



Simulation of Surface Water Quality Parameters, Suspended Sediments and Heavy Metals in the River (Case Study: Sarouq River)

Maryam Khalilzadeh Poshtegal¹ | Seyed Ahmad Mirbagheri²

1. Civil Environmental Engineering, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran. E-mail: mkhalilzadeh@mail.kntu.ac.ir
2. Corresponding Author, Faculty of Civil Environmental Engineering, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran. E-mail: mirbagheri@kntu.ac.ir

Article Info

Article type:

Research Article

Article history:

Received: 23 August 2022

Received in revised form:

03 September 2022

Accepted: 12 September 2022

Published online:

25 December 2022

Keywords:

Coefficient,
model of physical and chemical
parameters,
reaction kinetic,
spring and winter.

ABSTRACT

In this research, the simulation and phase transfer of heavy metal solution in the river has been done by developing a one-dimensional qualitative model. Environmental parameters (T), temperature, dissolved oxygen, (DO) (pH) and salinity (EC) are considered as influencing parameters on the change in the concentration of the solution phase of heavy metals lead, cadmium and zinc in springs and wells of the displacement-diffusion equation. Became to determine the above hydrodynamic and environmental parameters for use in the developed model, Hec-Ras hydrodynamic model and Qual2kw qualitative model have been used. In decoupling the spring and well terms of the displacement-diffusion equation of the qualitative model developed using the measured data from the Sarouk River, various relationships were considered to relate the kinetic coefficient of the first-order reaction of the dissolved phase of heavy metals to the above environmental parameters. And to find the constant coefficients of these relations, the method of minimization of simulation errors and Vba coding was used, and the linear relation including all the above parameters is considered as the final relation. The kinetic coefficient of the reaction is different in different parts of the river, and to simulate and determine the concentration of the solution phase of heavy metals at each point, the kinetic coefficient of the reaction corresponding to the same point should be used. Also, there is a significant increase in the accuracy of the developed model if the above environmental parameters are used in the spring and well term of displacement-diffusion equations and the effect of other qualitative parameters is insignificant, which indicates its proper efficiency in simulating the dissolved phase of heavy metals in the river.

Cite this article: Khalilzadeh Poshtegal, M., & Mirbagheri, S. A. (2022). Simulation of Surface Water Quality Parameters, Suspended Sediments and Heavy Metals in the River (Case Study: Sarouq River). *Journal of Water and Irrigation Management*, 12 (4), 763-781. DOI: <http://doi.org/10.22059/jwim.2022.347604.1015>





شبیه‌سازی پارامترهای کیفی آب سطحی، رسوبات معلق و فلزات سنگین (رودخانه ساروق)

مریم خلیل‌زاده پشتگل^۱ | سید احمد میرباقری^{۲*}

۱. گروه عمران محیط زیست، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران. رایانامه: mkhalilzadeh@mail.kntu.ac.ir
۲. نویسنده مسئول، گروه عمران محیط زیست، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران. رایانامه: mirbagheri@kntu.ac.ir

اطلاعات مقاله

چکیده

نوع مقاله: مقاله پژوهشی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۶/۰۱

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۰۶/۱۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۶/۲۱

تاریخ انتشار: ۱۴۰۱/۱۰/۰۴

کلیدواژه‌ها:

جابه‌جایی و پخش،

چشمه و چاه،

ضریب سینتیک واکنش،

مدل پارامترهای فیزیکی و شیمیایی آب.

در این پژوهش شبیه‌سازی و انتقال فاز محلول فلزات سنگین در رودخانه با توسعه مدل کیفی یک‌بعدی مورد بررسی قرار گرفت. پارامترهای محیطی (T) دما، اکسیژن محلول، DO، pH و شوری (EC) به‌عنوان پارامترهای تأثیرگذار بر تغییر غلظت فاز محلول فلزات سنگین سرب، کادمیم و روی در جمله چشمه و چاه معادله جابه‌جایی-پخش در نظر گرفته شدند. برای تعیین پارامترهای هیدرودینامیکی و محیطی فوق برای استفاده در مدل توسعه داده‌شده، از مدل هیدرودینامیکی Hec-Ras و مدل کیفی Qual2kw استفاده شده است. در منصف‌سازی ترم چشمه و چاه معادله جابه‌جایی-پخش مدل کیفی توسعه داده شده با استفاده از داده‌های اندازه‌گیری شده از رودخانه ساروق، رابطه‌های مختلفی برای ارتباط دادن ضریب سینتیک واکنش مرتبه اول فاز محلول فلزات سنگین به پارامترهای محیطی فوق در نظر گرفته شد و برای یافتن ضرایب ثابت این رابطه‌ها از روش کمینه‌سازی خطاهای شبیه‌سازی و کدنویسی Vba استفاده شد که رابطه خطی مشتمل بر تمامی پارامترهای فوق، به‌عنوان رابطه نهایی در نظر گرفته شده است. ضریب سینتیک واکنش در نقاط مختلف رودخانه متفاوت بوده و برای شبیه‌سازی و تعیین غلظت فاز محلول فلزات سنگین در هر نقطه می‌باید از ضریب سینتیک واکنش متناظر با همان نقطه استفاده نمود. همچنین افزایش معنی‌دار دقت مدل توسعه داده‌شده در صورت استفاده از پارامترهای محیطی فوق در ترم چشمه و چاه معادلات جابه‌جایی-پخش بوده و تأثیر پارامترهای کیفی دیگر ناچیز می‌باشد، که بیانگر کارایی مناسب آن در شبیه‌سازی فاز محلول فلزات سنگین در رودخانه می‌باشد.

استناد: خلیل‌زاده پشتگل، م. و میرباقری، س. ا. (۱۴۰۱). شبیه‌سازی پارامترهای کیفی آب سطحی، رسوبات معلق و فلزات سنگین (رودخانه ساروق). نشریه

مدیریت آب و آبیاری، ۱۲ (۴)، ۷۶۳-۷۸۱. DOI: <http://doi.org/10.22059/jwim.2022.347604.1015>



۱. مقدمه

شبیه‌سازی کیفیت آب در رودخانه را می‌توان به دو مرحله تقسیم کرد. در مرحله اول مشخصه‌های جریان مانند عمق و سرعت محاسبه می‌شوند که آن را می‌توان شبیه‌سازی هیدرودینامیک نامید. در مرحله دوم و با استفاده از نتایج مرحله اول، عوامل کیفی شبیه‌سازی می‌شوند. بدین ترتیب می‌توان مدل‌های عددی شبیه‌سازی کیفیت آب را به دو قفسه یا ماژول هیدرودینامیک و کیفیت تقسیم کرد. با توجه به این که در رودخانه‌ها، خورها و مخازن، تغییرات چگالی به‌طور عمده ناشی از تغییرات دما، شوری و مواد معلق می‌باشد و لذا تغییرات این متغیرهای کیفی می‌تواند در مشخصات هیدرودینامیکی جریان مؤثر باشد. با توجه به این که هدف از پژوهش حاضر، شبیه‌سازی کیفی انتقال فاز محلول فلزات سنگین در رودخانه می‌باشد و برای واسنجی^۱ و صحت‌سنجی^۲ شبیه‌سازی صورت گرفته می‌باید از داده‌های میدانی استفاده شود. مدل‌سازی صورت گرفته در این پژوهش از نوع یک‌بعدی می‌باشد. از طرفی با توجه به وجود مدل‌های هیدرودینامیکی متعدد برای شبیه‌سازی رودخانه، استفاده از یکی از این مدل‌ها برای شبیه‌سازی مشخصات هیدرودینامیکی جریان در رودخانه مورد مطالعه مدنظر قرار گرفته است. Noori et al. (2021) به بررسی غلظت فلزات سنگین در مخزن سد سبلان شمال غرب ایران و اثرات سرطان‌زا بودن و غیرسرطان‌زا بودن عناصر پرداختند. Hosseini et al. (2017) با بررسی کارایی مدل Qual2kw در خودپالایی رودخانه (مطالعه موردی رودخانه کارون در بازه زرگان-کوت امیر) دریافتند که این مدل کارایی خوبی برای بررسی خودپالایی رودخانه دارد. Noori et al. (2020) به ارزیابی آلودگی فلزی در رسوبات سطحی دریاچه نمک، ایران پرداختند. نتایج نشان داد که آلودگی فلزی در رسوبات سطحی به‌طور کلی کم بود، اگرچه غلظت سرب در قسمت جنوبی دریاچه نگران‌کننده بود. Noori et al. (2019) ایزاری جدید برای شبیه‌سازی لایه‌بندی حرارتی مخزن سد کرخه دست یافته‌اند که تلفیقی از مدل‌های تجزیه متعامد مناسب و مدل CE-Qual-w2 می‌باشد که برای شبیه‌سازی دمای رودخانه و مخزن استفاده شده است. Mohammadi et al. (2016) به ارزیابی توان خودپالایی و نقش اکسیژن محلول در کیفیت آب رودخانه کر (مطالعه موردی: پایین دست سد درودزن تا دریاچه طشک- بختگان) به کمک مدل Qual2kw پرداختند. نتایج پژوهش ایشان نشان داد که وجود پل‌ها و تأسیسات آب بند مانند بند امیر، پل رحمت‌آباد و بند حسن‌آباد می‌تواند باعث افزایش تلاطم و افزایش هوادهی و قدرت خودپالایی رودخانه کر و در نتیجه افزایش میزان اکسیژن محلول در رودخانه شود. به‌علت تأثیر پارامترهای کیفی دما، شوری و مواد معلق در چگالی جریان، می‌باید تأثیر حضور این عوامل در معادلات هیدرودینامیک در نظر گرفته شود. تأثیر عوامل مذکور معمولاً در قالب معادله حالت^۳ در محاسبات وارد می‌شود و معمولاً ارتباط تنگاتنگی بین معادلات هیدرودینامیک، معادلات کیفیت و معادله حالت وجود دارد. هم‌چنین با توجه به در نظر گرفتن پارامتر اکسیژن محلول (DO) علاوه بر پارامترهای دما (T)، EC و pH به‌عنوان پارامترهای تأثیرگذار در تغییرات ضریب واکنش غلظت فلزات سنگین، شبیه‌سازی تغییرات این پارامتر در میدان موردنظر نیز می‌باید انجام گیرد. از این‌رو، استفاده از مدل هیدرودینامیکی که ضمن شبیه‌سازی پارامترهای دما، TDS به‌عنوان شاخص شوری، DO، EC و pH برای استفاده در شبیه‌سازی انتقال غلظت فلزات سنگین، تأثیر تغییرات این پارامترها را در چگالی و در نتیجه سرعت جریان به‌وسیله معادله حالت در نظر بگیرد، مناسب‌تر خواهد بود. بر این اساس در این پژوهش از مدل هیدرودینامیکی Hec-Ras و مدل کیفی Qual2kw استفاده شده است. در ذیل ابتدا مبانی تئوری حاکم بر شبیه‌سازی هیدرودینامیک جریان و انتقال غلظت فلزات سنگین ارائه شده و سپس روش انجام پژوهش و روش‌های عددی حل معادلات توضیح داده شده است.

امروزه به‌علت استقرار مناطق شهری و روستایی و تمرکز واحدهای صنعتی در اطراف رودخانه‌ها، این بوم سامانه‌ها به شدت در معرض ورود آلاینده‌ها به‌ویژه آلاینده‌های فلزی قرار دارند. در این بین رسوبات بستر رودخانه به‌علت داشتن

توانایی بالا در تثبیت فلزات در اثر فرایندهای چون ته‌نشینی یا جذب سطحی می‌توانند محیط مناسبی برای بررسی شدت و تاریخچه آلودگی فلزی در بوم سامانه‌های رودخانه‌ای به حساب آیند. به همین منظور مطالعات متعددی در نقاط مختلف دنیا در زمینه مطالعه این فلزات در رسوبات رودخانه صورت گرفته است که تعدادی از این مطالعات آورده شده است. در میان پژوهش‌های انجام‌شده در خصوص فلزات سنگین در محیط‌های آبی، بعضی از پژوهش‌ها در قالب شبیه‌سازی انتقال فلزات به‌ویژه فلزات سنگین در آب‌ها به‌وسیله توسعه مدل‌های کیفی و بررسی تأثیر پارامترهای مختلف فیزیکی و شیمیایی محیطی روی تغییرات غلظت فلزات سنگین بوده است که در ادامه به تعدادی از این مطالعات اشاره می‌شود. Mirbagheri *et al.* (2008) به مدل‌سازی و شبیه‌سازی پارامترهای کیفی آب در سیستم‌های رودخانه، مطالعه موردی رودخانه کن در استان تهران پرداختند. Mirbagheri *et al.* (2010) به بررسی فلزات سنگین و نظارت بر سموم کشاورزی در رودخانه برای ارزیابی کیفیت آب پرداختند. Mirbagheri and Abaspour (2009) به مدل‌سازی ریاضی کیفیت آب در سیستم‌های رودخانه پرداختند. مقالات متعددی در رابطه با انتقال و مدل‌سازی رسوب بحث کرده‌اند. Mirbagheri (1981) در رودخانه کلسا در شمال کالیفرنیا، به مدل‌سازی ریاضی و انتقال رسوبات پرداختند. Handayani (2019) به تعیین ظرفیت بار آلودگی با استفاده از برنامه Qual2kw در رودخانه موسی پالمبانگ پرداخته‌اند. Hendrasari *et al.* (2020) به مقاومت بارگذاری در رودخانه سورابایا و سرشاخه آن با مدل Qual2kw پرداخته‌اند. Mohammadi *et al.* (2019) به ارزیابی عملکرد الگوریتم بهینه‌سازی چرخه آب و کالیبراسیون با مدل Qual2kw در رودخانه پرداختند. Tabrizi *et al.* (2019) به مدل‌سازی کیفیت آب رودخانه شاهرود با استفاده از مدل Qual2kw پرداختند. Gorbani *et al.* (2020) به شبیه‌سازی کیفیت آب رودخانه دز در ایران با استفاده از مدل Qual2kw پرداختند. نتایج پژوهش ایشان حاکی از دقت بالاتر شبیه‌سازی در ماه‌های پرآب نسبت به ماه‌های کم آب بود. همچنین بیش‌ترین دقت ارتوفسفات، pH، شبیه‌سازی مربوط به آمونوم و سپس به‌ترتیب نیترات، هدایت الکتریکی، اکسیژن خواهی بیوشیمیایی و اکسیژن محلول بوده است. Khalilzadeh and Mirbagheri (2019) به بررسی تغییرات آلودگی فلزات سنگین در رودخانه پرداختند و میزان اندکس آلودگی فلزات سنگین را به‌ترتیب براساس منابع آلاینده معدنی و فعالیت‌های انسانی در حوضه زربنه‌رود گزارش کردند. ایشان همچنین در پژوهشی دیگر به توزیع و ارزیابی فلزات سنگین و پارامترهای فیزیکی‌وشیمیایی در حوضه رودخانه زربنه‌رود و بالادست سد بوکان پرداختند و میزان آلودگی آهن، آلومینیوم و منگنز را به‌ترتیب براساس بیش‌ترین میزان پخش و توزیع بار آلودگی بین فلزات سنگین مورد مطالعه گزارش کردند. Khalilzadeh and Mirbagheri (2017) با توجه به پژوهش‌های انجام‌شده، لزوم شبیه‌سازی انتقال فاز محلول فلزات سنگین در رودخانه از طریق توسعه یک مدل کیفی، روشن می‌شود. در مدل‌سازی کیفی پیکره‌های آبی، تعداد محدودی از مدل‌های توسعه داده‌شده به شبیه‌سازی و مدل‌سازی عددی انتقال فلزات سنگین اختصاص یافته است که در این پژوهش با هدف مدل‌سازی یک‌بعدی فلزات سنگین در محیط نرم‌افزار Qual2kw و با استفاده از مدل هیدرودینامیکی Hec-Ras نسبت به این امر اقدام شده است و از طریق کدنویسی در محیط Vba نرم‌افزار Qual2kw ماژولی به نام heavy_metal اضافه شده است، که در منصف‌سازی ترم چشمه و چاه معادله جابه‌جایی - پخش مدل کیفی توسعه داده‌شده با استفاده از داده‌های اندازه‌گیری‌شده از رودخانه ساروق، رابطه‌های مختلفی برای ارتباط دادن ضریب سینتیک واکنش مرتبه اول فاز محلول فلزات سنگین به پارامترهای محیطی فوق در نظر گرفته می‌شود.

۲. مواد و روش‌ها

۲.۱. مدل Qual2kw

از سال ۱۹۲۵، پس از ارائه معادله Streeter-Phelps برای پیش‌بینی غلظت اکسیژن محلول در رودخانه‌ها، تاکنون

مدل‌های شبیه‌سازی متعددی برای شبیه‌سازی کیفی رودخانه‌ها، خلیج‌ها و آب‌های زیرزمینی به‌وجود آمده است. مدل Qual2kw که ویرایش مدرنی از برنامه معروف کیفیت آب رودخانه‌ها یعنی Qual2e است، اولین بار توسط Greg Pelletier *et al.* (2006) ارائه شده است. آخرین ویرایش این برنامه (که در این مطالعه از آن بهره گرفته شده است) نسخه 5.1 آن می‌باشد که از طریق اینترنت و به‌طور رایگان قابل دریافت است. این برنامه، انتقال و زوال آلاینده‌های معمول (یعنی غیر سمی) را شبیه‌سازی می‌کند. این برنامه Qual2kw رودخانه را به‌صورت یک‌بعدی، همراه با جریان دائمی غیریکنواخت شبیه‌سازی می‌کند و می‌تواند اثر بارگذاری را به دو صورت نقطه‌ای و غیر نقطه‌ای در نظر بگیرد. مدل Qual2kw همچنین قادر است تغییرات را به‌صورت روزانه و با گام‌های زمانی کمتر از یک ساعت شبیه‌سازی نماید. از Excel به‌عنوان رابط گرافیکی برای وارد کردن داده‌ها و مشاهده خروجی برنامه استفاده شده است. کلیه عملیات ارتباطی در ماکرو مجموعه Office توسط ویژوال بیسیک نوشته شده است (Pelletier and Chapra, 2005).

منشأ آلودگی آب توسط فلزات سنگین می‌تواند طبیعی مانند آب‌شستگی خاک‌ها و سنگ‌های حاوی فلزات سنگین و یا انسان ساخت مانند فاضلاب شهرها و صنایع، استفاده از کودها و سموم در فعالیت‌های کشاورزی، معادن روباز و ... و یا ترکیبی از هر دو باشد. فلزات سنگین در محیط آبی در دو فاز محلول و ذره‌ای انتقال می‌یابند که فاز محلول تابع حرکت آب بوده و فاز ذره‌ای جذب رسوبات شده و با آن‌ها حرکت می‌کند. تغییر غلظت بین فاز محلول و ذره‌ای فلزات سنگین از طریق فرایند جذب و واجذبی اتفاق می‌افتد که شرایط محیطی حاکم مانند دما، اکسیژن محلول (DO) و EC و pH روی این فرایند تأثیرگذار است. Shrestha and Orlob (1996) با توجه به غلظت فلزات سنگین و فازهای مختلف آن‌ها و همچنین اثرات آن‌ها بر اکوسیستم و محیط زیست، با استفاده از روش حل عددی المان محدود به شبیه‌سازی مکانی و زمانی پخش رسوبات چسبنده و فلزات سنگین در مصب‌ها پرداختند. فرایندی که مدل شبیه‌سازی براساس آن استوار است. شکل (۱) به بیان این فرایند می‌پردازد.

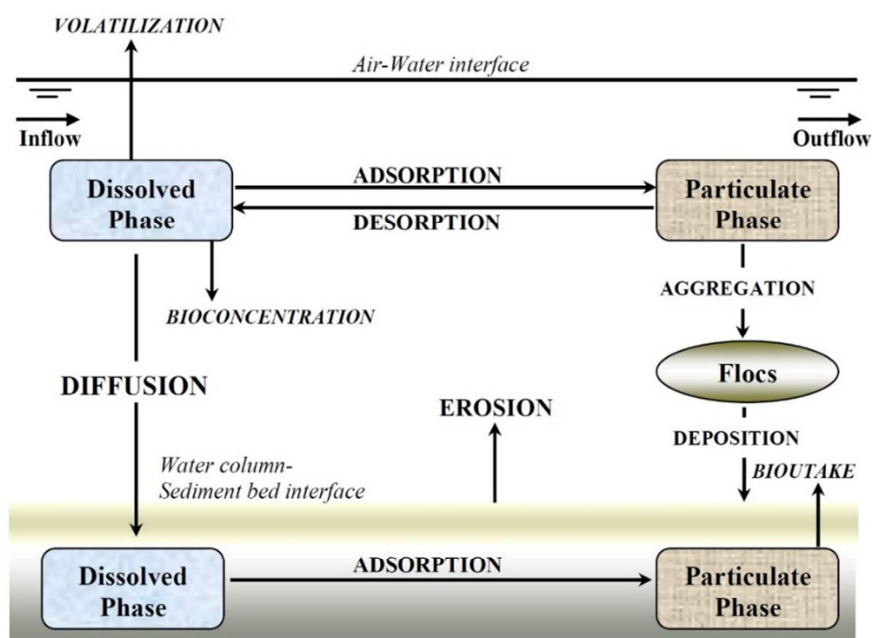


Figure 1. Conceptual Model of Key Processes Influencing Fate and Transport of Suspended Sediments and Associated Toxic Heavy Metals in Surface Water Systems (Shrestha and Orlob, 1996)

۲.۲. معرفی محدوده مورد مطالعه

مطابق شکل (۲) محدوده مطالعاتی حوضه آبریز رودخانه ساروق می‌باشد که یکی از شاخه‌های مهم رودخانه زربنه رود است و از کوه‌های خاوری و جنوبی شهر تکاب سرچشمه می‌گیرد. نقاط سرچشمه‌ای این رودخانه در دامنه‌های کوه ۲۵۳۰ متری ایوب انصار در جنوب شرقی تکاب و دامنه‌های غربی کوه ارنو واقع در شرق تکاب است (Modabberi and Moore, 2004).

این شاخه‌ها در شهر تکاب به هم پیوسته و رودخانه ساروق را تشکیل می‌دهند. جهت جریان اصلی آن از سمت شرق به سمت غرب می‌باشد و برای مصارف کشاورزی در داخل محدوده و تغذیه سد در نهایت به رودخانه زربنه رود ختم می‌شود (Mehrabi et al., 1999).

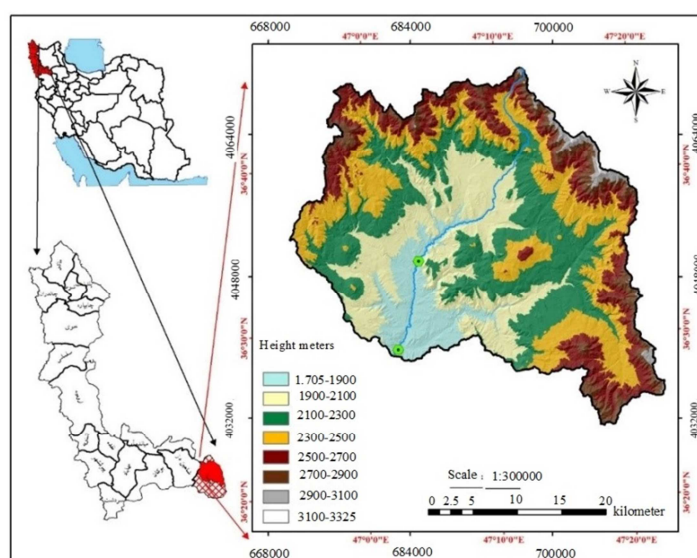


Figure 2. Location of Sarouq River in Iran and West Azerbaijan province

۳.۲. ارزیابی وضعیت کمی رژیم جریان هیدرولیکی (متغیرهای عمق، سرعت و ...) با استفاده از مدل

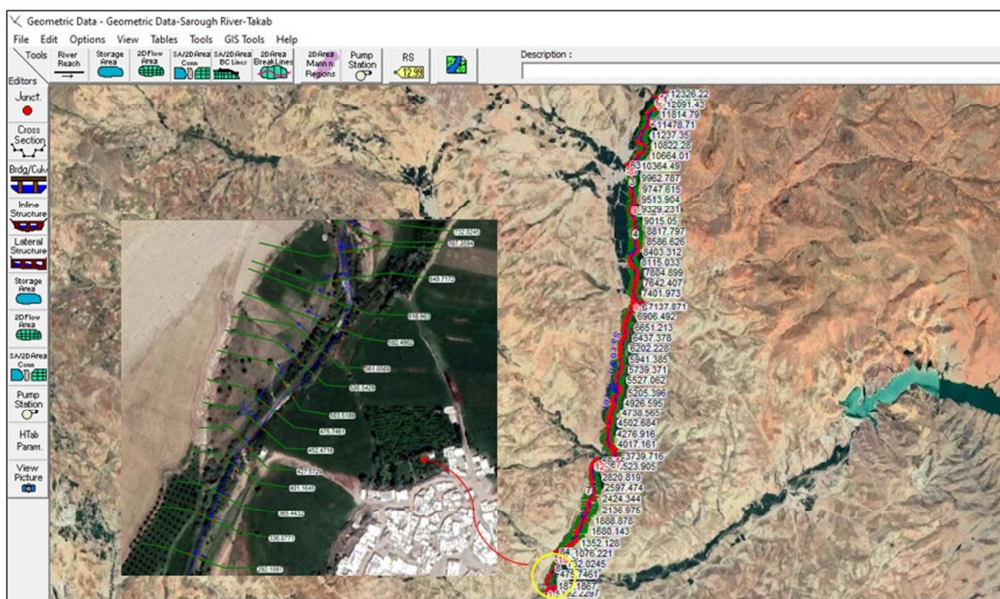
هیدرودینامیکی HEC-RAS

مطالعات هیدرولیک جریان پیش نیاز انجام مطالعات مدل‌سازی جریان آب و انتقال رسوبات معلق آلی و معدنی و همچنین فلزات سنگین در جریان آب رودخانه محسوب می‌شود. شناخت وضعیت جریان و تحلیل پارامترهای هیدرولیکی جریان در شرایط مختلف، در نهایت مبنای آنالیز رفتار رودخانه‌ها و تصمیم‌گیری در خصوص اقدامات مدیریتی بر آن‌ها می‌باشد. در این پژوهش، ابتدا جنبه‌های رفتاری رودخانه ساروق از دیدگاه هیدرولیک در طول بازه‌های مورد مطالعه با بهره‌گیری از اطلاعات و شرایط موجود مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه پارامترهای عمق، سرعت و سایر مؤلفه‌های جریان برای بازه‌های مورد مطالعه به دست آمد.

۴.۲. شبیه‌سازی هیدرولیکی رودخانه ساروق

در این مطالعات، شبیه‌سازی هیدرولیک جریان رودخانه ساروق در شرایط موجود انجام خواهد شد. به منظور تحلیل هیدرولیک جریان مراحل زیر انجام شد:

- انتخاب نحوه تحلیل جریان و محاسبات هیدرولیک جریان
- تهیه DEM با دقت نیم متر برای شبیه‌سازی دوبعدی و تهیه پلان و مقاطع عرضی رودخانه برای شبیه‌سازی یک‌بعدی
- تعیین و ارزیابی ضریب زبری رودخانه (ضریب مانینگ)
- انتخاب مقادیر دبی موردنظر جهت شبیه‌سازی
- تعیین شرایط مرزی در بالادست و پایین‌دست بازه مورد مطالعه از رودخانه
- اجرای مدل هیدرولیکی رودخانه و واسنجی و صحت‌سنجی آن
- ارائه نتایج هیدرولیک جریان



The position of Cross section of Sarouq River Hec-Ras Figure 3.

برای انجام محاسبات مدل‌سازی در نرم‌افزار Hec-Ras به صورت یک‌بعدی و دو بعدی لازم است که اطلاعاتی تحت عنوان شرایط مرزی در نرم‌افزار معرفی شوند. این اطلاعات در حالت جریان یک‌بعدی می‌تواند به صورت منحنی‌های بده-سنجه، عمق بحرانی، عمق نرمال و یا تراز آب به‌ازای بده‌های مختلف باشد. شرایط مرزی در شرایط جریان دوبعدی می‌تواند شامل هیدروگراف سیلاب (Q-T)، هیدروگراف اشل (Stage-T)، عمق نرمال و منحنی سنجه جریان (Q-Stage-T) باشند. شرایط مرزی عمق نرمال و منحنی سنجه تنها می‌توانند در مرزهای خروجی که جریان از سطح دوبعدی خارج می‌شود، به کار روند. اما شرایط مرزی هیدروگراف سیلاب و هیدروگراف اشل، می‌توانند برای مرز جریان ورودی یا خروجی از یک سطح جریان دو بعدی استفاده شوند. در مدل‌سازی یک‌بعدی محدوده مورد مطالعه رودخانه ساروق جهت تعیین شرایط مرزی، فرض شده شرایط حاکم بر جریان در بالادست بازه‌های مطالعاتی، نرمال می‌باشد. با توجه به برابری شیب سطح آب با شیب کف رودخانه در شرایط نرمال، شیب متوسط رودخانه به عنوان شرط مرزی پایین دست (Downstream Condition) و عمق بحرانی (Critical Depth) به عنوان شرط مرزی بالادست (Upstream Condition) در نظر گرفته شد. در شبیه‌سازی دو بعدی آن، هیدروگراف جریان (Flow Hydrograph) به عنوان شرط

مرزی ورودی در بالادست مسیر اصلی و شاخه‌های الحاقی ورودی و شیب نظیر عمق نرمال به‌عنوان شرط مرزی خروجی در پایین دست آن‌ها در نظر گرفته شد.

نحوه مدل‌سازی رودخانه در مدل Qual2kw به این صورت است که مدل رودخانه را تحت عنوان بازه‌هایی که کاربر مشخص می‌نماید تقسیم‌بندی نموده و در داخل هر بازه یک گره محاسباتی ایجاد می‌نماید. سپس معادله دیفرانسیلی یک‌بعدی انتقال-انتشار معادله (۱)، را برای هر گره به کار می‌گیرد و این معادله را به روش عددی دیفرنس می‌نماید.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial \left(AD_L \frac{\partial c}{\partial x} \right)}{A \partial x} - \frac{\partial (A \bar{u} c)}{A \partial x} + \frac{dc}{dt} + \frac{s}{V} \quad (\text{رابطه ۱})$$

که در آن C غلظت ماده آلاینده (mg/lit)، t زمان (sec)، A سطح مقطع المان عمود بر جریان (m^2)، D_L ضریب پراکندگی (m^2/s)، x طول رودخانه (m)، u سرعت متوسط جریان (m/s)، s عبارت چشمه یا چاه خارجی (mg) و V حجم المان (m^3) هستند. جملات سمت راست معادله (۱) به ترتیب عبارتند از پخشیدگی، انتقال (جاب‌جایی)، چشمه و چاه درونی و چشمه و چاه بیرونی. عبارت $\frac{dc}{dt}$ بیانگر تغییرات غلظت ماده آلاینده تحت فرایندهای زیست‌محیطی است و برای هر ماده‌ای، برحسب فرایندهای تولید یا مصرف آن متفاوت است هم‌چنین ترم سمت چپ یعنی $\frac{\partial c}{\partial t}$ بیانگر گرادیان غلظت است.

۲.۵. معادله انتقال-پخش حاکم بر جریان یک‌بعدی

شاخص‌های آلودگی را معمولاً با استفاده از معادله موازنه جرم توسط روش‌های عددی می‌توان شبیه‌سازی نمود. معادله دینامیکی توازن جرمی در قالب رابطه انتقال-پخش برای حالت تک‌بعدی، دو بعدی و سه‌بعدی اساس مدل‌سازی کیفی آب می‌باشد. پیش از آن که در مورد مدل‌سازی پارامترهای آلودگی با استفاده از صحبت شود در این قسمت ابتدا برخی از مفاهیم کلیدی که در مدل‌سازی آلودگی آب استفاده ADE رابطه می‌شوند معرفی خواهند شد. غلظت یک ماده در محل و مکانی خاص از سیستم توسط فرایندهای فیزیکی جاب‌جایی و پراکندگی که اجزای سیال را از مکانی به مکان دیگر انتقال می‌دهند، به‌طور دائم در حال تغییر است مقدار کل ماده در یک سیستم بسته ثابت است. مگر آن‌که توسط فرایندهای فیزیکی، شیمیایی یا بیولوژیکی تغییر کند. با به‌کارگیری روش فیک برای شار جرمی متلاطم معادله (موازنه جرم) یک‌بعدی انتقال-پخش را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\frac{\partial cA}{\partial t} + \frac{\partial QC}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left[AD_1 \frac{\partial C}{\partial x} \right] = A(S_0^d + S_t^d) \quad (\text{رابطه ۲})$$

که در این رابطه، D_1 ضریب پخشیدگی طولی و C غلظت فلز سنگین محلول می‌باشد. در این رابطه عبارت $\frac{\partial cA}{\partial t}$ معرف: تأثیر محلی، $\frac{\partial QC}{\partial x}$: انتشار به‌وسیله جاب‌جایی، $\frac{\partial}{\partial x} \left[AD_1 \frac{\partial C}{\partial x} \right]$: انتشار به‌وسیله پخشیدگی، S_0^d مقدار آلاینده ورودی و یا خروجی جانبی (زمان/غلظت) و S_t^d منبع کاهش‌دهنده یا افزایش‌دهنده آلودگی (زمان/غلظت) می‌باشند. در رابطه با D_1 با توجه به این که در مدل‌سازی آلودگی، پخشیدگی طولی و پارامترهای افزایش‌دهنده و کاهش‌دهنده آلودگی از اهمیت زیادی برخوردار می‌باشند و دقت حل معادلات وابسته به انتخاب روابط تجربی و تئوری این پارامترها دارد این پارامتر به‌طور مبسوط در پژوهشی شرح داده شده است. Kashefipour and Falconer (2000) هم‌چنین Noori et al. (2017) طی پژوهش اخیر نسبت به ضریب پخش طولی رودخانه با استفاده از یک مدل محاسباتی دانه‌ای و روش رگرسیون غیرخطی (NLR) پرداختند و به این نتیجه رسیدند که مهم‌ترین عوامل مؤثر در ضریب پخش طولی به‌ترتیب ابعاد کانال، ضریب اصطکاک و انحنا رودخانه می‌باشند. در زیر به‌طور خلاصه نتایج ضریب پخش طولی توسط پژوهش‌گران مختلف ارائه شده است (Parsaie et al., 2015).

Row	Author	Equation
1	Elder (1959)	$D_L = 5.93hu_*$
2	McQuivey and Keefer (1974)	$D_L = 0.58 \left(\frac{h}{u_*} \right)^2 uw$
3	Fisher (1967)	$D_L = 0.011 \frac{u_*^2 w^2}{hu_*}$
4	Li et al. (1998)	$D_L = 0.55 \frac{wu_*}{h^2}$
5	Liu (1977)	$D_L = 0.18 \left(\frac{u}{u_*} \right)^{0.5} \left(\frac{w}{h} \right)^2 hu_*$
6	Iwasa and Aya (1991)	$D_L = 2 \left(\frac{w}{h} \right)^{1.5} hu_*$
7	Sco and Chcong (1998)	$D_L = 5.92 \left(\frac{u}{u_*} \right)^{1.43} \left(\frac{w}{h} \right)^{0.62} hu_*$
8	Koussis and Rodriguez-Mirasol (1998)	$D_L = 0.6 \left(\frac{w}{h} \right)^2 hu_*$
9	Li et al. (1998)	$D_L = 5.92 \left(\frac{u}{u_*} \right)^{1.2} \left(\frac{w}{h} \right)^{1.3} hu_*$
10	Rajcev and Dutta (2009)	$D_L = 2 \left(\frac{u}{u_*} \right)^{0.96} \left(\frac{w}{h} \right)^{1.25} hu_*$
11	Tavakollizadeh and Kashefipour (2007)	$D_L = 7.428 + 1.775 \left(\frac{u}{u_*} \right)^{1.752} \left(\frac{w}{h} \right)^{0.62} hu$
12	Kashefipour and Falconer (2002)	$D_L = 10.612 \left(\frac{u}{u_*} \right) hu$

Figure 4. Longitudinal Dispersion Coefficient parsaie *et al.* (2015)

سینتیک واکنش در محیط‌های آبی به صورت رابطه زیر نشان داده می‌شود:

$$\frac{dc}{dt} = S_t^d = -K \cdot C^m \quad \text{رابطه ۳}$$

مقدار m در خیلی از فرایندهای زیست‌محیطی هم‌چون تغییرات غلظت فلزات سنگین توسط پژوهش‌گران، یک در نظر گرفته می‌شود که این مقدار در شبیه‌سازی صورت‌گرفته در پژوهش حاضر نیز در نظر گرفته شده است. ضریب واکنش k را می‌توان تابعی از شرایط محیطی تأثیرگذار در نظر گرفت:

$$K = f(T, EC, pH, DO) \quad \text{رابطه ۴}$$

که در آن، T دمای آب ($^{\circ}C$)، EC غلظت شوری آب (mg/L)، pH میزان اسیدیته یا قلیایی، DO غلظت اکسیژن محلول (mg/L) می‌باشد.

ابزارهای مورد استفاده در علوم مهندسی در واقع ابزارهایی هستند که درجه اعتماد به نتایج و خروجی‌های آن‌ها بستگی به چگونگی استفاده از مدل دارد و صرف ورود به اطلاعات اولیه و عدم کنترل تطابق‌پذیری نتایج آن با آنچه در شرایط واقعی رخ می‌دهد ممکن است به خطاها و اشتباهات جبران‌ناپذیری منتهی شود. بر همین اساس ضرورت دارد نتایج حاصل از شبیه‌سازی جریان رودخانه ساروق مورد واسنجی قرار گیرند. در محدوده مورد مطالعه، ایستگاه‌های هیدرومتری و اشل سنجی دبی وجود ندارد. لذا جهت واسنجی مدل ابتدا نتایج مدل مانند پهله و گسترش جریان را با نشانه‌های گسترش سیل در روی تصاویر ماهواره‌ای و اطلاعات برداشت‌شده در طی بازدید میدانی مقایسه و سعی شد با واسنجی ضریب زبری و پارامترهای مدل، تا حد ممکن نتایج را با شرایط واقعی نزدیک نمود. از طرف دیگر جهت واسنجی مدل از آزمون حساسیت‌سنجی استفاده شد. همان‌طور که بیان شد، مبنای محاسبه افت در نرم‌افزار Hec-Ras

رابطه مانینگ می‌باشد. از بین پارامترهای به‌کارگرفته در این رابطه، تمامی پارامترهای به‌کارگرفته در مدل‌سازی رودخانه مانند شعاع هیدرولیکی، شیب کف رودخانه و مساحت مقطع، حاصل از هندسه رودخانه بوده و تنها ضریب زبری مانینگ است که مقدار آن براساس نظر کارشناسی برآورد می‌شود. بر این اساس تنها پارامتری که می‌تواند مورد حساسیت‌سنجی قرار گیرد همین پارامتر است. ضمن این‌که این پارامتر نقش مهمی در شبیه‌سازی جریان و تعیین مشخصه‌های جریان دارد. از این‌رو حساسیت مدل نسبت به این ضریب موردبررسی قرار گرفته و تغییرات سرعت متوسط جریان و متوسط عرض سطح آزاد آب به‌ازای تغییرات ضریب مانینگ به‌صورت افزایشی و کاهش (۵± درصد، ۱۰± درصد و ۲۵± درصد) محاسبه شده که نتایج حاصله در جدول (۱) ارائه شده است. با توجه به تحلیل حساسیت انجام‌شده تغییرات عرض سطح آزاد آب یا سطح پهنه غرقابی سیل از حساسیت چندانی نسبت به تغییرات ضریب مانینگ برخوردار نمی‌باشد.

Table 1. The percentage of changes in the average speed and width of the free surface of the water according to the changes in Manning's coefficient in the Sarouq River

Percentage of changes in Manning's coefficient	Percentage of flow rate changes	The percentage of changes in the width of the free water surface
-25	8.2	-7.8
-10	-3.4	-3
-5	-6.75	-1.4
5	-12	2
10	-14.5	3.4
25	-20.9	8.5

۶.۲. شبیه‌سازی کیفی

پارامترهای شبیه‌سازی‌شده در این مطالعه عبارتند از اکسیژن محلول، دما، هدایت الکتریکی، pH، کلیفرم کل، اکسیژن‌خواهی بیوشیمیایی، اکسیژن‌خواهی شیمیایی، و نیترات. به‌علت نمونه‌برداری در چهار دوره زمانی (مربوط به چهار فصل سال)، مدل‌ها برای چهار دوره تهیه می‌شوند. مدل Qual2kw دارای ویژگی کالیبراسیون اتوماتیک به‌کمک الگوریتم ژنتیک است که در آن، ضرایب و نرخ‌های سینتیک و زیستی را، به‌طور بهینه محاسبه می‌کند و به این ترتیب، عملیات کالیبراسیون مدل را سرعت و اطمینان می‌بخشد. در این مطالعه، ضرایب موجود در مدل‌های دوره اول نمونه‌برداری، به‌کمک الگوریتم ژنتیک، بهینه شده و از آن‌ها، برای مدل‌های سه دوره دیگر نمونه‌برداری استفاده می‌شود.

۷.۲. معادله مورد استفاده در مدل Qual2kw

معادله اصلی که مدل مذکور، به حل آن می‌پردازد، معادله جابه‌جایی/پخش یک‌بعدی است که شامل جملات جابه‌جایی، پخش، چشمه/چاه داخلی و چشمه/چاه خارجی است. این معادله برای هر ماده آلاینده c به‌صورت فرمول زیر است:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial(AD_L \frac{\partial c}{\partial x})}{A \partial x} - \frac{\partial(A\bar{u}c)}{A \partial x} + \frac{dc}{dt} + \frac{s}{V} \quad \text{رابطه (۵)}$$

که در آن، c غلظت ماده آلاینده (mg/l)، t زمان (sec)، A سطح مقطع المان عمود بر جریان (m²)، D_L ضریب پراکندگی (m²/s)، x طول رودخانه (m)، u سرعت متوسط جریان (m/s)، s جمله چشمه یا چاه خارجی (mg) و V حجم المان (m³) هستند. جملات سمت راست معادله (۱) به‌ترتیب عبارتند از پراکندگی، جابه‌جایی، چشمه/چاه درونی و چشمه/چاه بیرونی. عبارت $\frac{\partial c}{\partial t}$ بیانگر تغییرات غلظت ماده آلاینده تحت فرایندهای محیط زیستی است و برای هر ماده‌ای، برحسب فرایندهای تولید یا مصرف آن متفاوت است و نباید آن را با ترم سمت چپ یعنی $\frac{\partial c}{\partial t}$ اشتباه گرفت که بیانگر گرادین غلظت است. این مدل از سه معادله تعادل استفاده می‌کند:

- معادله تعادل هیدرولیکی: به منظور محاسبه دبی؛

- معادله تعادل حرارت: برای محاسبه حرارت؛

- معادله تعادل جرم: برای محاسبه غلظت مواد کیفی.

فرایندهای جابه‌جایی و پراکندگی، در معادله تعادل جرم نوشته می‌شوند. جابه‌جایی^۴، نوعی از فرایند انتقال است که در جهت جریان رخ می‌دهد ماهیت ماده منتقل‌شونده، در این فرایند تغییر نمی‌کند (Chapra, 1997). انتقال ذرات به علت وجود گرادیان مکانی سرعت، پراکندگی^۵ نام دارد. این فرایند در مخازن، خور و مصب رودخانه‌ها اهمیت بالایی دارد، اما در رودخانه‌ها که فرایند جابه‌جایی غالب است، دارای اهمیت کم‌تری است.

اطلاعات مورد نیاز جهت مدل‌سازی را می‌توان به چهار دسته تقسیم‌بندی نمود:

اطلاعات هندسی: شامل مختصات جغرافیایی انتها و ابتدای بازه‌ها، طول بازه‌ها، تراز ارتفاعی ابتدا و انتهای هر

بازه، اطلاعات سطح مقطع ابتدا و انتهای بازه‌ها و ضریب انشمار

اطلاعات هیدرولیکی: شامل دبی، سرعت، ضریب زبری، شیب طولی در هر بازه، عرض مقطع در هر بازه و شیب

جانبی مقاطع دوزنقه‌ای شکل و ... است.

اطلاعات هواشناسی: شامل دمای هوا، دمای نقطه شبنم، میزان تابش خورشید، درصد پوشش ابر و سرعت باد

اطلاعات کمی و کیفی: شامل مقادیر داده‌های کیفی، همراه با ضرایب متناسب با هر فرایند در هر شاخه

انتخاب‌شده از رودخانه و اطلاعات منابع آلاینده نقطه‌ای موجود در طول مسیر، که قبلاً از آن‌ها نمونه‌برداری شده است.

۸.۲. سرشاخه ساروق

این سرشاخه، همراه با موقعیت ایستگاه‌های نمونه‌برداری در مسیر و منابع آلاینده نقطه‌ای و همچنین بازه‌بندی صورت گرفته به منظور مدل‌سازی، در ذیل آورده شده است. طول کل مسیر سرشاخه مذکور، (۷۸/۱۵ کیلومتر) به ۲۹ بازه تقسیم شده است. این تعداد بازه، بیش‌ترین تعداد بازه‌های موجود در این مطالعه می‌باشد. طول این بازه‌ها در جدول (۲) آورده شده است.

Table 2. The length of Sarouq reach

No.	Length	Cumulative length
reach 1	2.92	78.15
reach 2	2.63	75.24
reach 3	2.39	72.60
reach 4	4.17	70.21
reach 5	2.31	66.04
reach 6	2.52	63.73
reach 7	1.49	61.21
reach 8	1.95	59.72
reach 9	2.05	57.77
reach 10	3.05	55.72
reach 11	4	52.67
reach 12	2.65	51.22
reach 13	3.92	48.57
reach 14	4.37	44.65
reach 15	2.73	40.28
reach 16	2.82	37.55
reach 17	1.98	34.72
reach 18	2.88	32.74
reach 19	4.09	29.86
reach 20	2.87	25.77
reach 21	2.16	22.91
reach 22	2.59	20.74
reach 23	1.89	18.15
reach 24	2.70	16.26
reach 25	2.98	13.56
reach 26	2.26	10.57
reach 27	1.70	8.32
reach 28	4.13	6.62
reach 29	2.49	2.49

مشخصات ایستگاه‌های نمونه‌برداری در این سرشاخه به شرح جدول (۳) می‌باشد.

Table 3. Specifications of sampling stations

Province	Specification of Station	The distance from the station to the end of the Reach (km)	Station
West Azerbaijan	Above the city of Takab	78.15	1-4-14
	Sarouq downstream of Takab city	66.03	2-4-15
	Sarouq before entering Bukan dam	6.61	6-4-21

موقعیت و نام شاخه‌های ورودی در این مسیر، به شرح جدول (۴) می‌باشد.

Table 4. Specifications of the input reaches to the main reach

Province	Specification of Station	The distance from the station to the end of the Reach (km)	Station
West Azerbaijan	Bala Chole road, Takab - Shahin Dej	61.2	8-4-19

مشخصات منابع آلاینده شناسایی شده در طول این بازه، که در شبیه‌سازی اثر داده شده است، به شرح جدول (۵) است.

Table 5. Characteristics of polluting sources along the 5th reach route (distance in kilometers)

Province	City	Pollution source	Distance to the end of the Reach	Station
Western Azerbaijan	Takab	Takab wastewater	75.24	13-t
	Takab	Takab wastewater	72.6	14-t
	Takab	Omid Paper cartoning	70.21	12-t
	Takab	sand wash	59.72	9-t

اطلاعات هواشناسی موردنیاز در این شاخه، از اطلاعات ایستگاه "تکاب" تأمین شده است. در ادامه، نمودار تغییرات پارامترهای دبی، اکسیژن محلول، دما، هدایت الکتریکی، کلیفرم کل، اکسیژن خواهی بیوشیمیایی، اکسیژن خواهی شیمیایی و نیترات آورده شده است.

۳. نتایج و بحث

۳.۱. نوبت اول نمونه‌برداری

نوبت اول نمونه‌برداری از سرشاخه ساروق در نمودارهای مربوطه در نمودارهای شکل (۵) زیر نشان داده شده‌اند.

۳.۲. نوبت دوم نمونه‌برداری

نوبت دوم نمونه‌برداری از سرشاخه ساروق، در تیرماه با خشک‌بودن تمامی ایستگاه‌ها مواجه شده است. به همین دلیل امکان، شبیه‌سازی این سرشاخه، در این زمان میسر نبوده است.

۳.۳. نوبت سوم نمونه‌برداری

نوبت سوم نمونه‌برداری از سرشاخه ساروق در نمودارهای مربوطه در نمودارهای شکل (۶) به ترتیب نشان داده شده‌اند.

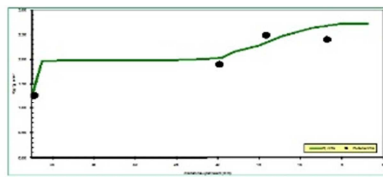


Figure 9. Flow rate changes along reach 1 in the first time of sampling

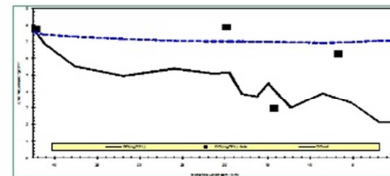


Figure 10. Dissolved oxygen changes along the reach 1 in the first time of sampling

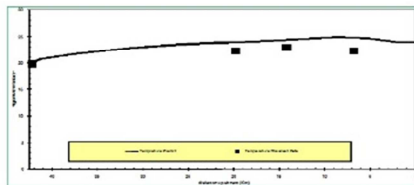


Figure 11. Temperature changes along the main reach 1 in the first round of sampling

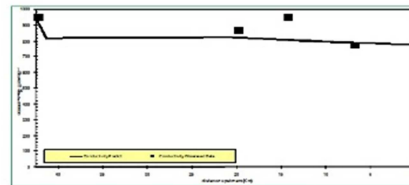


Figure 12. Electrical conductivity changes along reach 1 in the first round of sampling

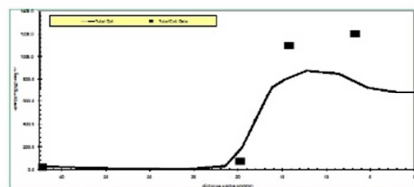


Figure 13. Total coliform changes along the head reach 1 in the first round of sampling

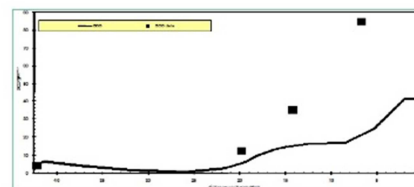


Figure 14. Changes in Biochemical Oxygen Demand Along the first reach of the first sampling

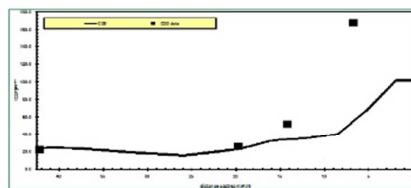


Figure 15. Changes in chemical oxygen demand along the main reach 1 in the first round of sampling

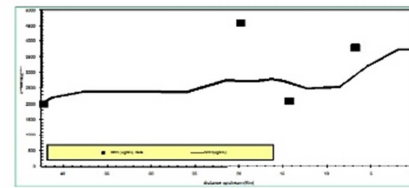


Figure 16. Nitrate changes along the main reach 1 in the first round of sampling

Figure 5. The first round of sampling in Sarouq River

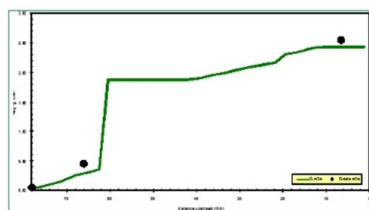


Figure 17. Flow rate changes in the third round of sampling

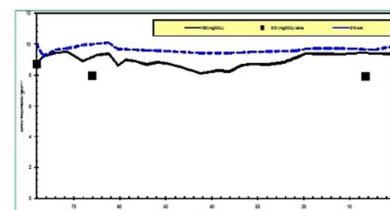


Figure 18. Dissolved oxygen changes in the third round of sampling

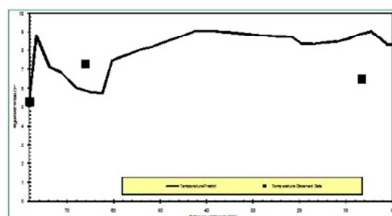


Figure 19. Temperature changes in the third round of sampling

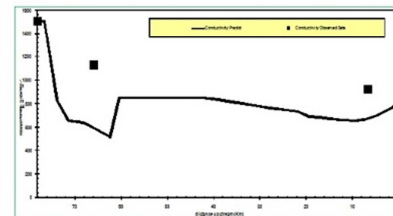


Figure 20. Electrical conductivity changes in the third round of sampling

Figure 6. The third round of sampling in Sarouq River

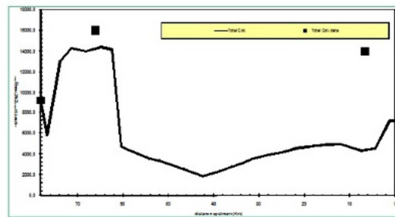


Figure 21. Total coliform changes in the third round of sampling

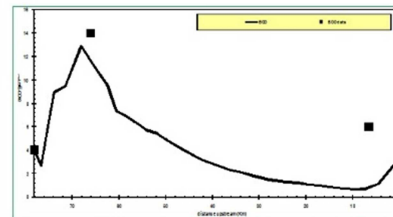


Figure 22. Changes in Biochemical Oxygen Demand in the third round of sampling

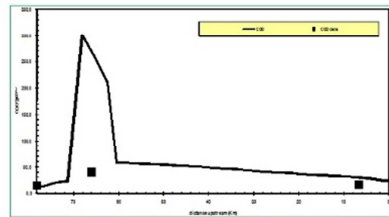


Figure 23. Changes in chemical oxygen demand in the third round of sampling

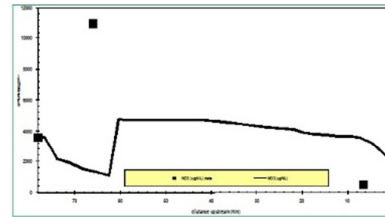


Figure 24. Nitrate changes in the third round of sampling

Continued figure 6. The third round of sampling in Sarouq River

۴.۳. نوبت چهارم نمونه برداری

نوبت چهارم نمونه برداری از سرشاخه ساروق در نمودارهای شکل (۷) به ترتیب نشان داده شده اند.

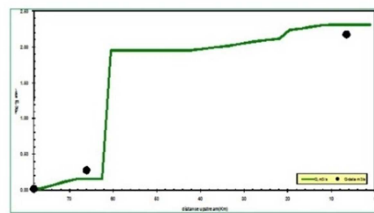


Figure 25. Flow rate changes in the fourth round of sampling

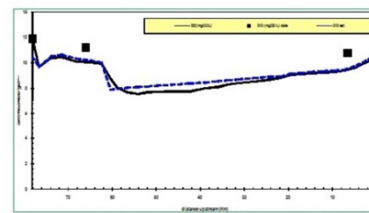


Figure 26. Dissolved oxygen changes in the fourth round of sampling

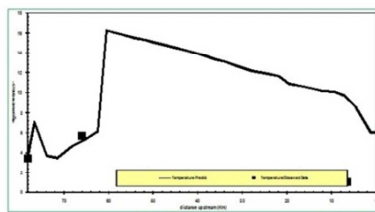


Figure 27. Temperature in the fourth round of sampling

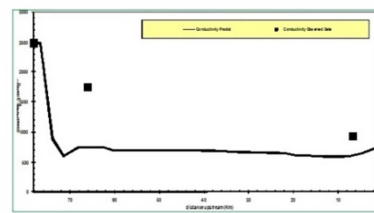


Figure 28. Electrical conductivity changes in the fourth round of sampling

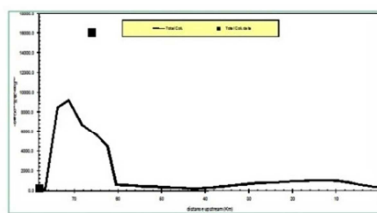


Figure 29. Total coliform changes in the fourth round of sampling

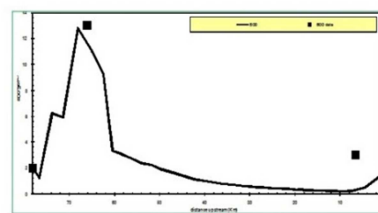


Figure 30. Changes in biochemical oxygen demand in the fourth round of sampling

Figure 7. The fourth round of sampling in Sarouq River

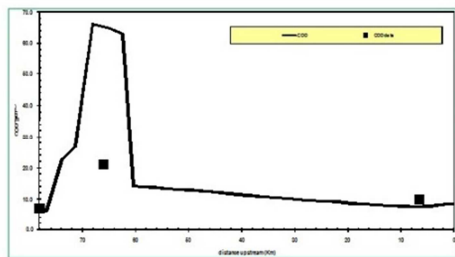


Figure 31. Changes in chemical oxygen demand in the fourth round of sampling

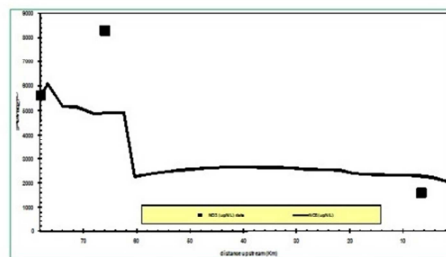


Figure 32. Nitrate changes in the fourth round of sampling

Continued figure 7. The fourth round of sampling in Sarouq River

۴. نتیجه‌گیری

پس از کالیبراسیون کمی و کیفی مدل Qual2kw، برای شبیه‌سازی غلظت فاز محلول فلزات سنگین از طریق کدنویسی در محیط VBA نرم‌افزار Qual2kw ماژولی به نام heavy metal اضافه شد. سپس ضرایب معادلات k با توجه به مقدار غلظت فلز سنگین، دما، اکسیژن محلول، pH و EC در فصول مختلف ابتدا عددی فرض شد و برای کالیبراسیون اتوماتیک (روش الگوریتم ژنتیک) بازه‌ای برای آن تعیین شد. سپس خطای مدل در شبیه‌سازی غلظت فاز محلول فلزات سنگین با داده‌های مشاهداتی از طریق تابع برازش الگوریتم ژنتیک کمینه‌سازی شد. تابع برازش معرفی شده به الگوریتم ژنتیک تابع معکوس میانگین جذر مربعات خطای نرمال شده جهت معرفی به مدل انتخاب شد. پس از اجرای کالیبراسیون اتوماتیک برای محاسبه غلظت فلزات سنگین با داشتن غلظت فاز محلول فلزات سنگین مقادیر K محاسبه شد و در معادلات خطی و لگاریتمی در نظر گرفته شده و جای‌گذاری شد. با توجه به این‌که پنج ضریب مجهول در معادلات k وجود دارد به پنج مقدار k برای جای‌گذاری در معادلات نیاز داریم که از این پنج مقدار دو مقدار در فصل بهار دو مقدار در فصل پاییز و یک مقدار در فصل زمستان جهت این کار انتخاب شد. بنابراین با داشتن مقادیر k ، دما، اکسیژن محلول، pH و EC ضرایب ثابت معادلات مطابق جدول‌های (۶) و (۷) محاسبه شد. شایان ذکر است در این جدول‌های واحدهای T, DO, EC و k_i به ترتیب $^{\circ}\text{C}$ ، $\frac{\text{mg}}{\text{lit}}$ ، umhos و $\frac{1}{\text{day}}$ هستند (i: نام فلز است).

پس از محاسبه ضرایب ثابت معادلات k ، برای شبیه‌سازی فلزات سنگین از طریق معادلات ارائه‌شده ضریب واکنش، در ماژول جدید heavy metal در قسمت کد برنامه برای هر فلز سنگین یک‌بار رابطه خطی و یک‌بار رابطه لگاریتمی k معرفی شد و میزان خطای مدل‌سازی مطابق جدول (۸) محاسبه شد.

Table 6. Linear equations of reaction coefficient of dissolved heavy metals

NO. of Equation	Heavy metal	$k_{pb} = 0.00509T + 0.03508DO - 0.2643pH + 0.00014EC + 1.44994$
(1)	Pb	$k_{cd} = -0.08374T - 0.53401DO + 3.82731pH - 0.00193EC - 20.5194$
(2)	Cd	$k_{zn} = 0.00172T + 0.01256DO - 0.09666pH + 0.00005EC + 0.54081$
(3)	Zn	$k_{pb} = 0.00509T + 0.03508DO - 0.2643pH + 0.00014EC + 1.44994$

Table 7. Logarithmic equations of the reaction coefficient of dissolved heavy metals

NO. of Equation	Heavy metal	$k_{pb} = -0.01268 \ln T - 0.05859 \ln DO + 0.23847 \ln pH - 0.02424 \ln EC - 0.14389$
(4)	Pb	$k_{cd} = 0.07045 \ln T + 0.49898 \ln DO - 2.83921 \ln pH + 0.2832 \ln EC + 2.50094$
(5)	Cd	$k_{zn} = -0.00659 \ln T - 0.02739 \ln DO + 0.10763 \ln pH - 0.01018 \ln EC - 0.05939$
(6)	Zn	$k_{pb} = -0.01268 \ln T - 0.05859 \ln DO + 0.23847 \ln pH - 0.02424 \ln EC - 0.14389$

Table 9. Calculation of modeling error

Heavy metal	Type of relationship	AME	RSME
pb	Linear	0.31	0.46
	Logarithmic	1.8	3.7
Cd	Linear	0.24	0.42
	Logarithmic	1.2	2.3
Zn	Linear	0.56	0.75
	Logarithmic	2.8	4.8

با توجه به جدول (۹) نتایج نشان داد معادلات خطی k برای شبیه‌سازی فاز محلول فلزات سنگین نسبت به معادلات لگاریتمی آن خطای کمتری را داراست. لذا جهت شبیه‌سازی غلظت فاز محلول فلزات سنگین سرب، کادمیم و روی، برای رودخانه ساروق استفاده شد که مقادیر غلظت فلزات سنگین رودخانه توسط مدل مطابق شکل‌های (۸) تا (۱۰) محاسبه شد.

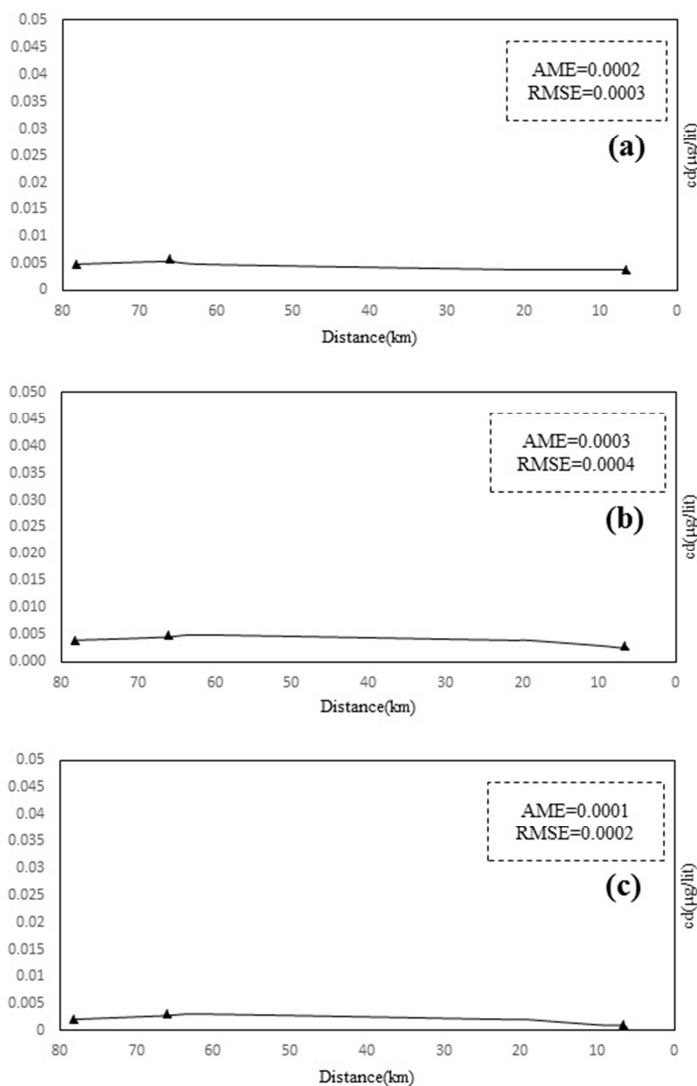


Figure 8. Total lead concentration of Sarouq River in (a) spring (b) autumn, (c) winter season in the developed Qual2kw model

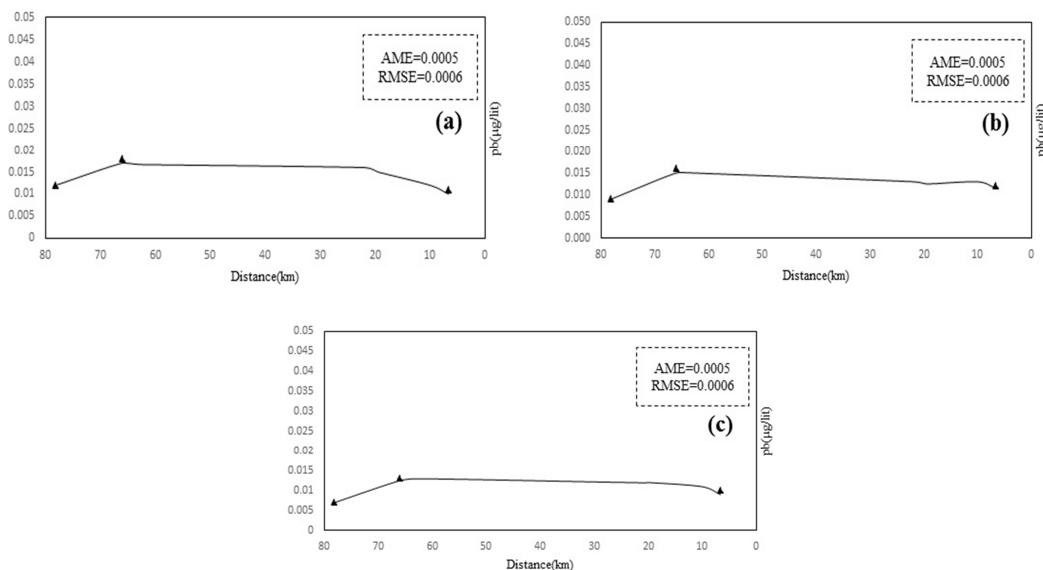


Figure 9. Total Pb concentration of Sarouq River in (a) spring (b) autumn, (c) winter season in the developed Qual2kw model

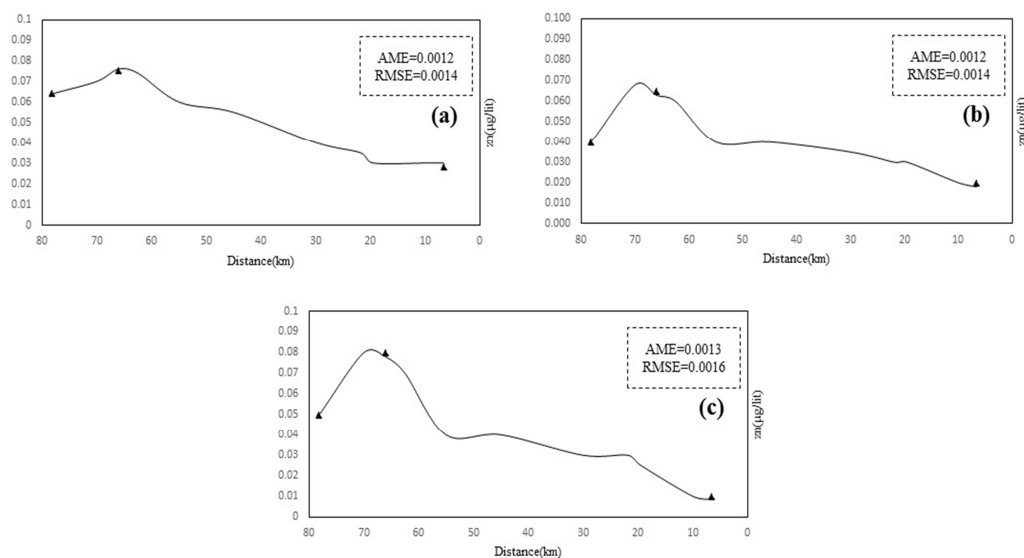


Figure 10. Total Zn concentration of Sarouq River in (a) spring (b) autumn, (c) winter season in the developed Qual2kw model

نتایج نشان می‌دهد که ضریب سینتیک واکنش در نقاط مختلف رودخانه متفاوت بوده و برای شبیه‌سازی و تعیین غلظت فاز محلول فلزات سنگین در هر نقطه می‌باید از ضریب سینتیک واکنش متناظر با همان نقطه استفاده نمود. همچنین افزایش معنی‌دار دقت مدل توسعه داده‌شده در صورت استفاده از پارامترهای محیطی فوق در ترم چشمه و چاه معادلات جابه‌جایی-پخش بوده و تأثیر پارامترهای کیفی دیگر ناچیز می‌باشد، که نتایج حاصل از مدل بیانگر کارایی مناسب آن در شبیه‌سازی فاز محلول فلزات سنگین در رودخانه می‌باشد. اولویت حساسیت فلزات سنگین نسبت به پارامترهای کیفی دما، اکسیژن محلول، هدایت الکتریکی و pH به صورت زیر است:

برای فلز سرب: $T > pH > EC > DO$
 برای فلز کادمیم: $EC > pH > T > DO$
 برای فلز روی: $T > DO > pH > EC$

۵. پی‌نوشت‌ها

1. Calibration
2. Verification
3. Equation of state
4. Advection
5. Dispersion

۶. تعارض منافع

هیچ‌گونه تعارض منافع توسط نویسندگان وجود ندارد.

۷. منابع مورد استفاده

- Chapra, S.C. (1997). *Surface Water Quality Modeling*. McGraw-Hill Publisher, New York.
- Engineering*, 49 (1), 35-46 (in Persian).
- Gorbani, Z., Amanipoor, H., & Battaleb Looie, S. (2020). Water Quality Simulation of Dez River in Iran Using Qual2kw Model. *Geocarto Int*, 8, 45-65.
- Handayani, L., Riyanto, H., & Yuliani, E. (2019). Determination of Pollution Load Capacity Using Qual2kw Program on the Musi River Palembang. *Civ. Environ. Sci. J.*, 2, 105-116.
- Hendrasarien, N., & Swandika, J. (2020). Resistance of Loading Loads in Surabaya River and Its Reach with Qual2kw Model. *In Journal of Physics: Conference Series*; IOP Publishing Ltd.: Bristol, UK, CrossRef
- Hosseini, P., & Hosseini, Y. (2017). Investigating the variation of self-propagation power of Karun River in 87 and 92 years using Qual2kw model in Ahvaz city. *Amir Kabir Journal of Civil*
- Kashefipour, M., & Falconer, R.F. (2002). Longitudinal dispersion coefficients in natural channels, *Water Research*, 36(6), 1596-1608.
- Kh. Mohammadi, M., & Boustani, F. (2016). Assessment of self-healing power and the role of dissolved oxygen in the quality of water in the river of Khor (Case study: Droodzan Dam down to Lake Tashkh-Bakhtegan). *Journal of Water Resources Engineering*, 7 (27), 85-98 (in Persian).
- Khalilzadeh Poshtegal, M., & Mirbagheri, S.A. (2017). Distribution and assessment of heavy metals and physicochemical parameters in riverine basin, *European Water*, 58, 95-102
- Khalilzadeh Poshtegal, M., & Mirbagheri, S.A. (2019). The heavy metals pollution index and water quality monitoring of the Zarrineh river, Iran. *Environmental & Engineering Geoscience*, 25(2), 179-188.
- Mehrabi á B. W. D., & Yardley á J. R. Cann. (1999). Sediment-hosted disseminated gold mineralization at Zarshuran, NW Iran, *Mineralium Deposita*, 34, 673-696
- Mirbagheri, S.A., & Fatae, E. (2010). Heavy metal and agricultural toxics monitoring in river in Iran for water quality assessment, *Asian journal of chemistry*, 22(4).
- Mirbagheri, S.A., & Rajaei, T. (2007). Modeling suspended sediment transport in river systems using ANN method", *Journal of engineering, Ferdosi Mashhad University, Iran (in Persian)*
- Mirbagheri, S.A., & Rajaei, T. (2009). Daily suspended sediment concentration simulation using ANN and neuro-fuzzy models. *Science of the total environment*, 407, 4916-4927.
- Mirbagheri, S.A., & Rajaei, T. (2010). Prediction of daily suspended sediment load using wavelet and neuro-fuzzy combined model. *International Journal of Environmental science and technology*, 7 (1).

- Mirbagheri, S.A., Abaspour, M., & Nasiri, A. (2008). Simulation modeling of water quality parameters in river systems, case study Kan river in Tehran province, *International journal of environmental science and Technology*
- Mirbagheri, S.A., Abaspour, M., & zamani, K.H. (2009). Mathematical modeling of water quality in river systems. *EWRA journal*, 27128, 31-41
- Modabberi, S., & Moore, F. (2004). Environmental geochemistry of Zarshuran Au-As deposit, NW Iran. *Environmental Geology*, 46(6-7), 796-807.
- Mohammadi, M., Qaderi, K., & Ahmadi, M.M. (2019). Performance Evaluation of the Water Cycle Optimizing Algorithm for Calibration of Qual2kw Model. *Journal of Soil Water Iran*, 50, 911-920. (In Persian)
- Nodefarahani, M., Aradpour, S., Noori, R., Tang, Q., Partani, S., & Klöve, B. (2020). Metal pollution assessment in surface sediments of Namak Lake, Iran, *Environmental Science and Pollution Research*, 27, 45639-45649 .
- Noori, R. (2021). Alarming carcinogenic and non-carcinogenic risk of heavy metals in Sabalan dam reservoir, Northwest of Iran, *Environmental Pollutants and Bioavailability*, 33(1), 278-291.
- Noori, R., Ghiasi, B., Sheikhian, H., & Adamowski, J. F. (2017). Estimation of the Dispersion Coefficient in Natural Rivers Using a Granular Computing Model, *Journal of Hydraulic Engineering*, 143(5).
- Noori, R., Tian, F., Guangheng, Ni., Bhattarai, R., Hooshyaripor, F., & Klöve, B. (2019). A novel tool for simulation of reservoir thermal stratification, *Scientific Reports*, 9, Article number: 18524
- Parsaie, A., & Haghiabi, A.H. (2015). Calculation of Longitudinal Dispersion Coefficient and Modeling the Pollution Transmission in Rivers (Case studies: Severn and Narew Rivers) , *Journal of Water and Soil*, 29(5), 1070-1085.
- Pelletier, G.J., & Chapra, S.C. (2005). QUAL2Kw theory and documentation (version 5.1), a modeling framework for simulating river and stream water quality. Washington Department of Ecology.
- Shrestha, P.L., & Orlob, G.T. (1996). Multiphase distribution of cohesive sediments and heavy metals in estuarine systems. *Journal of Environmental Engineering*, 122(8), 730-740.
- Tabrizi, M., Areeyaenezhad, R., & Babazadeh, H. (2019). Modeling Water Quality of Rivers Using Qual2kw Model (Case Study: Shahroud River). *J. Environ. Sci. Technol*, 21, 1-13. (In Persian)