات برای پیوند هیدرودینامیک را شامل می‌شود. نتایج نشان

داد که با افزایش دما، بازده افزایش می‌یابد. تأثیر متغیرهای وضعیت کیفیت آب بر نفوذ ستون آب سبک، که در ضریب کاهش نور منعکس می‌باشد، در مدل تغذیه‌گرایی (موجود و ماکرو جلبک) گنجانده شده‌است.

### ۱۷-۶-واکنش‌های تشکیل دهنده و فرآیند جنبشی

متغیرهای کیفیت تغذیه‌گرایی برای WASP در بالا لیست شده‌اند. این بخش به‌طور خلاصه، واکنش‌های جنبشی تشکیل دهنده‌ی موجود در عبارت منبع و مخزن را توصیف می‌کند (معادله‌ی ۱۷-۱).

فیتوپلانکتون‌ها (حداکثر ۵ فرم)؛

$$S_{phyto} = (PhytoPhoto - PhytoResp - PhytoDeath - PhytoSettl)C_{phyto} \quad (2-17)$$

که در آن فیتوپلانکتون‌ها به دلیل فتوسنتز افزایش یافته و از طریق تنفس، مرگ‌ومیر و ته‌نشینی از بین می‌روند. فرسایشی (مانند C، N و P)،

$$S_{mo} = r_{da}PhytoDeath + r_{da}BotlgDeath + r_{da}MaroAlgDeath - DetrDiss - DetrSettl \quad (3-17)$$

که شامل تولید مواد فرسایشی C، N و P از مرگ فیتوپلانکتون و جلبک‌های کفزی و از بین‌رفته ناشی از ته‌نشینی شدن و انحلال می‌باشد. به‌همین ترتیب، یک ترم برای منبع مواد فرسایشی که با مرگ ماکرو جلبک همراه‌است اضافه خواهدشد.

CBOD (حداکثر ۵ فرم)؛

$$S_{CBOD} = Decomposition - Oxidation - a_{ah} \text{ denitrification-settling} \quad (4-17)$$

که شامل تجزیه و اکسیداسیون CBODU همراه با تلفات ناشی از نیتروژن‌زدایی و ته‌نشینی می‌باشد.

### ۱۷-۶-۱-نیتروژن آلی محلول

$$S_{no} = r_{na}PhytoDeath + q_{No}BotAlgDeath + q_{0N,M}MaroAlgDeath - ONHydr \quad (5-17)$$

که شامل تولید N آلی از طریق مرگ فیتوپلانکتون‌ها و جلبک‌های کفزی و از دست رفتن آن‌ها در اثر هیدرولیز می‌باشد.

**۱۷-۶-۲- نیتروژن آمونیاکی**

$$S_{na} = \text{DONHydr} + r_n \text{PhytoResp} - \text{Nitrif} + \text{BotAlgExN} \quad (۶-۱۷)$$

$$- r_{na} P_{ap} \text{PhytoPhoto} - P_{ab} \text{BotAlgUpN}$$

در نتیجه نیتروژن آمونیاک به دلیل هیدرولیز نیتروژن آلی، تنفس/دفع فیتوپلانکتون و دفع گیاه پایین افزایش می‌یابد. از طریق نیتروژن زایی و فتوسنتز گیاه از بین می‌رود:

**۱۷-۶-۳- نیتروژن نیتراتی**

$$S_{ni} = \text{Nitrif} - \text{Denitr} - r_{na}(1 - P_{ap}) \text{PhytoPhoto} \quad (۷-۱۷)$$

$$- (1 - P_{ap}) \text{BotAlgUptakeN}$$

که در آن نیتروژن نیتراتی به علت نیتروژن زایی آمونیاک افزایش می‌یابد. از طریق نیتروژن زدایی و فتوسنتز گیاه از بین می‌رود.

**۱۷-۶-۴- فسفر آلی محلول**

$$S_{po} = r_{pa} \text{PhytoDeath} + q_{op} \text{BotAlgDeath} - \text{OPHydr} \quad (۸-۱۷)$$

که شامل تولید فسفر آلی از طریق مرگ فیتوپلانکتون‌ها و جلبک‌های کفزی و ازدست رفتن آن‌ها در اثر هیدرولیز می‌باشد.

**۱۷-۶-۵- فسفر معدنی**

$$S_{pi} = \text{DOPHydr} + r_{pa} \text{PhytoResp} - \text{BotAlgExp} \quad (۹-۱۷)$$

$$+ r_{pa} \text{BotAlgUpP} \text{PhytoPhoto} - \text{IPSettl}$$

این امر شامل افزایش تجزیه‌ی فسفر آلی، افزایش تنفس/دفع فیتوپلانکتون‌ها و کاهش دفع گیاهان می‌باشد. از طریق فتوسنتز گیاه و ته‌نشینی، شکل‌های جاذب از بین می‌رود (مانند اکسی هیدروکسیدهای آهن).

## ۱۷-۶-۶- اکسیژن محلول

$$S_O = r_{oa}PhytoPhoto + r_{oa}o BotAlgPhot - r_{oc}FastCOxid \quad (۱۰-۱۷)$$

$$- r_{on}NH4Nitr - r_{oa}PhytoResp$$

$$- r_{oa}BotAlgResp + OxReaer$$

که در آن اکسیژن محلول به دلیل فتوسنتز گیاه، افزایش می‌یابد و از طریق اکسیداسیون سریع CBOD، نیتروژن‌زایی و تنفس گیاه ازدست می‌رود. بسته به این که آیا آب کم‌اشباع بوده و یا بیش از حد اشباع شده‌است از طریق هوادهی مجدد به دست می‌آید یا ازدست می‌رود.

## ۱۷-۶-۷- کل کربن معدنی

$$S_{CT} = r_{cco}FastCOxid + r_{cca}PhytoResp + r_{cca}BotAlgResp \quad (۱۱-۱۷)$$

$$- r_{cca}PhytoPhoto - r_{cca}o BotAlgPhoto$$

$$+ CO2Reaer$$

که در آن به دلیل اکسیداسیون سریع کربن و تنفس گیاه، غلظت کل کربن غیرآلی افزایش می‌یابد. از طریق فتوسنتز گیاه از بین می‌رود. بسته به این که ستون آب کم‌اشباع باشد یا بیش از حد با کربن‌دی‌اکسید اشباع شود، از طریق هوادهی مجدد به دست آمده یا ازدست می‌رود.

## ۱۷-۶-۸- قلیائیت (Alk)

همان‌طور که در جدول (۱-۱۷) خلاصه شده‌است، مدل حاضر تغییرات ناشی از چندین مکانیزم در قلیائیت را توضیح می‌دهد.

جدول ۱-۱۷ فرآیندهای موجود در WASP که بر قلیائیت تأثیر می‌گذارد

فرآیند	تغییر قلیائیت	ایجاد شده	به کار رفته
Nitrif	کاهش	NO3	NH4
Denitr	افزایش		NO3
OPHydr	کاهش	SRP	
ONHydr	افزایش	NH4	
PhytoPhoto	کاهش		NH4
	افزایش		NO3
	افزایش		SRP
PhytoResp	افزایش	NH4	

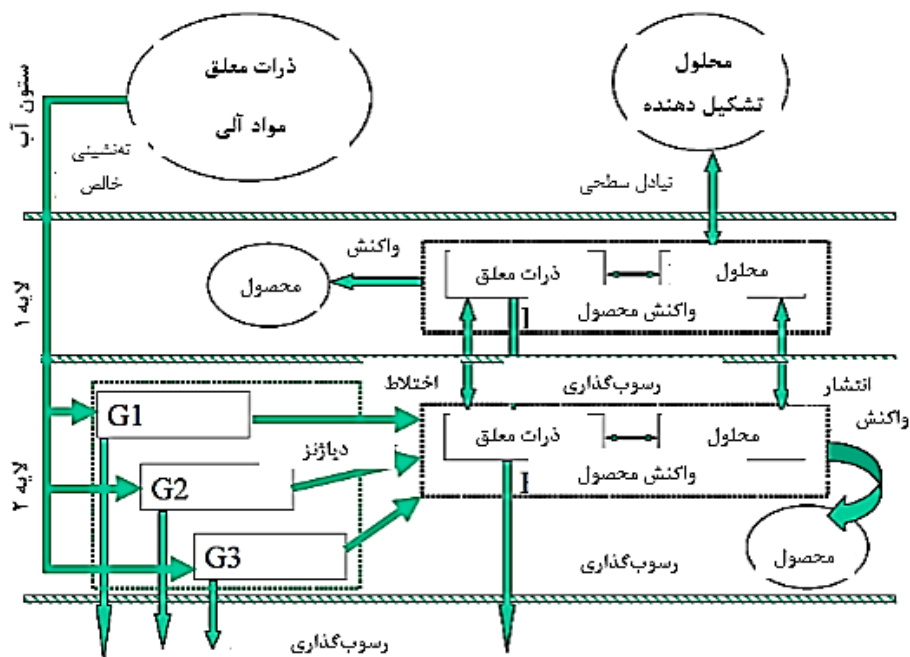
	SRP	کاهش	
NH4		کاهش	PhytoUpN
NO3		افزایش	
SRP		افزایش	PhytoUpP
	NH4	افزایش	PhytoExcrN
	SRP	کاهش	PhytoExcrP
NH4		کاهش	BotAlgUpN
NO3		افزایش	
SRP		افزایش	BotAlgUpP

### ۷-۱۷- جامدات معدنی

تا سه فرم از جامدات معدنی را می‌توان در بستر و ستون آب در WASP، مدل نمود. فرآیندهای انتقال رسوبات شامل ته‌نشینی و تعلیق رسوبات چسبنده و غیرچسبنده می‌باشد.

### ۷-۱۷-۱- دیاژنز رسوبات

طبق یافته‌های دی‌تورو (۲۰۰۱)، WASP شامل مدلی از دیاژنز رسوب می‌باشد که شار ذرات موادآلی (C، N و P) را از ستون آب، در کلاس‌های مختلف G که نشان‌دهنده‌ی واکنش‌پذیری هستند، تقسیم می‌کند. سپس مدل تقاضای اکسیژن رسوب، انتشار DIN و DIP را از رسوبات همراه با متان و سولفیدها پیش‌بینی می‌کند.



شکل ۱۷-۲ ساختار مدل دیازنز رسوب WASP

### ۱۷-۸-۱-۸ الگوریتم‌های مدل ماکرو جلبک

#### ۱۷-۸-۱-۱-۸-۱ فرم‌های شبیه‌سازی شده

ماکرو جلبک‌ها و ماکروفیت‌ها مجموعه‌ی متنوع و پیچیده‌ای از اثرها را نشان می‌دهند. ماکرو جلبک‌ها عموماً به شکل‌های ماکروسکوپی جلبک (نه گیاهان واقعی) که در آب لب‌شور یافت می‌شوند، اشاره دارند. آن‌ها ممکن است به زیرلایه‌های سخت، شناور یا هوازی آزاد متصل شوند. ماکروفیت‌ها ممکن است شامل جلبک‌ها و یا گیاهان واقعی باشند و عموماً براساس محیطی که در آن رشد کرده، متمایز می‌شوند و ممکن است شامل کفزیان غوطه‌ور، شناور و یا نوظهور باشند (مارتین ۲۰۱۳). ماکروفیت‌ها ممکن است ریشه داشته باشند و مواد مغذی را از ستون آب و رسوبات استخراج کنند؛ همچنین ممکن است در ساختار برگ خود متفاوت بوده و شامل گونه‌های تاج‌دار (مانند میریوفیلوم سیبیریوم) یا گونه‌های علف‌زاری (مانند چارا کانسنز، زوسترا، هالدوله و تالاسیا، شکل ۱۷-۳) باشند.





ماکرو جلبک‌ها در محیط‌های جزرومدی



ماکرو جلبک‌های شناور در یک مرداب پسته



علف دریایی



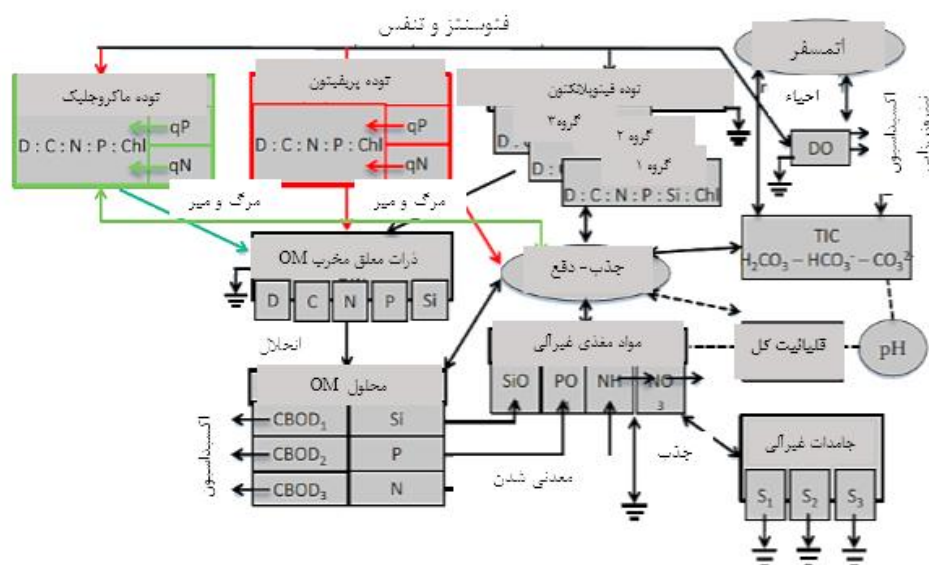
روپیا اس پی. یک گونه در آب‌های لب شور

شکل ۱۷-۳ مثال‌هایی از گروه‌های تولیدکننده‌ی اولیه در پهنه‌های جزر و مدی، انواع زیستگاه‌های آب کم عمق و عمیق در خورها یافت می‌شوند (از سوتولا و همکاران ۲۰۱۱).

همان‌طور که قبلاً اشاره شد، درحالی‌که این زیر مدل WASP، مدل ماکروجلبک نامیده می‌شود، برای گروه خاصی از فتوتروف‌های آبی هدف قرار نمی‌گیرد. در عوض مدل فرعی قابلیت WASP را برای اعمال فیتوپلانکتون‌ها، جلبک‌های کفزی (که می‌توانند میکروجلبک یا ماکروجلبک باشند) و شناور یا نیمه‌شناور فتوتروف‌های ماکروسکوپی گسترش داده‌است. فرمول‌هایی که رشد و مرگ این موجودات زنده را توصیف می‌کنند، شبیه به فرمول‌هایی برای فیتوپلانکتون‌ها هستند (وول و همکاران ۲۰۱۱) و مدل جلبک کفزی (مارتین و همکاران ۲۰۰۶) که جایگزین این مدل می‌شود، اما درجایی که موجودات زنده در ستون آب واقع می‌شوند بر رابطه مدل تأثیر می‌گذارند؛ به‌عنوان مثال، درحالی‌که رشد موجودات کفزی با رسیدن نور به کف تحت تأثیر قرار می‌گیرد، برای اشکال غوطه‌ور در آن به ارتفاع رشد موجودات بستگی دارد. همچنین فرم‌های کفزی و زیردریایی در ستون آب منتقل نمی‌شوند، مگر این‌که در طول رویدادی برشی با کف بالا جدا شوند، درحالی‌که ممکن است اشکال شناور منتقل شوند. فرم‌های کفزی، شناور سطحی، شناور زیرسطحی، و نیمه‌شناور در این زیر مدل، با شکل خاص شبیه‌سازی شده توسط کاربر، شبیه‌سازی می‌شوند.

جدول ۱۷-۲ گزینه‌ی مشخصه‌ی ماکروجلبک

گزینه‌ی فرم	فرم	نور مناسب	انتقال
۱	شناور بالا	نور در بالای ستون آب	بله
۲	شناور زیرسطحی	نور متوسط عمق	بله
۳	فرم سایبان زیر آب	نور در بالای سایبان	خیر
۴	زیرکفزی	نور پایین	خیر



شکل ۱۷-۴ متغیرها و فرآیندهای حالت در مدل اصلاح شده

فرم‌های خاص ویژگی‌های به اشتراک گذاری فتوتروف‌ها در آب که توسط فرمول‌های ارائه شده در زیر توضیح داده شده‌اند، ممکن است با استفاده از این زیرمدل با انتخاب عاقلانه‌ی گزینه‌های مدل و تعیین ثابت‌های مدل و ضرایب مناسب برای آن فرم‌ها شبیه‌سازی شوند. برای فرمول‌ها و ضرایبی که در ادامه بیان شده و همچنین مقادیر نماینده؛ در صورت لزوم، از مدل اصلی جلبک کفزی WASP (مارتین و همکاران ۲۰۰۶) برای مقایسه استفاده می‌شود.

### ۱۷-۸-۲- انتقال

انتقال جایگزین در WASP براساس معادله‌ی انتقال و انتشار سه‌بعدی می‌باشد که در آن عبارت مبدأ و مقصد به آن اضافه می‌شود:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial U_x C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( E_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial U_y C}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left( E_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) - \frac{\partial U_z C}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left( E_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \pm Sources \text{ and Sinks} \quad (17-12)$$

که در آن  $C$  غلظت (گرم بر مترمکعب)،  $U$  سرعت (متر بر ثانیه) در بعد  $x$ ،  $y$  و  $z$  و  $E$  سرعت پراکندگی در بعد  $x$ ،  $y$  و  $z$  می‌باشد. در WASP، این معادله بر روی حجم‌های مشخص شده یکپارچه است. در نتیجه:

$$\frac{d(VC)}{dt} = \sum Q_m C_{in} + \sum Q_{out} + \sum \frac{EA_i}{L_i} (C_i - C) \pm sources/sinks \quad (17-13)$$

که در آن  $V$  حجم قطعه (مترمکعب)،  $Q$  نرخ جریان (مترمکعب بر ثانیه)،  $E$  نرخ پراکندگی (مترمربع بر ثانیه)،  $A$  مساحت و  $L$  طول اختلاط برای قطعه‌ی  $i$  می‌باشد.

معادلات فوق به تمام اجزای شبیه‌سازی شده در WASP 8 اعمال می‌شوند، که در آن ترم‌های جابه‌جایی افقی و پراکندگی معمولاً از کاربرد یک مدل هیدرولیکی (هیدرواستاتیک یا هیدرودینامیک) در یک-دو یا سه بعد مشتق می‌شوند. یک استثناء در نسخه‌های قبلی WASP وجود دارد که در آن جلبک‌های کفزی به کف دریا متصل و منتقل نمی‌شوند.

### ۱۷-۸-۳- آبشستگی

در این نسخه از WASP 8 چهار فرم از ماکروجلبک شبیه‌سازی شده‌است که دو شکل آن مرتبط با کف و دو شکل آن شناور می‌باشد. برای جلبک‌های زیردریایی و کفزی فرض بر این است که آن‌ها متصل هستند و در نتیجه، با انتقال ستون آب منتقل نمی‌شوند. تنها زمانی که سرعت به اندازه‌ی کافی بزرگ می‌باشد، یک استثناء وجود دارد، به طوری که فرم‌های غوطه‌ور و کفزی از کف جدا شده یا خرد می‌شوند. در این نسخه از مدل، میزان مرگ‌ومیر افزایش‌یافته‌ی ناشی از آبشستگی، براساس سرعت حداکثر مشخصی که ماکروجلبک می‌تواند تحمل کند ( $U_{max}$ )، محاسبه می‌شود که با سرعت متوسط یک بخش از مدل مقایسه می‌شود. اگر سرعت بیش‌تر از حداکثر مقدار تعیین‌شده باشد، بخشی از زیست‌توده‌ی کل خرد خواهد شد ( $f_{scour}$ ). علاوه‌بر این فرض می‌شود که آبشستگی تا حدی انفجاری می‌باشد تا یک رویداد پیوسته که تحت‌تأثیر زمانی قرار گرفته‌است که ماکروجلبک‌ها، زمان برای بازیابی

از حادثه‌ی آب شستگی قبلی داشته‌اند ( $T_{\text{recovery}}$ , day). زمانی که یک رویداد آبشستگی آغاز می‌شود شمارنده‌ی زمانی روی صفر تنظیم می‌شود و سپس با زمان افزایش می‌یابد. اگر؛

$$U > U_{\max} \quad (17-14)$$

$$(Time \leq T_{\text{recovery}}) MacAlgaeDeath_{\text{scour}} = 0$$

$(Time > T_{\text{recovery}}) MacAlgaeDeath_{\text{scour}} = f_{\text{scour}} a_{MA}$   
کسر ازدست رفته به آب شستگی شامل یک ترم منبع برای ریزه‌ها یا جلبک‌های شناور خواهد بود (توجه داشته‌باشید، این الگوریتم هنوز پیاده‌سازی نشده‌است).

### ۱۷-۸-۴- کشش

گیاهان شناور و ماکروجلبک‌ها در معرض انتقال دوگانه‌ی محاسبه‌شده از معادله‌ی ۱۳ قرار دارند، به استثنای این که برخی از جلبک‌های شناور و زیرسطحی، متراکم در نظر گرفته می‌شوند و یک کشش (مقاومت) را در انتقال دوگانه قرار می‌دهند. فرض بر این است که کشش نسبتاً ثابت است به طوری که می‌تواند با ضریب مشخص شده توسط کاربر، کسری از انتقال دوگانه‌ی قابل اجرا برای ماکروجلبک نمایش داده شود.

$$Q_{MA} = f_{\text{drag}} Q_n \quad (17-15)$$

که در آن  $f_{\text{drag}}$  یک ضریب کاهش جریان و  $Q_n$  جریان خالص در یک فصل مشترک است. اگر  $f_{\text{drag}} = 0$  باشد، آن‌گاه ماکروجلبک از طریق جابه‌جایی منتقل نخواهد شد.

جدول ۱۷-۳ گزینه‌های انتقال و آبشستگی

متغیر	مقدار	مقدار حاصل از مدل ماکروجلبک (سابق)	شرح
$U_{\max}$	-	NA	حد اکثر مقدار سرعتی که در آن آبشستگی آغاز می‌شود (متر بر ثانیه) برای جلبک غوطه‌ور
$f_{\text{scour}}$	-	NA	کسری از زیست‌توده‌ی خردشده‌ی ماکروجلبک غوطه‌ور در یک رویداد واحد

$T_{recovery}$	-	NA	زمان بازیابی (روز) پس از یک واقعه‌ی آبخستگی که در آن هیچ آبخستگی اضافی رخ نخواهد داد.
$f_{drag}$	-	NA	ضریب کشش برای ماکرو جلبک شناور (بخشی از انتقال فرارفت)

### ۹-۱۷- واکنش‌های ماکرو جلبک و فرآیند جنبشی

#### ۱-۹-۱۷- استوکیومتری زیست توده‌ی ماکرو جلبک

برای این زیرمدل، ماکرو جلبک به صورت زیست توده‌ی کل (وزن خشک) در واحد سطح بستر موجود نشان داده می‌شود. این مدل نیاز دارد که استوکیومتری به منظور محاسبه‌ی روابط با دیگر متغیرهای کیفیت و متغیرهای خروجی مدل به شکل زیر مشخص شود:

$$r_{xy} = \frac{gX}{gY} \quad (۱۶-۱۷)$$

برای رابطه‌ی بین وزن خشک (D)، کلروفیل، نیتروژن (N)، فسفر (P) و تولید اکسیژن ( $O_2$ ): ورودی کاربر برای موارد زیر مورد نیاز است:

جدول ۱۷-۴ ثابت‌ها برای استوکیومتری

متغیر	مقدار	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	شرح
ADC	-	2/5	نسبت ماکرو جلبک C:D (mg D/mg C)
ANC	-	0/18	نسبت ماکرو جلبک C:D (mg D/mg C)
APC	-	0/025	نسبت ماکرو جلبک C:D (mg D/mg C)
AChlC	-	0/025	نسبت ماکرو جلبک C:D (mg D/mg C)

ROC	-	2/69	نسبت ماکرو جلبک C:D ( mg D/mg ) (C)
-----	---	------	--

### ۱۷-۹-۲- زیست‌توده‌ی ماکرو جلبک ( $a_{MA}$ )

ماکرو جلبک،  $a_{MA}$  ( $g - dw m^{-2}$ ) به‌عنوان زیست‌توده‌ی کل در واحد سطح از سطح موجود ( $gD/m^2$ ) نشان داده شده‌است. زیست‌توده‌ی ماکرو جلبک به‌دلیل فتوسنتز افزایش می‌یابد و با تنفس و مرگ کاهش می‌یابد:

$$S_{MA} = (F_{GMA} - F_{RMA} - F_{DMA})A_{MA}f_{sub} \quad (17-17)$$

که در آن  $S_{MA}$  منبع/مخزن کل زیست‌توده‌ی ماکرو جلبک (گرم بر روز)،  $F_{GMA}$  نرخ فتوسنتز ( $g/m^2 - day$ )،  $F_{RMA}$  نرخ ازدست رفتن تنفس ( $g/m^2 - day$ )،  $F_{DMA}$  نرخ مرگ‌ومیر ( $g/m^2 - day$ ) و  $A_{MA}$  مساحت سطح (مترمربع) می‌باشد.  $f_{sub}$  یک عبارت محاسباتی واقعی نیست، اما در این‌جا برای انعکاس فرم‌های خاص شبیه‌سازی شده‌ی زیر مورد استفاده قرار می‌گیرد.

- ماکرو جلبک‌های شناور روی سطح؛ این فرم‌ها از نور موجود در سطح استفاده می‌کنند، بنابراین رشد محدود به بخش‌های سطحی نیز می‌شود.
- ماکرو جلبک‌های زیرسطحی شناور: این ماکرو جلبک‌ها می‌توانند در هر جایی از ستون آب که نور و موادمغذی در دسترس هستند، واقع شوند.
- ماکرو جلبک‌های غوطه‌ور برای فرم‌های غوطه‌ور؛ در این حالت ارتفاع بستر یا سایبان شبیه‌سازی نشده‌است، اما توسط کاربر مشخص شده‌است. با استفاده از این گزینه فرض بر این است که ماکرو جلبک در ارتفاع بالای تاج رخ نمی‌دهد. بنابراین، برای بخش‌هایی از مدل در ستون عمودی آب و در بالای سایبان مشخص، نرخ تغییر (منبع و مخزن) صفر در نظر گرفته می‌شود ( $f_{sub} = 0$ ). از آنجایی که WASP هیچ فرضی در مورد شکل یک قطعه ندارد، بنابراین برای کسری از مساحت کف هر قطعه که یک بستر برای رشد ماکرو جلبک شناور در دسترس می‌باشد، پارامتری ارائه شده‌است.
- جلبک‌های ماکروسکوپی: برای این جلبک‌ها، فرض بر این است که در کف یک قطعه رخ می‌دهند. از آنجایی که WASP هیچ فرضی در مورد شکل یک قطعه ندارد، بنابراین برای کسری از مساحت کف هر قطعه، پارامتری ارائه شده‌است که یک بستر برای رشد ماکرو جلبک کفزی در دسترس است.

چرخه‌ی کامل تولیدمثل جنسی و غیرجنسی برای ماکرو جلبک در نسخه‌ی 8 WASP شبیه‌سازی نشده‌است. تا حدی این الگوها را تقلید می‌کند و فرض می‌شود که برخی غلظت‌های جلبکی تحت تمام شرایط باقی می‌مانند و می‌توانند غلظت دانه را برای رشد آینده فراهم کنند. این غلظت توسط کاربر (MacAlg-seed) مشخص می‌شود و در صورتی که غلظت ماکرو جلبک ( $a_{MA}$ ) مشخص شود، مقدار این غلظت مجاز به پایین‌تر از حداقل میزان غلظت نیست.

$$a_{MA} \geq a_{MA,seed} \quad (17-18)$$

### ۱۷-۹-۳- فتوستنتز

همان‌طور که در مدل پیریفون (مارتین و همکاران ۲۰۰۶) دو گزینه برای میزان فتوستنتز وجود دارد،  $F_{GMA}$  (گزینه‌ی اول حداکثر میزان صفر مرتب‌شده با درجه‌ی حرارت می‌باشد که با محدودیت موادمغذی و نور کاهش می‌یابد:

$$F_{G,MA} = F_{G,MA,20} \varphi_{T,MA} \varphi_{N,MA} \varphi_{L,MA} \varphi_{Sal,MA} \quad (17-19)$$

به این صورت که در آن  $F_{G,MA,20}$  حداکثر نرخ فتوستنتز در دمای  $20^\circ C$  ( $\frac{gD}{m^2-day}$ )،  $\varphi_{T,MA}$  فاکتور اصلاح دمای فتوستنتز (بدون بعد)،  $\varphi_{N,MA}$  فاکتور کاهش موادمغذی جلبک‌های تحتانی (عدد بدون بعد بین ۰ و ۱) و  $\varphi_{L,MA}$  ضریب استهلاک نور جلبک تحتانی (عدد بدون بعد بین ۰ و ۱) و فاکتور کاهش اولویت شوری برای ماکرو جلبک دریایی (عدد بدون بعد بین ۰ و ۱) می‌باشند. گزینه‌ی دوم از ثابت نرخ تصحیح‌شده‌ی دمای مرتبه اول استفاده می‌کند که با محدودیت موادمغذی، نور و فضا کاهش می‌یابد:

$$F_{G,MA} = k_{G,MA,20} \varphi_{T,MA} \varphi_{N,MA} \varphi_{L,MA} \varphi_{Sal,MA} \varphi_{Sb,MA} a_{MA} \quad (17-20)$$

که در آن  $k_{G,MA,20}$  حداکثر ثابت نرخ فتوستنتز در  $20^\circ$  درجه‌ی سانتی‌گراد ( $day^{-1}$ )،  $\varphi_{Sb,MA}$  ضریب کاهش فضای جلبک تحتانی (عدد بدون بعد بین ۰ و ۱)، غلظت ماکرو جلبک ( $MA$ ) و سایر عبارات به صورت بالا تعریف شده‌اند.

تنوع قابل توجهی در منابع درمورد حداکثر نرخ رشد وجود دارد همان طور که انتظار می‌رود مجموعه‌ی متنوعی از موجودات زنده که ماکرو جلبک و گیاهان درشت را می‌سازند، ایجاد می‌کند. پیچیدگی بیش‌تر در منابع، ناشی از نرخ‌های متفاوت مشخص شده و معیارهای تمرکزی می‌باشد که مقایسه بین مطالعات فردی را دشوار می‌سازد. نرخ‌های نماینده در جدول ۵ ارائه شده‌اند.

جدول ۱۷-۵ ثابت‌های مدل برای رشد

شرح	منبع	فرم	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	مقدار	ثابت
گزینه‌ی رشد		NA		= ۰ مرتبه صفر، = ۱ مرتبه اول	Macro_GrowthOption
نرخ حداکثر رشد ( $day^{-1}$ )	ترانسکو و همکاران ۲۰۰۵	ماکرو جلبک‌های اولوا تالاب ونیز	۹	-۰/۴۵ ۰/۴	Macro_KGAF( $F_{G,MA,20}$ )

#### ۱۷-۹-۴- اثر دما

دو گزینه برای اصلاح حداکثر نرخ رشد با توجه به دما و براساس گزینه‌ی مشخص شده توسط کاربر (MacAlg \_ Temp \_ Opt) پیاده‌سازی شده‌است. گزینه‌ی اول یک مدل اصلاح‌شده‌ی آرنیوس است که برای کمی کردن اثر دما بر فتوسنتز جلبک استفاده می‌شود:

$$\varphi_{T.MA} = \Theta_{MA}^{T-20} \quad (۲۱-۱۷)$$



که در آن  $\Theta$  یک ضریب و دمای  $T$  (درجه سانتی‌گراد) است. فرمول زیر یک رابطه جایگزین (MacAlg \_ Temp \_ Opt =2) (سرکو و کوله، ۱۹۹۴) می‌باشد،

$$\varphi_{T.MA} = e^{-\kappa_1(T-T_{opt})^2} \quad T \leq T_{opt} \quad (۱۷-۲۲)$$

$$\varphi_{T.MA} = e^{-\kappa_2(T-T_{opt})^2} \quad T > T_{opt}$$

که در آن  $T_{opt}$  دمای بهینه و  $\kappa_1$  و  $\kappa_2$  پارامترهای شکل هستند (که شکل رابطه‌ی رشد با دما را به ترتیب زیر و بالای دمای بهینه تعیین می‌کنند).

جدول ۱۷-۶ ثابت‌های مدل مربوط به دما

شرح	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	منبع	مقدار	ثابت
گزینه‌ی دما، اگر = ۱ از فرمول تنا استفاده کنید. اگر = ۲ سپس از فرمول بهینه استفاده کنید			-	MacAlg_Temp_Opt
ضریب دما برای رشد ماکرو جلبک	۱/۰۷		-	Macro_TKGF
درجه حرارت بهینه برای رشد ماکرو جلبک	NA		-	MacAlg_Topt
پارامتر شکل برای دمای کمتر از حد مطلوب برای ماکرو جلبک	NA		-	MacAlg_KAPPA1
پارامتر شکل برای دمای بالاتر از حد مطلوب برای ماکرو جلبک	NA		-	MacAlg_KAPPA2

## ۱۷-۹-۵- اثر محدودیت غذایی

محدودیت غذایی نرخ فتوسنتز در ماکرو جلبک، همانند مدل پری فایتون به غلظت موادمغذی درون سلولی (جذب لوکس) وابسته است (مارتین و همکاران ۲۰۰۶).

این روش یک روش معمول برای محاسبه‌ی کاهش موادمغذی براساس یک فرمول است که در اصل توسط دروپ (۱۹۷۴) توسعه داده شد و به آن فرآیند جنبشی دروپ گفته می‌شود.

$$\varphi_{N,MA} = \min \left[ \left( 1 - \frac{q_{ON}}{q_N} \right), \left( 1 - \frac{q_{OP}}{q_P} \right) \right] \quad (17-23)$$

که در آن  $q_N$  و  $q_P$  به ترتیب سهم سلولی نیتروژن (mgN/gD) و فسفر (mgP/gD)،  $q_{ON}$  و  $q_{OP}$  نیز حداقل سهم سلولی نیتروژن (mgN/gD) و فسفر (mgP/gD) هستند. حداقل سهم سلول، سطح موادمغذی درون سلولی است که در آن رشد متوقف می‌شود. سهم سلول مغذی برای ماکرو جلبک، متغیرهای حالت محاسبه شده توسط WASP هستند.

جدول ۱۷-۷ ثابت‌های مربوط به موادمغذی

شرح	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	منبع	مقدار	ثابت
حداقل سهمیه‌ی سلول از نیتروژن داخلی برای رشد ماکرو جلبک (mgP/gDW)	۷/۲		-	Macro_CellQuotaMinN
حداقل سهمیه‌ی سلول از فسفر داخلی برای رشد ماکرو جلبک (mgN/gDW)	۱		-	Macro_CellQuotaMinP

## ۱۷-۹-۶- اثر محدودیت نور

نور در دسترس برای رشد ماکرو جلبک‌های شناور، نور در بالای بخش‌های ستون آب می‌باشد. برای شکل‌های دیگر، نور موجود در عمقی که در آن رشد می‌کنند، محاسبه می‌شود. نور موجود برای رشد گونه‌های گیاهی در WASP 8 براساس نور سطح در دسترس (PAR) می‌باشد و سپس با استفاده از قانون بیر-لامبرت، به صورت نمایی از طریق ستون آب کاهش می‌یابد و همچنین براساس ضریب کاهش نور ( $k_e m^{-1}$ )، که برای محاسبه‌ی نور در بالا و پایین هر بخش عمودی از ستون آب استفاده می‌شود، می‌باشد.

$$I = I_a \exp(k_e - z) \quad (۱۷-۲۴)$$

که در آن  $I_a$  شدت نور تابشی مشخص شده برای یک بخش آب سطحی در طول ساعات روز در زیر سطح، یا نور موجود در بالای بخش‌های آب زیر سطح بوده و  $Z$  عمق بخش (متر) می‌باشد. همان‌طور که در بخش زیر توضیح داده شد، ممکن است نور نشان‌دهنده‌ی یک میانگین روزانه بوده و یا شامل مقادیر آن در طول چرخه‌ی روزانه باشد.

ضریب کاهش نور ( $k_e$ ) برای هر بخش از ستون آب با استفاده از یک ورودی پایه (پارامتر مدل و تابع زمان،  $P, k_e$ ) محاسبه می‌شود که ممکن است تأثیر خودسایه‌اندازی فیتوپلانکتون در آن براساس غلظت کلروفیل محاسبه شده، ضریب معین شده توسط کاربر ( $M_{chl}$ ) و توان ( $chl, Exp$ ) به آن اضافه شود. متناوباً، ضریب کاهش براساس ضریب زمینه‌ی ورودی ( $b, k_e$ ) است که اثرات کاهش ناشی از DOC، جامدات معلق غیرآلی (ISS) و کلروفیل فیتوپلانکتون‌ها در آن براساس غلظت‌های محاسبه شده و ضرایب تعیین شده توسط کاربر، اضافه می‌شوند.

$$k_{e,1} = k_{e,p} + M_{CHL} C_{GHL}^{Exp,chl} \quad (۱۷-۲۵)$$

یا

$$k_{e,1} = k_{e,b} + k_{e,DOC} C_{DOC} + C_{ISS}^* C_{ISS} + M_{CHL} C_{GHL}^{Exp,chl}$$

علاوه بر خودسایه‌اندازی توسط فیتوپلانکتون‌ها، خودسایه‌اندازی توسط ماکروفیت‌ها و یا ماکرو جلبک‌های شناور یا غوطه‌ور نیز می‌تواند نور موجود برای رشد گیاه را تحت تأثیر قرار دهد؛ به عنوان مثال، کراوس جنسن و همکاران (۱۹۹۶) دریافتند که نور در بستر متراکم جلبکی به صورت نمایی کاهش

می‌یابد. و این که تابش به ۱۰٪ از سطح در عمق تقریباً ۴ سانتی‌متر به درون حصیرها کاهش می‌یابد. تأثیر ماکرو جلبک بر ضریب کاهش نور از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود:

$$K_{e,MacroAlga} = K_{e,MA} a_{MA} \frac{A}{V} \quad (۱۷-۲۶)$$

که در آن،  $K_{e,MA}$  یک ضریب خاموشی نور  $(-1) \text{ [m}^3 \text{ m}^{-1} \text{ (g-dw}^{-1})]$ ،  $a_{MA}$  غلظت ماکرو جلبک  $(\text{g-dw m}^{-2})$ ،  $A$  مساحت سطح (مترمربع) و حجم بخش  $V$  (مترمکعب) است. اگر ماکرو جلبک شناور وجود داشته‌باشد، ضریب کاهش نور محاسبه‌شده برای ماکرو جلبک (معادله‌ی ۲۶) به رابطه‌ی بالا (معادله‌ی ۲۵) برای محاسبه‌ی ضریب کاهش نور کل ( $k_e$ ) افزوده می‌شود.

$$k_{e,2} = k_{e,p} + M_{CHL} C_{GHL}^{Exp,chl} + K_{e,MA} a_{MA} \frac{A}{V} \quad (۱۷-۲۷)$$

یا

$$k_{e,2} = k_{e,b} + k_{e,DOC} C_{DOC} + C_{ISS}^* C_{ISS} + M_{CHL} C_{GHL}^{Exp,chl} + K_{e,MA} a_{MA} \frac{A}{V}$$

که در آن از زیرمجموعه‌های ( $k_{e,1}$  و  $k_{e,2}$ ) برای تمایز دو رابطه استفاده می‌شود. به‌طور مشابه، برای اثرات ماکرو جلبک زیر دریایی، (شکل ۱۷-۵)، نور موجود توسط ارتفاع تاج تحت تأثیر قرار می‌گیرد که برای این مدل به ارتفاع متوسط اشاره دارد. فرآیند رشد از پایین جریان آب (شکل ۱۷-۵) گسترش می‌یابد که شامل مقدار مشخص‌شده توسط کاربر (ثابت MacAlg-Bed\_H) می‌باشد. اگر سایبان کل سطح را پوشانده باشد، آن‌گاه ضریب کاهش نور کل، شامل تأثیر خودسایه‌اندازی، از معادله‌ی ۲۷ محاسبه می‌شود. با این حال، اگر سایبان تنها تا حدی به بخش گسترش یابد، آن‌گاه ضریب خاموشی نور وزنی محاسبه می‌شود؛ به‌عنوان مثال، نور در پایین بخش ( $I$ ) برای حضور یا نبود حضور ماکرو جلبک را می‌توان از نوری که به بالای بخش ( $I_0$ ) می‌رسد، از عمق ( $z$ ) و یا هر دو محاسبه نمود.

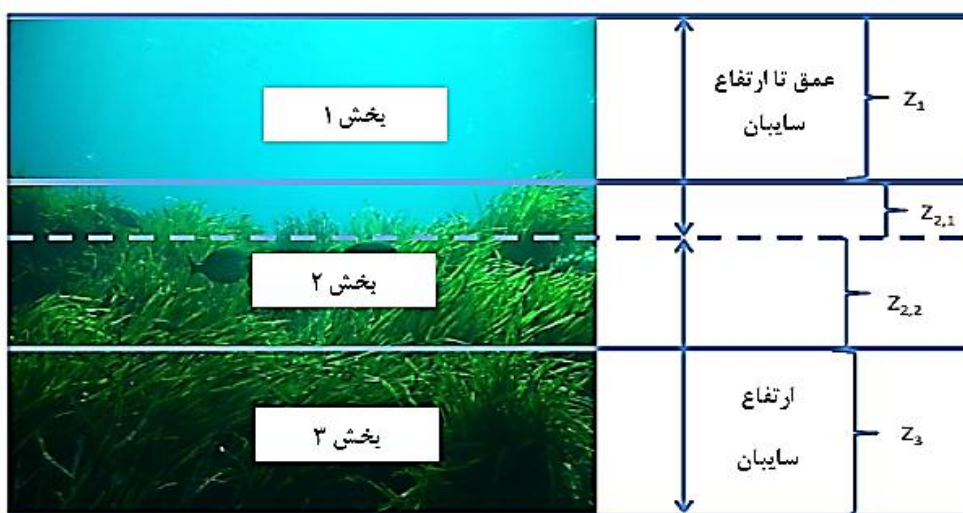
$$I = I_0 \exp(-k_{e,1}, z) \text{ یا } I = I_0 \exp(-k_{e,2}, z) \quad (۱۷-۲۸)$$

همان‌طور که برای بخش ۲ در شکل ۵ نشان داده شده‌است، برای حالتی که در آن سایبان از طریق بخش ستون آب گسترش نمی‌یابد، نور در قسمت پایین از این بخش محاسبه می‌شود.

$$I = I_0 \exp(-k_{e,1}, z_1) \exp(-k_{e,2}, z_2) \quad (۱۷-۲۹)$$

به‌طوری که کاهش نور کل را می‌توان از میانگین عمق-وزن این دو محاسبه نمود.

$$\begin{aligned}
 I &= I_0 \exp(-k_{e,2,1}, z_{2,1}) \exp(-k_{e,2,2}, z_{2,2}) & (30-17) \\
 &= I_0 \exp \left[ \left( \frac{z_{2,1} k_{e,2,1} + z_{2,2} k_{e,2,2}}{z_{2,1} + z_{2,2}} \right) (z_{2,1} \right. \\
 &\quad \left. + z_{2,2}) \right]
 \end{aligned}$$



شکل ۱۷-۵ تعریف تأثیر ارتفاع سایبان بر محاسبه نور

جدول ۱۷-۸ ثابت‌های نور

شرح	منبع	مقدار	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	ثابت
ضریب خودسایه ماکرو جلبک ( $m^3 m^{-1} g^{-1} dw^{-1}$ )		-	NA	MacAlg_Shade

ارتفاع بستر ماکروجلبک (متر، استفاده می‌شود اگر (MacAlg_SYS=2)		-	NA	MacAlg_Bed_H
--	--	---	----	--------------

### ۱۷-۹-۷- تأثیر نور بر ماکروجلبک

در بخش قبل، اثرات سایه‌دادن ماکروجلبک بر نور و تأثیرگذاری بر دیگر فتوتروف‌ها شرح داده شد. نور موجود برای رشد برای ماکروفیت‌ها محاسبه می‌شود:

- برای ماکروجلبک‌های سطحی (نوع ۱) نور در بالای یک قطعه از سطح،
- برای ماکروجلبک شناور از سطح نورسطح موجود به‌طور متوسط در طول ستون آب،  
براساس معادله‌ی ۲۷،
- برای ماکروجلبک‌های زیردریایی، از نور بالای سایبان (محاسبه‌شده از عمق کل آب و بستر مشخص یا ارتفاع سایبان و ضریب کاهش نور معادله‌ی ۲۵)،
- برای جلبک‌های کفزی، نوری که به پایین می‌رسد.

مدل ماکروجلبک نیز مشابه مدل فیتوپلانکتون WASP، چارچوب توسعه‌یافته توسط دی‌تورو (۱۹۷۱) و اسمیت (۱۹۸۰) را برای فرموله‌کردن تأثیر نور بر رشد ماکروجلبک که براساس آنالیز منحنی نور توسط استیل (۱۹۶۲) بسط داده شده‌است، دربر می‌گیرد. این رابطه‌ها هم برای شدت نور بیش از حد و هم برای کاهش نور در ستون آب محاسبه می‌شوند. بسته به این که کاربر وارد نور متوسط روزانه می‌شود یا مدل تغییرات در نور را محاسبه می‌کند (پارامترهای مدل و توابع زمانی) دو فرمول دیگر برای محاسبه‌ی تأثیر نور وجود دارد. در ابتدا، نور در طول عمق بخش و طول روز انتگرال گرفته می‌شود، که در آن  $f$  جناح روز است که نشان‌دهنده‌ی نور بوده و  $I$  ورودی یک تابع زمان برای مدل می‌باشد. برای گزینه‌ی نور روزانه، که شامل نور ورودی است و یا در طول روز محاسبه می‌شود، نور تنها در طول عمق میانگین‌گیری می‌شود.

گزینه‌ی نور متوسط روزانه؛

$$\varphi_{L,MA} = \frac{ef}{K_e D} \left[ \exp \left\{ -\frac{I_a}{I_s} \exp(-K_e D) \right\} - \exp \left( -\frac{I_a}{I_s} \right) \right] \quad (31-17)$$

تغییرات روزانه در نور؛

$$\varphi_{L,MA} = \frac{e}{K_e D} \left[ \exp \left\{ -\frac{I_a}{I_s} \exp(-K_e D) \right\} - \exp \left( -\frac{I_a}{I_s} \right) \right] \quad (32-17)$$

که:

$$2/718 = e$$

$I_a$  = متوسط شدت نور رویداد در ساعات تابش روز درست زیر سطح، یا نور روزانه dy/day

$I_s$  = شدت نور اشباع از گروه ماکرو جلبک، dy/day

$I$  = رویداد تابش خورشیدی، dy/day

$f$  = کسری از روز که شامل روشنایی روز است، بی واحد

$D$  = عمق ستون آب یا قطعه‌ی مدل، متر،

$K_e$  = ضریب کاهش کل نور،  $m^{-1}$ .

### اثر محدودیت مکانی

تراکم ماکرو جلبک با ظرفیت حمل آن‌ها و یا حداکثر جرم مخصوص، محدود می‌شود. محدودیت فضایی نرخ رشد مرتبه‌ی اول را می‌توان به صورت یک تابع لجستیک مدل کرد (ماددن و کمپ (۱۹۹۶):

$$\varphi_{S,MA} = 1 - \left( \frac{a_{MA}}{a_{MA,ma}} \right)^2 \quad (33-17)$$

که  $a_{MA,max}$  در آن نشان‌دهنده‌ی ظرفیت حمل ماکرو جلبک می‌باشد ( $gD/m^2$ ). توجه داشته‌باشید که این فرمول با مدل اصلی پری فایتون WASP (مارتین و همکاران، ۲۰۰۶) تفاوت دارد. که عبارت مربوط به آن مربع است.

جدول ۱۷-۹ ثابت‌های ظرفیت حمل

شرح	منبع	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	مقدار	ثابت
ظرفیت حمل ماکرو جلبک برای مدل مرتبه‌ی اول ( $gD/m^2$ ).		NA	-	MacroAlgMax

\* مدل جلبک بنتیکی با استفاده از رابطه‌های مختلف و نه مربع

## ۱۷-۹-۸- اثر شوری

اثرات شوری بر ماکرو جلبک‌ها می‌تواند شامل افزایش مرگ‌ومیر در اثر افزایش میزان شوری برای گونه‌های آب شیرین باشد، درحالی‌که معمولاً میزان شوری برای ارگانیزم‌های دریایی شرایط مطلوبی داشته و در مقادیر بالاتر و پایین‌تر، میزان رشد کاهش می‌یابد. به‌طور مشابه در مورد تأثیر دما، با استفاده از این روش می‌توان میزان شوری را محاسبه نمود.

$$\varphi_{Sal,MA} = e^{-\kappa_1(S-S_{opt})^2} \quad S \leq S_{opt} \quad (۱۷-۳۴)$$

$$\varphi_{Sal,MA} = e^{-\kappa_2(S-S_{opt})^2} \quad S > S_{opt}$$

که در آن S شوری،  $S_{opt}$  شوری بهینه و  $\kappa_1$  و  $\kappa_2$  پارامترهای فرم هستند (که شکل رابطه‌ی رشد با شوری را در زیر و بالای شوری بهینه، تعیین می‌کنند).

جدول ۱۷-۱۰ ثابت‌های اثر شوری

شرح	منبع	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	مقدار	ثابت
اگر $0=$ ، در نظر گرفته نشده‌است، اگر $1=$ مدل بهینه آب شور، 2 آب شیرین		NA	-	MacAlg_Salinity_Tol
شوری که در آن میزان مرگ‌ومیر جلبک نصف حداکثر است ارزش برای گونه‌های آب شیرین		NA	-	MacAlg_SSat
شوری بهینه برای رشد ماکرو جلبک‌های دریایی (ppt)		NA	-	MacAlg_Sopt



حداقل شوری برای رشد ماکرو جلبک‌های دریایی (ppt)		NA	-	MacAlg_Smin
ماکزیمم شوری برای رشد ماکرو جلبک‌های دریایی (ppt)		NA	-	MacAlg_SMax

### ۱۷-۹-۸-۱- تلفات

زیست‌توده‌ی ماکرو جلبک با تنفس و مرگ کاهش می‌یابد.

### ۱۷-۹-۸-۲- تنفس

تنفس جلبک تحتانی با استفاده از فرآیند جنبشی اصلاح دمای مرتبه‌ی اول نشان داده می‌شود:

$$\text{MacroAlgResp} = k_{r,MA}(T)a_{MA} \quad (۱۷-۳۵)$$

که،  $(T)a_{MA}$  نرخ تنفس جلبک کف وابسته به دما می‌باشد.

### ۱۷-۹-۸-۳- مرگ

مرگ جلبک کف با استفاده از فرآیند جنبشی مرتبه‌ی اول تصحیح دما نشان داده می‌شود. علاوه بر

این، ممکن است به دلیل تأثیر شوری، نرخ مرگ و میر برای گونه‌های آب شیرین افزایش یابد.

$$\text{MacroAlgDeath} \quad (۱۷-۳۶)$$

$$= \left( k_{d,MA}(T) + k_{d,sal,MA} \left( \frac{S}{S + K_S} \right) \right) a_{MA} + f_{scour} a_{MA}$$

که در آن  $k_{d,MA}(T)$  نرخ مرگ ماکرو جلبک‌های وابسته به دما،  $(k_{d,sal,MA}, d)$  نرخ مرگ

ماکرو جلبک‌های وابسته به شوری برای گونه‌های آب شیرین،  $S$  شوری (گرم بر مترمکعب) و  $K_S$  شوری

(گرم بر مترمکعب) می‌باشد که در آن نرخ مرگ و میر جلبک برابر با نصف مقدار حداکثر برای گونه‌های

آب شیرین است. یک سهم اضافی در مرگ آبستگي زمانی اتفاق می‌افتد که سرعت از یک آستانه‌ی

مشخص که با استفاده از معادله‌ی ۱۴ محاسبه شده است، تجاوز کند.

$$\text{MacroAlgGrazing} = k_{GR,MA} a_{MA} \quad (۱۷-۳۷)$$

جدول ۱۱-۱۷ ثابت‌های مرتبط با مرگ‌ومیر و دفع

شرح	منبع	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	مقدار	ثابت
ثابت نرخ تنفس ماکرو جلبک (1/day)		۰/۳۱	-	Macro_KREAF
ضریب دما برای تنفس ماکرو جلبک		۱/۰۷	-	Macro_TKREAF
ثابت نرخ دفع مواد مغذی داخلی ماکرو جلبک (1/day)		۰/۰۹	-	kMacroAlgExcr
ضریب دما برای دفع مغذی ماکرو جلبک		۱/۰۷	-	TMacroAlgExcr
ثابت نرخ مرگ ماکرو جلبک (1/day)		۰/۰۱	-	Macro_KDEAF
ضریب دما برای مرگ ماکرو جلبک		۱/۰۷	-	Macro_TKEAF
ثابت نرخ افزایش شوری مرگ‌ومیر ماکرو جلبک (1/day)		NA	-	Macro_Algal_SalTox
نرخ تغذیه‌ی ماکرو جلبک (1/day)		NA	-	MacAlg_Graze
اگر=0 در نظر گرفته نشده‌است، اگر=		NA	-	MacAlg_Salinity_Tol

1 مدل بهینه‌ی آب شور، 2 آب شیرین				
شوری که در آن میزان مرگ‌ومیر جلبک نصف حداکثر مقدار برای گونه‌های آب شیرین است.		NA	-	MacAlg_SSat

### ۱۷-۱۰- مواد مغذی سلول ماکرو جلبک ( $q_P, q_N$ )

غلظت مواد مغذی درون سلولی، یا سهم سلول؛ نسبت مواد مغذی درون سلولی به وزن خشک ماکرو جلبک را نشان می‌دهد:

$$q_N = 10^3 \frac{IN_{MA}}{a_{MA}} \quad (38-17)$$

$$q_P = 10^3 \frac{IP_{MA}}{a_{MA}}$$

که در آن  $IN_{MA}$  غلظت نیتروژن درون سلولی ( $\frac{gN}{m^2}$ ) و  $IP_{MA}$  غلظت فسفر درون سلولی ( $\frac{gP}{m^2}$ ) و  $10^3$  یک فاکتور تبدیل واحد (mg/g) می‌باشد.

شرایط منبع/مخزن کل برای نیتروژن و فسفر درون سلولی در سلول‌های ماکرو جلبکی (g/day) با جذب، دفع و مرگ کنترل می‌شوند:

$$S_{MA,N} = (F_{UN,MA} - F_{EN,MA} - F_{DN,MA})A_{MA} \quad (39-17)$$

$$S_{MA,P} = (F_{UP,MA} - F_{EP,MA} - F_{DP,MA})A_{MA}$$

که در آن  $F_{UP,MA}$  و  $F_{UN,MA}$  میزان جذب نیتروژن و فسفر توسط ماکرو جلبک ( $gN/m^2 - day$  و  $gP/m^2 - day$ )،  $F_{EP,MA}$  و  $F_{EN,MA}$  میزان دفع ماکرو جلبک ( $gN/m^2 - day$  و  $gP/m^2 - day$ )، و  $F_{DN,MA}$  و  $F_{DP,MA}$  میزان تلفات از مرگ ماکرو جلبک ( $gN/m^2 - day$  و  $gP/m^2 - day$ ) را نشان می‌دهند.

میزان جذب N و P به مواد مغذی درون سلولی و بیرونی بستگی دارد (راهی، ۱۹۷۳).

$$F_{UN,MA} = 10^{-3} \left( \frac{NH_4 + NO_3}{K_{SN,MA} + NH_4 + NO_3} \right) \left( \frac{K_{qN}}{K_{qN}(q_N - q_{ON})} \right) a_{MA} \quad (۴۰-۱۷)$$

$$F_{UP,MA} = 10^{-3} \left( \frac{PO_4}{K_{SP,MA} + PO_4} \right) \left( \frac{K_{qP}}{K_{qP}(q_P - q_{OP})} \right) a_{MA}$$

و  $(mgP / gMA - d)$ ،  $K_{SP,MA}$  و  $K_{SN,MA}$  ثابت‌های نیمه‌اشباع برای نیتروژن و فسفر خارجی و  $(mgN/L)$  و  $(mgP/L)$ ،  $K_{qN}$  و  $K_{qP}$  ثابت‌های نیمه‌اشباع برای نیتروژن و فسفر درون سلولی  $(mgN/gD)$  و  $(mgP/gd)$ ، و  $10^{-3}$  یک فاکتور تبدیل واحد می‌باشد  $(g/mg)$ . توجه داشته باشید، هنگامی که غلظت مواد مغذی خارجی به ثابت‌های نیمه‌اشباع کاهش می‌یابد یا غلظت اضافی مواد مغذی داخلی به ثابت‌های نیمه‌اشباع درونی افزایش می‌یابد، سرعت جذب مواد مغذی به نصف مقادیر حداکثر خود می‌رسد. نرخ‌های داخلی دفع N و P با استفاده از فرآیند جنبشی تصحیح‌شده‌ی دمای درجه‌ی اول نشان داده می‌شوند:

$$F_{EN,MA} = K_{E,MA,20} \Theta_{E,MA}^{T-20} q_N a_{ma} 10^{-3} \quad (۴۱-۱۷)$$

$$F_{EP,MA} = K_{E,MA,20} \Theta_{E,MA}^{T-20} q_P a_{ma} 10^{-3}$$

که در آن  $K_{E,MA,20}$  ثابت نرخ ترشح سلول جلبک در دمای ۲۰ درجه‌ی سانتی‌گراد  $(day^{-1})$  و  $\Theta_{E,MA}^{T-20}$  ضریب دمای دفع جلبک در دمای ۲۰ درجه سانتی‌گراد می‌باشد. نرخ داخلی N و P ناشی از مرگ ماکروجلبک، نتیجه‌ی نرخ مرگ جلبک و سهم مواد مغذی سلول می‌باشد:

$$F_{DN,MA} = F_{DN,MA} q_N 10^{-3} \quad (۴۲-۱۷)$$

$$F_{DP,MA} = F_{DP,MA} q_N 10^{-3}$$

که در آن  $10^{-3}$  یک ضریب تبدیل واحد  $(g/mg)$  است. در بخش‌های بعدی، ترم  $R_S$  نرخ حجمی  $(g/m^3 - day)$  به جای ترم نرخ ماکروجلبک متناظر  $F_S$   $(g/m^3 - day)$  استفاده می‌شوند.

$$R_s = F_s \left( \frac{A_{MA}}{V} \right) \quad (۴۳-۱۷)$$

که در آن "s" اشتراک مناسب را نشان می‌دهد و  $A_{MA}$  نشان‌دهنده‌ی مساحت سطح فعال (مترمربع) و  $V$  حجم قطعه (مترمکعب) می‌باشد.

جدول ۱۷-۱۲ ثابت‌های مرتبط با دفع مواد مغذی داخلی

شرح	منبع	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	مقدار	ثابت
ثابت نرخ دفع مواد مغذی داخلی برای ماکرو جلبک ( $1/day$ )		۰/۰۹	-	kMacroAlgExcr
ضریب دما برای دفع مغذی ماکرو جلبک		۱/۰۷	-	TMacroAlgExcr
حداکثر نرخ جذب نیتروژن برای ماکرو جلبک ( $mgN/gDW-day$ )		۷۲۰	-	kMacroAlgUNmax
حداکثر نرخ جذب فسفر برای ماکرو جلبک ( $mgP/gDW-day$ )		۵۰	-	kMacroAlgUPmax
ثابت جذب نیمه‌اشباع نیتروژن درون سلولی برای ماکرو جلبک ( $mgN/gDW$ )		۹	-	Macro_KQN
ثابت جذب نیمه‌اشباع فسفر درون سلولی برای ماکرو جلبک ( $mgP/gDW$ )		۱/۳	-	Macro_KQP

## ۱۷-۱۰-۱- مواد مغذی معدنی خارجی

مواد مغذی معدنی خارجی عبارتند از نیتروژن آمونیاک، ( $mgN/L$ ،  $NH_4$ )، نیتروژن نیترات، ( $mgN/L$ ،  $NO_3$ ) و ارتوفسفات، ( $mgP/L$ ،  $PO_4$ )، ماکرو جلبک به واسطه‌ی جذب و دفع سلولی بر این مواد مغذی تأثیر می‌گذارد. عبارت منبع/مخزن در معادلات مواد مغذی غیر آلی شامل عبارات زیر است:

$$S_{NH_4,MA} = [(R_{EN,MA} + R_{DN,MA})(1 - f_{ON,MA}) - R_{UN,MA}P_{NH_4,MA}]V \quad (۴۴-۱۷)$$

$$S_{NO_3,MA} = [R_{UN,MA}(1 - P_{NH_4,MA})]V$$

$$S_{PO_4,MA} = [(R_{EP,MA} + R_{DP,MA})(1 - f_{OP,MA}) - R_{UP,MA}]V$$

که در آن  $f_{OP,MA}$  و  $f_{ON,MA}$  اجزای مواد مغذی سلول هستند (عدد بدون بعد بین ۰ و ۱) و  $P_{NH_4,MA}$  فاکتور اولویت آمونیاک ماکرو جلبک می‌باشد (عدد بدون بعد بین ۰ و ۱). اجزای آلی مواد مغذی سلول به صورت نسبت‌های بخش مغذی استوکیومتری به بخش مغذی کل سلول محاسبه می‌شوند:

$$f_{ON,MA} = \frac{(ANC/ADC)}{q_N 10^{-3}} \quad (۴۵-۱۷)$$

$$f_{OP,MA} = \frac{(APC/ADC)}{q_P 10^{-3}}$$

که ANC، APC و ADC، نیتروژن استوکیومتری به کربن، فسفر به کربن و نسبت‌های وزن خشک به کربن ( $gP/gC$ ،  $gN/gC$ ) و ( $gD/gC$ ) است.  $q_P$  و  $q_N$  سهم سلول نیتروژن و فسفر کل سلول ( $mgP/gD$  و  $mgN/gD$ )، و  $10^{-3}$  واحد ضریب تبدیل ( $mg/g$ ) می‌باشد هر زمان که بخش‌های مواد مغذی سلول محاسبه شده، پایین‌تر از بخش‌های مواد مغذی استوکیومتری مشخص شده قرار می‌گیرند، بخش‌های آلی مواد مغذی به ۰/۱ تنظیم می‌شوند.

فاکتور اولویت آمونیاک نشان‌دهنده‌ی اولویت ماکرو جلبک به عنوان منبع نیتروژن برای آمونیم می‌باشد.  $P_{NH_4b}$  از غلظت‌های  $NH_4$  و  $NO_3$  محاسبه می‌شود.

$$P_{NH_3} = \frac{NH_4^*NO_3}{(K_{hnx,MA} + NH_4)^*(K_{hnx,MA} + NO_3)} + \frac{NH_4^*K_{hnx,MA}}{(K_{hnx,MA} + NH_4)^*(K_{hnx,MA} + NO_3)} \quad (۴۶-۱۷)$$

که در آن  $K_{hnx,MA}$  ضریب اولویت جلبک کف برای آمونیوم (mgN/L) می‌باشد.

جدول ۱۷-۱۳ اولویت آمونیاک و ثابت‌های بازیافت

شرح	منبع	مقدار حاصل از مدل ماکرو جلبک (سابق)	مقدار	ثابت
اولویت آمونیاک ماکرو جلبک (mg N/L)		۰/۲۵	-	Macro_KHNXF
کسری از ماکرو جلبک بازیافت شده به N آلی		۰	-	Macro_FON_excr
کسری از ماکرو جلبک بازیافت شده به P آلی			-	Macro_FOP_excr

### ۱۷-۱۰-۲- ماده‌ی آلی خارجی

ماده‌ی آلی خارجی شامل ذرات و اشکال حل شده می‌باشد که ماده‌ی آلی ذرات، حاصل از مرگ جلبک بوده و با انحلال باکتری‌ها به ماده‌ی آلی حل شده تبدیل می‌شود. ماده‌ی آلی حل نشده بیش‌تر به شکل‌های غیرآلی معدنی می‌شود.

WASP 7 کربن، نیتروژن و فسفر غیرپیوندی (mgC/L, mgN/L و mgP/L)، نیتروژن آلی محلول (mgN/L) و فسفر آلی حل شده (mgP/L) را شبیه‌سازی می‌کند. WASP 7 هم‌چنین سه شکل کربن آلی محلول را نیز بر حسب معادل‌های اکسیژن آن‌ها شبیه‌سازی می‌کند (یعنی  $CBOD_i$  در  $\frac{mgO_2}{L}$ ). این متغیرهای کربنی تنها با انحلال غیرجنسی شکل می‌گیرند و مستقیماً به دفع یا مرگ سلول جلبکی مرتبط نیستند:

$$S_{mc,MA} = R_{D,MA} ADC^{-1V} \quad (۴۷-۱۷)$$

$$S_{mN,MA} = R_{DN,MA} f_{ON} V$$

$$S_{mP,MA} = R_{DP,MA} f_{OP} V$$

جلبک‌های کف برکه‌ها بر روی N آلی حل شده و P با دفع سلولی تأثیر می‌گذارند:

$$S_{DON,MA} = R_{EN,MA} f_{ON,MA} V \quad (۴۸-۱۷)$$

$$S_{DOP,MA} = R_{EP,MA} f_{OP,MA} V$$

### ۱۷-۱۰-۳- اکسیژن محلول

جلبک‌های کف به‌طور مستقیم از طریق فتوسنتز و تنفس؛ و به‌طور غیرمستقیم از طریق تولید کربن آلی فرسایشی که پس از آن، حل شده و اکسید می‌شود، بر سطح اکسیژن حل شده تأثیر می‌گذارند. اثرات مستقیم با معادله‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$S_{O2,MA} = \left( R_{G,MA} \frac{ROC}{ADC} + R_{G,MA} \frac{RNC}{ADC} (1 - PNH_{MA}^4) \left( \frac{3}{2} * \frac{32}{14} \right) - R_{R,MA} \frac{ROC}{ADC} \right) V \quad (۴۹-۱۷)$$

عبارت اول نشان‌دهنده‌ی میزان تولید اکسیژن در طول فتوسنتز می‌باشد. عبارت سوم، مصرف اکسیژن همراه با تنفس را نشان می‌دهد و عبارت دوم نشان‌دهنده‌ی تکامل اکسیژن با کاهش نیترات به آمونیوم است، که براساس واکنش زیر است:



که در آن با کاهش ۲ مول نیترات، ۳ مول اکسیژن تولید می‌شود. عبارت ۳۲/۱۴ این نسبت مولی را به نسبت جرمی  $gO_2/gN$  پوشش می‌دهد.

جدول ۱۷-۱۴ خلاصه ثابت‌های جنبشی ماکرو جلبک (ادامه)

شرح	متغیر
اگر ۱= فرم شناور و منتقل شده (QBY, RBY = 0)، اگر ۲= فرم غوطه‌ور، منتقل نشده (QBY, RBY = 1) اگر ۴= کفزی و منتقل نشده و برای مقایسه با روند جلبک کفزی استفاده می‌شود.	MacAlg_OPT



نسبت ماکرو جلبک C:D (mg D/mg C)	Macro_ADC
نسبت ماکرو جلبک C:N (mg N/mg C)	Macro_ANC
نسبت ماکرو جلبک C:P (mg P/mg C)	Macro_APC
نسبت ماکرو جلبک C:Chl a (mgChl a /mg C)	Macro_AChlC
ماکرو جلبک $O_2:C$ ( $mgO_2/mgC$ )	Macro_ROC
حداکثر سرعت قابل تحمل ( $U_{max}$ )، یا سرعت آستانه برای آبشستگی ( $m/s$ )، گونه‌های زیر آب	Macro_Umax
کسری از ماکرو جلبک آبشسته شده که $U > U_{max}$ ، گونه‌های زیر آب	Macro_fscour
ضریب کاهش برای جذب در اثر کشش (گونه‌های شناور)	Macro_fdrag
مدل رشد ماکرو جلبک، $0 =$ مرتبه‌ی صفر؛ $1 =$ مرتبه‌ی اول	Macro_GrowthOption
حداکثر نرخ رشد ماکرو جلبک ( $gD/m^2$ -day, 1/day)	Macro_KGAF
اگر $1 =$ از فرمول تتا استفاده کنید = اگر $2 =$ از فرمول بهینه استفاده کنید	MacAlg_Temp_Opt
ضریب دما برای رشد ماکرو جلبک	Macro_TKGAF
درجه‌ی حرارت بهینه برای رشد ماکرو جلبک ( $\theta C$ )	MacAlg_Topt
پارامتر شکل برای دمای پایین بهینه برای ماکرو جلبک	MacAlg_KAPPA1
پارامتر شکل برای دمای بالای بهینه برای ماکرو جلبک	MacAlg_KAPPA2
ظرفیت حمل ماکرو جلبک برای مدل مرتبه‌ی اول ( $gD/m^2$ )	MacroAlgMax
ثابت نرخ تنفس ماکرو جلبک (1/day)	Macro_KREAF
ضریب دما برای تنفس ماکرو جلبک	Macro_TKREAF
ثابت نرخ دفع موادمغذی درونی برای ماکرو جلبک	kMacroAlgExcr
ضریب دما برای دفع موادمغذی ماکرو جلبک	TMacroAlgExcr
ثابت نرخ مرگ‌ومیر ماکرو جلبک (1/day)	Macro_KDEAF
ضریب دما برای مرگ‌ومیر ماکرو جلبک	Macro_TKEAF
اگر $0 =$ در نظر گرفته نشده است، اگر $1 =$ مدل بهینه برای آب شور، اگر $2 =$ برای آب شیرین	MacAlg_Salinity_Tol

شوری که در آن میزان مرگ‌ومیر جلبک نصف حداکثر مقدار برای گونه‌های آب شیرین	MacAlg_SSat
شوری بهینه برای رشد ماکروجلبک دریایی (ppt)	MacAlg_Sopt
حداقل شوری بهینه برای رشد ماکروجلبک دریایی (ppt)	MacAlg_Smin
حداکثر شوری بهینه برای رشد ماکروجلبک دریایی (ppt)	MacAlg_SMax

جدول ۱۷-۱۵ خلاصه ثابت‌های جنبشی ماکروجلبک (ادامه)

شرح	متغیر
ثابت جذب نیمه‌اشباع ماکروجلبک برای نیتروژن خارج سلولی (mg N/L)	Macro_KSNF
ثابت جذب نیمه‌اشباع ماکروجلبک برای فسفر خارج سلولی (mg P/L)	Macro_KSPF
ثابت نور برای رشد ماکروجلبک (langleys/day)	Macro_SATF
اولویت آمونیاک ماکروجلبک (mg N/L)	Macro_KHNXF
حداقل سهم سلولی نیتروژن داخلی برای رشد ماکروجلبک (mgN/gDW)	Macro_CellQuotaMinN
حداقل سهم سلولی فسفر داخلی برای رشد ماکروجلبک (mgP/gDW)	Macro_CellQuotaMinP
حداکثر نرخ جذب نیتروژن برای ماکروجلبک‌ها (mgN/gDW-) (day)	kMacroAlgUNmax
حداکثر نرخ جذب فسفر برای ماکروجلبک‌ها (mgP/gDW-) (day)	kMacroAlgUPmax
ثابت جذب نیمه‌اشباع درون سلولی نیتروژن برای ماکروجلبک (mgN/gDW)	Macro_KQN
ثابت جذب نیمه‌اشباع درون سلولی فسفر برای ماکروجلبک (mgP/gDW)	Macro_KQP
کسری از ماکروجلبک‌های بازیافت شده به آلی N	Macro_FON_excr
کسری از ماکروجلبک‌های بازیافت شده به آلی P	Macro_FOP_excr

بذر ماکرو جلبک با حداقل غلظت ( $gD/m^2$ )	MacAlg_Seed
نرخ تغذیه برای ماکرو جلبک	MacAlg_Graze
تنش برشی بحرانی تفکیک	MacAlg_Shear
ضریب سایبان ماکرو جلبک ( $m^3 m^{-1} g - dw^{-1}$ )	MacAlg_Shade
ارتفاع بستر ماکرو جلبک (متر، در صورت استفاده از $MacAlg\_SYS = 2$ )، گونه‌های زیرآب	MacAlg_Bed_H

### ۱۷-۱۱- خروجی ماکرو جلبک

#### ۱۷-۱۱-۱- متغیرها و ضرایب خروجی جلبک چندگانه (نه شامل ماکرو جلبک)

#### WASP 8

خروجی مدل چندجلبکی WASP شامل انواع مقادیر خروجی نه تنها برای غلظت پیش‌بینی شده‌ی متغیرهای حالت مدل، بلکه مجموعه‌ای از مقادیر مشتق‌شده‌ی مفید در تفسیر پیش‌بینی‌های مدل و استفاده از آن پیش‌بینی‌ها در مدیریت محیطی است. خروجی چندجلبکی به خروجی برای ماکرو جلبک‌ها اضافه شد. خروجی دقیق مدل، از گزینه‌های انتخابی کاربر بوده و این خروجی شامل یک فایل داده‌ی جفتی مدل (BMD) می‌باشد که می‌تواند پس‌پردازش شود و یا از نوع فایل CSV برای وارد کردن به اکسل باشد. در حال حاضر ۱۳۹ مقدار خروجی وجود دارد که در جداول زیر فهرست شده‌اند. هر خروجی برای هر بخش مدل در یک فراوانی (فاصله چاپ) مشخص شده توسط کاربر مشخص می‌شود.

جدول ۱۷-۱۶ مقادیر خروجی مدل چند جلبکی WASP 8 (ادامه)

واحد	نام
متر مکعب	حجم
$m^3 / sec$	جریان ورودی قطعه
$m^3 / sec$	جریان خروجی قطعه
$m^3 / sec$	جریان فرارفت
$m^3 / sec$	جریان پراکنده
days	زمان سکونت
meters	عمق قطعه
c	دمای آب

m	عرض قطعه
m/sec	سرعت آب
days	گام زمانی ماکزیمم
days	استفاده از گام زمانی محاسبه شده
mg/L	مواد جامد محلول کل
PSU	شوری
kg/L	جرم مخصوص آب
mg/L	نیتروژن آمونیاک
mg/l	آمونیاک یونیزه
g/m <sup>2</sup> -day	شار نیتروژن کفزی
g/m <sup>2</sup>	شار ته‌نشینی آمونیاک
mg/L	نیتروژن نیترات
mg/L	نیتروژن غیرآلی محلول
mg/L	نیتروژن غیرآلی کل
mg/L	نیتروژن آلی محلول
mg/L	ذرات آلی نیتروژن
mg/L	نیتروژن آلی کل
g/m <sup>2</sup>	شار ته‌نشینی PON
mg/L	نیتروژن کل
mg/L	فسفر غیرآلی محلول
g/m <sup>2</sup>	شار ته‌نشینی فسفر غیرآلی
g/m <sup>2</sup> -day	شار فسفر کفزی
mg/L	فسفر غیرآلی کل
mg/L	فسفر آلی محلول
mg/L	ذرات فسفر آلی
mg/L	فسفر آلی کل
mg/L	فسفر کل
g/m <sup>2</sup>	شار ته‌نشینی POP

mg/L	سیلیس غیرآلی محلول
g/m <sup>2</sup>	شار سیلیس غیرآلی
mg/L	سیلیس غیرآلی کل
mg/L	سیلیس آلی محلول
mg/L	ذرات سیلیس آلی
g/m <sup>2</sup>	شار ته‌نشینی POSi
mg/L	سیلیس کل
mg/L	CBOD (نهایی)
per day	نرخ فروپاشی CBOD
mg/L	کل CBOD
mg/L	ذرات آلی کربن
mg/L	کربن آلی محلول
g/m <sup>2</sup>	شار ته‌نشینی POC
mg/L	اکسیژن محلول (DO)
mg/L	میانگین اکسیژن محلول روزانه
mg/L	حداقل اکسیژن محلول روزانه
mg/L	حداکثر اکسیژن محلول روزانه
mg/L	اکسیژن محلول اشباع (Conc)
mg/L	کمبود اکسیژن محلول
%	درصد اشباع اکسیژن محلول
per day	ثابت نرخ هوادهی مجدد
per day	ثابت نرخ هوادهی مجدد باد
per day	ثابت نرخ هوادهی مجدد هیدرولیک
g/m <sup>2</sup> -day	تقاضای اکسیژن رسوب
ug/L	کلروفیل a فیتوپلانکتون کل
mgDW/L	زیست‌توده‌ی فیتوپلانکتون کل
mg/mg	نسبت کل فیتوپلانکتون C به Chla
mg/L	کربن فیتوپلانکتون

ug/L	کلروفیل a فیتوپلانکتون
per day	نرخ رشد فیتوپلانکتون
per day	نرخ مرگ فیتوپلانکتون
Ly/day	شدت نور فیتوپلانکتون Sat
(۰-۱)	محدودیت رشد نور فیتوپلانکتون
(۰-۱)	کاهش رشد فیتوپلانکتون مواد مغذی
(۰-۱)	کاهش رشد فیتوپلانکتون نیتروژن
(۰-۱)	کاهش رشد فیتوپلانکتون فسفر
(۰-۱)	کاهش رشد فیتوپلانکتون سیلیس
1/day	نرخ رشد خالص فیتوپلانکتون
g/m <sup>2</sup>	شار ته‌نشینی فیتوپلانکتون
mgA/ m <sup>2</sup>	کلروفیل جلبک کف
mgN/mgA	سلول جلبک Chl:N
mgP/mgA	سلول جلبک Chl :P
1/day	ثابت نرخ رشد جلبک کف
1/day	ثابت نرخ مرگ + جلبک کف
1/day	ثابت نرخ خالص رشد جلبک کف
mgN/gDW	سهم نیتروژن سلولی جلبک کف
mgP/gDW	سهم فسفر سلولی جلبک کف
gDW/m <sup>2</sup>	زیست‌توده‌ی جلبک کف
(۰-۱)	کاهش نور جلبک کف
(۰-۱)	کاهش مواد غذایی جلبک کف
gDW/ m <sup>2</sup>	غلظت ماکرو جلبک در واحد سطح، وزن خشک
gDW/ m <sup>3</sup>	غلظت ماکرو جلبک در هر واحد حجم، وزن خشک
gChl/ m <sup>3</sup>	غلظت کرو فیل ماکرو جلبک، ug/L
gN/m <sup>2</sup>	غلظت نیتروژن درون سلولی ماکرو جلبک
gP/m <sup>2</sup>	غلظت فسفر درون سلولی ماکرو جلبک
gDW/m <sup>2</sup> -day	نرخ رشد ماکرو جلبک

NA	کسر نیتروژن داخلی ماکرو جلبک
NA	کسر فسفر داخلی ماکرو جلبک
gDW/m <sup>3</sup> -day	نرخ مرگ ماکرو جلبک
gN/m <sup>3</sup> -day	نیتروژن درون سلولی بر پایه‌ی نرخ مرگ و میر ماکرو جلبک
gP/m <sup>3</sup> -day	فسفر درون سلولی بر پایه‌ی نرخ مرگ و میر ماکرو جلبک
gN/m <sup>3</sup> -day	نرخ دفع نیتروژن ماکرو جلبک
gP/m <sup>3</sup> -day	نرخ دفع فسفر ماکرو جلبک
gDW/m <sup>3</sup> -day	نرخ رشد ماکرو جلبک
gC/m <sup>3</sup> -day	نرخ رشد ماکرو جلبک
gDW/m <sup>3</sup> -day	نرخ تنفس ماکرو جلبک
gC/m <sup>3</sup> -day	نرخ تنفس ماکرو جلبک
gN/m <sup>3</sup> -day	جذب ماکرو جلبک از N غیرآلی خارجی به عنوان آمونیاک
gN/m <sup>3</sup> -day	جذب ماکرو جلبک از N غیرآلی خارجی به عنوان نیترات
gP/m <sup>3</sup> -day	جذب ماکرو جلبک از فسفر معدنی خارجی
mg/L	کربن غیرآلی کل
mol/L	pH
CaCo <sub>3</sub> mg/L	قلیائی
mol/kg	pH (مقیاس انتخاب شده)
m/day	سرعت تعلیق جامد
cm/yr	سرعت دفن
gDW/m <sup>3</sup> -day	نرخ تولید جامدات بیوتیک
g/m <sup>2</sup>	شار ته‌نشینی جامدات
mg/L	مواد جامد
mg/L	سنگ
g/m <sup>2</sup>	شار ته‌نشینی فرسایشی کل
mg/L	جامدات کل
per day	ثابت نرخ انحلال جامدات بیوتیک
mg/L	ذرات ماده معدنی

$N/m^2$	تنش برشی کف
$1/m$	انقراض نور محاسبه شده
$1/m$	Ke زمينه
$1/m$	Ke سایه جلبک
$1/m$	Ke مواد جامد
$1/m$	Ke DOC
$[W/m^2]$	نور کل
$[W/m^2]$	نور قطعه‌ی بالا
$[W/m^2]$	نور قطعه‌ی کف
m	Ke عمق متوسط
Fraction	Ke نور کل در کف
$[W/m^2]$	نور ماوراء بنفش در بالای قطعه
$[W/m^2]$	نور PAR در قسمت بالای قطعه $[W/m^2]$
$[W/m^2]$	نور IR در قسمت بالای قطعه $[W/m^2]$
$[W/m^2]$	نور UV در قسمت کف قطعه
$[W/m^2]$	نور PAR در کف قطعه $[W/m^2]$
$[W/m^2]$	نور IR در قسمت کف قطعه $[W/m^2]$
m	ضخامت یخ
$W/m^2$	تابش خورشیدی خالص
$W/m^2$	تابش خورشیدی خالص متوسط روزانه
$W/m^2$	تابش اتمسفر خالص
$W/m^2$	تابش طول موج
$W/m^2$	کمبود حرارت تبخیر
$W/m^2$	انتقال تبادل گرما
$W/m^2$	تبادل گرمای سطحی خالص
c	درجه‌ی حرارت تعادل
$W/m^2-C$	ضریب تبادل گرما
C	حداقل دمای آب



C	حداکثر دمای آب
C	میانگین دمای آب

### ۱۷-۱۲- منابع

1. Aisha, K. A., E. F. Shabana, M. S. EL-Abyad, I. A. Kobbia and F. Schanz. 1995. Pulse feeding with nitrate and phosphate in relation to tissue composition and nutrient uptake by some macroalgae from the Red Sea at Ghardaqa (Egypt). *Journal of Basic Microbiology* 35:135-145.
2. Canal-Verge's, P., M. Vedel, T. Valdemarsen, E. Kristensen and. M. R. Flindt. 2010. Resuspension created by bedload transport of macroalgae: implications for ecosystem functioning. *Hydrobiologia* (2010) 649:69-76
3. Di Toro, D. M. 2001. *Sediment Flux Modeling*, Wiley-Interscience, New York, New York. 624 pp.
4. Duke, C. S., W. Litaker and J. Ramus 1989. Effect of temperature on nitrogen-limited growth rate and chemical composition of *Ulva curvata* (Ulvales: Chlorophyta). *Marine Biology* 100:148-150.
5. Fong, P, R. M. Donohoe and J. B. Zedler. 1994. Nutrient concentration in tissue of die macroalga *Enteromorpha* as a function of nutrient history: An experimental evaluation using field microcosms. *Marine Ecology Progress Series* 106:273- 281.
6. Fong, Peggy, Lauri Green, and Rachel Kennison. 2011. Chapter 3: Suitability of Macroalgae as an Indicator of Eutrophication: A Review of Existing Science, IN: Sutula, Martha (Editor). 2011. *Review of Indicators for Development of Nutrient Numeric Endpoints in California Estuaries*, Final Technical Report 646 , Southern California Coastal Water Research Project, prepared for the California Environmental Protection Agency, State Water Resources Control Board (Agreement Number 07-110-250)
7. Fujita, R. M. 1985. The role of nitrogen stores in regulating transient ammonium uptake and nitrogen storage by macroalgae. *Journal of Experimental Marine Biology and Ecology* 92: 283-301.
8. Hipsey, M.R., Antenucci, J.P., and Hamilton, D. 2013. *Computational Aquatic Ecosystem Dynamics Model: CAEDYM v3 v3.2 Science Manual (DRAFT)*, Centre for Water Research, University of Western Australia.
9. Kamer, Krista, Karleen Boyle and Peggy Fong. 20012. Macroalgal Bloom Dynamics in a Highly Eutrophic Southern California Estuary. *Estuaries Vol. 24, No. 4, p. 623-635 August 2001*

10. Martin, James L., Robert B. Ambrose, Jr., and Tim A. Wool. 2006. "WASP7 Benthic Algae - Model Theory and User's Guide, U.S. EPA, Region 4, Atlanta, GA
11. Martin, J.L. 2013. Hydro-Environmental Analysis: Fresh Water Environments. CRC Press, Boca Raton, FL.
12. Martins, I and J. C. Marques. 2002. A Model for the Growth of Opportunistic Macroalgae (*Enteromorpha* sp.) in Tidal Estuaries, *Estuarine, Coastal and Shelf Science* (2002) 55, 247–257
13. McLaughlin, Karen, Martha Sutula, Jaye Cable and Peggy Fong. 2013. Eutrophication and Nutrient Cycling In Santa Margarita River Estuary: A Summary of Baseline Studies For Monitoring, Technical Report 635, Southern California Coastal Water Research Project
14. Romano, C, J. Widdows, M. D. Brinsley, and F. J. Staff. 2003. Impact of *Enteromorpha intestinalis* mats on nearbed currents and sediment dynamics: flume studies, *Mar Ecol Prog Ser*, Vol. 256: 63–74
15. Shen, Jian, Taiping Wang, Julie Herman, Pam Mason and Gretchen L. Arnold, 2008. Hypoxia in a Coastal Embayment of the Chesapeake Bay: A Model Diagnostic Study of Oxygen Dynamics, *Estuaries and Coasts* (2008) 31:652–663
16. Solidoro, C., G. Pecenic, R. Pastres, Davide Franco, and C. Dejak. 1997. Modelling macroalgae (*Ulva rigida*) in the Venice lagoon: Model structure identification and first parameters estimation, *Ecological Modelling* 94 (1997) 191-206
17. Sutula, Martha (Editor). 2011. Review of Indicators for Development of Nutrient Numeric Endpoints in California Estuaries," Final Technical Report 646, Southern California Coastal Water Research Project, prepared for the California Environmental Protection Agency, State Water Resources Control Board (Agreement Number 07-110-250)
18. Trancoso, A.R., S. Saraiva, L. Fernandes, P. Pina, P. Leitao, and R. Neves. 2005. Modelling macroalgae using a 3D hydrodynamic-ecological model in a shallow, temperate estuary, *Ecological Modelling* 187 (2005) 232–246
19. Wool, Tim A., Robert B. Ambrose, Jr., and James L. Martin. 2011. "WASP7 Multiple Algae -Model Theory and User's Guide," U.S. EPA, Region 4, Atlanta, GA
20. Venier, C., et al., Experimental investigation of the impact of macroalgal mats on flow dynamics and sediment stability in shallow tidal areas, *Estuarine, Coastal and Shelf Science* (2012), doi:10.1016/j.ecss.2011.12.035

فصل هجدهم

ماژول دما

تئوری مدل و راهنمای کاربر **WASP 8**

## یادداشت

تحقیقات شرح داده‌شده در این‌جا از طریق دفتر تحقیقات و توسعه‌ی (ORD) آژانس حفاظت محیط‌زیست آمریکا (EPA) تأمین مالی و مدیریت شده‌است. این موضوع مورد بررسی و اجرای آژانس قرار گرفته و برای انتشار به‌عنوان یک سند EPA مورد تأیید قرار گرفته‌است. ذکر نام‌های تجاری یا محصولات تجاری برای استفاده تأیید یا توصیه نمی‌شود.

## چکیده

ماژول‌های استاندارد تغذیه‌گرایی و ماژول‌های سمی WASP برای تعیین میزان واکنش‌هایی که تحت تأثیر دما هستند، از دمای آب استفاده می‌کنند. در بسیاری از موارد، داده‌های مکانی و زمانی کافی برای دمای آب وجود ندارد که بتواند مدل کیفیت آب را به اندازه‌ی کافی پارامتر کند. ماژول دمای WASP می‌تواند بر اساس شرایط جوی و تبادل گرما بین سطح، لایه‌های زیرسطحی و زیرزمینی بدنه‌ی آب برای پیش‌بینی دمای ستون آب مورد استفاده قرار بگیرد. علاوه بر این، WASP روش‌هایی برای انتقال دمای پیش‌بینی شده‌ی آب به سایر مدل‌های فرعی WASP از طریق یک فایل رابط انتقال را دارد. این کتابچه‌ی راهنما الگوریتم‌های تکمیلی دما، از جمله معادلات جنبشی، ورودی و خروجی اضافی مدل و یک سری آزمایش‌های تأیید مدل را برای کاربر ثبت می‌کند.

## ۱۸-۱- مقدمه

برنامه‌ی شبیه‌سازی تجزیه و تحلیل آب (WASP، Ambrose و همکاران ۱۹۹۳) یک سیستم مدل‌سازی محفظه‌ی پویا می‌باشد که می‌تواند برای انواع مختلف آب مورد استفاده قرار گیرد. انعطاف‌پذیری ارائه‌شده توسط WASP منحصر به فرد است. WASP به مدل‌ساز اجازه‌ی تشکیل مدل‌های یک، دو و سه بعدی و همچنین اجازه‌ی تعیین مشخصات ضرایب تبادل متغیر زمانی، جریان‌های جابه‌جایی، بارهای زباله و شرایط مرزی با کیفیت آب را می‌دهد.

یکی دیگر از مزایای منحصر به فرد WASP، ساختار مدل‌سازی آن بوده که بدون نیاز به نوشتن یا بازنویسی بخش‌های بزرگی از کد کامپیوتری، اجازه‌ی سازماندهی همه‌ی فرآیندهای جنبشی که در چارچوب مدل‌سازی بزرگ‌تر هستند، را می‌دهد. دو مدل اولیه‌ی عملیاتی WASP، سم‌شناسی و تغذیه‌گرایی، کاملاً عمومی هستند و برای شبیه‌سازی دو گروه اصلی از مشکلات کیفیت آب از جمله آلودگی معمولی (اکسیژن محلول، نیاز اکسیژن بیوشیمیایی، مواد مغذی و تغذیه‌گرایی) و آلودگی سمی (شامل مواد شیمیایی آلی و رسوبات) در نظر گرفته شده‌اند. علاوه بر این، مدل‌های جنبشی برای جیوه (مارتین MERC4، ۱۹۹۲) و به‌طور کلی برای شبیه‌سازی فلزات ساخته شده‌اند (مارتین و مدین META4، ۱۹۹۶).

با انتشار WASP 8، قابلیت شبیه‌سازی دمای آب به هر دو ماژول سمی و تغذیه‌گرایی اضافه شد. در تمام نسخه‌های WASP، دما بر بسیاری از نرخ‌های فرآیند جنبشی که اغلب در نوع خود مهم هستند، تأثیر می‌گذارد. WASP 8 برای شبیه‌سازی دینامیکی فرآیندهای مؤثر بر دمای آب گسترش پیدا کرده است که شامل تبادل حرارت سطحی، تشکیل و فروپاشی یخ می‌باشد و روال‌های دمایی بر اساس مدل‌های CE-QUAL-W2 در سپاه مهندسين ارتش آمریکا استوار است (آزمایشگاه‌های هیدرولیک و محیط‌زیست ۱۹۸۴، کول و بوچک ۱۹۹۴).

این کتابچه‌ی راهنما برای توضیح روابط اساسی مورد استفاده برای پیش‌بینی تغییرات در هریک از پنج متغیر کیفیت شبیه‌سازی - شده توسط ماژول گرما و همچنین توضیح نیازهای ورودی مدل می‌باشد. این کتابچه‌ی راهنما مکمل کتابچه‌ی راهنمای WASP (آمبرووس و همکاران) در نظر گرفته می‌شود و به همین خاطر، خواننده برای توضیح کامل‌تر نظریه‌ی مدل WASP و نیازهای ورودی، به آن کتابچه‌ی راهنمای کاربر معرفی شده است. علاوه بر این، همان‌طور که در قسمت زیر توضیح داده شده است، روابط اساسی مورد استفاده برای پیش‌بینی تغییرات دما، از کول و بوچاک (۱۹۹۵) گرفته شده است.

## ۱۸-۲- تئوری مدل

### ۱۸-۲-۱- معادله‌ی عمومی تعادل جرم

معادلات اساسی حل شده در تمام نسخه‌های WASP، براساس قوانین پایستگی می‌باشد. قوانین اولیه‌ی پایستگی مورد استفاده در توسعه‌ی مدل‌های کیفیت آب شامل مواردی برای انرژی، جرم و حرکت می‌باشد؛ به‌عنوان مثال، می‌توان به مدل‌های هیدرودینامیکی DYNHYD و RIVMOD که بر پایستگی حرکت و جرم آب پایه‌گذاری شده‌اند، اشاره کرد. نسخه‌های قبلی WASP براساس پایستگی آب و جرم تشکیل‌دهنده بوده‌اند. مدل ماژول گرما بر پایه‌ی پایستگی آب و جرم‌های تشکیل‌دهنده (برای شوری، باکتری‌های کولیفرم، و اجزای سازنده‌ی دل‌خواه) و همچنین قانون پایستگی انرژی برای انتقال حرارت استوار است. این قوانین اصول اساسی بسیاری از علوم و مهندسی مدرن و همچنین مدل‌سازی کیفیت آب را تشکیل می‌دهند.

برای کلیه‌ی موادی که مطابق قوانین پایستگی عمل می‌کنند، در صورت تبدیل یا تغییر و تحول، باید مقدار کل ماده‌ی موجود پس از تغییر و تحول و یا تبدیل، با مقدار قبل از آن یکسان باشد. برای محاسبه‌ی فرآیندهای مؤثر بر تبدیل معادله‌ی تعادل در ارتباط با جرم، باید برای مواد ورودی و خروجی از طریق قراردادن مستقیم و پراکنده؛ جابه‌جایی افقی و انتقال فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی توضیح داده‌شود. برای

یک سیستم مختصات که مختصات X و Y در صفحه‌ی افقی قرار گرفته و مختصات Z نیز در صفحه‌ی عمودی قرار دارد، معادله‌ی موازنه‌ی جرم در اطراف یک حجم سیال بی‌نهایت کوچک می‌باشد:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(U_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(U_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(U_z C) + \frac{\partial}{\partial x}\left(E_x \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(E_y \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(E_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) + S_L + S_B + S_K \quad (1-18)$$

C = غلظت اجزای سازنده‌ی کیفیت آب، mg/L یا g/m<sup>3</sup>

t = زمان، روزها،

U<sub>x</sub>, U<sub>y</sub>, U<sub>z</sub> = سرعت‌های طولی، عرضی، عمودی، m/day

E<sub>x</sub>, E<sub>y</sub>, E<sub>z</sub> = ضرایب انتشار طولی، عرضی، عمودی، m<sup>2</sup>/day

S<sub>L</sub> = نرخ بارگذاری مستقیم و پراکنده، g/m<sup>3</sup> - day

S<sub>B</sub> = نرخ بارگذاری مرزی (شامل بالادست، پایین‌دست، اعماق، جوی)، g/m<sup>3</sup> - day

S<sub>K</sub> = نرخ تبدیل جنبشی کل که مقدار مثبت آن مربوط به منبع است و مقدار منفی نیز بسینک است، g/m<sup>3</sup> - day

همان‌طور که در بالا نوشته‌شد، معادله‌ی تعادل جرم بر غلظت‌های تشکیل‌دهنده که به جرم آن ماده به‌صورت محلول و یا معلق در حجم معینی از آب اشاره‌دارد، استوار می‌باشد. به‌طور مشابه، ممکن است دما معیاری برای اندازه‌گیری مقدار انرژی گرمای موجود در یک حجم از آب در نظر گرفته‌شود، و رابطه‌ی بین انرژی گرمایی و دما توسط رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$H = V(\rho_w C_p T) = VC_h \quad (2-18)$$

در جایی که H مقدار گرما باشد، C<sub>p</sub> گرمای ویژه‌ی آب (با فشار مشخص) و T دما را نشان می‌دهد، در این صورت مقدار موجود در پرانتز می‌تواند "غلظت" گرما محسوب شود (C<sub>h</sub>). در معادله‌ی فوق جایگزینی غلظت تشکیل‌دهنده با غلظت گرما، منجر به معادله‌ی تعادل گرما می‌شود که توسط مازول گرما برای دمای آب حل می‌شود.

WASP با گسترش حجم کنترل بی‌نهایت کوچک به "بخش‌های" مجاور بزرگ‌تر و با مشخص کردن پارامترهای مناسب برای انتقال، بارگذاری و تبدیل مناسب، پیاده‌سازی یک فرم تفاضل محدود را اعمال می‌کند (معادله‌ی اصلی برای مجموعه‌ای از حجم کنترل گسترده استفاده می‌شود). این شبکه ممکن است حجم کنترل را به‌صورت عمودی، جانبی و همچنین به‌صورت طولی تقسیم کند. بخش‌های اعماق دریا می‌تواند به‌همراه بخش‌های ستون آب درج شود. اگر مدل کیفیت آب به مدل

هیدرودینامیکی مرتبط باشد، آن‌گاه بخش‌های ستون آب باید با مدل هیدرودینامیکی مطابقت داشته باشند. غلظت مواد تشکیل‌دهنده و دمای آب در هر بخش محاسبه می‌شود و سرعت انتقال اجزای کیفیت آب نیز در طول فصل مشترک بخش‌های مجاور محاسبه می‌شود.

### ۱۸-۲-۲- فرآیند کیفیت آب

رابطه‌ی تعادل شرح داده شده در بخش قبل، برای همه متغیرهای حالت توسط WASP حل شده است. رابطه‌ی اساسی بدون در نظر گرفتن متغیر کیفیت، یکسان می‌باشد. از نظر تعداد متغیرهای حالت و فرآیندهای که در کل نرخ تبدیل جنبشی (S\_K) برای هر متغیر کیفیت ایجاد می‌شود، میان زیرمدل‌های WASP تفاوت‌هایی وجود دارد و این درحالی است که تمام نسخه‌های WASP دارای یک برنامه‌ی اصلی یکسان بوده و کلیه‌ی اصطلاحات به جز S\_K را محاسبه می‌کند. این اصطلاح در یک ماژول جداگانه (WASPB) محاسبه می‌شود که مخصوص زیرمدل (TOXI, EUTRO) می‌باشد.

### ۱۸-۲-۲-۱- دما

فرآیندهای موجود در کل نرخ تبدیل برای دما، شامل تبادل گرما در سطح و قسمت پایین می‌باشد. تبادل گرمای سطح توسط یک تعادل گرمایی کامل و یا با استفاده از دمای تعادل و ضرایب تبادل گرمای سطح محاسبه می‌شود (بردی و ادینگر، ۱۹۷۵). میزان گرمای سطح در زیر شرح داده شده و از کول و بوچاک (۱۹۹۴) گرفته شده است.

### ۱۸-۲-۲-۲- تبادل گرمای سطح

اصطلاح منبع و مخزن برای گرما شامل بارگذاری از منابع خارجی مانند تخلیه‌های حرارتی و همچنین تبادل گرما در فصل مشترک آب و هوا می‌باشد، به این صورت که به دلیل تبادل گرمای سطح ممکن است این اصطلاح منبع و مخزن برای دمای آب به صورت زیر نوشته شود:

$$\left. \frac{\partial VT}{\partial t} \right|_{\text{exchange}} = \frac{H_n A_s}{\rho C_p} \quad (3-18)$$

که در آن  $V$  حجم ( $m^3$ )،  $A_s$  مساحت سطح ( $m^2$ )،  $T$  دما ( $^{\circ}C$ ) و  $t$  نشان‌دهنده‌ی پارامتر زمان می‌باشد،  $\rho$  جرم‌مخصوص آب ( $997 \text{ kgm}^{-3}$  در  $25^{\circ}C$ )،  $C_p$  گرمای ویژه آب ( $4179 \text{ Jkg}^{-1}^{\circ}C^{-1}$  در  $25^{\circ}C$ )، و  $H_n$  (وات  $m^{-2}$ ) نیز شار انرژی حرارتی خالص می‌باشد. شار انرژی حرارتی خالص ( $H_n$ ، وات  $m^{-2}$ ) شامل اثرات چندین فرآیند است که می‌توان آن را به صورت یک تبادل حرارتی سطح به صورت کوتاه مدت بیان کرد.

$$H_n = H_s + H_a + H_e + H_c - (H_{sr} + H_{ar} + H_{br}) \quad (۴-۱۸)$$

$H_n$  = نرخ خالص تبادل گرما در سطح آب،  $W/m^2$ ،

$H_s$  = تابش موج کوتاه نور خورشید،  $W/m^2$ ،

$H_a$  = تابش موج بلند،  $W/m^2$ ،

$H_{sr}$  = انعکاس نور خورشیدی موج کوتاه،  $W/m^2$ ،

$H_{ar}$  = انعکاس امواج بلند،  $W/m^2$ ،

$H_{br}$  = تابش برگشتی از سطح آب،  $W/m^2$ ،

$H_e$  = اتلاف حرارتی تبخیری،  $W/m^2$ ،

$H_c$  = انتقال حرارت،  $W/m^2$ .

در ماژول حرارتی، فرآیندهای تبادل گرمایی سطح بسته به دماهای سطح آب و با استفاده از داده‌های مرحله‌ی زمانی قبل محاسبه می‌شوند، بنابراین در این مرحله‌ی زمانی مدل، از فرآیندهای انتقال عقب مانده‌اند. تابش موج کوتاه خورشیدی ( $H_s$ ) یا به‌طور مستقیم اندازه‌گیری می‌شود و یا از روابط زاویه‌ی خورشید و پوشش ابر محاسبه می‌شود. تابش شعاعی موج بلند نیز از دمای هوا و پوشش ابر و یا فشار بخار هوا با استفاده از فرمول Bruntts محاسبه می‌شود.

تابش سطح آب به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$H_{br} = \varepsilon \sigma^* (T_s + 273/15)^4 \quad (۵-۱۸)$$

که

$\varepsilon$  = قابلیت تابش آب، 0/97

$\sigma^*$  = ثابت استفان-بولتزمن،  $5/67 \times 10^{-8} W m^{-2} EK^{-4}$ ،

$T_s$  = دمای سطح آب، EC،

اتلاف حرارت تبخیری به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$H_e = f(W)(e_s - e_a) \quad (۶-۱۸)$$

که

$f(W)$  = تبخیر تابع سرعت باد،  $W/m^2 mm Hg^{-1}$ ،

$e_s$  = فشار بخار اشباع در سطح آب،  $mm Hg$ ،

$e_a$  = فشار بخار اتمسفر،  $mm Hg$ .



کاهش گرمای تبخیری به دمای هوا، دمای نقطه‌ی شبنم و یا رطوبت‌نسبی بستگی دارد. فشاربخار سطح نیز با استفاده از دمای سطح برای هر قطعه از سطح محاسبه می‌شود. انتقال حرارت سطح به شرح زیر محاسبه می‌شود:

$$H_c = C_c f(W)(T_s - T_a) \quad (7-18)$$

که

$$C_c = \text{ضریب بوونز، } 0/47 \text{ mm Hg } EC^{-1}$$

$$T_a = \text{دمای هوا، } EC$$

تابش خورشیدی موج کوتاه در سطح نفوذ می‌کند و مطابق قانون بیرز با عمق از بین می‌رود:

که

$$H_s(z) = (1 - \beta)H_s e^{-\eta z} \quad (8-18)$$

که،

$$H_s(z) = \text{تابش موج کوتاه در عمق } z, \text{ W/m}^2$$

$$\beta = \text{کسری که در سطح آب جذب می‌شود.}$$

$$\eta = \text{ضریب انقراض، } m^{-1}$$

$$H_s = \text{تابش موج کوتاه که به سطح می‌رسد، } W/m^2$$

در رویکرد دمای تعادل، دمایی محاسبه می‌شود که تبادل سطح خالص در آن برابر صفر است. خطی‌سازی تعادل گرمای خالص و این تعریف از دمای تعادل اجازه می‌دهد تا نرخ خالص تبادل گرمای سطح،  $H_n$ ، به صورت زیر بیان شود:

$$H_n = -K_{aw}(T_w - T_e) \quad (9-18)$$

$$H_n = \text{نرخ تبادل حرارت سطح، } W/m^2$$

$$K_{aw} = \text{ضریب تبادل گرما سطح، } W/m^2 EC^{-1}$$

$$T_w = \text{دمای سطح آب، } EC$$

$$T_e = \text{درجه‌ی حرارت تعادل، } EC$$

هفت فرآیند تبادل گرمای جداگانه در ضریب تبادل گرمای سطحی و دمای تعادل خلاصه می‌شود. خطی‌سازی مورد استفاده در به دست آوردن معادله توسط برادی و همکاران (۱۹۶۸) و ادینگر و همکاران (۱۹۷۴) با جزئیات مورد بررسی قرار گرفته است.

### ۱۸-۲-۳- تبادل گرمای رسوب

به طور کلی تبادل گرمای رسوبی با آب در مقایسه با تبادل گرمای سطحی کوچک می‌باشد و اغلب نادیده گرفته شده‌است. با این حال، تحقیقات بر روی چندین مخزن نشان داده‌است که این فرآیند باید شامل تولید دقیق دماهای هم‌فشار باشد که علت اصلی آن کاهش انتشار عددی است. فرمول مورد استفاده برای محاسبه‌ی انتقال حرارت کف، شبیه به فرمول مورد استفاده در روش دمای تعادلی برای تبادل سطح می‌باشد:

$$H_{sw} = -K_{sw}(T_w - T_s) \quad (10-18)$$

$H_{sw}$  = نرخ تبادل حرارت رسوب/آب،  $W m^{-2}$

$K_{sw}$  = ضریب تبادل حرارت رسوب/آب،  $W m^{-2} EC^{-1}$

$T_w$  = دمای آب،  $EC$

$T_s$  = دمای رسوب،  $EC$ .

کول و بوچاک (۱۹۹۴) نشان دادند که مقادیر  $7 \times 10^{-8} W m^{-2} EC^{-1}$  برای  $K_{sw}$  در کاربردهای قبلی استفاده شده‌است و میانگین دمای سالانه هوا تخمین خوبی از  $T_s$  می‌باشد.

### ۱۸-۲-۴- پوشش یخ

تشکیل یخ می‌تواند بر تعادل گرما، ویژگی‌های اختلاط و کیفیت آب در دریاچه‌ها و مخازن تأثیر بگذارد؛ به‌عنوان مثال، هنگامی که یک دریاچه یخ می‌زند، تلفات محسوس گرما و تبخیر تقریباً متوقف می‌شود و تابش خالص به شدت به سمت بیرون می‌باشد طوری که منجر به رشد تقریباً یکنواخت یخ در طول ماه‌های اولیه‌ی زمستان می‌شود (لرمن ۱۹۷۸). علاوه بر این، فرآیندهای دیگری مانند: شار حرارتی از پایین، که اغلب در طول دوره‌های که یخ وجود ندارد ناچیز هستند و در چرخه‌ی گرما مهم می‌شوند. یخ اساساً دریاچه را در برابر اختلاط باد محافظت می‌کند و بسته به ضخامت یخ و پوشش برف، نفوذ نور را به تأخیر می‌اندازد. هوادهی سطحی نیز در طول دوره‌های پوشش یخ و در بسیاری از شرایط بی‌اکسیژن در دریاچه‌های تغذیه‌ور کم‌عمق، به تأخیر - می‌افتد و اغلب هم بعد از دوره‌های طولانی پوشش یخ و برف رخ می‌دهد و ممکن است منجر به مرگ ماهی‌های زمستانی شود.

پوشش یخ برای زیرمدل تغذیه‌گرایی WASP شرح داده می‌شود. ماژول گرمایی پوشش یخ را براساس روابط موجود در مدل CE-QUAL-W2 محاسبه می‌کند. مدل یخ اساس یک پوشش یخی با تبادل گرما از یخ به هوا، هدایت از طریق یخ، هدایت بین آب زیرین و یک لایه "دمای مذاب" در کف یخ است (کول و بوچاک ۱۹۹۴، اشتون ۱۹۷۹). تعادل گرمای کلی برای سیستم آب به یخ به هوا به‌صورت زیر است:

$$\rho_i L_f \frac{\Delta h}{\Delta t} = h_{ai}(T_i - T_{ei}) - h_{wi}(T_w - T_m) \quad (11-18)$$

$\rho_i$  = جرم مخصوص یخ،  $\text{kg m}^{-3}$

$L_f$  = گرمای نهان ذوب یخ،  $\text{J kg}^{-1}$

$\Delta h/\Delta t$  = تغییر ضخامت یخ (h) با زمان (t)،  $\text{m sec}^{-1}$

$h_{ai}$  = ضریب تبادل حرارت یخ به هوا،  $\text{W/m}^2 \text{ EC}^{-1}$

$h_{wi}$  = ضریب تبادل گرما از آب به یخ از طریق لایه‌ی مذاب،  $\text{W/m}^2 \text{ EC}^{-1}$

$T_i$  = دمای یخ، EC

$T_e$  = دمای تعادل تبادل گرما یخ به هوا، EC

$T_w$  = دمای آب زیر یخ، EC

$T_m$  = دمای ذوب EC.

ضریب انتقال حرارت سطح به هوا ( $h_{ai}$ ) و دمای تعادل آن ( $T_{ei}$ )، مشابه با تبادل حرارت سطح در ادینگر و همکاران (۱۹۷۴) محاسبه می‌شوند، زیرا تعادل گرمای لایه‌ی نازکی از سطح آب یخ با نرخ خالص تبادل حرارت سطحی که قبلاً ارائه شده‌است، برابر می‌باشد. ضریب تبادل آب به یخ ( $h_{wi}$ )، به آشفستگی و حرکت آب در زیر یخ و تأثیر آن‌ها بر ضخامت لایه‌ی مذاب بستگی دارد. این تابع سرعت آب برای استفاده در رودخانه‌ها می‌باشد اما باید به‌طور تجربی برای مخازن تنظیم شود. دمای یخ در تعادل گرمایی یخ با برابر کردن سرعت انتقال گرمای سطحی بین یخ و هوا و با سرعت هدایت گرمایی از طریق یخ محاسبه می‌شود:

$$h_{ai}(T_i - T_{ei}) = \frac{-k_i(T_i - T_m)}{h} \quad (12-18)$$

$k_i$  = هدایت گرمای مولکولی یخ،  $\text{W m}^{-2} \text{ EC}^{-1}$

در شرایطی که محلول در دمای یخ اتفاق می‌افتد  $T_i$  باید در معادله‌ی بیلان به عنوان دمای صفر در نظر گرفته شود، و ضخامت یخ طبق رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\frac{\rho_i L_f \Delta h}{\Delta t} = \frac{(T_m - T_{ei})}{\frac{h}{K_i} + \frac{1}{h_{ai}}} - h_{wi}(T_w - T_m) \quad (13-18)$$

که با استفاده از آن می‌توان ضخامت یخ را برای هربخش طولی محاسبه نمود. در محاسبات انتقال دمای آب، حرارت منتقل شده از آب به یخ توسط عبارت آخر حذف می‌شود.

تغییرات در آغاز پوشش یخ، رشد فصلی و ذوب شدن در بدنه‌ی آب به مکان‌ها و دماهای جریان ورودی و خروجی، تغییرات تبخیر باد در سطح یخ و اثرات حرکت آب بر ضریب تبادل آب به یخ بستگی

دارد. یخ اغلب قبل از تشکیل در مخزن اصلی، در شاخه‌های مخزن شکل می‌گیرد و به خاطر این اثرات طولانی‌تر باقی می‌ماند.

الگوریتم دوم، با جزئیات بیشتر برای محاسبه‌ی رشد و فروپاشی یخ برای CEQUAL-W2 (کول و بخارک ۱۹۹۴) توسعه‌داده شده‌است و شامل ماژول گرمایی می‌باشد. این الگوریتم شامل یک سری محاسبات ترمودینامیکی یک‌بعدی و شبه حالت پایدار برای هر مرحله‌ی زمانی شبیه به مایکوت و انتر اشتاینر (۱۹۷۱)، ویک (۱۹۷۷) و پترسون و همبلین (۱۹۸۸) می‌باشد. الگوریتم دقیق، نمایش دقیق‌تری از بخش بالایی پروفیل دمای یخ ارائه می‌دهد که منجر به محاسبه‌ی دقیق‌تر دمای سطح یخ و نرخ انجماد و ذوب یخ می‌شود.

دمای سطح یخ ( $T_s$ )، به‌طور تکراری در هر مرحله‌ی زمانی و با استفاده از شرط مرزی بالایی به‌صورت زیر محاسبه می‌شود. با فرض شیب حرارتی خطی و با استفاده از تقریب‌های تفاضل محدود، شارهای حرارتی در یخ  $q_i$  و در فصل مشترک آب-یخ  $q_{iw}$  محاسبه می‌شوند. ضخامت یخ در زمان  $t$ ،  $\theta(t)$  توسط ذوب‌شدن یخ در سطح مشترک هوا-یخ  $\Delta\theta_{ai}$  و رشد یخ و ذوب‌شدن آن در سطح مشترک آب-یخ  $\Delta\theta_{iw}$  تعیین می‌شود. توالی محاسباتی پوشش یخ نیز در ادامه آورده شده‌است.

تشکیل یخ اولیه نیاز به کاهش دمای آب‌سطحی به نقطه‌ی انجماد، توسط فرآیندهای تبادل حرارت سطح دارد. با کم‌شدن میزان گرما، یخ روی سطح آب تشکیل می‌شود و سطح آب به صورت دمای منفی نشان داده خواهد شد. سپس دمای منفی سطح آب به ضخامت معادل یخ تبدیل می‌گردد و گرمای معادل به منبع گرما اضافه می‌شود. محاسبه برای هر بخش تنها یک‌بار صورت می‌گیرد که این محاسبه با دوره‌ی بدون یخ شروع خواهد شد:

$$\theta_0 = \frac{-T_{wn}\rho_w C_{pw}h}{\rho_i L_f} \quad (14-18)$$

$\theta_0$  = ضخامت تشکیل یخ اولیه در طی یک مرحله‌ی زمانی، m

$T_{wn}$  = دمای منفی آب موقتی محلی، EC

$h$  = ضخامت لایه، m

$\rho_w$  = جرم‌مخصوص آب،  $kg\ m^{-3}$

$C_{pw}$  = گرمای ویژه آب،  $J\ kg^{-1}\ EC^{-1}$

$\rho_i$  = جرم‌مخصوص آب،  $kg\ m^{-3}$

$L_f$  = گرمای نهان ذوب،  $J\ kg^{-1}$

شرایط مرزی بالایی شار فصل مشترک در سطح هوا-یخ و تخمین دمای سطح یخ: دمای سطح یخ یعنی  $T_s$ ، باید برای محاسبه‌ی مؤلفه‌های گرما،  $H_c, H_e, H_{br}$  و شیب گرمایی در یخ شناخته‌شود، زیرا مؤلفه‌ها و شیب همگی یا به‌طور صریح و یا به‌طور ضمنی تابعی از  $T_s$  می‌باشند. به جز زمانی که در فصل ذوب فعال، دمای سطح یخ در OEC ثابت می‌باشد،  $T_s$  در هر گام زمانی باید با استفاده از شرط مرزی بالاتر محاسبه شود. مقدار تقریبی  $T_s$  کلی با افزایش ضخامت یخ در طول مرحله‌ی زمانی و حل  $T_s$  بار به دست می‌آید.

$$q_i = K_i \frac{T_f - T_s(t)}{\theta(t)} \quad (15-18)$$

$$H_{sn} + H_{an} - H_{br} - H_e - H_c + q_i = \rho_i L_f \frac{d\theta_{ai}}{dt}, \quad T_s = 0^\circ\text{C} \quad (16-18)$$

$$T_s^n \approx \frac{\theta^{n-1}}{K_i} [H_{sn}^n + H_{an}^n - H_{br} T_s^n - H_e T_s^n - H_c T_s^n] \quad (17-18)$$

$K_i =$  رسانایی حرارتی یخ،  $\text{W m}^{-2} \text{EC}^{-1}$

$T_f =$  دمای نقطه‌ی انجماد، EC

$n =$  سطح زمان.

تابش خورشیدی جذب‌شده توسط آب زیر یخ: اگرچه مقدار تابش خورشیدی نفوذیافته نسبتاً کم بوده اما یک جزء مهم از میزان گرما می‌باشد، زیرا تنها منبع گرما برای ستون آب در زمان وجود یخ بوده و ممکن است به‌طور قابل‌توجهی، به ذوب یخ در فصل مشترک آب و یخ کمک کند. مقدار تابش خورشیدی جذب‌شده توسط آب در زیر پوشش یخ می‌تواند به‌صورت زیر بیان شود:

$$H_{ps} = H_s(1 - ALB_i)(1 - \beta_i)e^{-\gamma_i\theta(t)} \quad (18-18)$$

$H_{ps} =$  تابش خورشیدی جذب شده توسط آب زیر پوشش یخ،  $\text{Wm}^{-2}$

$H_s =$  تابش خورشیدی رسیده،  $\text{Wm}^{-2}$

$ALB_i =$  یخ البدو،

$\beta_i =$  کسری از تابش خورشیدی جذب‌شده،

$\gamma_i =$  ضریب انقراض یخ،  $\text{m}^{-1}$ .

ذوب یخ در فصل مشترک هوا و یخ، در شرایطی که  $T_s$  تبادل حرارت سطح خالص،  $H_n(T_s)$  برقرار است، مطابق با خنک‌کننده‌ی سطح، منفی باقی می‌ماند و در این صورت امکان ذوب سطحی وجود ندارد.

اگر  $H_n(T_s)$  مطابق با افزایش خالص گرما در سطح مثبت شود، مقدار  $q_i$  باید منفی شود و تنها در صورت وجود  $T_s > T_f$  می‌تواند یک راه‌حل تعادلی وجود داشته‌باشد. این وضعیت امکان‌پذیر نیست، به دلیل این که ذوب‌شدن در سطح قبل از رسیدن به تعادل رخ خواهد داد (پاترسون و هامبلین، ۱۹۸۸). در نتیجه تخمین شبه‌پایدار گرما، که در واقع برای ذوب‌یخ در سطح به کار می‌رود، به‌طور داخلی ذخیره می‌شود و یک مشخصات دمایی غیرواقعی ایجاد می‌کند. در هر گام زمانی، برای ذوب از انرژی ذخیره‌شده استفاده می‌شود و از آن‌جا که کل انرژی ورودی یکسان است، خطای خالص کم است. انرژی ذخیره‌شده مورد استفاده برای ذوب یخ به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\rho_i C_{pi} \frac{T_s(t)}{2} \theta(t) = \rho_i L_f \Delta \theta_{ai} \quad (19-18)$$

$C_{pi}$  = گرمای ویژه یخ،  $J kg^{-1} EC^{-1}$

$\Delta \theta_{ai}$  = یخ ذوب شده در فصل مشترک یخ-هوا،  $m^{-1}$

فرمول‌بندی شرایط مرزی پایین شار فصل مشترک آب-یخ: هم رشد یخ و هم ذوب آن ممکن است در فصل مشترک آب-یخ رخ دهد و این در صورتی است که دمای سطح مشترک  $T_f$ ، توسط ویژگی‌های آب ثابت می‌شود. بنابراین شار حرارتی در فصل مشترک یخ، به  $T_f$  و دمای سطحی  $T_s$  در طول شار حرارتی  $q_i$  بستگی دارد. به‌طور مستقل، جریان گرما از آب به یخ  $q_{iw}$ ، تنها به شرایط زیر یخ بستگی دارد. نبود تعادل میان این شارها مکانیزمی را برای انجماد و ذوب‌شدن فراهم می‌کند. بنابراین،

$$q_i - q_{iw} = \rho_i L_f \frac{d\theta_{iw}}{dt} \quad (20-18)$$

$\theta_{iw}$  = رشد/ذوب یخ در فصل مشترک آب-یخ،

ضریب تبادل آب به یخ  $K_{iw}$ ، به تلاطم و حرکت آب در زیر یخ و تأثیر آن‌ها بر ضخامت لایه‌ی ذوب بستگی دارد. این فرمول یک تابع از سرعت آب برای رودخانه‌ها و نه‌رهای شناخته شده می‌باشد، اما باید به صورت تجربی برای مخازن تنظیم شود. شار گرما در رابط آب-یخ به شرح زیر است:

$$q_{iw} = h_{wi}(T_w(t) - T_f) \quad (21-18)$$

$T_w$  = دمای آب در بالاترین لایه‌ی زیر یخ، EC

سرانجام، رشد یخ یا ذوب‌شدن در فصل مشترک آب-یخ عبارت است از:

$$\Delta \theta_{iw}^n = \frac{1}{\rho_i L_f} \left[ K_i \frac{T_f - T_s^n}{\theta^{n-1}} - h_{iw}(T_w^n - T_f) \right] \quad (22-18)$$

## ۱۸-۲-۲-۵-جرم مخصوص

جرم مخصوص آب تحت تأثیر تغییرات دما و غلظت مواد جامد می باشد که توسط رابطه ی زیر

محاسبه می شود:

$$\rho = \rho_T + \Delta\rho_s \quad (23-18)$$

$\rho =$  جرم مخصوص،  $\text{kg m}^{-3}$ .

$\rho_T =$  جرم مخصوص آب به عنوان تابعی از دما،  $\text{kg m}^{-3}$ .

$\Delta\rho_s =$  افزایش جرم مخصوص به دلیل مواد جامد،  $\text{kg m}^{-3}$ .

رابطه متنوعی برای توصیف تغییرات جرم مخصوص آب به دلیل تغییرات دما پیشنهاد شده است.

رابطه ی زیر در مازول گرما استفاده می شود (کوله و بانچاک، ۱۹۹۴، گیل، ۱۹۸۲):

$$\begin{aligned} \rho_{T_w} = & 999/8452594 + 6/793952 \times 10^{-2} T_w - \\ & 9/095290 \times 10^{-3} T_w^2 + 1/001685 \times 10^{-4} T_w^3 - 1/ \\ & 120083 \times 10^{-6} T_w^4 + \\ & 6/536332 \times 10^{-9} T_w^5 \end{aligned} \quad (24-18)$$

تأثیر جامدات حل شده، به صورت شوری یا کل جامدات حل شده بیان می شود که جرم مخصوص آن

نیز شامل می شود. اثرات تراکم ناشی از TDS توسط فورד و جانسون (۱۹۸۳) آورده شده است:

$$\Delta\rho_{TDS} = (8/221 \times 10^{-4} - 3/87 \times 10^{-6} T_w - 4/99 \times 10^{-8} T_w^2) \Phi_{TDS} \quad (25-18)$$

$\Phi_{TDS} =$  غلظت TDS،  $\text{gm}^{-3}$ .

و برای شوری (گیل، ۱۹۸۲):

$$\begin{aligned} \Delta\rho_{sal} = & (0/824493 - 4/0899 \times 10^{-3} T_w + 7/6438 \times 10^{-5} T_w^2 \\ & - 8/2467 \times 10^{-7} T_w^3 + 5/3875 \times 10^{-9} T_w^4) \Phi_{sal} \\ & + (-5/72466 \times 10^{-3} + 1/0227 \times 10^{-4} T_w \\ & - 1/6546 \times 10^{-6} T_w^2) \Phi_{sal}^{1/5} + 4/8314 \times 10^{-4} \Phi_{sal}^2 \end{aligned} \quad (26-18)$$

$\Phi_{sal} =$  شوری،  $\text{kgm}^{-3}$ .

## ۱۸-۳-ورودی مدل

داده های که برای پشتیبانی در استفاده از یک مدل مازول حرارتی مورد نیاز است، شامل: شرایط اولیه

(پارامترهای قطعه، توابع زمان محیط و ثابت های جنبشی) می باشد که هر یک از این موارد به طور خلاصه

در بخش های زیر توضیح داده شده است.

### ۱۸-۳-۱- پارامترهای مدل

پارامترها ویژگی‌های متغیر مکانی بدنه‌ی آب هستند. تعریف پارامترها بسته به ساختار و فرآیند جنبشی سیستم‌های متشکل از هر مدل، متفاوت خواهد بود. با این حال، فرمت ورودی ثابت می‌باشد. تعداد پارامترهایی که مشخص شده‌اند، باید در ورودی هر بخش مشخص شده باشند. شکل (۱۸-۱) نشان‌دهنده‌ی آن است که کاربر پارامترهای خاص بخش را کجا تعریف و فعال می‌کند. اگر یک پارامتر بخش توسط کاربر تعریف نشود، به این معنی می‌باشد که غیرفعال در نظر گرفته می‌شود.

Parameter	System	Used	Scale Factor	1HarpethRiver	LSPC203PERO	3HarpethRiver	4JonerCreek
1 Temperature of Segment [°C or Multiplier]	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
2 Solar Radiation Multiplier [unitless or watts/m2]	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
3 Solar Radiation Time Function [1-4]	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
4 Light Extinction for Segment [per meter or multiplier]	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
5 Air Temperature of Segment [°C or Multiplier]	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
6 Pointer to Air Temperature Time Function	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
7 Wind Speed Multiplier [unitless or m/sec]	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
8 Pointer to Wind Speed Time Function	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
9 Cloud Cover Multiplier [unitless or fraction]	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
10 Pointer to Cloud Cover Time Function	None	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
11 Dew Point Temperature Multiplier [unitless or °C]	WTEMP	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
12 Pointer to Dew Point Time Function	WTEMP	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
13 Multiplier for Shading Coefficient [unitless or fraction]	None	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
14 Pointer to Shading Time Function	None	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
15 Wind Sheltering Coefficient Multiplier [unitless or fraction]	WTEMP	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
16 Pointer to Wind Sheltering Time Function	WTEMP	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
17 Water Velocity [m/sec or Multiplier]	None	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
18 Ice Cover [Fraction Cover or Multiplier]	None	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
19 Sediment Cobble Concentration [mg/L]	None	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
20 Zooplankton Population	PHYTO	<input type="checkbox"/>	1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

شکل ۱۸-۱ پارامترهای تقسیم‌بندی برای ماژول دما

علاوه بر این که کاربر باید پارامترهای خاص بخش را تعریف کند، بلکه باید این پارامترها را فعال نماید و فاکتور مقیاس را نیز در صورت نیاز تنظیم نماید. جدول (۱۸-۱) توصیف دقیقی از پارامترهای بخش را ارائه می‌دهد که برای مدول گرما در دسترس می‌باشند.



جدول ۱۸-۱ توضیحات پارامترهای بخش برای ماژول دما

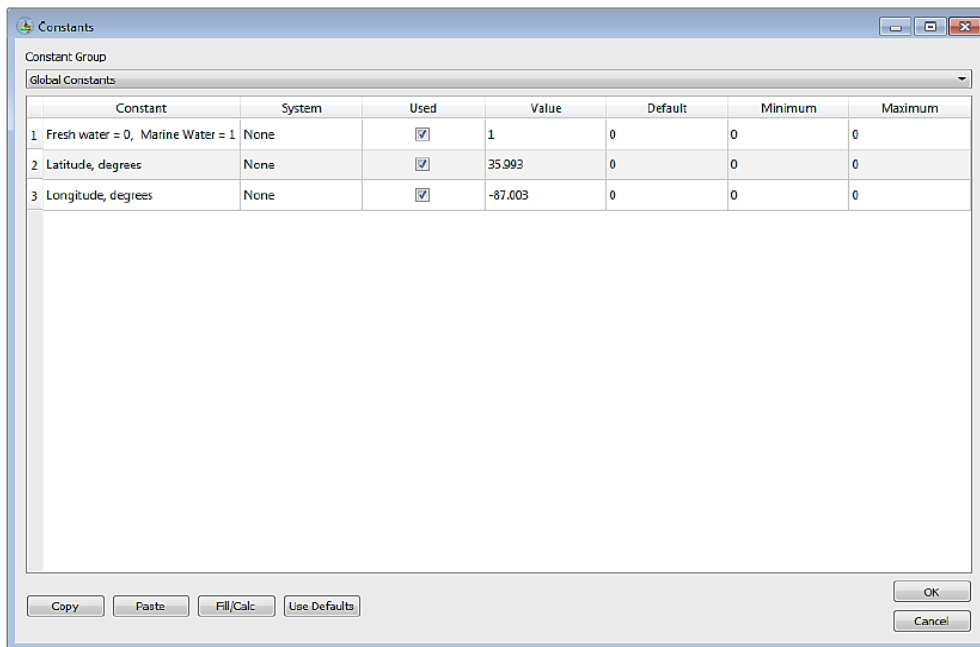
شرح	اسم
نشان گر تعیین پوشش ابر متغیر زمان؛ این متغیر برای بخش استفاده می‌شود. چهار تابع زمان پوشش ابر توسط کاربر در صفحه‌نمایش ورود داده‌های تابع زمان محیطی تعریف می‌شود.	Pointer to Cloud Cover Time Function
فاکتور بخش پوشش ابرها. پوشش ابر، نسبت به فضا متفاوت بوده و بسته به نوع تعریف کاربر از تابع زمان، می‌تواند پوشش ابر واقعی (به‌عنوان درصدی از آسمان صاف) و یا یک تابع نرمال شده باشد.	Cloud Cover Multiplier (unitless or fraction)
نشان گر تعیین تابع سرعت باد متغیر زمان؛ این متغیر برای قطعه استفاده می‌شود. چهار تابع سرعت باد، صفحه‌نمایش ورود داده‌های تابع زمان محیطی تعریف شده‌اند.	Pointer to Wind Speed Time Function
فاکتور بخش سرعت. سرعت باد در فضا تغییر می‌کند و بسته به روشی که کاربر تابع زمان را تعریف می‌کند، می‌تواند سرعت باد (m/sec) یا یک تابع نرمال شده باشد.	Wind Speed Multiplier (unitless or m/sec)
نشان گر تعیین تابع دمای هوای متغیر زمان؛ این تغییر برای قطعه استفاده می‌شود. توابع دمای هوا، صفحه‌ی ورودی داده‌های زیست‌محیطی را تعریف می‌کنند.	Pointer to Air Temperature Time Function
فاکتور بخش دمای هوا. دما در طول فضا تغییر می‌کند و بسته به روشی که کاربر تابع زمان را تعریف می‌کند، می‌تواند دمای هوا (°C) یا یک تابع نرمال شده باشد.	Air Temperature Multiplier (unitless or °C)
نشان گر تعیین نقطه‌ی شبنم متغیر زمان؛ این متغیر برای قطعه استفاده می‌شود. توابع دمای نقطه‌ی	Pointer to Dew Point Time Function

<p>شبیم، در صفحه‌ی ورود داده‌های عملکرد زمان محیطی تعریف شده‌اند.</p>	
<p>فاکتور بخش دمای نقطه‌ی شبیم. دمای نقطه‌ی شبیم نسبت به فضا تغییر می‌کند. می‌تواند دمای نقطه‌ی شبیم (<math>^{\circ}\text{C}</math>) یا یک تابع نرمال شده باشد.</p>	<p>Dew Point Temperature Multiplier (unitless or <math>^{\circ}\text{C}</math>)</p>
<p>فاکتور ضریب محافظت در برابر باد. (یک کسر از ۰ تا ۱). ضریب محافظت از باد در فضا متغیر بوده و می‌تواند بسته به تعریف یک ضریب واقعی و یا یک تابع نرمال شده باشد.</p>	<p>Wind Sheltering Coefficient Multiplier (unitless or fraction)</p>
<p>نشان‌گر تعیین ضریب محافظت باد؛ متغیر زمان برای قطعه استفاده می‌شود. این ضریب برای تنظیم اثرات باد استفاده می‌شود. اساس فیزیکی آن این است که زمین‌های اطراف اغلب از بدنه‌ی آبی محافظت می‌کند به طوری که بادهای مشاهده‌شده از ایستگاه‌های هواشناسی بادهای مؤثری نیستند که به بدنه آبی می‌رسند. از آن‌جا که جهت باد غالب و پوشش گیاهی با گذشت زمان تغییر می‌کند، کاربر این اختیار را دارد که ضریب حفاظت از باد را با زمان و نیز فضا تغییر دهد. چهار ضریب محافظت توابع زمانی موجود در صفحه‌نمایش ورود داده، تابع زمان محیطی تعریف می‌شوند.</p>	<p>Pointer to Wind Sheltering Time Function</p>
<p>فاکتور ضریب کاهش قطعه (<math>m^{-1}</math>). انقراض نور با فضا متغیر است و می‌تواند بسته به تعریف، یک ضریب کاهش واقعی یا یک تابع نرمال شده باشد.</p>	<p>Light Extinction Coefficient Multiplier (unitless or 1/m)</p>

### ۱۸-۳-۲- ثابت‌های مدل

تعریف ثابت‌ها بسته به این که کدام متغیرهای کیفیت را برای استفاده در ماژول دما انتخاب می‌کنید، متفاوت خواهد بود. ثابت‌های جنبشی موجود در رابط WASP، ثابت‌های موجود را به سه گروه از ثابت‌های مجزا تجزیه می‌کنند.

در ادامه سه گروه ثابت با شرح هر ثابت جنبشی ذکر شده است. شکل (۱۸-۲) صفحه‌ی ورودی داده‌ی ثابت جنبشی را برای ثابت جهانی نشان می‌دهد. برای جابه‌جایی بین گروه‌های ثابت، از فهرست کشویی استفاده کنید. توجه داشته باشید که کاربر مقادیر ثابت را مشخص می‌کند، اما باید دکمه رادیویی "Used" را نیز بررسی نماید. عدم بررسی این کادر باعث می‌شود تا رابط ارسال این اطلاعات به مدل حفظ شود.



شکل ۱۸-۲ ثابت‌های جهانی برای ماژول دما

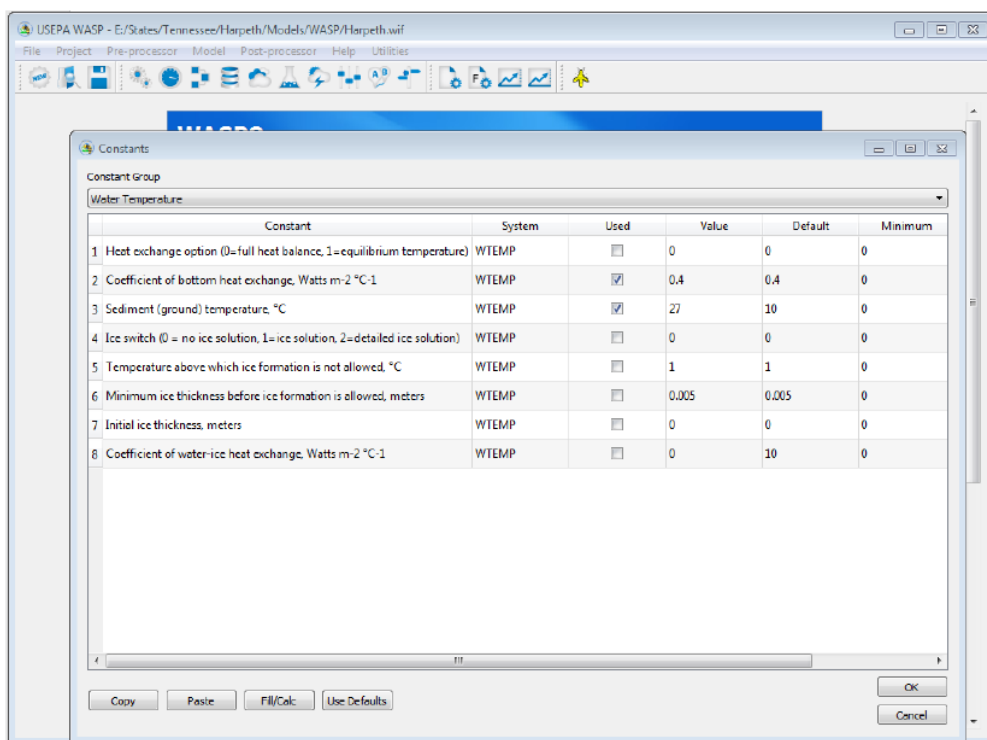
جدول ۲ لیستی از ثابت‌های جنبشی برای گروه ثابت‌های جهانی را نشان می‌دهد.

جدول ۱۸-۲ ثابت‌های جهانی برای ماژول گرمایی WASP 8

رديف	ثابت‌ها
۱	نوع بدنه‌ی آب (۱= آب شیرین، ۲= آب شور)

۲	گزینه‌ی تبادل گرما (۱=تعادل کامل گرما، ۲=تعادل درجه‌ی حرارت)
۳	تعویض یخ (۰=بدون محلول یخ، ۱=محلول یخ، ۲=محلول مفصل یخ)
۴	کسری از پرتوهای خورشیدی جذب‌شده در سطح یخ
۵	عرض جغرافیایی، درجه (استفاده از ژنراتور تابش خورشیدی)
۶	طول، درجه (استفاده از ژنراتور تابش خورشیدی)
۷	روز میلادی در آغاز شبیه‌سازی (استفاده از مولد اشعه خورشید)

شکل (۳-۱۸) ثابت‌های جنبشی برای مدول پیش‌بینی دما را نشان می‌دهد. توجه داشته‌باشید که کاربر مقادیر ثابت را مشخص می‌کند، اما باید دکمه رادیویی "Used" را نیز بررسی نماید. عدم بررسی این کادر باعث می‌شود تا رابط ارسال این اطلاعات به مدل حفظ شود.



شکل ۳-۱۸ ثابت‌های محاسبه دما

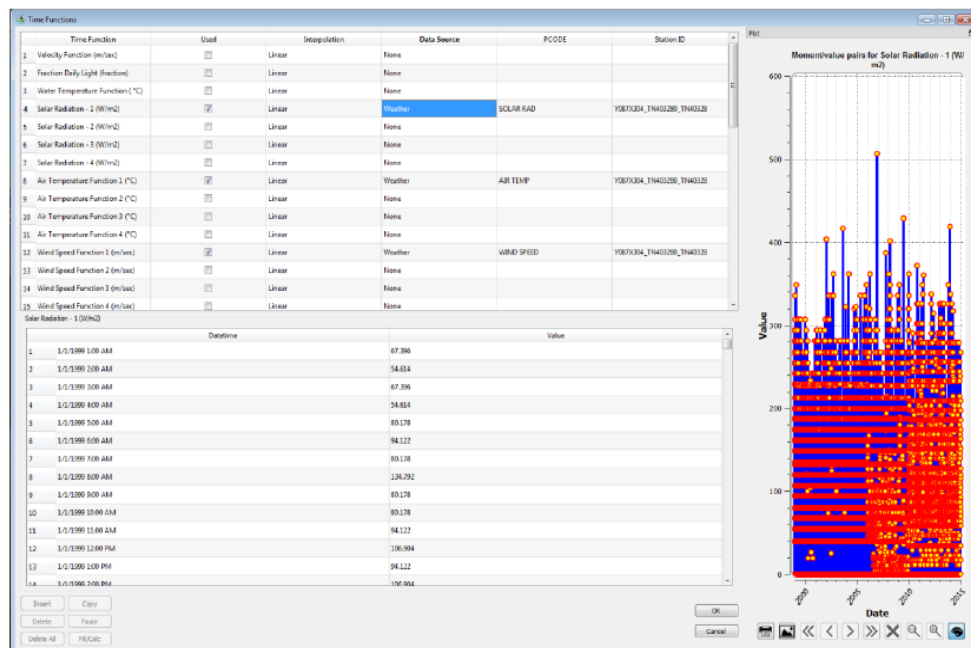
ثابت‌های جنبشی که توسط کاربر برای پیش‌بینی دمای آب تعریف شده‌اند، در جدول (۳-۱۸) ارائه شده‌اند.

جدول ۱۸-۳ ثابت‌های جنبشی دما برای ماژول گرما 8 WASP

ثابت‌ها	ردیف
تابع چند برابر تابش خورشیدی مشاهده شده	۱
ضریب تبادل گرمای پایین، وات $m^{-2}C^{-1}$	۲
دمای (زمین) رسوب، $^{\circ}C$	۳
ضخامت یخ اولیه، m	۴
نسبت بازتاب به پرتوهای رسیده (یخ آلبدو)	۵
ضریب تبادل گرمای آب و یخ	۶
کسری از پرتوهای خورشیدی جذب شده در سطح یخ	۷
ضریب کاهش اشعه‌ی خورشیدی برای یخ	۸
حداقل ضخامت یخ قبل از تشکیل یخ مجاز است، m	۹
دمای بالاتر از این که تشکیل یخ مجاز نیست، $^{\circ}C$	۱۰

### ۱۸-۳-۳- توابع زمان جنبشی

تعریف تابع زمان جنبشی، بسته به ساختار و فرآیند جنبشی سیستم‌های متشکل از هر مدل، متفاوت خواهد بود. در زیر ۲۱ تابع زمانی موجود در ماژول گرمایی لیست شده است. تمام توابع زمانی در ارتباط با پارامتر "pointer" در تعریف پارامتر بخش (بخش ۱-۳) عمل می‌کنند. شکل (۱۸-۴) از صفحه‌ی ورودی کاربر، تابع زمان محیطی برای WASP را نشان می‌دهد. توجه داشته باشید که کاربر کدام توابع زمانی را انتخاب می‌کند و باید دکمه رادیویی "Used" را نیز برای انتقال اطلاعات به مدل بررسی کند. برای هر تابع زمانی که تعریف می‌شود، کاربر باید یک سری زمانی از داده‌ها را فراهم نماید.



شکل ۱۸-۴ توابع زمان جنبشی برای ماژول دما

در جدول (۱۸-۴) توصیف مختصری از توابع زمان محیطی ارائه شده‌است.

جدول ۱۸-۴ توابع زمان محیطی برای ماژول دما

ردیف	توابع زمان محیطی
۱	تابع پوشش ابر متغیر- زمان (۱) بسته به تعریف چندبرابر کننده‌ی پارامتر قطعه، پوشش ابر می‌تواند یک تابع نرمال شده و یا یک پوشش ابر (درصد) باشد.
۲	تابع پوشش ابر متغیر- زمان (۲)، بدون واحد یا درصد
۳	تابع پوشش ابر متغیر- زمان (۳)، بدون واحد یا درصد
۴	تابع پوشش ابر متغیر- زمان (۴)، بدون واحد یا درصد
۵	تابع سرعت باد متغیر- زمان (۱)، سرعت باد بسته به تعریف فاکتور پارامتر قطعه، می‌تواند یک تابع نرمال شده و یا سرعت باد واقعی (متر بر ثانیه) باشد.
۶	تابع سرعت باد متغیر- زمان (۲)، بدون واحد یا $m sec^{-1}$
۷	تابع سرعت باد متغیر- زمان (۳)، بدون واحد یا $m sec^{-1}$

تابع سرعت باد متغیر- زمان (۴)، بدون واحد یا $m sec^{-1}$	۸
تابع دمای هوای متغیر- زمان (۱)، بسته به تعریف فاکتور پارامتر قطعه، دمای هوا می‌تواند یک تابع نرمال شده و یا دمای هوا باشد.	۹
تابع دمای هوای متغیر- زمان (۲)، بدون واحد یا EC	۱۰
تابع دمای هوای متغیر- زمان (۳)، بدون واحد یا EC	۱۱
تابع دمای هوای متغیر- زمان (۴)، بدون واحد یا EC	۱۲
تابع دمای نقطه‌ی شبنم متغیر- زمان (۱)، دمای نقطه‌ی شبنم می‌تواند یک تابع نرمال شده و یا دمای نقطه‌ی شبنم باشد که به تعریف فاکتور پارامتر بخش، بستگی دارد.	۱۳
تابع دمای نقطه‌ی شبنم متغیر- زمان (۲)، بدون واحد یا EC	۱۴
تابع دمای نقطه‌ی شبنم متغیر- زمان (۳)، بدون واحد یا EC	۱۵
تابع دمای نقطه‌ی شبنم متغیر- زمان (۴)، بدون واحد یا EC	۱۶
تابع ضریب انقراض متغیر- زمان (۱)، بسته به تعریف فاکتور پارامتر قطعه، انقراض نور می‌تواند یک تابع نرمال شده و یا ضریب انقراض واقعی در $m^{-1}$ باشد.	۱۷
تابع ضریب انقراض متغیر- زمان (۲)، بدون واحد یا $m^{-1}$	۱۸
تابع ضریب انقراض متغیر- زمان (۳)، بدون واحد یا $m^{-1}$	۱۹
تابع ضریب انقراض متغیر زمان (۴)، بدون واحد یا $m^{-1}$	۲۰
تابع ضریب محافظت باد متغیر- زمان. ضریب محافظت باد بسته به تعریف فاکتور پارامتر قطعه، می‌تواند یک تابع نرمال شده یا ضریب محافظت واقعی (۰ تا ۱) باشد.	۲۱

## ۱۸-۲- منابع

1. Ambrose, B, Jr., P.E., T.A. Wool, and J.L. Martin, "The Water Quality Analysis Simulation Program, WASP5. Part B: the WASP5 Input Dataset, Version 5.00," U.S. Environmental Protection Agency, Center for Exposure Assessment Modeling, Athens, GA, May, 1993.

2. Ambrose, B, Jr., P.E., T.A. Wool, and J.L. Martin, "The Water Quality Analysis Simulation Program, WASP5; Part A: Model Documentation," U.S. Environmental Protection Agency, Center for Exposure Assessment Modeling, Athens, GA, June, 1993.
3. Ashton, G.D. 1979. "Suppression of River Ice by Thermal Effluents", CRREL Rpt. 79-30, US Army Engineer Cold Regions Research and Engineering Laboratory, Hanover, NH.
4. Brady, D.K., Graves, W.L., and Geyer, J.C. 1969. "Surface Heat Exchange at Power Plant Cooling Lakes", Cooling Water 2, Discharge Project No. 5, Publication No. 69-901, Edison Electric Institute, New York, NY.
5. Cole, T.M. and E.M. Buchak. 1994. ACE-QUAL-W2: A Two-Dimensional, Laterally Averaged, Hydrodynamic and Water Quality Model, Version 2.0, User Manual, @ Draft Instruction Report, Station, Vicksburg, MS
6. Edinger, J.E., Brady, D.K., and Geyer, J.C. 1974. "Heat Exchange and Transport in the Environment", Rpt. No. 14, EPRI Publication No. 74-049-00-34, prepared for Electric Power Research Institute, Cooling Water Discharge Research Project (RP-49), Palo Alto, CA.
7. Ford, D.E., and Johnson, M.C. 1983. "An Assessment of Reservoir Density Currents and Inflow Processes", Technical Rpt. E-83-7, US Army Engineer Waterways Experiment Station, Vicksburg, MS.
8. Gill, A.E. 1982. "Appendix 3, Properties of Seawater", Atmosphere-Ocean Dynamics, Academic Press, New York, NY, pp 599-600.
9. Martin, J.L. "MERC4, A Mercury Transport and Kinetics Model, Beat Test Version 1.0: Model Theory and User's Guide," Prepared for the U.S. Environmental Protection Agency, Center for Exposure Assessment Modeling, Athens, GA, July 1992.
10. Martin, J.L. and A. J. Medine. AA Dynamic model of Metal Speciation and Transport in Surface Waters (META4): Model Description, @ Draft manuscript, ASci Corporation, Athens, GA.
11. Maykut, G. N. and N. Untersteiner. 1971. "Some results from a time dependent, thermodynamic model of sea ice", J. Geophys. Res., 83: 1550-1575.
12. Patterson, J.C. and Hamblin, P.F., "Thermal Simulation of a Lake with Winter Ice Cover", Limnology and Oceanography, 33(3), 1988, P. 323-338.
13. Wake, A. 1977. "Development of a Thermodynamic Simulation Model for the Ice Regime of Lake Erie", Ph.D. thesis, SUNY at Buffalo, Buffalo, NY.



فصل نوزدهم

ماژول نور

### ۱-۱۹- تابش خورشیدی

تابش خورشیدی در برخورد به ستون آب در طیف‌های متفاوتی منتشر می‌شود. مدل WASP8 طول موج‌هایی از فرابنفش تا مادون قرمز را در نظر می‌گیرد و به باند موج‌های مجزا تقسیم می‌کند. این باندهای مجزا شده در ستون آب از فرآیندهای مختلفی منتج می‌شوند که برای پروسه‌ی کیفیت آب مهم هستند:

- تعادل گرمایی،
- رشد جلبک،
- فوتولیز شیمیایی،
- فوتولیز نانو شیمیایی،
- مرگ باکتریایی.

تابش خورشیدی کل به سه کلاس گسترده تقسیم می‌شود:

جدول ۱-۱۹ تقسیم تشعشعات خورشیدی کل به کلاس‌های موجی

کلاس موج	رنگ	طول موج، nm	کسری از کل
۱	فرابنفش	۲۹۵-۳۷۹	۰/۰۳۶
۲	مرئی	۳۸۰-۷۲۴	۰/۴۶۴
۳	فروسرخ	۷۲۵-۲۵۰۰	۰/۵۰۰

این سه کلاس در معادلات موازنه‌ی گرما در مدول دمای 8 WASP و در معادلات مرگ باکتری‌ها در مدول گرمای تغذیه‌گرایی و سمی استفاده می‌شوند. نور مرئی برابر با تابش فعال فتوسنتزی (PAR) می‌باشد که در مدول تغذیه‌گرایی برای تخمین رشد جلبکی استفاده می‌شود.

تابش فرابنفش و خورشیدی مرئی به ۱۰ نوار موجی تقسیم می‌شوند: این طول موج‌ها برای تعیین ضرایب معادلات تجزیه‌ی شیمیایی و نانوشیمیایی در ماژول سمی WASP استفاده می‌شوند. جدول (۱۹-۲) به‌طور خلاصه نشان می‌دهد که چگونه WASP با کسری از تابش کل از عرض جغرافیایی، اشعه‌ی خورشید را به باندهای موج فرابنفش، مرئی و مادون قرمز تقسیم می‌کند.

جدول ۱۹-۲ اشعه ماورای بنفش و طول موج مرئی، با کسری عرض جغرافیایی

ردیف	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷
رنگ	uVb med	uVb high	uVa low	uVa med	uVa high	بنفش	آبی
طول موج nm	۲۹۵-۳۰۴	۳۰۵-۳۱۴	۳۱۵-۳۳۴	۳۳۵-۳۵۴	۳۵۵-۳۷۹	۳۸۰-۴۴۹	۴۵۰-۴۹۴
0°N	./۰۰۰۰۱۵	./۰۰۰۱۴۲	./۰۰۸۴۵	./۰۱۱۴۱	./۰۱۷۲۳	./۰۷۶۲۶	./۰۶۶۶۴
10°N	./۰۰۰۰۱۵	./۰۰۰۱۳۹	./۰۰۸۳۹	./۰۱۱۳۷	./۰۱۷۱۸	./۰۷۶۱۷	./۰۶۶۶۳
20°N	./۰۰۰۰۱۳	./۰۰۰۱۳۲	./۰۰۸۲۵	./۰۱۱۲۶	./۰۱۷۰۶	./۰۷۵۹۳	./۰۶۶۵۹
30°N	./۰۰۰۰۱۱	./۰۰۰۱۲۰	./۰۰۸۰۱	./۰۱۱۰۸	./۰۱۶۸۶	./۰۷۵۵۰	./۰۶۶۵۲
40°N	./۰۰۰۰۸	./۰۰۰۱۰۴	./۰۰۷۶۶	./۰۱۰۸۲	./۰۱۶۵۵	./۰۷۴۸۲	./۰۶۶۳۹
50°	./۰۰۰۰۶	./۰۰۰۰۸۵	./۰۰۷۲۱	./۰۱۰۵۲	./۰۱۶۱۹	./۰۷۳۹۴	./۰۶۶۱۶
60°N	./۰۰۰۰۴	./۰۰۰۰۶۷	./۰۰۶۸۱	./۰۱۰۵۴	./۰۱۶۳۰	./۰۷۳۴۳	./۰۶۶۴۴

۸	سبز	۴۹۵-۵۵۹	۰/۱۰۳۷۵	۰/۱۰۳۷۸	۰/۱۰۳۹۴	۰/۱۰۴۰۲	۰/۱۰۴۰۶	۰/۱۰۴۰۹	۰/۱۰۳۸۵
۹	زرد-نارنجی	۵۷۰-۶۱۹	۰/۰۶۵۴۶	۰/۰۶۵۴۹	۰/۰۶۵۵۶	۰/۰۶۵۶۶	۰/۰۶۵۷۶	۰/۰۶۵۸۶	۰/۰۶۴۲۲
۱۰	قرمز	۶۲۰-۷۳۹	۰/۱۴۹۱۴	۰/۱۴۹۳۴	۰/۱۴۹۹۵	۰/۱۵۱۰۶	۰/۱۵۲۸۲	۰/۱۵۵۵۰	۰/۱۵۷۶۹

WASP مقدار کل تشعشع در هر باند موج را با استفاده از درون‌یابی برای یک عرض جغرافیایی مشخص، تعیین می‌کند. هر باند موج که به‌طور جداگانه از طریق ستون آبی کاهش می‌یابد، در بخش ۴ نشان‌دهنده شده‌است. واکنش‌های فوتوشیمیایی توسط باند موج‌های گسسته که با ضرایب متناسب با سرعت هر باند در نظر گرفته شده‌است، برآورد می‌شوند و با ثابت‌های سرعت متفاوتی که برای هر کدام تعیین می‌شوند، هدایت می‌شوند.

در مدل WASP 8 از سری‌های زمانی تابش کل به‌همراه کسری از باند موج برای تبدیل اشعه‌ی خورشید در سطح آب استفاده می‌شود. کل تشعشع می‌تواند توسط کاربر وارد شود و یا توسط مدل محاسبه شود. از طرفی کسر باند موج نیز می‌تواند شامل مقادیر تعیین‌شده یا پیش‌فرض باشد.

### ۱۹-۲- تابش ورودی کل

دو گزینه برای مشخص کردن کل تابش خورشیدی به سطح آب وجود دارد و به این صورت می‌باشد که یا باید توسط کاربر وارد شود و یا مدل نور روزانه را محاسبه نماید. این گزینه در بخش Constants از گروه Light مشخص شده‌است. مقدار پیش‌فرض محاسبه‌شده از نور روزانه، \* می‌باشد.

### گزینه‌ی +، نور روزانه‌ی محاسبه‌شده

گزینه‌ی + نور داخلی محاسبه‌شده براساس عرض جغرافیایی، طول جغرافیایی، روز سال و زمان روز می‌باشد. طول و عرض جغرافیایی محدوده‌ی مطالعه به‌عنوان ورودی اولیه می‌باشند. روز و زمان شبیه‌سازی به‌عنوان یک ورودی در روند محاسبات لحاظ می‌شود، و نور محاسبه‌شده نیز نشان‌دهنده‌ی تابش آسمان صاف در  $W/m^2$   $I_{clear}$  می‌باشد.

### گزینه ۱: نور روزانه‌ی ورودی کاربر

گزینه‌ی ۱ نور، تا ۴ سری زمانی مشخص و بصورت ساعتی شار نور در سطح تقسیم می‌شود. مدل WASP 8 فرض می‌کند که این توابع ورودی طیف کل تابش خورشیدی ( $W/m^2$ ) را نشان می‌دهند، به صورتی که هر گام زمانی، مدل تابش کل را خوانده و آن را برای هر بخش سطحی اعمال می‌کند. تابع زمان تابش خورشیدی مناسب برای هر بخش ( $1-4$ ) در بخش داده‌ی پارامتر از گروه زیست‌محیطی قرار شده‌است. توابع زمان تابش خورشیدی در بخش توابع زمان وارد شده‌اند. اگر داده‌ها نشان‌دهنده‌ی کسری از کل (یعنی نور مریی یا PAR) بوده و یا اگر داده‌ها در واحدهای جایگزین بیان شوند، آن‌گاه کاربر باید یک فاکتور مقیاس مناسب را در "فاکتور تابش خورشیدی" واقع در بخش داده‌های پارامتر از گروه زیست‌محیطی وارد کند. برای تبدیل از نور PAR به تابش کل، مقدار فاکتور باید  $2/155$  باشد.

### گزینه‌ی ۲: نور روزانه‌ی ورودی کاربر، نور روزانه‌ی محاسبه‌شده

کل شار روزانه در روز گزینه‌ی ۲، مجموع شار نور روزانه‌ی سطحی که تا ۴ سری زمانی مشخص تقسیم‌بندی می‌شود ( $W/m^2$ ). در هر روز از شبیه‌سازی جدید، مدل؛ کل تابش روزانه‌ی آن روز  $I_{Tot}$  را می‌خواند. و بخشی از تابش کل روزانه را برای هر بخش از سطح، محاسبه و اعمال می‌کند. تابع زمانی تابش خورشیدی مناسب برای هر بخش ( $1-4$ ) در بخش داده‌ی پارامتر از گروه زیست‌محیطی وجود دارد. این توابع در بخش توابع زمان وارد می‌شوند. اگر داده‌ها در واحدهای جایگزین بیان شوند، آن‌گاه کاربر باید یک فاکتور مقیاس مناسب را در "فاکتور تابش خورشیدی (بی واحد یا  $W/m^2$ )" واقع در بخش داده‌های پارامتر از گروه محیطی وارد کند.

توزیع نور روزانه‌ی پیش‌فرض روال پیش‌فرض چرخه‌ی اصلی، براساس عرض جغرافیایی، طول جغرافیایی، روز سال و زمان روز می‌باشد. این مدل کل تابش آسمان صاف را برای روز ( $I_{ClearDay}$ ) و تابش آسمان صاف را برای هر گام زمانی در طول روز ( $I_{ClearSky}$ ) محاسبه می‌کند. شار تابش لحظه‌ای خورشید، شار کل روزانه‌ی ورودی ( $I_{Tot}$ ) برابر نرخ روزانه برای آن مرحله‌ی زمانی می‌باشد.

$$I = I_{Tot} (I_{ClearSky} / I_{ClearDay}) \quad (1-19)$$

طول و عرض جغرافیایی محدوده‌ی آبی به‌عنوان یک ورودی در مدل وارد می‌شود. روز و زمان شبیه‌سازی نیز براساس روز و زمان شروع شبیه‌سازی و همچنین مرحله‌ی زمانی محاسبه، به‌صورت داخلی نگاه‌داشته می‌شوند.

توزیع نور روزانه‌ی جایگزین در مواقعی که تابع زمان کسر نور روز ( $f_{\text{day}}$ ) مشخص باشد، از یک گزینه‌ی جایگزین که توسط کاربر کنترل می‌شود، استفاده می‌شود. در این حالت، کل تابش روزانه در ساعات روز (بین طلوع و غروب) با استفاده از یک منحنی نیمه‌سینوسی و با حداکثر مقدار در ظهر توزیع می‌شود.

$$I_{\text{max}} = I_{\text{tot}} \pi / (2f_{\text{day}}) \quad (2-19)$$

$$I = I_{\text{max}} \sin(\pi T_{\text{day}}) \quad (3-19)$$

که  $I_{\text{tot}}$  کل تابش روزانه ( $W/m^2$ )،  $f_{\text{day}}$  بخشی از روز که روشن است ( $0.8-0.2$ ) و  $T_{\text{day}}$  نیز زمان نرمال شدن بین طلوع و غروب خورشید می‌باشد که کسری از روشنایی روز معرفی می‌شود. در این حالت طلوع آفتاب ۰، ظهر ۰/۵ و غروب ۰ است. و در ساعات شب نیز مقدار آن برابر با صفر می‌باشد.

### ۱۹-۳- کاهش نور در بالای سطح آب

تابش خورشیدی ورودی در شرایط پوشش ابر، سایه‌اندازی سایبان، پوشش یخ و بازتابندگی سطح آب کاهش می‌یابد. پوشش ابر محاسبه‌ی میزان نور توسط مدل در داخل نور تولیدشده (گزینه‌ی ۱) از تابش آسمان صاف را نشان می‌دهد، و باید از طریق پوشش ابر مشخص شده توسط کاربر (کسری از آسمان) کاهش یابد.

$$I = I_{\text{clear}} * /.65 * \text{Cloud}^2 \quad (4-19)$$

تابع زمان پوشش ابر مناسب برای هر بخش (۱-۴) در بخش داده‌ی پارامتر از گروه محیطی مشخص شده است. توابع زمان پوشش ابر (۰-۱) در بخش توابع زمان وارد شده‌اند.

سایه‌اندازی سایبان نور سطحی نزدیک را می‌توان با سایه‌ی گیاهی کاهش داد و نور در زیر سایبان نیز باید از طریق سایه‌ی گیاهی مشخص شده توسط کاربر (بخشی از نور مسدود شده) کاهش یابد.

$$I_s = I * (1 - \text{shade}) \quad (5-19)$$

تابع زمان سایه‌اندازی مناسب برای هر بخش (۱-۴) در بخش داده پارامتر از گروه محیطی مشخص شده است. توابع زمان سایه‌اندازی (۰-۱) در بخش توابع زمان وارد می‌شوند.

انعکاس سطح آب کسری از نور که به سطح آب می‌رسد  $I_s$  منعکس می‌شود و نور بالای ستون آب  $I_0$  با کسر نور منعکس شده کاهش می‌یابد.

$$I_0 = I_s * (1 - \beta_w) \quad (6-19)$$

بازتابش پیش فرض برابر ۰/۰۶ می‌باشد و کاربر می‌تواند یک مقدار متناوب را در بخش ثابت‌ها از گروه نور وارد کند.

**کاهش در یخ** - هنگامی که یخ بر روی سطح آب شکل می‌گیرد، نور سطحی  $I_s$ ، توسط انعکاس سطح یخ (آلبدو)، جذب توسط سطح  $(\beta_i)$ ، و کاهش نور در میان ضخامت یخ  $h_i$ ، کاهش می‌یابد.

$$I_0 = I_s * (1 - \text{albedo}) * (1 - \beta_i) * \exp(-\gamma_i h_i) \quad (7-19)$$

مقادیر پیش‌فرض برای albedo، جذب سطحی و ضریب کاهش یخ  $(\gamma_i)$  صفر می‌باشد و کاربر باید مقادیر مناسب را در بخش ثابت‌ها از گروه دمای آب وارد کند.

بخش‌های پوشش یخ سطحی می‌توانند در بخش داده‌ی پارامتر از گروه زیست‌محیطی و گروه تابع زمان ورودی باشند. این ورودی‌ها با هم، کسری از مناطق سطحی را نشان می‌دهند که توسط یخ پوشش داده شده‌اند.

$$F_{ice} = SG_{ice} * TF_{ice} \quad (8-19)$$

ضخامت یخ با مدول دمایی محاسبه می‌شود. اگر دمای آب و یخ شبیه‌سازی نشوند، "حداقل ضخامت یخ قبل از تشکیل یخ" به‌عنوان یک ضخامت متوسط اعمال می‌شود.

### ۱۹-۴- کاهش نور از طریق ستون آب

در ستون آب، نور طبق معادله‌ی بیر-لمبرت با عمق کاهش می‌یابد:

$$I_z = I_0 * \exp(-K_{e\lambda} z) \quad (9-19)$$

که  $K_{e\lambda}$  ضریب کاهش نور،  $\lambda$  (1/m) شاخص طول موج و  $z$  عمق زیر سطح (m) است. ضرایب کاهش نور در داخل تابعی از آب پس‌زمینه می‌باشد که کلروفیل a جلبک، DOC و جامدات محاسبه می‌شود.

$$K_{e\lambda} = K_{w\lambda} + K_{chl,\lambda} + Chl^{exp,\lambda} + K_{DOC,\lambda} \times DOC + K_{Solid,\lambda} \times TSS \quad (10-19)$$

که  $Chl$  کلروفیل جلبک ( $ug/L$ )،  $DOC$  کل کربن آلی محلول ( $mg/L$ ) و  $TSS$  کل مواد جامد معلق ( $mg/L$ ) می‌باشند، ضرایب  $DOC$  در ماژول سموم و ضرایب  $CBOD$  در ماژول تغذیه‌گرایی، به متغیرهای حالت شبیه‌سازی می‌شوند و ضرایب  $DOC$  در ماژول تغذیه‌گرایی از  $CBOD$  محاسبه می‌شوند. ضرایب پیش‌فرض بر اساس طول موج تعریف می‌شوند:

جدول ۱۹-۳ ضرایب میرایی نور توسط باند موج

جامدات (1/m/mg/L)	DOC (1/m/mg/L)	کلروفیل (1/m/ug/L)	آب (1/m)	رنگ	ردیف
۰/۳۴	۶/۲۲	۰/۱۰۳	۰/۱۵۱	uVb med	۱

۰/۳۴	۵/۴۰	۰/۰۸۱۶	۰/۱۰۹	uVb high	۲
۰/۳۴	۴/۵۹	۰/۰۶۹	۰/۰۸۰۵	uVa low	۳
۰/۳۴	۳/۴۰	۰/۰۵۷	۰/۰۵۱۲	uVa med	۴
۰/۳۴	۲/۵۴	۰/۰۵۳	۰/۰۳۴۰	uVa high	۵
۰/۳۴	۱/۲۶۶	۰/۰۳۹	۰/۰۱۶۹	بنفش	۶
۰/۳۴	۰/۵۱۴	۰/۰۲۶۲	۰/۰۱۶۶	آبی	۷
۰/۳۴	۰/۲۸۹	۰/۰۱۴۳	۰/۰۴۷۵	سبز	۸
۰/۳۴	۰/۱۱۵	۰/۰۰۶۳	۰/۲۱۷	زرد-نارنجی	۹
۰/۳۴	۰/۰	۰/۰۰۶۵	۱/۰۰۷	قرمز	۱۰
۰/۳۴	۰/۰	۰/۰	۲/۰۷	فروسرخ	۱۱

مقدار ضریب کلروفیل به صورت پیش فرض در طول موج، به ۱ می‌رسد. ضرایب برای کل ماوراء بنفش و کل نور مرئی به وسیله‌ی مجموع وزنی گروه‌های باند موج محاسبه می‌شوند (۱-۶ برای ماوراء بنفش، ۷-۱۰ برای مرئی).

کاربر می‌تواند ضرایب متناوب برای نور مرئی را در گروه Constants، بخش Light وارد کند. اگر چندین بخش از DOC و یا CBOD شبیه‌سازی شوند، کاربر می‌تواند مجموعه‌ای از ضرایب کاهش نور را برای هر بخش DOC وارد نماید.

در ماژول تغذیه‌گرایی، کاربر می‌تواند ضرایب کاهش نور مورد نظر خود را برای نور مرئی مشخص کند. تعیین مقادیر خاص می‌تواند به صورت ورودی بخش داده‌ی پارامتر، گروه محیطی باشد. یک تابع زمانی کمکی، می‌تواند یک ورودی در بخش توابع زمانی باشد. ضرایب کاهش نور برای هر بخش در هر گام زمانی، محصول پارامترهای ورودی و تابع زمان خواهند بود.

اگر کاربر ماکرو جلبک را در ماژول تغذیه‌گرایی شبیه‌سازی کند، آن‌گاه در این حالت ضریب کاهش نور اضافی برای سایه‌دهی ماکرو جلبک نیز در نظر گرفته می‌شود:

$$K_{e,MA} = K_{MA} \times MA \quad (11-19)$$

که  $K_{e,MA}$  ضریب سایه‌اندازی ماکرو جلبک ( $1/m$ ) و  $MA$  زیست‌توده‌ی ماکرو جلبک ( $g_{DW}/m^3$ ) و  $K_{MA}$  ضریب ( $1/m/g_{DW}/m^3$ ) می‌باشد که در بخش ثابت‌ها در گروه ماکرو جلبک مشخص شده‌است. این ضریب کاهش، در زیر سطح سایبان ماکرو جلبک اعمال می‌شود که می‌تواند بر روی سطح آب و یا در ارتفاع مشخصی از پایین باشد.